

FRIEDRICH-SCHILLER-UNIVERSITÄT JENA
PHYSIKALISCH-ASTRONOMISCHE FAKULTÄT
THEORETISCH-PHYSIKALISCHES INSTITUT



seit 1558

Supersymmetrische nichtlineare Sigma-Modelle

Diplomarbeit

eingereicht von Daniel Körner
geboren am 10.03.1985 in Naumburg

1. *Gutachter*: Prof. Dr. phil. habil. Andreas Wipf

2. *Gutachter*: Dr. rer. nat. Jens Braun

Tag der Verleihung des Diploms: 22. November 2010

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Supersymmetrisches nichtlineares Sigma-Modell	9
2.1	Wirkfunktional	9
2.2	Symmetrien	16
2.2.1	Supersymmetrie	16
2.2.2	O(3)-Symmetrie	18
2.2.3	Chirale Symmetrie	18
2.3	Bisherige Studien	19
3	Gitterquantenfeldtheorie	21
3.1	Euklidische Formulierung	21
3.2	QFT auf dem Raumzeitgitter	23
3.3	Wilson-Fermionen	26
3.4	Symmetrien	27
3.4.1	O(3)-Symmetrie	27
3.4.2	Chirale Symmetrie	30
3.4.3	Supersymmetrie	31
4	Monte-Carlo-Techniken	33
4.1	Markov-Ketten	33
4.2	Metropolis-Algorithmus	35
4.3	Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus	39
4.4	Fermionen	42
4.5	Präkonditionierung	43
4.6	Observablen auf dem Gitter	50
4.7	Fehleranalyse	57
5	Ergebnisse aus der Gittersimulation	62
5.1	Konsistenztests	62
5.2	Pfaff'sche Determinante	62
5.3	O(3)-Symmetrie	63
5.4	Bosonische Masse	70
5.5	Fermionische Masse	72
5.6	Chirales Kondensat	74
5.7	Supersymmetrie	76

5.8 Spektrum	77
6 Zusammenfassung und Ausblick	79
A Konventionen	82
B Majorana Fermionen	83
C JenLaTT	86
D Pseudofermionalgorithmus	87
E <i>even-odd</i>-Präkonditionierung der vollen Fermionmatrix	88

1 Einleitung

Nichtlineare Sigma Modelle weisen interessante Eigenschaften komplizierter Quantenfeldtheorien auf, die Gegenstand moderner Forschung sind, insbesondere asymptotische Freiheit und dynamische Massenerzeugung. Die supersymmetrische Erweiterung dieser Modelle wurde 1977 von E. Witten [1] und unabhängig davon von P. DiVecchia und S. Ferrara [2] vorgeschlagen.

Supersymmetrie Supersymmetrie gilt als eine der vielversprechendsten Erweiterungen des Standardmodells der Elementarteilchen. Sie ist zentraler Bestandteil der M-Theorie¹, deren Formulierung seit nunmehr über drei Jahrzehnten verfolgt wird und in deren Kern die Vereinigung der fundamentalen Kräfte unseres Universums steht, namentlich der starken Kraft, elektroschwachen Kraft sowie Gravitation. Haag, Lopuszanski und Sohnius [4] führen an, daß supersymmetrische Theorien die einzig mögliche Wahl darstellen, um ein derart vereinheitlichtes Modell zu konstruieren. Auch bei der Suche nach „dunkler Materie“ beziehungsweise „dunkler Energie“ kann die Supersymmetrie für Abhilfe sorgen - besteht doch eine ihrer charakteristischen Eigenschaften darin, daß jedem bosonischen Teilchen ein fermionischer Partner (und umgekehrt) entspricht. Diese „Superpartner“ sind Kandidaten für WIMP's („Weakly Interacting Massive Particles“), die in kosmologischen Modellen zur Erklärung erhöhter gravitativer Anziehung postuliert werden [5]. Bisher konnte man allerdings keinen der vorausgesagten Superpartner entdecken [6], sodass davon ausgegangen werden muss, daß Supersymmetrie bei geringen Energien in einer spontan gebrochenen Phase vorliegt. Dies wiederum liefert einen natürlichen Mechanismus zum Verständnis des „Hierarchie Problems“ des Standardmodells [7]. Es überrascht kaum, daß eine der Hauptaufgaben des ATLAS² Experiments am Large Hadron Collider (CERN) in Genf darin besteht, Hinweise auf eine Erweiterung des Standardmodells in der Natur zu suchen.

