有效势的数值 RG 时间积分：分析与基准测试

Friederike Ihssen, [1] Franz R. Sattler, [1] 以及 Nicolas Wink[2], *[1] *Institut für Theoretische Physik, Universität Heidelberg, Philosophenweg 16, D-69120 Heidelberg, Germany*[2] *Institut für Kernphysik, Technische Universität Darmstadt, D-64289 Darmstadt, Germany*

我们以 $d = 3$中的一个标量理论为例，研究了泛函重整化群中存在自发对称性破缺时有效势的重整化群时间积分，以及其随后发生的凸性恢复。该设置的特征在许多物理模型中都很常见，因此我们的结果可直接应用于多种情形。我们通过考察流方程的不同离散形式与大量不同算法的组合，提供了详尽的工作量-精度基准测试和数值稳定性分析。我们利用重整化群时间积分过程中涉及的不同组成部分以及离散系统的特征值结构来解释这些结果。特别是，将 Rosenbrock 方法、隐式多步方法或某些（对角）隐式 Runge-Kutta 方法与精确或自动微分雅可比矩阵相结合，已被证明非常有效。此外，在对数变量中的重述规避了势的平坦区间内与奇点界限相关的问题。

arXiv:2302.04736v1 [hep-th] 9 Feb 2023

I. 引言

相变和临界现象是描述相对论量子理论（如量子色动力学、电弱理论或凝聚态物质系统）中物理现象不可或缺的一部分。要理解这些现象的起源，最佳方式是追踪物理的尺度依赖性：从微观描述出发，通过积分掉涨落进行粗粒化，从而理解并量化宏观尺度上的集体现象。这一过程体现在重整化群（RG）方法中。因此，重整化群方法适用于研究临界性和标度，因为它契合不同尺度上的物理规律。

这类方法的一种实现是泛函重整化群（fRG），它构成了一种以非微扰方式处理涨落尺度积分的强大方法。关于近期综述，请参见 [1], 其中详细介绍了当前的应用。其基本前提是引入一个调节尺度 k 在该尺度以下，由于引入了动量依赖质量插入，即调节器，涨落受到抑制。随后降低这一尺度，以威尔逊式方式逐步纳入不同的动量尺度，直至达到 $k \to 0$从而获得包含所有已积分掉涨落的完整理论。尽管泛函重整化群是一种精确方法，但仍有必要对流进行截断，才能将fRG流方程转化为数值上可处理的工具。

在处理集体现象和相变时，可以采用导数展开，即在 1PI 有效作用量中将动量截断到某个幂次 $\Gamma_k[\phi]$。尽管忽略了更高阶的动量依赖，导数展开通常仍是利用泛函重整化群研究这些系统的良好选择，因为它们能够专注于纳入更高阶的相互作用过程，即对场的高阶次构建有效作用量模型，参见例如 [2–5]。

由此得到的泛函重整化群方程在许多不同的物理系统中往往惊人地相似，并具有共同的数值难点，因此可以在一个最简框架下探究重整化群时间积分中经常出现的问题。该框架的基本特征可推广至大多数更复杂的理论。本文选用这样一个框架，讨论一个简单标量理论中的自发对称性破缺过程；该理论的相互作用势具有完整的场依赖性，且未作截断。

为评估常见数值难点的性质，我们分析了该模型在导数展开的领先阶，即局域势近似（LPA）下的 fRG 流。此外，在这一框架中，流方程简化为一个偏微分方程（PDE），而更复杂的近似则可能包含规模更大的方程组。

数值求解流方程时遇到的大多数障碍，都可以归因于对称性破缺区域内 1PI 有效作用量的凸性恢复。假设有一个有效势 $V(\phi)$，其中 ϕ 是标量场的期望值。1PI 有效作用量的运动方程将 $V(\phi)$ 的极小值 ϕ_0 确定为运动方程的解，也就是物理点。因此，ϕ 也可作为序参量，$\phi_0 = 0$ 表示对称相，而 $\phi_0 > 0$ 表示对称性破缺相。在二级相变附近的对称性破缺相中，由于 $\Gamma_{k\to 0}[\phi]$的凸性，势满足 $V(|\phi| \leq \phi_0) = \text{const}$；模型的 fRG 流过程中必须恢复这一凸性。势的这一区域称为平坦部分。然而，在任何有限的重整化群尺度/正则化下，平坦区域中的势仍具有有限斜率，只有渐近地趋近于零，这会导致技术上的

* nicolas.wink@tu-darmstadt.de

实际实现困难。

本文主要讨论泛函重整化群流过程中有效势发生凸性恢复所引发的数值问题。为此，我们采用一种启发式驱动的方法，研究如何选择适当的重整化群时间积分程序。

从线法出发，近期已有研究在概念层面阐明了应如何沿场方向离散化有效势以实现稳定性，参见 [6–8] 以及 [9–15] 中的相关应用。在此前几乎所有的工作中，如何选择算法来推进系统的重整化群时间演化都相当任意。值得注意的例外包括 [16], ，其中以半解析方法考察了重整化群时间演化；以及[17], ，其中采用了基于切比雪夫多项式的全隐式时空演化方法。然而，后一种方法受到稳定性问题的困扰，而在本文所研究的情形下，这些问题尤为突出。

至关重要的是，还应注意到，使用显式时间步进方法并不切实际，因为对于较大的重整化群时间 [6]，势的平坦区域中的波速会以指数速度发散。根据对稳定性和结果有效性都必不可少的 Courant–Friedrichs–Lewy（CFL）条件，这将导致指数级变小的步长。由于任何显式方法都会受到这一限制，因此只能通过使用隐式方法来解决该问题。本文旨在通过调查和分析常用算法的性能，开始探索如何有依据地选择数值时间积分器，并理解其适用性。

II. 有效势及其离散化

为简化问题，我们考察 φ_3^4理论，即一个具有 $\mathbb{Z}_2$ 对称性的单标量场，在三维欧几里得时空中的破缺相。利用泛函重整化群，我们主要旨在计算尺度依赖有效势；有关详细内容和参考文献，请参见附录 A。在导数展开的最低阶，量子有效作用量表示为

$$\Gamma_k[\phi] = \int_x \left\{ \frac{1}{2}(\partial_\mu \phi)^2 + V(t,\rho) \right\} , \tag{1}$$

其中，$\phi = <\varphi>$表示场的期望值，k 表示重整化群尺度，$t = -\log(k/\Lambda)$表示相对于初始紫外尺度 Λ的重整化群时间。关于场依赖性，有效势 $V(t,\rho)$必须仅是 $\mathbb{Z}_2$ 不变量 $\rho = \phi^2/2$ 的函数。最后，积分下标 x 表示按照通常方式对整个时空进行积分。

使用 Litim调节器 $R_k(p) = (k^2 - p^2)\,\Theta\,(k^2 - p^2)$，将有效作用量的试探形式 （1）代入 Wetterich 方程（A1）并投影到有效势上

$$\partial_t V(t,\rho) = -A_d \frac{k^{d+2}}{k^2 + \partial_\rho V(t,\rho) + 2\rho\,\partial_\rho^2 V(t,\rho)} . \tag{2}$$

前因子 $A_d = 2/d(2\pi)^{-d}\pi^{d/2}\Gamma(d/2)^{-1}$ 在(2) 中汇集了 Wetterich方程和动量积分产生的前因子。其符号为正，且仅取决于时空维数 d。在本文中，我们始终采用 $d = 3$，但请注意，对于任意 $d > 2$，破缺相中的定性结论均与这一选择无关。

尽管采用了这一简单截断，与重整化群时间积分相关的数值问题已经出现，而且这些结果可直接推广至其他理论和更复杂的情形。

遵循 [6]及后续工作的思路，基本变量取为有效势的导数

$$u(t,\rho) = \partial_\rho V(t,\rho) . \tag{3}$$

为简便起见，如果函数的自变量在当前语境中显而易见，我们将省略不写。现在可以方便地利用通量来表述 $u(t,\ \rho)$ 的方程

$$f(t,m^2) = -A_d \frac{k^{d+2}}{k^2 + m^2} , \tag{4}$$

其中，(曲率)质量 m^2 的平方为

$$m^2(t,\rho) = u(t,\rho) + 2\rho\,\partial_\rho u(t,\rho) . \tag{5}$$

有效势的导数 $u(t,\ \rho)$ 的流为

$$\partial_t u = \partial_\rho\, f(t,m^2) . \tag{6}$$

为便于后文引用，我们还引入曲率质量平方的流方程

$$\partial_t m^2 = (1 + 2\rho\,\partial_\rho)\partial_\rho\, f(t,m^2) . \tag{7}$$

最后，我们考虑正则化二点函数的对数

$$\varpi(t,\rho) = \log(k^2 + m^2) , \tag{8}$$

其对应的流方程为

$$\partial_t \varpi = -e^{-\varpi}\left[(1 + 2\rho\partial_\rho)\partial_\rho \left(A_d k^{d+2} e^{-\varpi}\right) - 2k^2\right] . \tag{9}$$

这些流方程可能具有重要意义，因为它们或许有利于数值应用。质量平方 m^2 的流在形式上更接近典型的对流扩散方程，而正则化二点函数的对数则使约束 $k^2 + m^2 > 0$ 对所有有限 $k > 0$ ($t < \infty$)都显而易见。出于完全相同的原因，这类对数变换也常用于化学和生物系统，例如化学浓度可能变得任意小，但必须为正。对于本文所考虑的初始条件（四次势），可以证明该约束对所有重整化群尺度 k均成立，详见[18] 。

A. 离散化

为使后续讨论简明易懂，我们对场空间采用直接的网格离散化，并采用一阶有限差分格式，另请参见 [9]。

我们在一维有序网格上对（有限）定义域进行离散化，

$$\{\rho_i\} = \{\rho_1 = 0, \rho_2, \ldots, \rho_{N_\rho} = \rho_{\max}\} \,. \tag{10}$$

为简化下文中的方程，我们引入简写符号 $u_i = u(t, \rho_i)$、$m_i^2 = m^2(t, \rho_i)$ 和 $\varpi_i = \varpi(t, \rho_i)$。

通量 (4) 严格为负。因此，我们可以定义一阶迎风导数和下风导数算子，

$$\mathcal{D}_{u(d)} a_i = \frac{a_{i\pm1} - a_i}{\rho_{i\pm1} - \rho_i} \,, \tag{11}$$

其中 a 代表任意感兴趣的变量；对于迎风算子$\mathcal{D}_u$，应取 $+$ 号，而对于下风算子 $\mathcal{D}_d$，应取 $-$ 号。

我们首先对标准表述 (6)进行离散化，随后推导质量 (7) 和对数(9)形式的离散化。遵循 [6], 的思路，作用于通量 (4) 的导数 在 (6) 中必须是迎风导数，而项（$1 + 2\rho\,\partial_\rho$）中的导数 (5) 必须是下风导数。

总而言之，方程的对流部分采用迎风导数进行离散化，而扩散部分则考虑到 2ρ 的不对称性，采用中心导数进行离散化。

有了这些，我们便可以轻松写出三个不同版本 (6)、(7) 和(9)的稳定离散化。为此，引入组合导数算子是有益的，

$$\tilde{\mathcal{D}} = (1 + 2\rho\,\mathcal{D}_d)\mathcal{D}_u \,, \tag{12}$$

它出现在三个方程中的两个方程里。

总的来说，有效势的导数 (6)的离散流为，

$$\partial_t u_i = \mathcal{D}_u\, f(t, (1 + 2\rho\,\mathcal{D}_d)u_i) \,. \tag{13}$$

利用质量平方 (5)的定义，我们得到 (7)的离散形式，

$$\partial_t m_i^2 = \tilde{\mathcal{D}}\, f(t, m_i^2) \,. \tag{14}$$

最后，利用 (8)，我们得到 (9)的离散形式，即正则化二点函数的对数

$$\partial_t \varpi_i = -e^{-\varpi_i} \left[\tilde{\mathcal{D}}\left(A_d k^{d+2} e^{-\varpi_i}\right) + 2k^2\right] \,. \tag{15}$$

此处我们想强调，这些形式的离散化是等价的。因此，(13) 所依据的稳定性概念意味着(14)和(15)也具有相同的稳定性。不过，这仅适用于在重整化群时间上的积分中采用强稳定性保持（SSP）算法并结合CFL型步长条件的情况。因此，这并不能说明隐式算法采用自适应时间步进时的性能或稳定性。

B. 初始条件与边界条件

使用四次紫外势来研究势的凸性恢复最为简单。因此，我们将初始势设为

$$V(t = 0, \rho) = m_\Lambda^2 \rho + \frac{\lambda_\Lambda}{2}\rho^2 \,. \tag{16}$$

系数 λ_Λ 必须为正，才能使势从下方有界。另一方面，系数 m_Λ^2 被设为负值，使得流从对称性破缺相开始。只有这样，最终势才能出现平坦区域，因为流是对称性恢复的，参见例如 [18]。我们只关注理论的这一状态，因为它正是我们正在研究的数值困难的根源。从这一角度看，另一支解则是平凡的。

本文中我们省略单位，因为我们并未将此处的计算与某个特定物理系统相对应。此外，我们利用场的重标度自由度来设定 $\lambda_\Lambda = 1$。

我们将初始紫外尺度设为 $\Lambda = 7.5$，该尺度足够大，能够涵盖与凸性恢复有关的全部动力学。最后，为了在正则化趋于零（$t \to \infty$）时仍远处于对称性破缺区域内，我们设定 $m_\Lambda^2 = -2.5$。

由于我们关注的是势的平坦化，而这完全由流的红外部分主导，因此我们不会关注任何潜在的紫外问题，例如重整化群一致性；相关详情请参见 [19] 。这一处理方式与有效低能理论中的常规计算完全兼容。

对于这些参数，有效势的极小值最初位于 $\rho_0(t = 0) = 2.5$ ，并在$\rho_0(t \to \infty) = 2.296$处冻结。为充分纳入相关动力学，我们选择了 $\rho_{\max} = 7.5$ 和 $N_\rho = 256$。这些参数对应于现实的取值，是我们在相关相结构研究中会采用的典型参数，也就是说，它们是典型计算中使用的参数。

最后，我们必须指定边界条件，才能完整描述离散化。计算域的左边界始终位于 $\rho = 0$，因此我们需要指定该边界处的下风导数。在当前设置中，我们预计不会在 $\rho = 0$ 处出现任何不规则性（也不可能出现），因此可以放心地将组合 $2\rho\mathcal{D}_d$ 设为零。在某些情况下，情况可能更复杂，详见 [7] 。在右边界 $\rho_{\max}$ 处，流受到充分抑制，迎风格式

