

Adaptive Algebraic Multigrid for Lattice QCD Computations

(Adaptive algebraische Mehrgitterverfahren in der Gittereichtheorie der QCD)

Karsten Kahl

Arbeitsgruppe Angewandte Informatik, Fachbereich C – Mathematik und Naturwissenschaften,
Bergische Universität Wuppertal, 42097 Wuppertal, kkahl@math.uni-wuppertal.de

Computersimulationen spielen heutzutage für das Verständnis physikalischer, chemischer, medizinischer und technischer Prozesse eine ebenso wichtige Rolle wie Experimente oder sind sogar teilweise in der Lage diese, meist kostspieligen Experimente, ganz zu ersetzen. Typischerweise wird für eine solche Simulation zunächst ein mathematisches Modell des Prozesses mit Hilfe von partiellen Differentialgleichungen erstellt. Da eine analytische Lösung, also eine explizite „formelmäßige“ Angabe einer Lösung, der Differentialgleichungen nur in den seltensten Fällen möglich ist, muss numerisch nach approximativen Lösungen gesucht werden. Die numerische Behandlung der Modelle umfasst im Allgemeinen die Linearisierung und Diskretisierung der sie beschreibenden partiellen Differentialgleichungen. In diesem Approximationsprozess entstehen meist große lineare und dünnbesetzte Gleichungssysteme mit Millionen oder gar Milliarden Unbekannten, deren Lösung in der Regel den rechenintensivsten Teil einer solchen Simulation darstellt.

Mehrgitterverfahren sind Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme, die aus solchen Diskretisierungen partieller Differentialgleichungen entstehen und die es ermöglichen, durch die geschickte Behandlung des Systems auf unterschiedlichen Skalen eine Lösung mit *linearem* Aufwand zu bestimmen. Dies bedeutet, dass für jede Unbekannte nur eine konstante Anzahl an Rechenoperationen benötigt wird, was im Sinne der Komplexitätstheorie optimal ist. In vielen Fällen ist es möglich, Mehrgitterverfahren direkt aus der Diskretisierung zu entwickeln. Ist jedoch die Diskretisierung nicht bekannt oder eine solche kanonische Konstruktion eines Mehrgitterverfahrens nicht möglich, kann man dennoch in vielen Fällen Mehrgitterverfahren auf gänzlich algebraische Weise, d.h. nur die Kenntnis des Gleichungssystems voraussetzend, konstruieren.

Das Thema meiner Dissertation ist die Entwicklung eines effizienten algebraischen Mehrgitterverfahrens für die linearen Gleichungssysteme, die in der Gittereichtheorie der Quanten-Chromodynamik (QCD) entstehen. Die QCD beschreibt die starke Wechselwirkung zwischen Quarks und Gluonen als Bausteine der Materie. Die zugehörige Gittereichtheorie ermöglicht es, QCD Systeme zu simulieren und dadurch zum Beispiel die Entstehung der Materie zu beschreiben oder die Existenz von Elementarteilchen, wie zum Beispiel die des Higgs-Bosons, vorherzusagen. Auf Grund ihrer hohen Vorhersagekraft ist sie eine der erfolgreichsten Theorien der Physik.

Die Konstruktion von effizienten Mehrgitterverfahren zur Lösung von Problemen in der Gittereichtheorie erfordert die Berechnung von effizienten Interpolationsoperatoren. Die klassische Definition von Interpolationsoperatoren schlägt hier auf Grund der zu berücksichtigenden stochastischen „Eichfelder“ fehl. Die Aufgabe, dennoch effiziente Interpolationsoperatoren zu definieren, wird in dieser Arbeit durch die Einführung der „Least Squares Interpolation“ (LSI) gelöst. Die LSI stellt eine Möglichkeit dar, Interpolationsoperatoren adaptiv zu berechnen und dabei nur Informationen in Form von Prototypen algebraisch glatter Fehler zu verwenden. Weiterhin wird ein „Bootstrap Setup“ eingeführt, das die Berechnung einer LSI mit gewünschter Genauigkeit in linearer, d.h. optimaler, Komplexität gewährleistet. Hierbei wird eine Beobachtung ausgenutzt, die einen Zusammenhang zwischen Eigenvektoren und Eigenwerten entlang der Mehrgitterhierarchie herstellt, um die Berechnung von Prototypen algebraisch glatter Fehler auf verschiedenen Skalen, und damit mit Mehrgitter-Effizienz, zu ermöglichen.

Literatur

- [1] K. Kahl, *Adaptive Algebraic Multigrid for Lattice QCD Computations*, Doktorarbeit, Bergische Universität Wuppertal, Fachbereich C – Mathematik und Naturwissenschaften, 2009