Überblick Ein tieferes Verständnis des supersymmetrischen nichtlinearen Sigma-Modells ist insbesondere dank der Gemeinsamkeiten mit vierdimensionalen Super-Yang-Mills Theorien erstrebenswert. Bei einer ersten Gitteruntersuchung innerhalb der Arbeitsgruppe (nicht veröffentlicht) unter Verwendung eines RHMC-Algorithmus³ offenbarten sich einige Schwierigkeiten. Darunter sind vor allem ein Vorzeichenpro-

¹Eine populärwissenschaftliche Einführung der M-Theorie findet sich in [3].

²Informationen zum aktuellen Stand werden auf dem Internetauftritt www.atlas.ch veröffentlicht.

³Details bezüglich des RHMC Algorithmus können [8] entnommen werden.

blem sowie hohe Konditionszahlen der zugehörigen Fermionmatrix zu nennen, die eine effiziente Simulation verhindern. In der vorliegenden Diplomarbeit wird ein Monte-Carlo-Algorithmus mit exakter Auswertung der Fermionmatrix genutzt, um Perspektiven bezüglich der Anwendung von Pseudofermionalgorithmen aufzuzeigen. Anhand einer stereographisch-projizierten Gitterwirkung wird die Respektierung der fundamentalen Symmetrien des Modells studiert sowie Methoden der Präkonditionierung analysiert. Dabei klären die Kapitel zwei bis vier grundlegende Aspekte, während Kapitel fünf entsprechende Ergebnisse präsentiert.

2 Supersymmetrisches nichtlineares Sigma-Modell

E. Witten [1] und P. DiVecchia, S. Ferrara [2] formulierten 1977 eine supersymmetrische Erweiterung des nichtlinearen Sigma-Modells. Vermittels Einschränkung der Freiheitsgrade der Superfelder gelangt man zu einer Verallgemeinerung des wohlbekannten bosonischen $O(N)$ Sigma-Modells. Im Fall $N = 3$ offenbart sich eine Fülle interessanter Eigenschaften: dynamisch generierte Massen, asymptotische Freiheit, Instantonmoden sowie eine erweiterte $\mathcal{N} = 2$ Supersymmetrie-Algebra. Dies entspricht wesentlichen Merkmalen vierdimensionaler Eichtheorien. Angesichts nicht-perturbativer Effekte gestaltet sich eine analytische Lösung schwierig. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wird ein Monte-Carlo-basierter Ansatz verfolgt.

2.1 Wirkfunktional

Supersymmetrie Das Konzept der Supersymmetrie (kurz: Susy), das bosonische und fermionische Freiheitsgrade in Relation setzt, wurde in den 1970'er Jahren im Regime von String-Theorie eingeführt. Die Algebra der Susy-Generatoren erweitert die bekannte Poincaré-Algebra der Raumzeittransformationen. Einführende Worte können dem Buch von S. Weinberg [9] und H. Kalka, G. Soff [10] entnommen werden, wobei die Notation der folgenden Seiten soweit nicht anders erläutert dem letztgenannten Buch entlehnt ist. Einen Überblick verschafft der Review-Artikel von M. Sohnius [7]. Zur Konstruktion der supersymmetrischen Wirkung wird ein Ansatz von A. Salam und J. Strathdee [11] verfolgt, der verallgemeinerte Felder in einem Superraum betrachtet.

Superraumformalismus Zur Konstruktion⁴ der supersymmetrischen Wirkung betrachte man den *Superraum* $\mathbb{S}^{2|2}$ mit Koordinaten (x, θ_0, θ_1) . Hierbei repräsentiert $x^T = (x_0, x_1)$ die gewohnte euklidische Raumzeit in zwei Dimensionen, während die beiden Koordinaten θ_0, θ_1 als Generatoren einer reellen Grassmann-Algebra⁵ \mathcal{G} auftreten,

$$\{\theta_i, \theta_j\} \equiv \theta_i\theta_j + \theta_j\theta_i = 0.$$

Dies impliziert insbesondere, daß $\theta_i^2 = 0$. Beide Generatoren können zu einem Majorana Spinor⁶ $\theta^T = (\theta_0, \theta_1)$ zusammengefasst werden. Zwei beliebige Majorana

⁴Im Folgenden werden die in Anhang A erläuterten Konventionen verwendet. Insbesondere wird die Einstein'sche Summenkonvention genutzt.