并不重要 [6]。因此，我们可以用下风导数替代边界处的迎风导数。总之，

$$\begin{aligned} 2\rho\,\mathcal{D}_d &\to 0 \qquad \text{at } \rho = 0 \\ \mathcal{D}_u &\to \mathcal{D}_d \qquad \text{at } \rho = \rho_{\max}\,. \end{aligned} \tag{17}$$

上述讨论已完整规定了场域的离散化，并得到一个常微分方程（ODE）系统。

C. 费米子扩展

原则上，本文的一般性结论应具有普适性，因为对流主导演化的机制与理论无关。为了检验我们的分析是否确实对流方程的变化具有稳健性，我们在本小节中为系统加入一个额外的类夸克项，并将标量场的数量从N=1增加到 N=4。有效作用量的试探形式 (1) 变为

$$\begin{aligned} \Gamma_k[\phi] = \int_x \Big\{ &\bar{\psi}_{a,f} i\gamma_\mu \partial_\mu \psi_{a,f} + \frac{1}{2}(\partial_\mu \phi)^2 \\ &+ \frac{h}{\sqrt{2}} \bar{\psi}_{a,f}(i\sigma + \gamma_5 \vec{\tau}\cdot\vec{\pi})\psi_{a,f} + V(t,\rho) \Big\}\,, \end{aligned} \tag{18}$$

其中，夸克场 $\psi_{a,f}$ 带有颜色指标 $a = 1,2,3$ 和味指标 $f = 1,2$；为简洁起见，省略了狄拉克指标。在当前情形下，标量场 $\phi = (\sigma, \vec{\pi})$ 有四个分量，这与上一节中具有一个分量的 $\mathbb{Z}_2$ 理论不同。标量场与费米子通过汤川相互作用 h耦合，其中我们使用了泡利矩阵τ_i。关于这一称为夸克-介子模型的模型的详细讨论，参见例如 [20–22]。这一扩展是量子色动力学的一种常用低能有效理论，可用于预测低能条件下量子色动力学的相结构，因此也是另一种具有物理意义的模型。

根据有效作用量 (18)，采用 Litim调节器后，我们得到与 $\mathbb{Z}_2$ 情形类似的流方程

$$\begin{aligned} \partial_t V(t,\rho) = -A_d k^{d+2} \Bigg(&\frac{3}{k^2 + \partial_\rho V(t,\rho)} \\ &+ \frac{1}{k^2 + \partial_\rho V(t,\rho) + 2\rho\,\partial_\rho^2 V(t,\rho)} - \frac{24}{k^2 + h^2\rho} \Bigg)\,. \end{aligned} \tag{19}$$

与(2)相比，我们为戈德斯通自由度增加了一项，与径向模的项类似，但它完全是平流项，即不包含扩散。此外，还有一个费米子贡献，它在方程中起到源项的作用，参见 [9, 10, 13, 15] 关于费米子的早期研究。

在当前的夸克-介子情形中，我们遵循与 $\mathbb{Z}_2$ 理论相同的思路，并对有效势(3)的导数进行处理。随后，按照IIA节中概述的完全相同的方式对方程进行离散化，从而得到一个几乎与(13)完全相同的方程，

$$\partial_t u_i = \mathcal{D}_u\, f_{\mathrm{QM}}(t, u_i, (1 + 2\rho\,\mathcal{D}_d)u_i)\,, \tag{20}$$

其中夸克-介子通量为

$$\begin{aligned} f(t, m_\pi^2, m_\sigma^2) = -A_d k^{d+2} \Bigg(&\frac{3}{k^2 + m_\pi^2} + \frac{1}{k^2 + m_\sigma^2} \\ &- \frac{24}{k^2 + h^2\rho} \Bigg)\,, \end{aligned} \tag{21}$$

其中，我们将 π 介子质量和 σ 介子质量定义为

$$\begin{aligned} m_\pi^2(t,\rho) &= u(t,\rho) \\ m_\pi^2(t,\rho) &= u(t,\rho) + 2\rho\partial_\rho u(t,\rho)\,. \end{aligned} \tag{22}$$

为简化讨论，我们只考虑标准表述(20)，即直接离散化有效势的导数。

与 $\mathbb{Z}_2$-理论类似，我们希望采用现实的设定，这也意味着要选择物理上合理的初始条件。在当前的夸克-介子模型中，费米子自由度，即夸克，驱动着对称性破缺，因此初始条件通常设在对称相。通过设定 $m_\Lambda = 0$ 并保持其余参数不变，即可实现这一点。

此外，汤川耦合是在 $\mathbb{Z}_2$-理论中不存在的额外参数，我们将其固定为 $h = 1.5$ ，以使对称性破缺尺度与 $\mathbb{Z}_2$-理论情形下的尺度具有可比性。

D. 典型解

在深入分析重整化群时间积分的不同数值方案之前，先讨论解的定性特征会很有帮助。我们讨论 $t \in [0,6]$范围内的解。在最终重整化群时间$t = 6$ ，流实际上已被冻结，与 $t \to \infty$ 极限几乎无法区分。我们将在IV B 节中进一步讨论这一点。

对于标准表述 (13)，其定性行为十分直观，如图 1 所示。对于较小的重整化群时间 t， $u(t,\ \rho)$ 的线性形状基本保持不变，仅发生轻微位移。当$t \approx 1.5$ 达到最小值时，其位置约为 $\rho = 0$，此时该值与奇点界限 $-k^2$ 相当，参见 (6)，凸性恢复动力学随之启动。将各个网格点的重整化群时间演化可视化后，这一现象尤为明显，如图 1右图所示。此时，决定运动方程解的零点穿越开始以指数速度迅速冻结。在剩余的重整化群时间

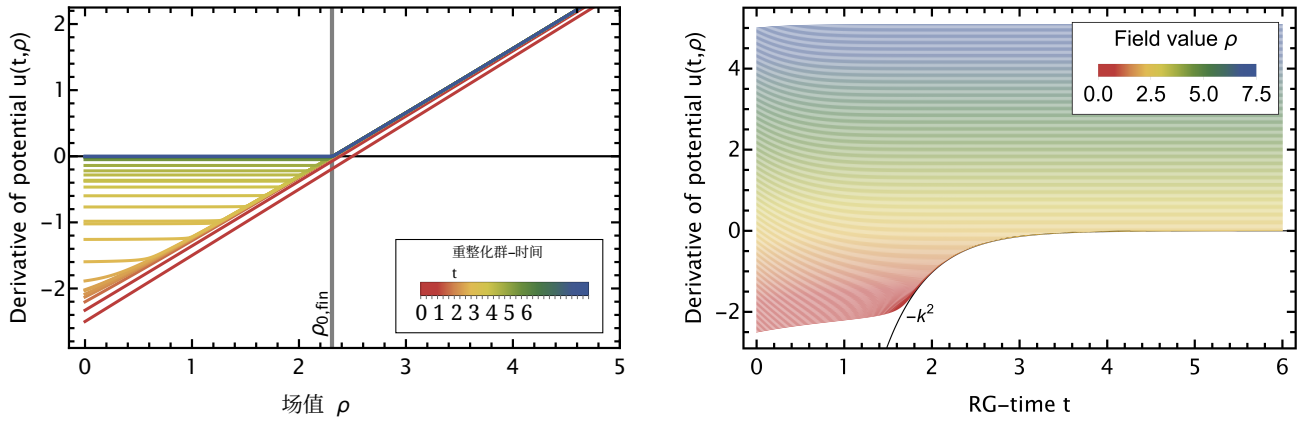


图 1：标准表述(13) 在（ρ， t）平面中的解。左图显示不同重整化群时间 t下线性插值的ρ依赖解；右图则显示各个网格点的重整化群时间演化。

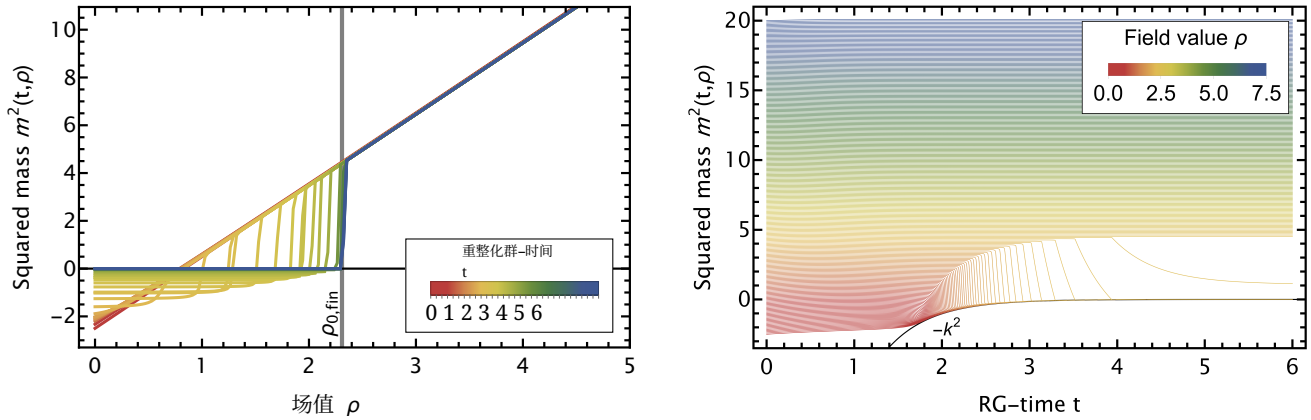


图 2：质量表述(14) 在（ρ， t）平面中的解。左图显示不同重整化群时间 t下线性插值的ρ依赖解；右图则显示各个网格点的重整化群时间演化。由于空间离散化具有扩散特性，激波被抹平。其影响是单个网格点会在跃变内部被冻结，这一点在右图中清晰可见。

演化过程中，场值小于零点穿越 $\rho \leq \rho_0(t)$ 的区域在奇点界限的推动下趋向于零。

这些计算中通常最具挑战性之处在于，运动方程的解位于平坦区域的边界。这使得对$\rho_{0,\text{fin}} = \rho_0(t \to \infty)$附近区域进行精确分辨变得困难，因为关注点本身会变得非解析，而质量等量（参见(5)）包含单侧导数。方程中存在奇点界限时，非解析性要求采用扩散格式来使其正则化。

采用质量(14)进行离散化时，这个问题尤为明显。其解如图 2所示。在这种情况下，$\rho_{0\text{处的fin}}$ 非解析性会转变为跳跃，并且随着重整化群时间增大，跳跃会变得越来越尖锐。从图 2右图可以明显看出

跳跃内部有一个网格点，这反映了其扩散特性。请注意，该网格点在 $t \to \infty$极限下依然存在，而且激波扩散展宽的细节强烈依赖于所选的空间离散化。此外，标准表述(13)的解中也包含这一点，在离散层面上两者等价。在质量表述(14)中也可以清楚地看到，平坦区间内的每个网格点都会经历快速变化，这凸显了重整化群时间演化的困难。

最后，我们考虑该问题的对数形式 (15)。在这种形式下，方程中并未显式体现奇点界限，如 $\varpi(t,\rho) = \log(k^2+m^2) \in \mathbb{R}$所示；与 $u(t,\rho) > -k^2$相比，这解决了奇点界限的问题。代价是，平坦区域中的点会趋向负无穷，如图3所示。

这使得 m^2 的跃变高度随重整化群时间线性发散

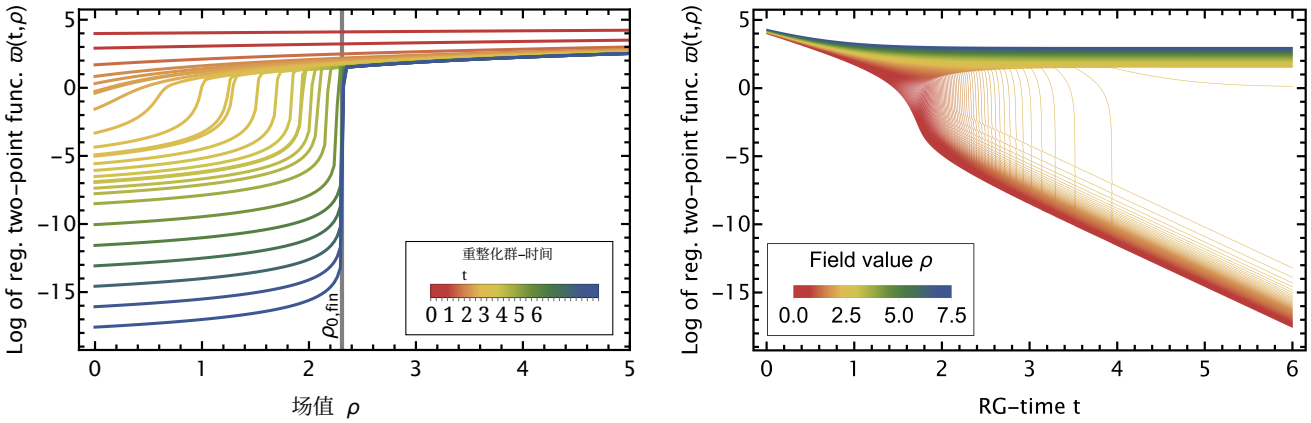


图3：对数形式的解（15）在（ρ， t）平面中的解。左图显示了对ρ相关的解进行线性插值后的结果，其中取了不同的重整化群时间 t；右图则显示了各个网格点的重整化群时间演化。由于空间离散化具有扩散特性，激波被抹平了。由此产生的影响——单个网格点被冻结在跳跃内部——可以在右图中清楚地看到。