⁵Wie üblich gilt, daß $a\theta_0 + b\theta_1 \in \mathcal{G}$ falls $\theta_0, \theta_1 \in \mathcal{G}$ und $a, b \in \mathbb{R}$. Weitere Informationen zum Umgang mit Grassmann-Zahlen finden sich in [12].

⁶Konventionen zu Majorana Spinoren finden sich in Anhang B. Insbesondere geht ein Majorana Spinor λ unter Ladungskonjugation in sich selbst über, $\lambda_c = \lambda$. Für den konjugierten Spinor $\bar{\lambda}$ gilt

Spinoren λ, θ anti-vertauschen, d.h.

$$\{\lambda, \theta\} = \lambda^T \theta + \theta^T \lambda = 0.$$

Evident ist, daß

$$\theta^2 = \theta^T \theta = \theta_0 \theta_0 + \theta_1 \theta_1 = 0. \quad (2.1)$$

Ein nützliches Resultat dieser Nilpotenz äußert sich darin, daß gerade Konstrukte $F(x, \theta)$ aus Generatoren der Grassmann-Algebra in eine endliche Reihe entwickelt⁷ werden können,

$$F(x, \theta) = A(x) + i\bar{\theta}B(x) + \frac{i}{2}\bar{\theta}\theta D(x). \quad (2.2)$$

Hierbei sind $A(x)$ und $D(x)$ skalare reellwertige Funktionen auf \mathbb{R}^2 , während $B(x)$ jedem Punkt der Raumzeit einen zweikomponentigen Majorana Spinor zuordnet. In Anhang B sind einige der wichtigsten Rechenregeln und Identitäten im Zusammenhang mit Majorana Fermionen aufgelistet, die im Folgenden häufiger verwendet werden.

Konstruktion Wie üblich versteht man unter einer Translation um den Vektor a die Transformation

$$x^\mu \rightarrow x^\mu + a^\mu, \quad \theta \rightarrow \theta,$$

generiert durch den Differentialoperator $\frac{\partial}{\partial x^\mu}$. Zusätzlich betrachte man die *Supersymmetrie Transformation* (Susy-Transformation) mit Majorana Parameter ϵ ,

$$x^\mu \rightarrow x^\mu + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta, \quad \theta \rightarrow \theta + \epsilon.$$

Sie wird durch den *Differentialoperator im Superraum* \mathcal{Q} generiert,

$$\mathcal{Q} = \frac{\partial}{\partial \theta} + i\gamma^\mu\theta \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad (2.3)$$

$$\bar{\mathcal{Q}} = \mathcal{Q}^T C = -\frac{\partial}{\partial \theta} - i\bar{\theta}\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}. \quad (2.4)$$

Die Entwicklungskoeffizienten eines reellen, skalaren *Superfeldes* $\phi(x, \theta)$ können mit den verschiedenen, reellen Feldern eines Supermultipletts identifiziert werden,

$$\phi(x, \theta) = n(x) + i\bar{\theta}\psi(x) + \frac{i}{2}\bar{\theta}\theta f(x),$$

$\bar{\lambda} = \lambda^T C$ mit der Ladungskonjugationsmatrix C .

⁷Bezüglich der komplexen Konjugation von Majorana Spinoren λ, θ wird die Konvention gewählt, daß $(\lambda\theta)^* = \theta^*\lambda^*$. Insbesondere ist $(i\bar{\lambda}\theta)^* = i\bar{\lambda}\theta$ reell.

wobei $n(x)$ bosonischen Anregungen korrespondiert und $\psi(x)$ (Majorana) fermionischen Freiheitsgraden entspricht. Das Hilfsfeld $f(x)$ entkoppelt in der Regel von den physikalischen Feldern und kann ausintegriert werden, d.h. Anregungen des Hilfsfeldes zeigen sich nicht im physikalischen Spektrum der Theorie. Anwendung einer Susy Transformation mit (Majorana) Parameter ϵ liefert das gewünschte Verhalten:

$$\begin{aligned}
e^{\bar{\epsilon}\mathcal{Q}}\phi(x, \theta) &= \left\{1 + \bar{\epsilon}\mathcal{Q} + \frac{1}{2}(\bar{\epsilon}\mathcal{Q})(\bar{\epsilon}\mathcal{Q})\right\}\phi(x, \theta) \\
&= \phi(x, \theta) + \bar{\epsilon}\frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}} + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\partial_\mu n + i^2\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\bar{\theta}\partial_\mu\psi + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}\epsilon\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta\partial\bar{\theta}} - \frac{1}{2}\underbrace{\bar{\epsilon}\gamma^\mu\epsilon}_0\partial_\mu n \\
&\quad - \frac{i}{2}\underbrace{\bar{\epsilon}\gamma^\mu\epsilon\bar{\theta}}_0\partial_\mu\psi + \frac{i^2}{2}\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\bar{\epsilon}\partial_\mu\psi + \frac{i^2}{2}\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\bar{\epsilon}\partial_\mu\psi + \frac{i^2}{2}\underbrace{\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\bar{\epsilon}\theta}_0\partial_\mu f \\
&\quad + \frac{1}{2}(i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta)(i\bar{\epsilon}\gamma^\nu\theta)\partial_\mu\partial_\nu n \\
&= \underbrace{\phi(x, \theta) + \bar{\epsilon}\frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}}(x, \theta) + \frac{1}{2}\bar{\epsilon}\epsilon\frac{\partial^2\phi}{\partial\theta\partial\bar{\theta}}(x, \theta)}_{\phi(x, \theta + \epsilon)} + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\partial_\mu n + i^2\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\bar{\theta}\partial_\mu\psi \\
&\quad + i^2\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\bar{\epsilon}\partial_\mu\psi + \frac{1}{2}(i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta)(i\bar{\epsilon}\gamma^\nu\theta)\partial_\mu\partial_\nu n \\
&= n(x) + i(\bar{\theta} + \bar{\epsilon})\psi(x) + \frac{i}{2}(\bar{\theta} + \bar{\epsilon})(\theta + \epsilon)f(x) + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\partial_\mu n(x) \\
&\quad + \frac{1}{2}(i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta)(i\bar{\epsilon}\gamma^\nu\theta)\partial_\mu\partial_\nu n(x) + i(i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta)(\bar{\theta} + \bar{\epsilon})\partial_\mu\psi(x) \\
&= n(x^\mu + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta) + i(\bar{\theta} + \bar{\epsilon})\psi(x^\mu + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta) + \frac{i}{2}(\bar{\theta} + \bar{\epsilon})(\theta + \epsilon)f(x^\mu + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta) \\
&= \phi(x^\mu + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta, \theta + \epsilon).
\end{aligned}$$

Als „infinitesimale“ Susy Transformation versteht man die Ersetzung $\phi \rightarrow \phi + \delta\phi$ mit $\delta\phi = \bar{\epsilon}\mathcal{Q}\phi = \bar{\epsilon}\frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}} + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\frac{\partial\phi}{\partial x^\mu}$, d.h. Terme proportional zu $\bar{\epsilon}\epsilon$ werden ignoriert. Durch Anwendung des Generators supersymmetrischer Transformationen kann das Verhalten der Supermultiplettfelder studiert werden. Betrachte dazu:

$$\delta\phi = \bar{\epsilon}\mathcal{Q}\phi = \bar{\epsilon}\frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}} + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\frac{\partial\phi}{\partial x^\mu} = i\bar{\epsilon}\psi(x) + i\bar{\epsilon}\theta f(x) + i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta\left(\frac{\partial n}{\partial x^\mu} + i\bar{\theta}\frac{\partial\psi}{\partial x^\mu} + \frac{i}{2}\bar{\theta}\theta\frac{\partial f}{\partial x^\mu}\right).$$