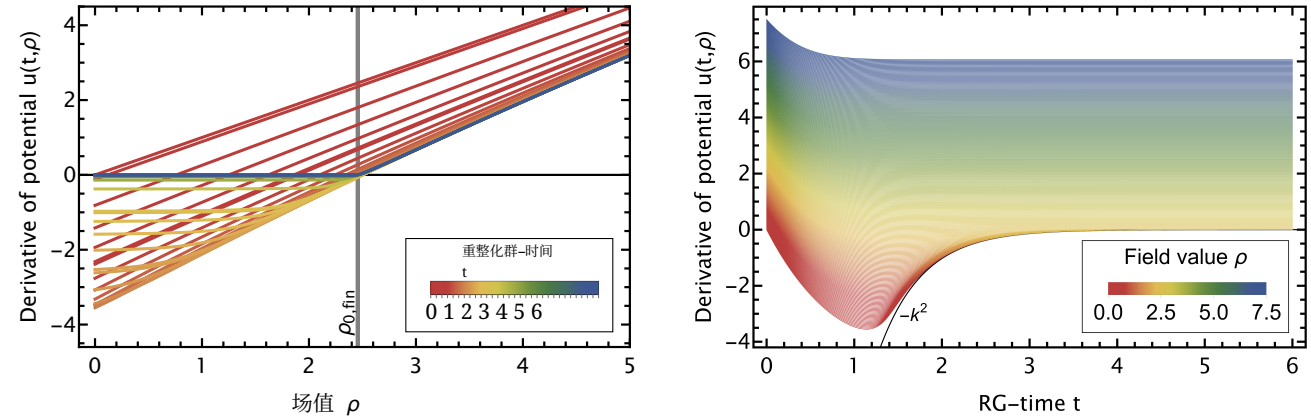


图4：包含费米子扩展时标准表述的解（19）在（ρ， t）平面中的解。左图显示了对 ρ相关的解进行线性插值后的结果，其中取了不同的重整化群时间 t；右图则显示了各个网格点的重整化群时间演化。

这可能会导致额外的复杂问题，尤其是关于跳跃间断附近空间离散化的稳定性。与上述质量表述的情况类似，跳跃间断内部只有一个点，其解释方式相同。

考察图图3右图中各个网格点的重整化群时间演化时，还可以看到一个进一步的特性。每当一个网格点进入平坦区间时，平坦区域中的其他所有点都会移向其前一个点，从而产生阶梯状行为。在其他形式中，这一现象并不可见，因为它完全发生在平坦区域内。然而，为了正确解析平坦区域并避免奇点界限，这种行为无疑是相关的。

最后，我们想指出，目前尚无已知的稳定离散化方案能够避免上述问题或定性特征。

为求完整，我们还在此处加入了包含费米子的情况下解的可视化结果，见 图 4。相关讨论可参见IVD节。

本节讨论的所有解均对应于我们的参考解。我们尽可能以机器精度计算这些解，相关细节见IIA节。

III. 数值实验框架

本节将介绍我们用于分析和基准测试由IIA节中的讨论所得到的常微分方程组的重整化群时间积分的实现细节和总体设置。

使用隐式算法求解常微分方程，需

要明确选择几个不同的组成部分：

- 算法
- 非线性求解器
- 线性求解器
- 时间步控制器
- 误差范数
- 雅可比矩阵的确定

请注意，并非所有算法都需要其他所有组件。例如，Rosenbrock 方法内置了牛顿迭代步骤，因此不需要非线性求解器。尽管如此，我们仍可以较为通用地讨论所有组件，因为我们发现，许多规律都与所用的具体算法无关。

为了讨论所有这些不同方面，我们发现 `DifferentialEquations.jl` [23] 软件包最为合适。我们的所有测试均使用 Julia 语言编写 [24] ，并可在GitHub [25]上获取。

A. 数值求解所需的组件

下面，我们将讨论各个组件，以及它们如何影响我们的基准测试过程，或影响一般情况下求解该系统的可能性：

1. *Algorithm*

数值求解中首要且最重要的组件，是时间步进算法本身的选择。总体而言，时间步进算法分为两类：隐式格式和显式格式；两类都有许多可选方案，也可以选择混合格式。不过，在当前情境下，这个选择很简单。

要理解这一点，可以考虑在势的平坦区间内，局部波速呈指数级快速增长（参见 [6] 以及 第 IVB 节；注意，波速定义为局部雅可比矩阵的最大特征值）。因此，根据 CFL 条件，重整化群时间中的最大步长会指数级变小，即

$$\Delta t < \frac{C\Delta x}{\alpha} \sim e^{-bt}\,, \tag{23}$$

其中， C 是该问题的库朗数， b是波速的尺度指数 α。

虽然像(23) 中这样简单直接的 CFL 条件仅在 O(N) 理论的无限 N 极限下才严格成立，参见 [6], 但势的平坦部分由对流主导，因此 (23) 在当前情况下也能提供良好的近似。此外，扩散项的存在通常会缩小允许的步长，使情况更加不利。总之，所需的指数级小时间步长使显式时间步进器变得不可行，因此我们将只关注隐式算法。

这仍然为我们留下了极其广泛的隐式算法选择。有关详细介绍，请参见例如 [26, 27],；这里我们只概述其基本特征。广受欢迎的龙格–库塔格式分为两类。

第一类也是最常用的算法是对角隐式龙格-库塔（DIRK）方法，其中包括隐式欧拉法以及克兰克–尼科尔森格式中使用的梯形法／隐式中点算法等知名算法。第二类包括全隐式龙格–库塔（FIRK）格式。在 DIRK 格式中，每个内部阶段的方程组都可以依次求解；而在 FIRK 格式中，则必须求解一个耦合的方程组。更准确地说，在显式 RK 格式中，每个阶段仅由先前的阶段得到；而在 DIRK 方法中，每个阶段的右端项可以包含其自身。在 FIRK 方法中，右端项可能包含所有阶段。直接的结果是，DIRK 格式更易于实现、成本也低得多；如果它们能够处理系统的刚性，通常还会更快。因此，DIRK 方法是偏微分方程工具箱中最常实现的隐式方法。

本文研究的下一大类算法是 Rosenbrock 方法，包括由其衍生的 Rosenbrock-W 扩展。它们将雅可比矩阵直接纳入时间步更新，实质上执行了一步牛顿迭代，因此可视为对角隐式龙格-库塔方法的扩展。因此，对于非自治方程，公式中还会出现通量的重整化群时间梯度。这类方法在广泛的问题上表现出卓越的稳定性和精度，但实现起来相对繁琐。在统称为 Rosenbrock-W 的格式中，雅可比矩阵和时间梯度并非每一步都更新，而是根据算法采用延迟更新的方式。

最后一大类隐式算法是隐式多步格式。与 RK 格式相比，它们不计算内部阶段，而是在更新步骤中利用前几步的信息。一些最常用于求解刚性常微分方程系统的库，包括 SUNDIALS 库 [28, 29] 或 ODEPACK 软件包 [30], ，都以隐式多步方法为重点。上述两个库也都通过各自的 Julia 接口 [23] 纳入了我们的研究。隐式多步方法的一大优势是能够轻松实现自适应阶数选择，从而大幅提升性能。

作为算法这一小节的结尾，我们想提及并评论其他几类算法。

其中第一类是隐式外推方法，已纳入综述图 图 8 至 图 13。总体而言，我们发现它们的表现明显

不如其他算法。不过，它们的一个吸引人的特点是具有良好的可并行性前景，参见例如 [31]。

在启动这个项目时，我们认为另一类颇有前景的算法是指数积分器，例如参见 [32]。这类算法的核心思路是将方程拆分为线性部分和非线性部分：前者可以精确积分，后者则可以显式处理。我们认为这很有前景，因为在渐近的大重整化群时间下，标准表述中的所有数值都只是指数衰减，参见图 3。然而，我们既未能找到合适的方程拆分方式，基于每个时间步进行线性化的自动拆分（如 [23], 中所实现）也无法奏效，即在任何表述下都无法达到至少 $t = 6$ 的最终重整化群时间。未来或许可以通过隐式指数积分器克服这些不足。不过，这又会引入隐式算法，因此额外的工作是否值得便令人存疑。

为求完整，我们还提及曾尝试使用 IRKGaussLegendre.jl 软件包 [33], 提供的算法，但由于函数迭代普遍失败（下文将对此进行讨论），我们发现这些算法并不适用。

2. *Non-linear solver*

大多数隐式算法都需要求解一个非线性方程组。一个显著的例外是 Rosenbrock 方法，它已经包含了牛顿求解器迭代步骤。在数值求解常微分方程组时，通常采用两种方法：

牛顿迭代 这包括用于求解方程组的经典（拟）牛顿方法。我们发现，这类方法是唯一在实践中有效的方法。尤其是，ODE Julia框架中的 NLNewton [23]表现良好，且对数值调节参数的变化不敏感。

函数迭代 遗憾的是，我们无法让直接迭代及其安德森加速变体正常工作，也就是说，无法在合理的迭代次数内收敛到足够的精度。这至少在一定程度上可以用平坦区域内雅可比矩阵特征值谱的特殊性质来解释，下面将在 第 IVB 节中进一步讨论。

3. *Linear solver*

在当前情境下所有值得认真考虑的重整化群时间演化算法，都要求在每个重整化群时间步求解线性方程组。在我们的设置中，通过 Julia 软件包 LinearSolve.jl 的接口，可以使用大量不同的方法。我们发现，所有常用算法都能收敛，但其性能存在显著差异。基于 LU 分解的算法，以及尤其是其稀疏变体，表现极为出色。相比之下，基于 Krylov 子空间和 QR分解的算法表现明显较差，运行时间增加了几个数量级。这同样可以用雅可比矩阵特征值谱的特殊性质来解释，相关讨论见 第四节B。在当前情境下，这种联系在 QR算法中尤为明显，因为其收敛速率与特征值之比成正比。

4. *RG-timestep controller*

自适应控制重整化群时间步长通常极具吸引力，原因显而易见。此外，在函数重整化群应用中，常常需要针对不同的初始条件重新进行计算（无论是为了调节初始条件，还是为了扫描参数空间以研究相结构），而流的特征可能会发生显著变化。在这些情况下，手动控制重整化群时间步长的效率相当低，因此这一点在函数重整化群流中尤其重要。

最常用的自适应步长控制器是控制回路类型，即积分、比例-积分或比例-积分-微分控制器。我们测试了这三种选项，以及 Gustafsson 加速法；这四种变体均已在 [23]中实现。我们没有发现显著差异，因此直接采用了各个重整化群时间步进算法的默认选项。

5. *Error norms*

无论是为了检查牛顿求解器是否已收敛，还是为了选择自适应时间步的大小，都要使用残差的误差范数。对于无法进行 LU 分解的大型问题，也需要使用这类范数来检查迭代算法是否已收敛。

结合IV B 节来看，在稳定性方面，确保误差范数考虑空间局部精度非常重要。具体而言，考虑绝对和相对精度限值 s_{abs} 和s_{rel}。对于残差向量 r ，以及网格大小为 N时迭代前（u）和迭代后（$\tilde{u}$）的解向量，我们可以使用 l_2-范数定义归一化误差：

$$e_{l_2} = n_{l_2} \frac{\|r\|_2}{s_{\text{abs}} + s_{\text{rel}} \max(\|u\|_2, \|\tilde{u}\|_2)}, \tag{24}$$

与 $n_{l_p} = N^{\frac{1}{p}}$ 通常，这是许多用于有限差分和有限元的离散化框架中实现的标准误差范数。这种定义可能会允许局部误差较大，尤其是在局部强动力学出现时，而这会迅速导致系统不稳定。

因此，能够评估局部相对精度的误差范数更为合适，

$$e_{\mathrm{loc}} = n_{l_p} \left\| \frac{r_i}{s_{\mathrm{abs}} + s_{\mathrm{rel}} \max(|u_i|, |\tilde{u}_i|)} \right\|_p . \qquad (25)$$

在`DifferentialEquations.jl` 和SUNDIALS套件中，误差范数(25)采用 $p = 2$实现，这对于本文所考虑的问题已足够。然而，需要指出的是，当存在具有快速动力学的空间局域现象时，我们发现必须选择 $p = \infty$ 才能确保演化的稳定性。

6. *(Automatic) Jacobian construction*

最后，我们还必须考虑雅可比矩阵的构造与近似，这是大多数时间步进算法所必需的。首先应注意，处理对流占优偏微分方程的空间离散化通常具有稀疏雅可比矩阵。利用这一结构，即采用稀疏矩阵，当然十分重要；这也与关于线性求解器的讨论密切相关，参见第 IIIA 3 节。实际上，计算雅可比矩阵有三种不同的选项：

- 自动微分（自动微分）
- 精确／符号计算
- 有限差分

我们发现，使用在工作精度层面上足够精确的雅可比矩阵，能够显著改善数值 RG 时间积分。前两种选项可以实现这一点。

第一种方案，即自动微分，是一种在工作精度下获取雅可比矩阵的方法，它通过在编译器层面反复应用链式法则来实现。在 Julia 语言中，可以直接通过 `ForwardDiff.jl` [34] 使用这项技术，并且`DifferentialEquations.jl`会自动支持雅可比矩阵的计算。我们发现这是最方便的配置，因此在本文中将其作为所有基于 Julia 的求解器的默认配置，但不包括 SUNDIALS (`CVODE_BDF`) 和 `ODEPACK` (LSODA) 例程。在这些情况下，我们采用了它们的内部默认设置。

第二种方案是显式实现雅可比矩阵，其表现与自动微分非常相近，但需要额外花费时间推导雅可比矩阵。有时，这项工作可以高效自动化，因此这也是一种非常可行的方案。尤其是在无法使用自动微分时。

最后，我们发现，有限差分法的实际可用性很大程度上取决于不同库所采用的启发式方法。上文提到的外部库表现非常出色，运用了各自的近似启发式方法。另一方面，我们没能让基于 Julia 的求解器与有限差分法结合使用（即使用 FiniteDiff.jl）正常运行。我们还想补充一点，之前我们在 Mathematica 中也有过类似的经历，因此得出了上述结论。

B. 数值实验的设置

所有用于测量执行时间的基准测试均运行五次，以避免异常值；报告的数值为中位数。在所有情况下，我们发现中位数都非常接近最小值，这证实不存在异常值。该实现可在GitHub [25]上获取。本研究在一台笔记本电脑上进行，其操作系统为 Windows 11，配备 Intel Core i7-11800H CPU，最高主频为 4.60GHz，以及 32GB 随机存取存储器。为便于比较，未采用任何形式的并行化，所有计算均限制在单个核心和线程上。所有浮点运算均采用双精度浮点格式。除非另有说明，最终重整化群时间取为 $t = 6$。在 $t = 6$ 时，流已安全进入渐近区间，参见IV B 节。

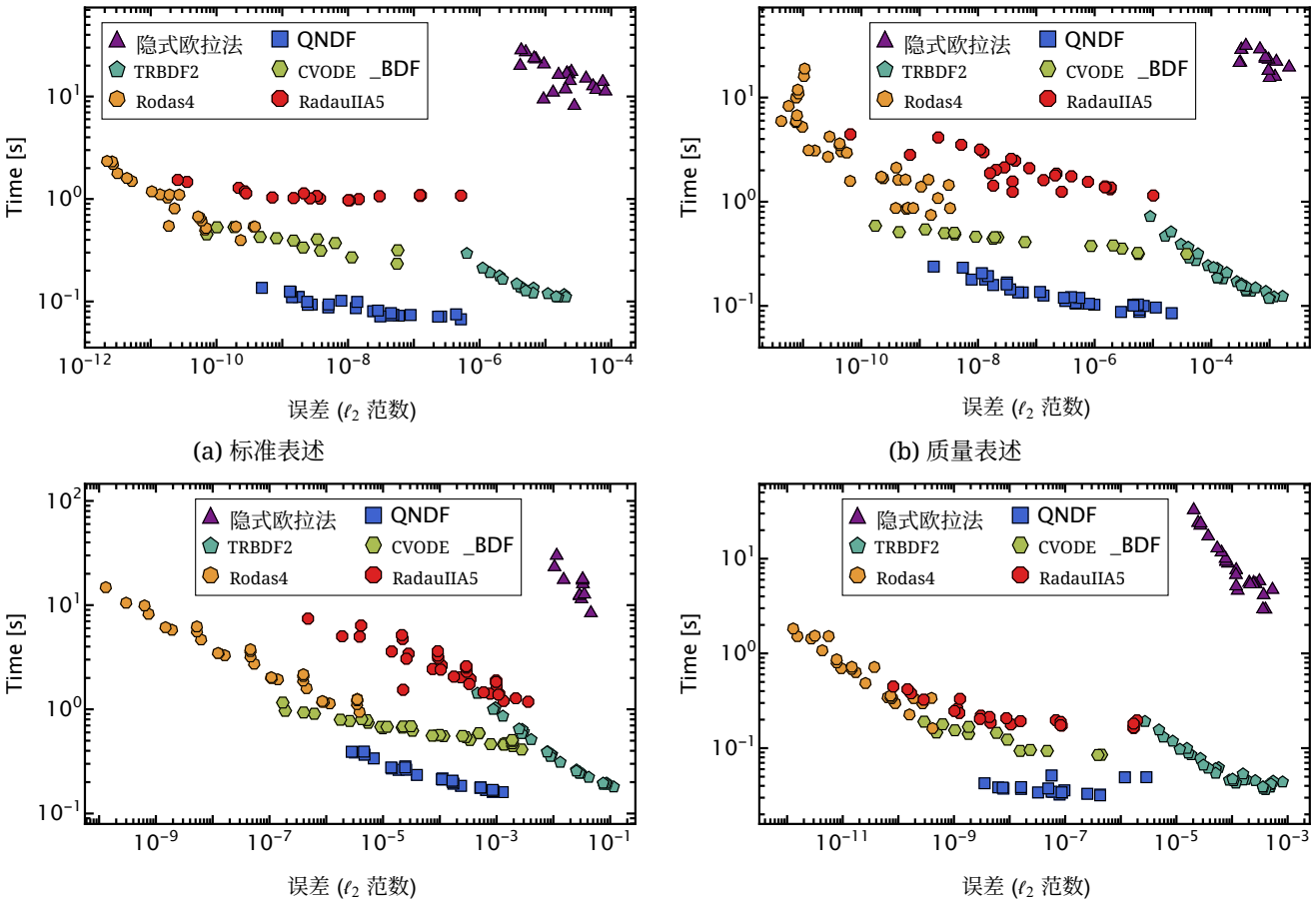
IV. 结果

本节介绍我们的分析和结果，重点关注重整化群时间演化求解算法。我们发现，其他组件对于数值重整化群时间积分的影响具有普遍性，相关讨论见前一节，即第 III 节。

A. 工作精度

对于日常应用中的流方程求解，衡量性能最重要的指标是工作精度关系，即精度如何随计算时间变化。因此，我们调查了 49 种不同的算法，收录于 附录 B。此前，我们使用 `KenCarp58` 算法生成了一个参考解。对于该参考解，绝对精度和相对精度目标设为 10^{-15}，这是双精度浮点数所能达到的最高精度。通过比较不同算法（即 `RadauIIA5`、`QNDF` 和`Rodas4`）在该目标精度下的表现，我们发现实际可达到的最高精度约为 10^{-12}，以 ℓ_2-范数衡量。因此，我们排除了调查中所有满足 $\|a_i - a_i^{\mathrm{ref}}\|_{\ell_2} < 1.25 \cdot 10^{-12}$ 的结果。在考察工作精度关系时，仍能观察到由此产生的轻微饱和效应残留，尤其是在质量表述 (14) 的结果中。

为了研究工作精度关系，我们扫描了绝对目标精度和相对目标精度在 $10^{-8} \ldots 10^{-12}$ 范围内的所有可能组合，步长为



(a) 标准表述　(b) 质量表述

(c) 对数形式　(d) 费米子扩展的标准表述

图 5：所有三种形式、费米子情形及所选算法的工作量-精度图。值得注意的是，隐式多步算法 QNDF效率极高，Rosenbrock 算法 Rodas4 精度很高，而 隐式欧拉法表现不佳。完整的比较结果见图 8、图 9、图 10，详细讨论见第 IV A 节。

一（对数$_{10}$ 尺度）。我们排除了所有未达到最终重整化群时间 $t = 6$ 的运行；这在精度目标较低时最为常见，也解释了为何扫描范围下限为 10^{-8}。工作精度关系的完整调查结果汇总于：标准表述 图 8 （13）中，质量表述 图 9 （14）中，以及对数形式 图 10（15）中。三种表述的整体性能相近，因此我们不再分别讨论每种表述。

对角隐式龙格-库塔算法、KenCarp 系列（KenCarp5 除外）以及 TRBDF2 都很有前景。尤其是，考虑到 KenCarp3 和 TRBDF2 都是低阶方法，它们表现出色更是值得称道。还值得注意的是，广受欢迎的隐式欧拉法和梯形法表现极差。

Rosenbrock 方法相对不受具体算法选择的影响。虽然要推进高精度边界需要耗费更多时间，但它们凭借出色的稳定性以及实际达到的精度远超预期，表现尤为突出。

Rosenbrock-W 方法的平均运行速度略快，但其降低的稳定性削弱了吸引力。

接下来讨论隐式多步方法，包括 SUNDIALS 的 CVODE BDF 和 ODEPACK 的 LSODA。尽管变阶 BDF 实现（即 QBDF、QNDF 和 CVODE BDF）无法达到非常小的误差精度，但由于运行时间极短，仍然颇具吸引力。FBDF 的表现相近，但由于稳定性降低，即需要显著减小允许的最小步长，其性能不如 QBDF 和 QNDF。

转而考察 FIRK 方法时，我们发现 RadauIIA5 非常稳定且表现出色，而 RadauIIA3 则是仍能成功求解该系统的算法中表现最差的算法之一。我们未能找到这两种非常相似的算法之间存在如此巨大差异的明显原因。我们怀疑这与 RadauIIA3 缺少伪稳定区域有关，相关讨论见

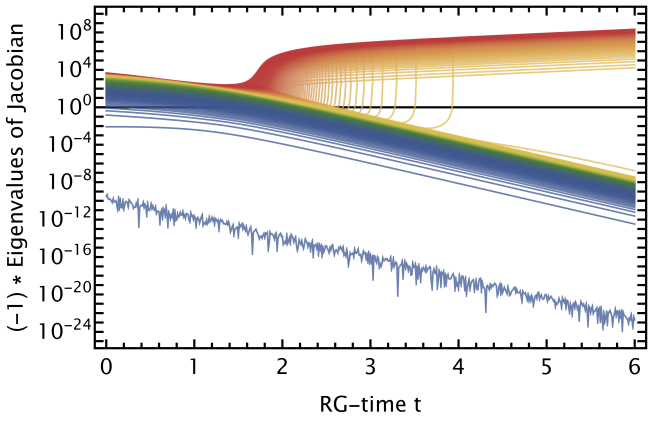


图 6：雅可比矩阵负特征值的重整化群时间演化。显著受抑制的波动曲线可归因于大场值处的边界条件，即 $\rho_{\max}$ 边界。其余特征值分为两类：与平坦区间相关的特征值呈指数增长，其余特征值则呈指数抑制。关于其影响的详细讨论见 IV B 节。

RadauIIA3，IV C 节将对此进行讨论。

最后，隐式外推算法族的表现显著逊于其他算法族，因此对于流方程的常规应用而言无关紧要。

为方便读者，图中展示了一组性能良好的算法，以及作为参考的 隐式欧拉法，见 图 5。所示算法，即 QNDF、TRBDF2、Rodas4、RadauIIA5 和CVODE BDF，在处理流方程导数展开中的新问题或新方程时，都是极佳的选择。

B. 雅可比矩阵特征值

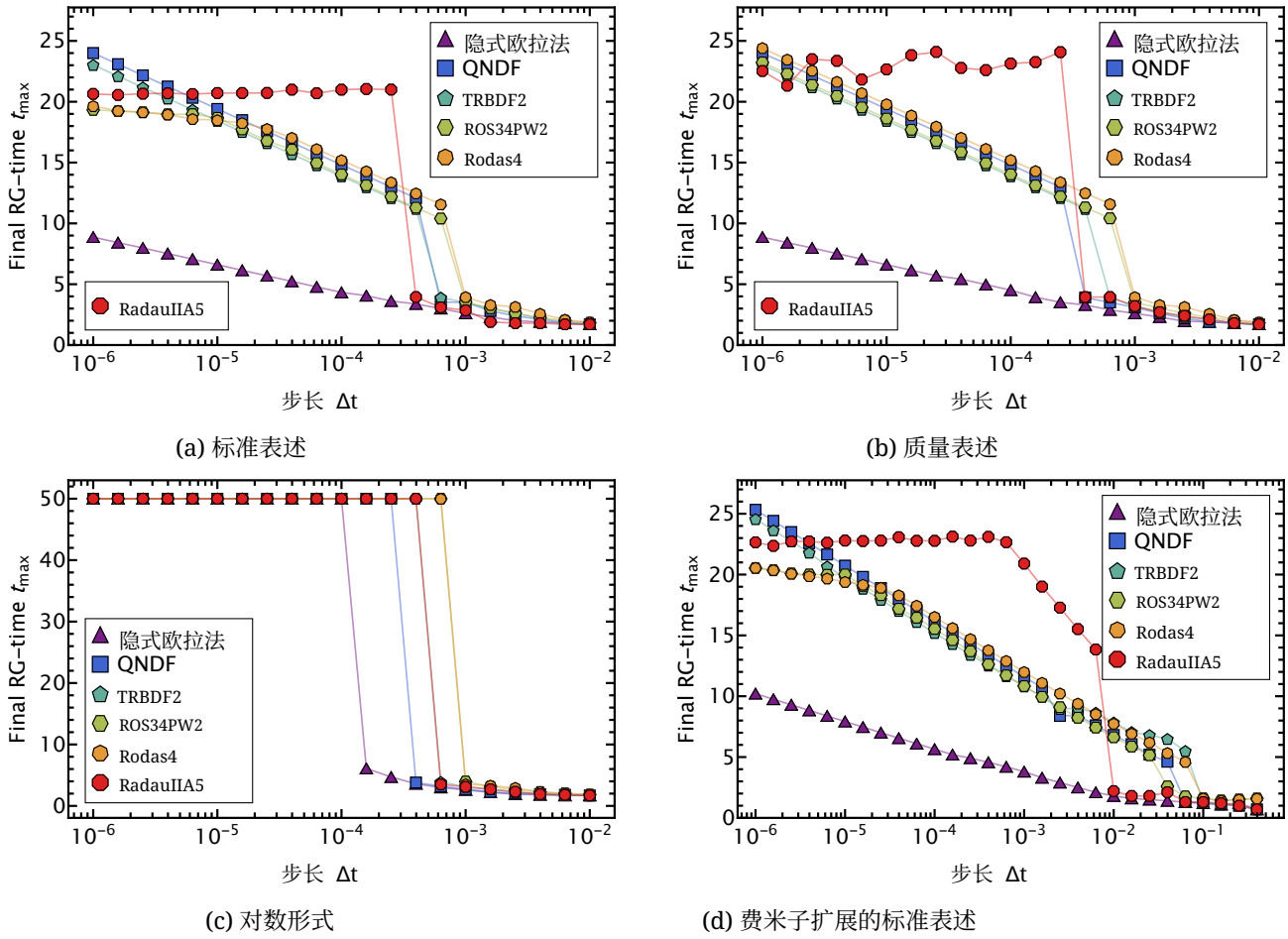
通过考察系统的雅可比矩阵，可以进一步了解平坦区域内遇到的困难。为简便起见，我们仅讨论标准表述(13)。不过，所得结果可直接应用于全部三种形式。图中展示了（离散）雅可比矩阵的（负）特征值图 6，并以重整化群时间为横轴。系统的一些特殊之处立刻显现出来。首先，平坦区域中的每个网格点都对应一个指数增长的特征值。请注意，这一说法完全取决于空间离散化，但所有已知的稳定离散化都呈现类似情况。其次，这些特征值并非同时开始指数增长。与尖点／跃变内网格点相关联的特征值最后才表现出动态行为。它的增长与平坦区域内其他网格点的特征值相似，但在非平坦区会冻结。这标志着一个独特的重整化群时间；在此时，可以安全地进行类似于 [6], 中所讨论的外推。最后，当流小于局部质量尺度后，势的非平坦区便开始以指数速度冻结。这是重整化群流的预期行为。请注意，那个起伏的特征值受到的抑制显著强于其他所有特征值，它与边界条件(17)相关，位置在 $\rho_{\max}$。

总而言之，特征值分为两组：一组在平坦区域内指数增长，另一组在非平坦区内受到指数抑制。因此，这两组之间存在指数增长的间隙。这会显著降低所有收敛速率与特征值比值相关的算法的性能，参见第 III 节。此外，这也提示了新型空间离散化的潜在设计原则，即减少平坦区域内每个计算节点对应的指数增长特征值数量。由此，[16] 中的见解可能特别有用，因为它提供了平坦区域内的线性化方程。

雅可比矩阵特征值的指数增长还表明，系统会越来越容易因扰动而出现较大误差和不稳定性。这类扰动可能很快由先前时间步中的数值误差引发，因此，时间步进期间保持高精度是确保稳定性的重要前提。

C. 无限重整化群时间极限下的稳定性

在日常应用中求解泛函重整化群方程时，还有一个高度相关的方面：重整化群时间积分的长期重整化群时间稳定性。为了忠实地检验这一点，我们改用固定重整化群时间步长的演化，其中步长记为 Δt。我们对流进行积分，直到检测到流中的不一致性/不稳定性，即解变得非单调，或违反正性界。最后一个成功的重整化群时间步长随后决定