Unter Verwendung der Rechenregeln aus Anhang B und der Beobachtung, daß Terme mit drei gleichen Majorana Faktoren und mehr verschwinden müssen, lassen sich die Transformationsgleichungen der Multiplettfelder ablesen. Ausgehend von

$$\delta n + i\bar{\theta}\delta\psi + \frac{i}{2}\bar{\theta}\theta\delta f = \delta\phi = i\bar{\epsilon}\psi + i\bar{\theta}(f\epsilon - \gamma^\mu\partial_\mu n\epsilon) - \frac{i}{2}\bar{\theta}\theta i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\partial_\mu\psi$$

notiert man:

$$\begin{aligned}\delta n &= i\bar{\epsilon}\psi \\ \delta\psi &= f\epsilon - \gamma^\mu\partial_\mu n\epsilon \\ \delta f &= -i\bar{\epsilon}\gamma^\mu\partial_\mu\psi.\end{aligned}$$

Keht man zurück zu Gleichung (2.2), so folgt aus den soeben gewonnenen Transformationsgleichungen, daß

$$\delta D = -i\bar{\epsilon}\not{\partial}B,$$

d.h. $\int d^2x \delta D$ ist ein Oberflächenintegral und der Ausdruck $\int d^2x D(x)$ entsprechend invariant unter Susy Transformationen. Man bezeichnet ihn auch allgemein als „*D-Term*“. Die Strategie zur Konstruktion Susy-invarianter Wirkungen sieht nun vor, mehrere Superfelder derart zu kombinieren, daß das resultierende Konstrukt erneut wie ein Superfeld transformiert. Die Wirkung kann dann aus dem zugehörigen, invarianten D-Term extrahiert werden. Hierbei sei angemerkt, daß Polynome von Superfeldern in der Regel wie Superfelder transformieren, nicht aber Produkte mit den grassmannwertigen Koordinaten θ (vergleiche Kapitel 26.2. in [9]). Möglich ist allerdings die Definition einer *superkovarianten Ableitung* \mathcal{D} derart, daß $\mathcal{D}\phi$ erneut als Superfeld transformiert. Hier gilt:

$$\begin{aligned}\mathcal{D} &= \frac{\partial}{\partial\theta} - i\gamma^\mu\theta\frac{\partial}{\partial x^\mu}, \\ \bar{\mathcal{D}} &= -\frac{\partial}{\partial\theta} + i\bar{\theta}\gamma^\mu\frac{\partial}{\partial x^\mu}.\end{aligned}$$

Der Antikommutator $\{\mathcal{D}_\beta, \mathcal{Q}_\alpha\}$ verschwindet, sodass

$$\bar{\epsilon}\mathcal{Q}\mathcal{D}\phi = -\bar{\epsilon}\mathcal{D}\mathcal{Q}\phi = \mathcal{D}\bar{\epsilon}\mathcal{Q}\phi,$$

d.h. die superkovariante Ableitung vertauscht mit Susy-Transformationen derart, daß $\mathcal{D}\phi$ erneut wie ein Superfeld transformiert. Betrachte nun das Wirkfunktional

$$S = \int d^2x d\bar{\theta}d\theta \bar{\mathcal{D}}\phi\mathcal{D}\phi = \int d^2x d\bar{\theta}d\theta \sum_\alpha \bar{\mathcal{D}}_\alpha\phi\mathcal{D}_\alpha\phi.$$

Ausintegration der grassmannwertigen Koordinaten $\bar{\theta}$ und θ projiziert auf den gewünschten D-Term, sodass die Susy-invariante Wirkung, versehen mit globaler Kopplungs-

konstante g^2 , sofort folgt:

$$S = \frac{1}{2g^2} \int d^2x \partial^\mu n \partial_\mu n - i\bar{\psi} \not{\partial} \psi - f^2. \quad (2.5)$$

Dieses Modell beschreibt das *lineare supersymmetrische Sigma-Model*, die freie Theorie je einer masselosen bosonischen wie (Majorana) fermionischen Anregung mit den gewohnten Bewegungsgleichungen,

$$\begin{aligned} \Delta n &= 0 \\ \gamma^\mu \partial_\mu \psi &= 0. \end{aligned}$$