(a) 标准表述

(b) 质量表述

(c) 对数形式

(d) 费米子扩展的标准表述

图 7：所有三种形式、费米子情形及所选算法的重整化群时间稳定性。值得注意的是，标准表述(13) （包括费米子情形 (20)）和质量表述(14) 中的伪稳定性概念，以及对数形式(15)中的真正稳定性。完整的综述见图 11、图 12、图 13，详细讨论见 IV C 节。

$t_{\max}$。理想情况下，应存在某个最大步长 Δt_{cr}，使得所有更小的重整化群时间步长 $\Delta t < \Delta t_{\mathrm{cr}}$ 都能提供稳定演化，即 $t_{\max} \to \infty$。实际上，我们无法积分至 $t_{\max} \to \infty$。因此，我们选择将截止值设为 $t = 50$，在所有实际应用中这都等效。由于技术原因，本次调查排除了外部库；鉴于计算雅可比矩阵时缺少自动微分，我们预计它们的表现不如纯 Julia 实现。

结果的完整汇总见图 11，对应标准表述(13)；图 12对应质量表述(14)，而图 13 对应对数形式(15)。算法的选择见图 7。可以立即观察到以下几点：首先，只有对数形式(15)表现出真正稳定性。在 $\Delta t \approx 10^{-3} \ldots 10^{-3}$ 处，最终重整化群时间变得与步长无关。其次，另外两种形式都没有超过 $t_{\max} \approx 20 \ldots 25$，即它们不具备稳定性。不过，在大致相同的 Δt，对数形式表现出稳定性的地方，它们的 $t_{\max}$会急剧增加。这种急剧增加恰恰决定了算法是在势变平过程中失效，还是能够正确解析演化中的这一关键阶段。我们将这种性质称为伪稳定性。幸运的是，大部分受考察的算法，尤其是 Rosenbrock 方法和隐式多步方法，都具有这一性质。标准表述和质量表述下，大多数算法所能达到的最终重整化群时间受限于线性求解器部分的双精度。这一点可通过估算其离散方程中相关量级轻易看出。

此外，对于方法`RadauIIA5` 而言，最终重整化群时间的跃升幅度如此之大，以至于我们无法区分算法的伪稳定性与真正稳定性。鉴于质量表述中跃升幅度极大，参见图 7b，有人可能会认为该方法是稳定的，只是受有限数值精度限制。然而，这一说法必须与

IVD节中讨论的费子情形的观察结果相对照。

尤其是，对数形式尽管解中的间隙无限增大，却因其重整化群时间稳定性而颇具吸引力。我们想指出，将其推广到更复杂的理论（例如具有 $N > 1$ 的 $O(N)$ 理论）存在歧义，仍有待进一步研究。

一般而言，伪稳定性的概念暗示存在两种不同的稳定性判据。一种与对非解析性的稳定性有关，也就是本例中的尖点；另一种则与奇点界限的存在有关，而对数形式可以规避这一界限。

D. 模型的费米子扩展

迄今为止所展示的结果均是在 $\mathbb{Z}_2$ 理论中得到的。这里我们简要讨论第 IIC 节 中引入费米子的理论所得结果。为简便起见，我们仅讨论标准形式；其他形式的扩展，尤其是对数形式，将在别处讨论。

有效势导数的典型重整化群时间演化如 图 4 所示。最值得注意的是，在流动的初始阶段，费米子贡献会增大场的期望值。然而，势一旦开始变平，其演化便与 $\mathbb{Z}_2$ 情形非常相似。此外，非解析性似乎更为温和，即它在离散系统中持续存在于更大范围的重整化群时间内。

工作量—精度结果如图 5d所示，所选 $\mathbb{Z}_2$ 算法与纯粹情形非常相似。这是意料之中的，因为最终解也非常相似。

然而，无限重整化群时间分析表明，达到伪稳定性要求的时间步长要大得多（$\approx 10^{-2}$），这很容易用较弱的非解析性来解释。此外，RadauIIA5 算法显然只表现出伪稳定行为。这可能表明，在 $\mathbb{Z}_2$ 情形下观察到的行为也只是伪稳定性，受有限数值精度限制，或者是该特定情形所特有的。

V. 结论与展望

本文研究了在具有 $\mathbb{Z}_2$ 对称性的三维时空标量理论的导数展开中遇到的 fRG 流方程的数值重整化群时间积分。这个例子展现了有效势平坦区域的典型行为，并伴随其边界处的非解析性；该边界标示出理论的期望值。

通过研究该方程的三种不同形式，我们发现，某些算法族结合（几乎）精确的雅可比矩阵，适合以所需精度进行重整化群时间积分。我们将启发式观点概述于表 I。

有趣的是，相当多的算法都呈现出伪稳定性，即存在一个最大步长，使得势最低点处的非解析性能够得到适当解析。对于更小的步长，唯一的限制因素是解析奇点界限的精度。

然而，(9)中引入的对数形式规避了这一问题。这使得我们能够积分到任意大的重整化群时间，即任意小的重整化群尺度。

这立即凸显了未来的目标：首先，理解由非解析性和奇点界限所引出的不同稳定性概念。对IVC节末尾讨论的内容，可以作为更正式研究该方程的良好起点。其次，理解对数形式的推广，以及其在更一般理论中的可行性。

致谢

我们感谢 Eduardo Grossi、Adrian K¨onigstein、Jan M. Pawlowski、Fabian Rennecke 和 Lorenz vonSmekal 就相关主题进行的讨论和研究工作。

FI 感谢德国人民奖学金基金会提供资助。FRS 感谢 GSI 重离子研究亥姆霍兹中心提供资助。NW 感谢德国研究联合会（DFG）通过项目编号 315477589 的 TRR 211 项目，以及黑森州通过 ELEMENTS研究集群（项目 ID 500/10.006 ）提供支持。

附录 A：泛函重整化群

我们简要概述泛函重整化群（fRG）的核心思想，并介绍本文采用的符号。综述可参见 [1]及其中的参考文献。RG 描述了量子场论沿（动量）重整化群尺度 k的演化。它通过逐步积分掉涨落，在小尺度（大 k）处的微观理论与大尺度（小 k）处的宏观理论之间进行插值。泛函重整化群为这一思想提供了现代的泛函实现方式，

$$\partial_t \Gamma_k[\phi] = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left[\left(\Gamma^{(2)} + R_k\right)^{-1} \partial_t R_k\right], \tag{A1}$$

Wetterich方程 [54]。在(A1)中，重整化群时间 t 定义为

$$t = -\ln\frac{k}{\Lambda}, \tag{A2}$$

Name	参考	阶数	评级
DIRK			
隐式欧拉法		1	C
梯形法		2	C
TRBDF2	[35]	2	S
SDIRK2	[28]	2	C
Kvaerno3	[36]	3	C
KenCarp3	[37]	3	S
Cash4	[28]	4	D
Hairer4	[38]	4	A
Hairer42	[38]	4	A
Kvaerno4	[36]	4	B
KenCarp4	[37]	4	S
KenCarp47	[39]	4	S
Kvaerno5	[36]	5	C
KenCarp5	[37]	5	B
KenCarp58	[39]	5	S
FIRK			
RadauIIA3	[40]	3	C
RadauIIA5	[41]	5	S
隐式多步法			
QNDF1	[41]	1	B
QBDF1	[41]	1	B
ABDF2	[42]	2	B
QNDF2	[41]	2	A
QBDF2	[41]	2	A
QNDF	[41]	v	S
QBDF	[41]	v	S
FBDF	[43]	v	A

Name	Ref	阶数	评级
Rosenbrock			
ROS3P	[44]	3	B
Rodas3	[38]	3	B
RosShamp4	[45]	4	B
Veldd4	[46]	4	A
Velds4	[46]	4	A
GRK4T	[47]	4	A
GRK4A	[47]	4	A
Ros4LStab	[38]	4	A
Rodas4	[38]	4	A
Rodas42	[38]	4	A
Rodas4P	[48]	4	A
Rodas4P2	[49]	4	A
Rodas5	[50]	5	A
Rosenbrock-W			
Rosenbrock23	[41]	2	C
Rosenbrock32	[41]	3	D
ROS34PW1a	[51]	3	B
ROS34PW1b	[51]	3	B
ROS34PW2	[51]	3	A
ROS34PW3	[51]	3	A
外部库			
CVODE_BDF	[23, 28]	v	S
LSODA	[23, 30, 52, 53]	v	A
隐式外推			
ImplicitEulerExtrapolation	[23]	v	C
ImplicitDeuflhardExtrapolation	[23]	v	D
ImplicitHairerWannerExtrapolation	[23]	v	C

表 I：本研究中考察的所有方法概述。其名称采用`DifferentialEquations.jl` 软件包 [23]中的用法。如果算法的阶数可变且可在运行时更改，则记为“v”。此外，我们还对每种算法在当前应用中的表现作出主观评级，仅供参考。评级说明见(B1)，其中S 为最佳，D 为最差。

其中，某个（紫外）参考尺度 Λ通常用作流的初始化尺度。在(A2) 中，我们想指出，与大多数功能重整化群文献相比，这里多了一个负号，它使重整化群时间的演化变为正向而非负向。 $\Gamma_k[\Phi]$在(A1)中表示给定重整化群尺度 k下的量子有效作用量（QEA），它必须经过截断才能得到有限组方程，参见第二节 A。 R_k 表示调节器，其作用类似质量项 $\sim k^2$，因而使圈图在红外区域有限；同时，它在动量空间中的衰减使得通过其重整化群时间导数得到的图在(A1)中紫外有限。最后，迹 Tr 汇总了对指标和自变量的求和与积分，其中包括对时空的积分，以及对内部指标的求和与积分；视所研究的理论而定，可能存在这些内部指标。

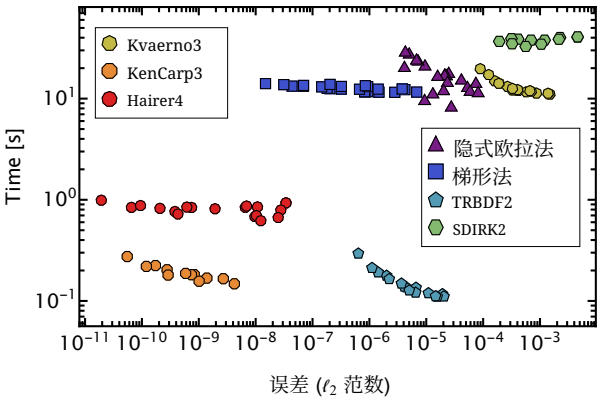
量子有效作用量 $\Gamma_k[\Phi]$在 $S[\Phi]$ 时趋近于该理论的经典作用量 $t \to -\infty$ ($k \to \infty$)。另一方面，在 $t \to \infty$ ($k \to 0$的极限下，正则化被移除，此时可恢复给定截断下的物理理论。重整化群演化由(A1)给出，通常会得到一组耦合偏微分方程。常见的截断方案是标准导数展开，其最低阶称为 局域势近似 （LPA）。在此近似中，只有有效势是依赖重整化群尺度的量，因此最终只需求解一个偏微分方程。

附录 B：求解器概览

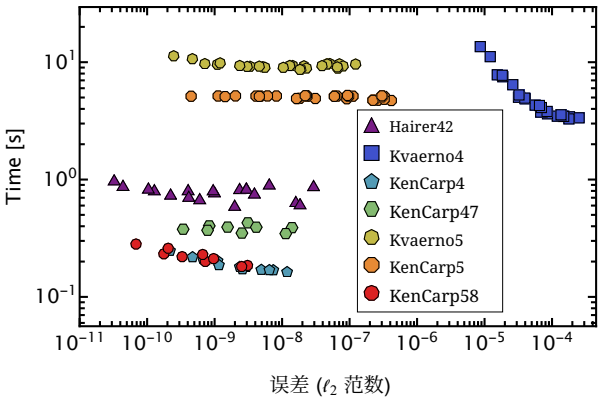
表 I 汇总了本文深入探讨的所有算法。表中列出了方法的名称、其参考文献中所采用的实现方式以及阶数（变量为 v=）。此外，我们还给出了评级，反映我们对该算法在当前问题中性能的主观评价。评级时，我们考虑了三种形式(13)、(14) 和 (15)的工作精度性能，以及该问题的费米子扩展(20)。此外，IV C 节详述的固定步长下的重整化群时间稳定性也发挥了重要作用。最后，在难以确定算法排名时，我们还考虑了实现的难易程度。例如，`TRBDF2` 相对容易实现，而 Rosenbrock 方法则会增加一层复杂性。评级方案如下：

S 性能最佳，几乎没有缺点A　总体性能非常好B 运行良好，但存在一些缺点C 能够收敛，但效率低下D　存在严重的收敛性/稳定性问题 (B1)

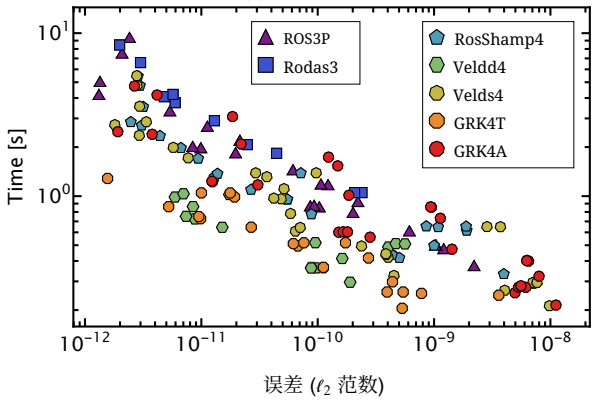
我们想再次强调，这一评级具有主观性，是基于我们完成本研究期间的经验得出的。尽管如此，我们希望它能为选择算法提供一个有用的起点。



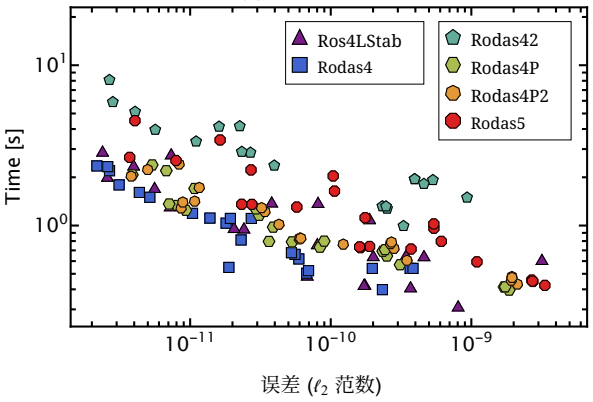
(a) 对角隐式龙格-库塔 1



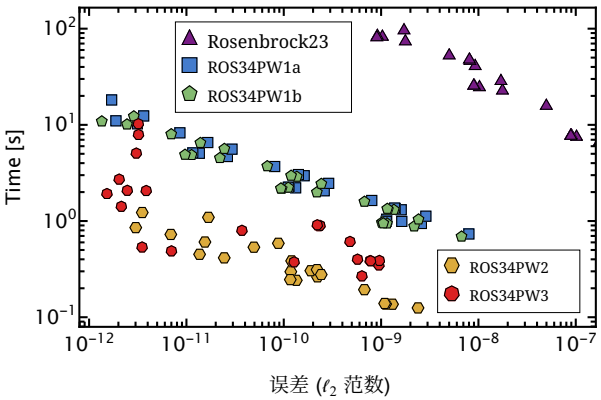
(b) 对角隐式龙格-库塔 2



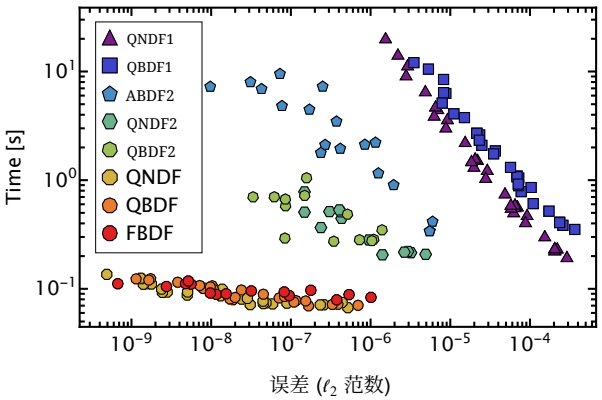
(c) Rosenbrock 1



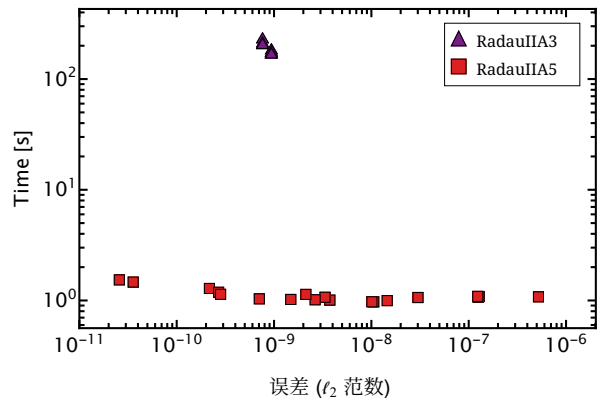
(d) Rosenbrock 2



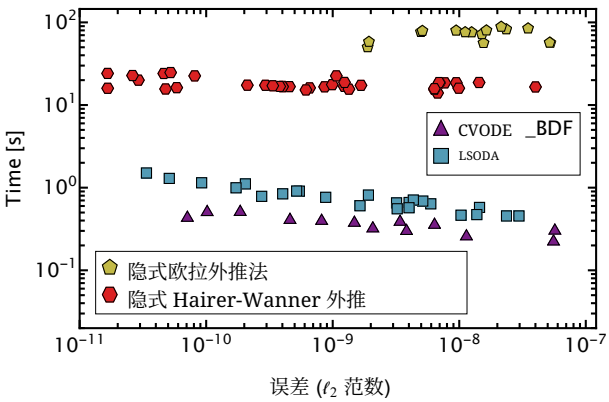
(e) Rosenbrock-W



(f) 隐式多步法

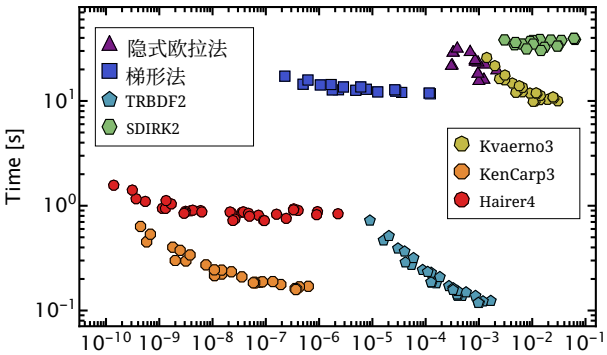


(g) Radau II

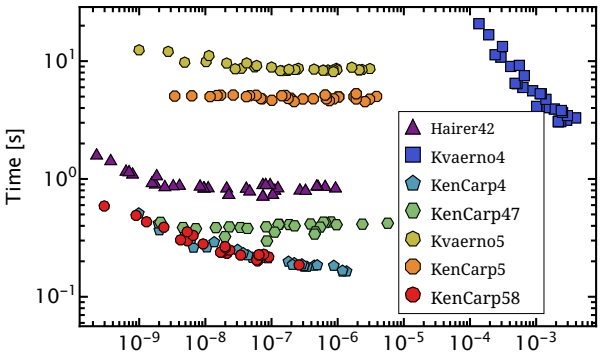


(h) 外部库与隐式外推

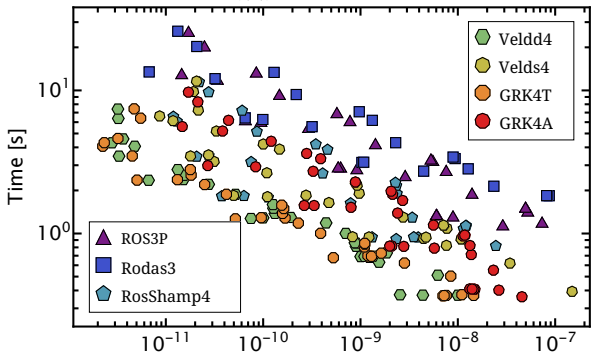
图 8：标准表述的工作量–精度综述(13)。



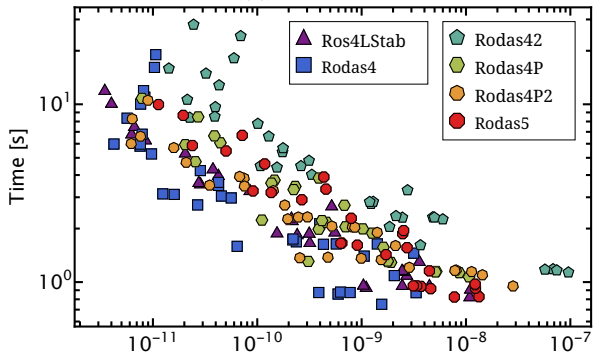
(a) 对角隐式龙格-库塔 1



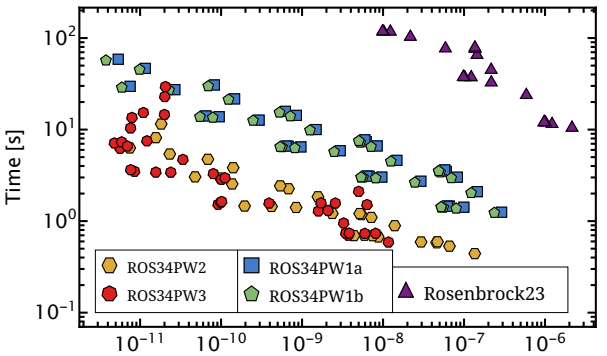
(b) 对角隐式龙格-库塔 2



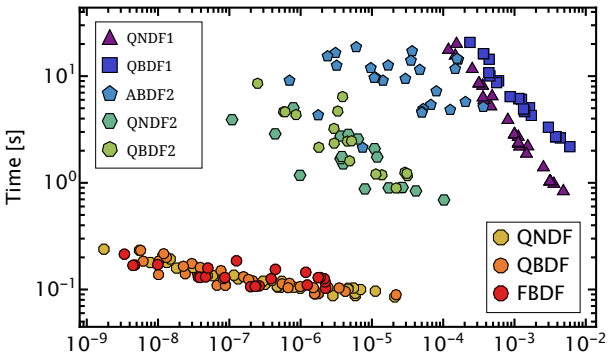
(c) Rosenbrock 1



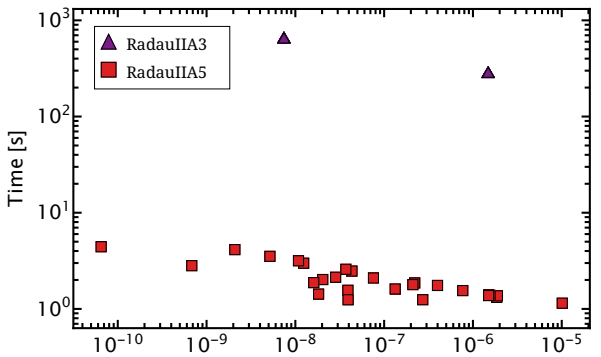
(d) Rosenbrock 2



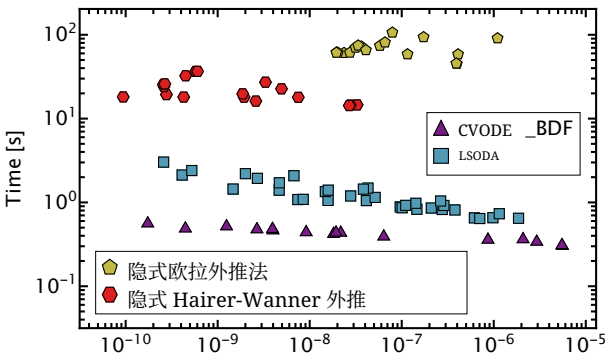
(e) Rosenbrock-W



(f) 隐式多步法

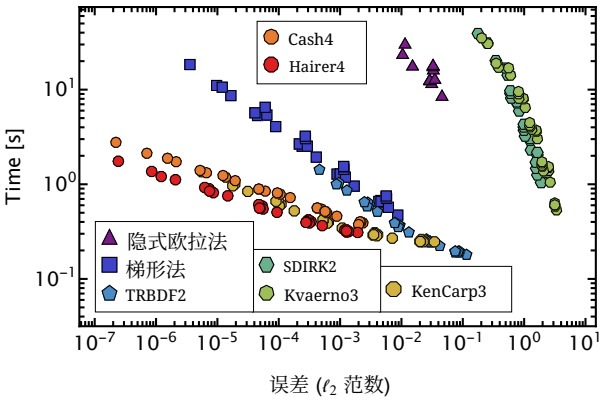


(g) Radau II

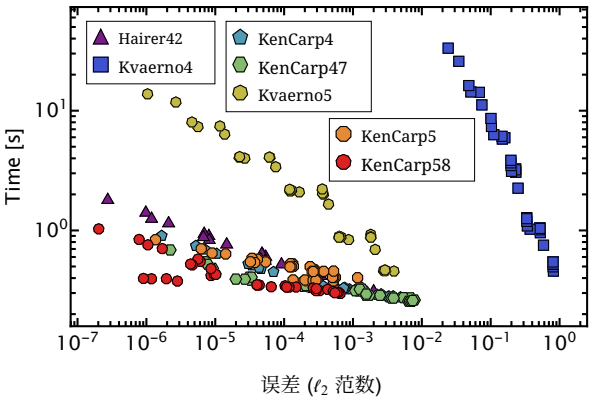


(h) 外部库与隐式外推

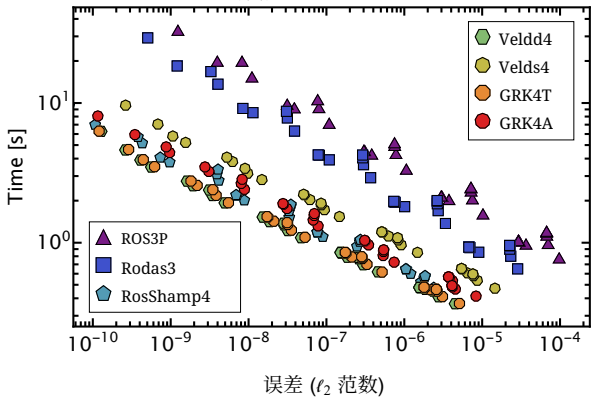
图 9：质量表述（14）的工作量–精度综述 (14)。



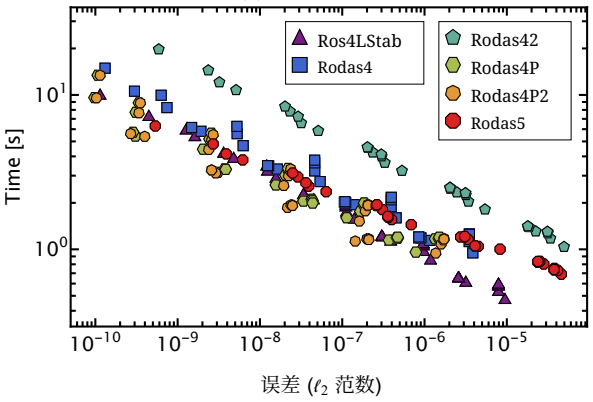
(a) 对角隐式龙格-库塔 1



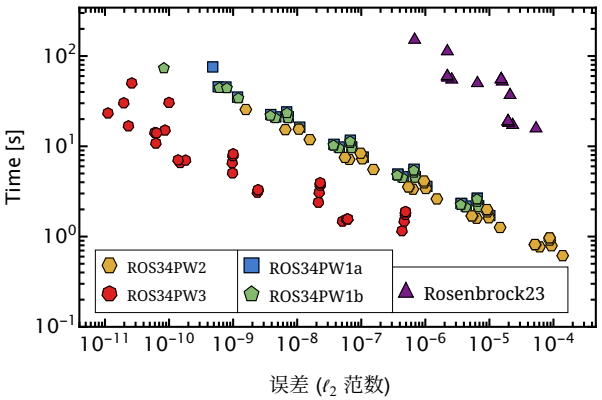
(b) 对角隐式龙格-库塔 2



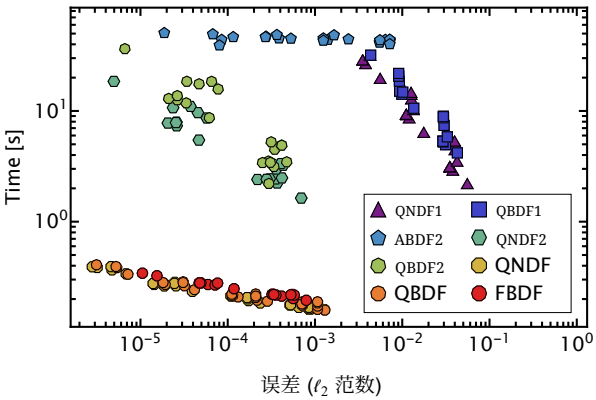
(c) Rosenbrock 1



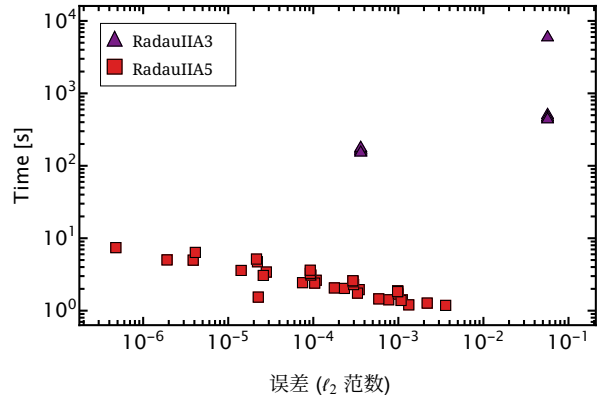
(d) Rosenbrock 2



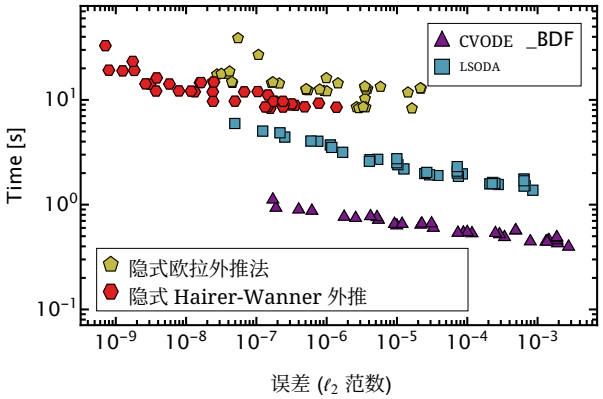
(e) Rosenbrock-W



(f) 隐式多步法

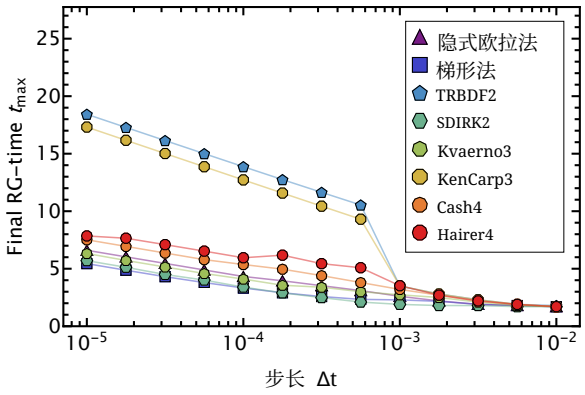


(g) Radau II

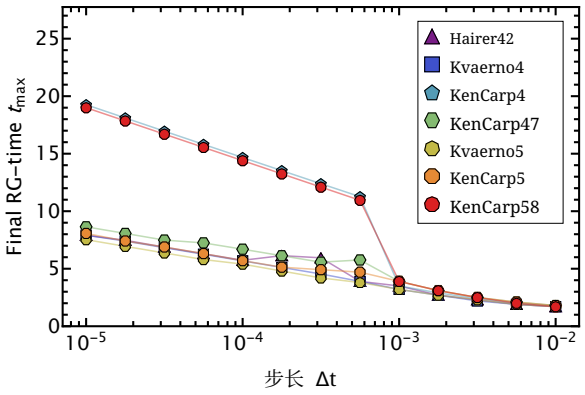


(h) 外部库与隐式外推

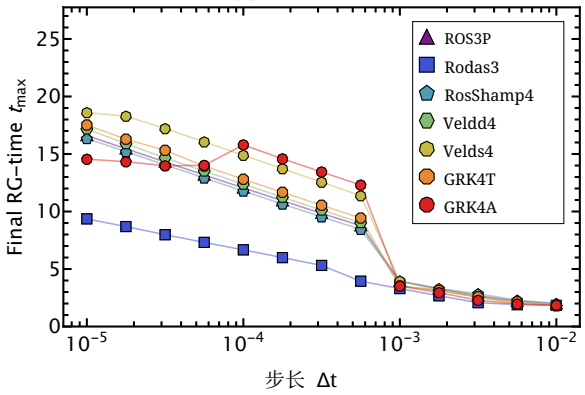
图 10：对数形式的工作量–精度综述(15)。



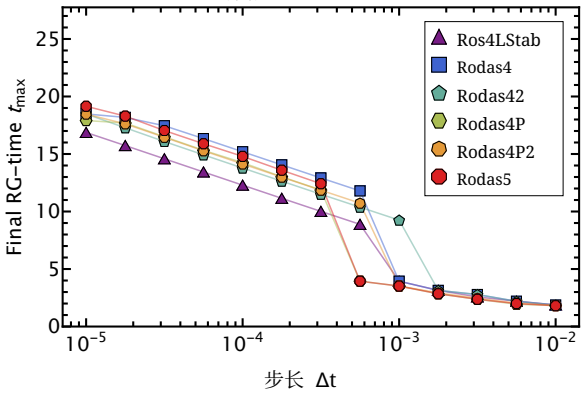
(a) 对角隐式龙格-库塔 1



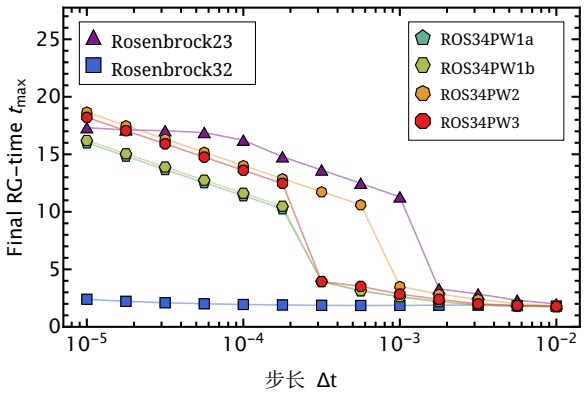
(b) 对角隐式龙格-库塔 2



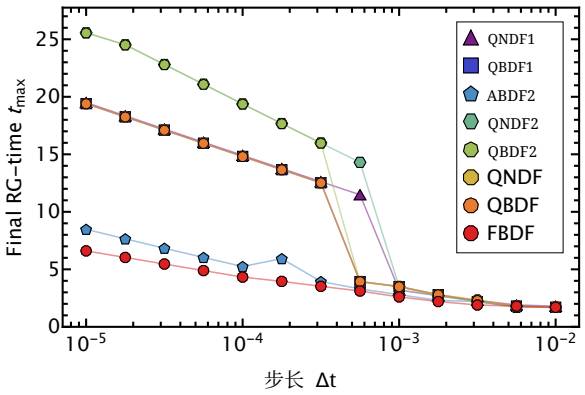
(c) Rosenbrock 1



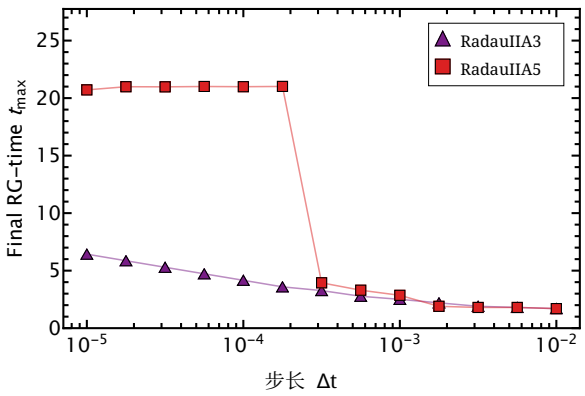
(d) Rosenbrock 2



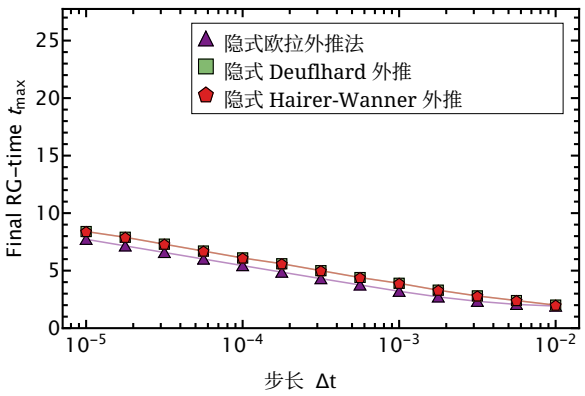
(e) Rosenbrock-W



(f) 隐式多步法

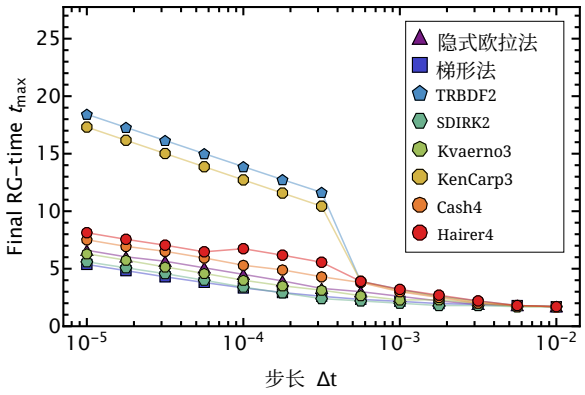


(g) Radau II

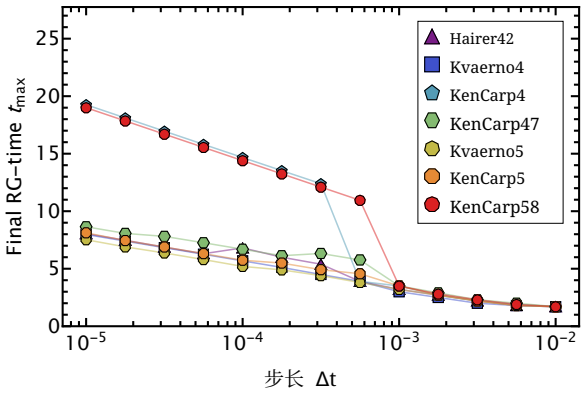


(h) 隐式外推

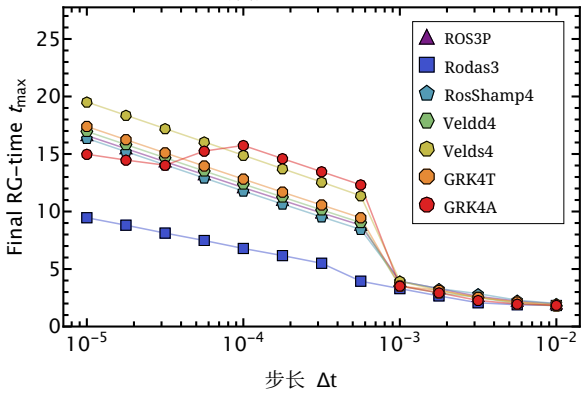
图 11：标准表述的固定步长重整化群时间稳定性调查 (13)。



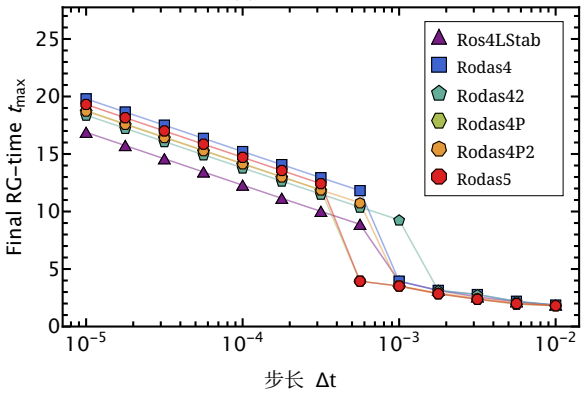
(a) 对角隐式龙格-库塔 1



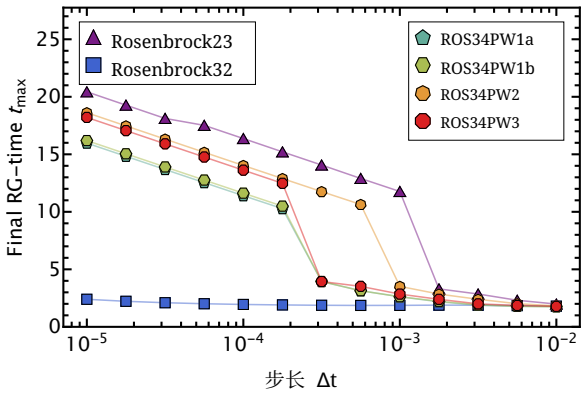
(b) 对角隐式龙格-库塔 2



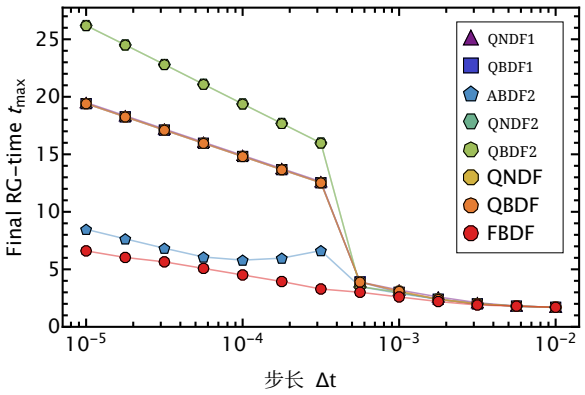
(c) Rosenbrock 1



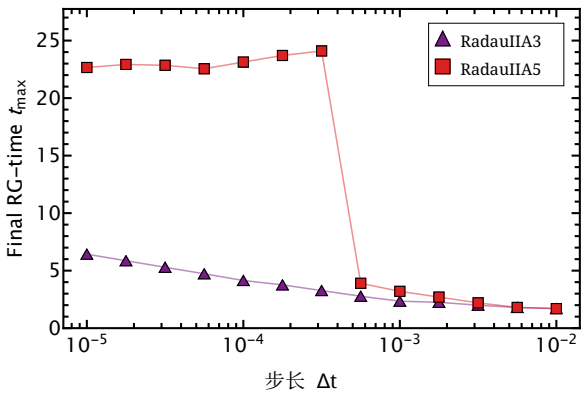
(d) Rosenbrock 2



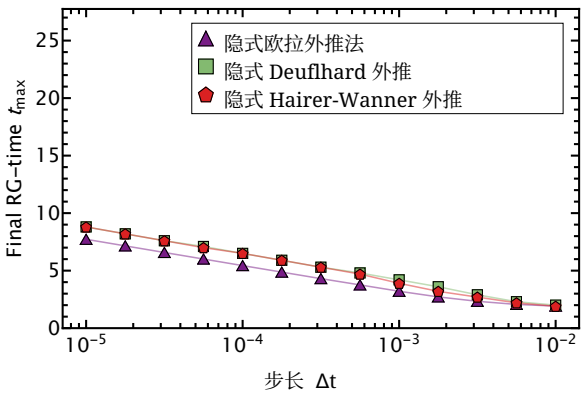
(e) Rosenbrock-W



(f) 隐式多步法

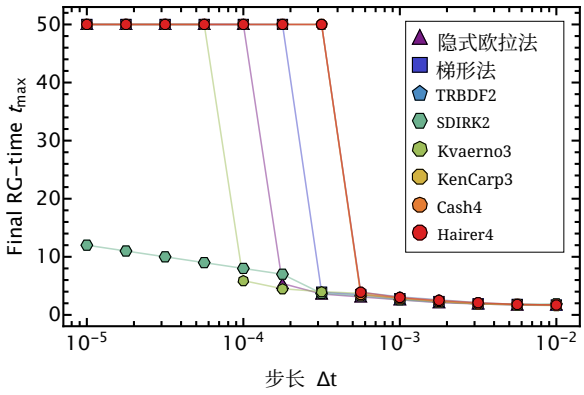


(g) Radau II

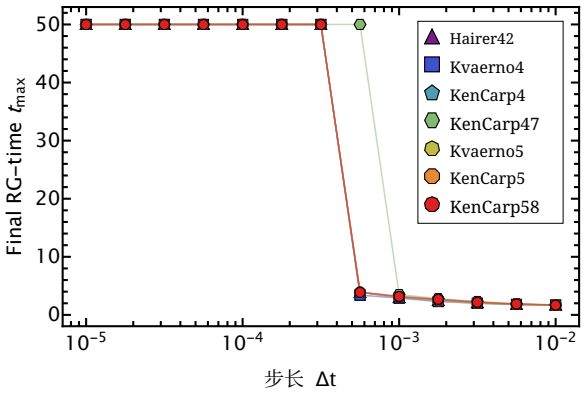


(h) 隐式外推

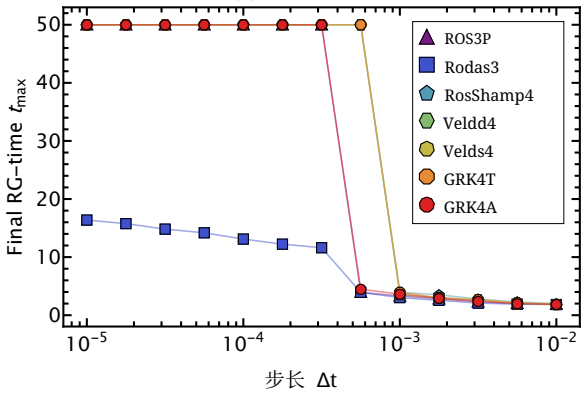
图 12：质量表述的固定步长重整化群时间稳定性调查 (14)。



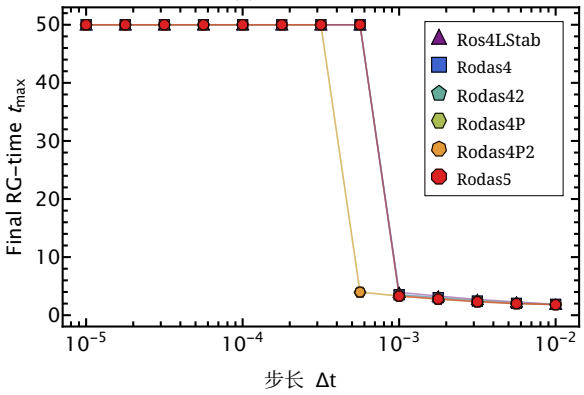