Das Hilfsfeld f entkoppelt und erfüllt die triviale Bewegungsgleichung

$$f = 0.$$

O(N)-Modell Betrachte nun eine Menge von N gleichartigen Superfeldern ϕ_i , die Komponenten eines Vektors⁸ $\boldsymbol{\phi}$ bilden. Wiederum schreibt man die Felder des Supermultipletts als

$$\boldsymbol{\phi} = \mathbf{n} + i\bar{\theta}\boldsymbol{\psi} + \frac{i}{2}\bar{\theta}\theta\mathbf{f}.$$

Die Ausführungen des vorhergehenden Abschnitts können analog angewendet werden und führen auf die Susy Transformationen

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{n} &= i\bar{\epsilon}\boldsymbol{\psi}, \\ \delta \boldsymbol{\psi} &= \mathbf{f}\epsilon - \gamma^\mu \partial_\mu \mathbf{n}\epsilon, \\ \delta \mathbf{f} &= -i\bar{\epsilon}\gamma^\mu \partial_\mu \boldsymbol{\psi}, \end{aligned}$$

mit invarianter Wirkung

$$S = \frac{1}{2g^2} \int d^2x \partial^\mu \mathbf{n} \partial_\mu \mathbf{n} - i\bar{\psi} \not{\partial} \psi - \mathbf{f}\mathbf{f} = \frac{1}{2g^2} \int d^2x \sum_{i=1}^N (\partial^\mu n_i \partial_\mu n_i - i\bar{\psi}_i \not{\partial} \psi_i - f_i f_i). \quad (2.6)$$

Dem rein bosonischen nichtlinearen Sigma-Modell analog führt man eine Wechselwirkung durch Postulierung von Zwangsbedingungen vermittels der Forderung ein,

⁸Sofern keine Doppeldeutigkeit besteht, werden Skalarprodukte bezüglich der Komponenten schlicht in der Form $\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi} \equiv \boldsymbol{\phi} \cdot \boldsymbol{\phi} \equiv \boldsymbol{\phi}^T \boldsymbol{\phi} = \sum_i \phi_i \phi_i$ notiert.

daß

$$\phi\phi = \sum_{i=1}^N \phi_i\phi_i = 1.$$

Unter Verwendung der bekannten Expansion,

$$\begin{aligned} \phi_i\phi_i &= n_i n_i + i n_i \bar{\theta} \psi_i + n_i \frac{i}{2} \bar{\theta} \theta f_i + i \bar{\theta} \psi_i n_i \\ &- \underbrace{(\bar{\theta} \psi_i)(\bar{\theta} \psi_i)}_{-\frac{1}{2}(\bar{\theta}\theta)(\bar{\psi}_i\psi_i)} + \underbrace{i(\bar{\theta} \psi_i) \frac{i}{2}(\bar{\theta}\theta) f_i}_{0} + \frac{i}{2} \bar{\theta} \theta f_i n_i - \underbrace{\frac{1}{2}(\bar{\theta}\theta) f_i (\bar{\theta} \psi_i)}_0 - \underbrace{\frac{1}{2}(\bar{\theta}\theta) f_i \frac{1}{2}(\bar{\theta}\theta) f_i}_0 \\ &= n_i n_i + 2i \bar{\theta} \psi_i n_i + i \bar{\theta} \theta (n_i f_i - \frac{i}{2} \bar{\psi}_i \psi_i), \end{aligned}$$

folgt für beliebige $\bar{\theta}, \theta$

$$\mathbf{nn} = \sum_{i=1}^N n_i n_i = 1, \quad (2.7)$$

$$\psi^\alpha \mathbf{n} = \sum_{i=1}^N \psi_i^\alpha n_i = 0, \quad (2.8)$$

$$\mathbf{nf} - \frac{i}{2} \bar{\psi} \psi = \sum_{i=1}^N (n_i f_i - \frac{i}{2} \bar{\psi}_i \psi_i) = 0. \quad (2.9)$$