(a) 对角隐式龙格-库塔 1



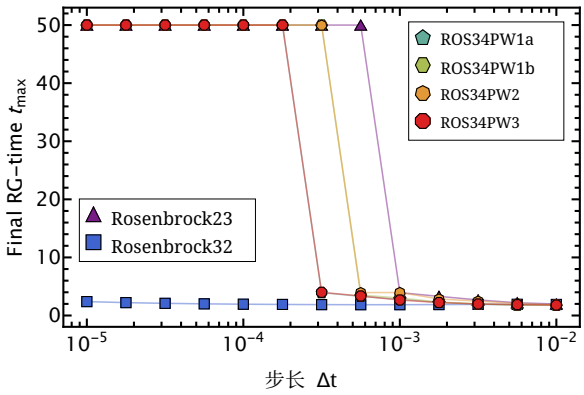
(b) 对角隐式龙格-库塔 2



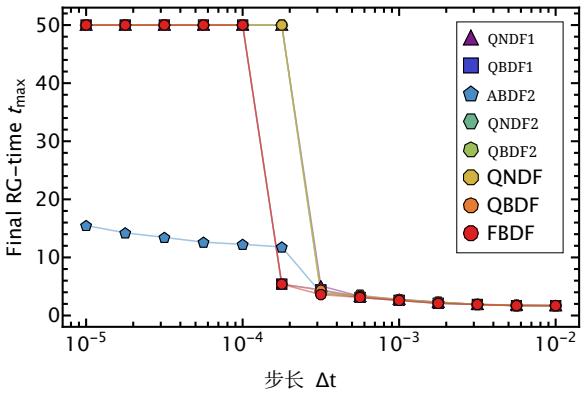
(c) Rosenbrock 1



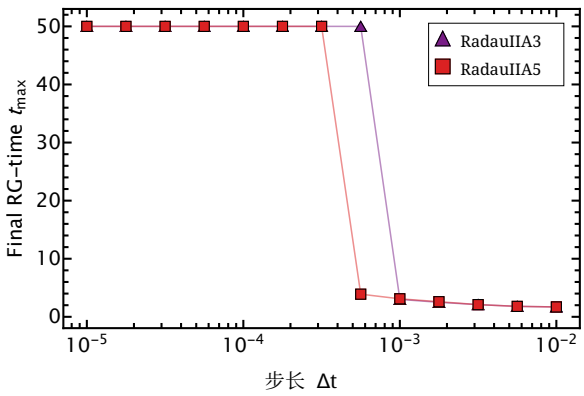
(d) Rosenbrock 2



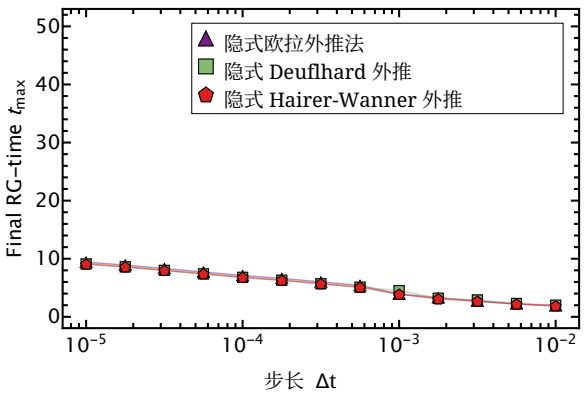
(e) Rosenbrock-W



(f) 隐式多步法



(g) Radau II



(h) 隐式外推

图 13：对数形式下固定步长的重整化群时间稳定性调查 (15)。重整化群时间的最大值设为$t = 50$，在所有实际应用中均可视为无穷大。

[1] N. Dupuis、L. Canet、A. Eichhorn、W. Metzner、J. M. Pawlowski、M. Tissier和N. Wschebor，《物理报告》910，1（2021年），arXiv:2006.04853 [cond-mat.stat-mech]。[2] I. Balog、H. Chat´e、B. Delamotte、M. Marohnic和N. Wschebor，《物理评论快报》123，240604（2019年），arXiv:1907.01829 [cond-mat.stat-mech]。[3] W.-j. Fu、J. M. Pawlowski和F. Rennecke，《物理评论D辑》101，054032（2020年），arXiv:1909.02991 [hep-ph]。[4] G. De Polsi、I. Balog、M. Tissier和N. Wschebor，《物理评论E辑》101，042113（2020年），arXiv:2001.07525 [cond- mat.stat-mech]。[5] W.-j. Fu，《理论物理通讯》74，097304（2022年），arXiv:2205.00468 [hep-ph]。[6] E. Grossi和N. Wink，（2019年），arXiv:1903.09503 [hep- th]。[7] A. Koenigstein、M. J. Steil、N. Wink、E. Grossi、J. Braun、M. Buballa和D. H. Rischke，《物理评论D辑》106，065012（2022年），arXiv:2108.02504 [cond-mat.stat-mech]。[8] F. Ihssen、J. M. Pawlowski、F. R. Sattler和N. Wink，（2022年），arXiv:2207.12266 [hep-th]。[9] N. Wink，*Towards the spectral properties and phase structure of QCD.* 2020，博士论文，海德堡大学，理论物理研究所（）。[10] E. Grossi、F. J. Ihssen、J. M. Pawlowski和N. Wink，《物理评论D辑》104，016028（2021年），arXiv:2102.01602 [hep- ph]。[11] A. Koenigstein、M. J. Steil、N. Wink、E. Grossi和J. Braun，《物理评论D辑》106，065013（2022年），arXiv:2108.10085 [cond-mat.stat-mech]。[12] M. J. Steil和A. Koenigstein，《物理评论D辑》106，065014（2022年），arXiv:2108.04037 [cond-mat.stat-mech]。[13] J. Stoll、N. Zorbach、A. Koenigstein、M. J. Steil和S. Rechenberger，（2021年），arXiv:2108.10616 [hep-ph]。[14] F. Ihssen和J. M. Pawlowski，（2022）2207.10057，[]。arXiv: . hep-th . [15] A. Koenigstein，*Non-perturbative aspects of (low-dimensional) quantum field theories*，博士论文，歌德大学，法兰克福（美因），法兰克福大学（2023年）。[16] M. Pel´aez和N. Wschebor，《物理评论E辑》94，042136（2016年），arXiv:1510.05709 [cond-mat.stat-mech]。[17] J. Borchardt和B. Knorr，《物理评论D辑》94，025027（2016年），arXiv:1603.06726 [hep-th]。[18] D. F. Litim、J. M. Pawlowski和L. Vergara，（2006年），arXiv:hep-th/0602140。[19] J. Braun、M. Leonhardt和J. M. Pawlowski，《SciPost物理》6，056（2019年），arXiv:1806.04432 [hep-ph]。[20] D. U. Jungnickel和C. Wetterich，《物理评论D辑》53，5142 1996 9505267（），arXiv:hep-ph/。[21] B.-J. Schaefer和J. Wambach，《核物理A辑》757，479（2005年），arXiv:nucl-th/0403039。[22] R. Alkofer、A. Maas、W. A. Mian、M. Mitter、J. Par´ís- L´opez、J. M. Pawlowski和N. Wink，《物理评论D辑》99，054029 2019 1810（），arXiv: .07955 [hep-ph]。[23] C. Rackauckas和Q. Nie，《开放研究软件期刊》5（2017年）。[24] J. Bezanson、A. Edelman、S. Karpinski和V. B. Shah，《SIAM评论》59，65（2017年）。[25] GitHub链接，https://github.com/NicolasW1/Numerical-RG-time-integration-of-the-effective-potential-Analysis-and-Benchmark。[26] K. E. Brenan、S. L. Campbell和L. R. Petzold，*Numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations* 1995（工业与应用数学学会，）。[27] K. Atkinson、W. Han 和 D. E. Stewart，*Numerical solution of ordinary differential equations*（John Wiley & Sons，2011）。[28] A. C. Hindmarsh、P. N. Brown、K. E. Grant、S. L. Lee、R. Serban、D. E. Shumaker 和 C. S. Woodward，ACM数学软件汇刊（TOMS）31，363（2005）。[29] D. J. Gardner、D. R. Reynolds、C. S. Woodward 和 C. J. Balos，ACM数学软件汇刊（TOMS）10.1145/3539801（2022年）。[30] A. C. Hindmarsh，《科学计算》，55（1983）。[31] C. Elrod、Y. Ma、K. Althaus、C. Rackauckas，*et al.*，载于*2022 IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC)* 2022 1 9（IEEE，）第–页。[32] M. Hochbruck 和 A. Ostermann，Acta Numerica 19，209（2010）。[33] M. Antonana、J. Makazaga 和 A. Murua，Numerical Algorithms 76，861（2017）。[34] J. Revels、M. Lubin 和 T. Papamarkou，arXiv:1607.07892 [cs.MS]（2016）。[35] M. Hosea 和 L. Shampine，Applied Numerical Mathematics 20，21（1996）。[36] A. Kværnø，BIT Numerical Mathematics 44，489（2004）。[37] C. A. Kennedy，*Additive Runge-Kutta schemes for convection-diffusion-reaction equations*（美国国家航空航天局、兰利研究中心，2001）。[38] G. Wanner 和 E. Hairer，*Solving ordinary differential equations II* 375，第卷（Springer Berlin Heidelberg New York，1996）。[39] C. A. Kennedy 和 M. H. Carpenter，Applied Numerical Mathematics 136，183（2019年）。[40] E. Hairer 和 G. Wanner，Journal of Computational and Applied Mathematics 111，93（1999）。[41] L. F. Shampine 和 M. W. Reichelt，SIAM科学计算杂志18，1（1997）。[42] E. A. Celaya、J. A. Aguirrezabala 和 P. Chatzipantelidis，Procedia Computer Science 29，1014（2014）。[43] L. F. Shampine，（2002）。[44] J. Lang 和 J. Verwer，BIT Numerical Mathematics 41，731（2001）。[45] L. F. Shampine，ACM数学软件汇刊（TOMS）8，93（1982）。[46] M. van Veldhuizen，Computing 32，229（1984）。[47] P. Kaps 和 P. Rentrop，Numerische Mathematik 33，55（1979）。[48] G. Steinebach，Preprint/达姆施塔特工业大学，数学系（1995）。[49] G. Steinebach，载于*Progress in Differential-Algebraic Equations II* 2020 165 184（Springer，）第–页。[50] G. Di Marzo，数学硕士论文（1993）。[51] J. Rang 和 L. Angermann，BIT Numerical Mathematics 45，761（2005）。[52] L. Petzold，SIAM科学与统计计算杂志4，136（1983）。[53] K. Radhakrishnan 和 A. C. Hindmarsh，*Description and use of LSODE the Livermore solver for ordinary differential equations* 1993，技术报告（）。[54] C. Wetterich，物理快报B辑301，90（1993），arXiv:1710.05815 [hep-th]。