Das Wirkfunktional (2.6) ist per Konstruktion Susy-invariant, so verbleibt nur die Prüfung der Nebenbedingungen. Es folgt:

$$\delta(n_i n_i) = 2n_i \delta n_i = 2n_i i \bar{\epsilon} \psi_i = 2i \bar{\epsilon}^\alpha \underbrace{n_i \psi_i^\alpha}_{0 \text{ wg. (2.8)}} = 0,$$

$$\begin{aligned} \delta(\psi_i^\alpha n_i) &= n_i \delta \psi_i^\alpha + \psi_i^\alpha \delta n_i = \epsilon^\alpha n_i f_i - (\gamma^\mu \epsilon)^\alpha \underbrace{n_i \partial_\mu n_i}_{0 \text{ wg. (2.7)}} + i \psi_i^\alpha \bar{\epsilon}^\beta \psi_i^\beta \\ &= \epsilon^\alpha \frac{i}{2} \bar{\psi}_i \psi_i + \underbrace{i \psi_i^\alpha \bar{\psi}_i^\beta \epsilon^\beta}_{-\frac{1}{2} \bar{\psi}_i \psi_i \epsilon^\alpha} = \frac{i}{2} \epsilon^\alpha (\bar{\psi}_i \psi_i - \bar{\psi}_i \psi_i) = 0. \end{aligned}$$

Weiterhin rechnet man nach, daß

$$\begin{aligned} \delta(n_i f_i - \frac{i}{2} \bar{\psi}_i \psi_i) &= f_i \delta n_i + n_i \delta f_i - i \bar{\psi}_i \delta \psi_i \\ &= i f_i \bar{\epsilon} \psi_i - i \bar{\epsilon} \gamma^\mu n_i \partial_\mu \psi_i - i (\bar{\psi}_i \epsilon f_i - \bar{\psi}_i \gamma^\mu \epsilon \partial_\mu n_i) = 0, \end{aligned}$$

denn aus Gleichung (2.8) folgt:

$$0 = \partial_\mu(n_i \psi_i^\alpha) = \psi_i^\alpha \partial_\mu n_i + n_i \partial_\mu \psi_i^\alpha \quad \Leftrightarrow \quad n_i \partial_\mu \psi_i^\alpha = -\psi_i^\alpha \partial_\mu n_i.$$

Die Bewegungsgleichungen der Felder ergeben sich nach Minimierung der Wirkung unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen. Vermittels der Lagrange-Multiplikatoren A , B^α und D schreibt man

$$S' = \int d^2x \partial^\mu n_i \partial_\mu n_i - i \bar{\psi}_i \not{\partial} \psi_i - f_i f_i + A(n_i n_i - 1) + B^\alpha(n_i \psi_i^\alpha) + D(n_i f_i - \frac{i}{2} \bar{\psi}_i \psi_i).$$

Aus den Gleichungen $\frac{\delta S'}{\delta A} = 0$, $\frac{\delta S'}{\delta B^\alpha} = 0$ und $\frac{\delta S'}{\delta D} = 0$ reproduzieren sich die Nebenbedingungen, während $\frac{\delta S'}{\delta n_i} = 0$, $\frac{\delta S'}{\delta \psi_i^\alpha} = 0$ sowie $\frac{\delta S'}{\delta f_i} = 0$ die Bestimmung der Lagrange-Multiplikatoren zu

$$\begin{aligned} A &= \mathbf{n} \partial^\mu \partial_\mu \mathbf{n} - (\mathbf{f} \mathbf{n})^2 \\ B^\alpha &= 2i \mathbf{n} (\partial_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu)^\alpha \\ D &= 2 \mathbf{f} \mathbf{n} \end{aligned}$$

erlauben. Somit ergeben sich die Bewegungsgleichungen⁹:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{n} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \Delta \mathbf{n}) - i \bar{\psi}(\mathbf{n} \not{\partial} \psi) - \frac{1}{4}(\bar{\psi} \psi)^2 \mathbf{n} - \frac{i}{2}(\bar{\psi} \psi) \mathbf{f} &= 0 \\ \not{\partial} \psi - \mathbf{n}(\mathbf{n} \not{\partial} \psi) + \frac{i}{2}(\bar{\psi} \psi) \psi &= 0 \\ \mathbf{f} - \frac{i}{2}(\bar{\psi} \psi) \mathbf{n} &= 0. \end{aligned}$$

Da die Bewegungsgleichung des Hilfsfelds keine Ableitungen aufweist, kann die Wirkung entsprechend umgeschrieben werden. Dies entspricht einer Ausintegration im zugehörigen Pfadintegral. Es folgt, daß

$$S = \frac{1}{2g^2} \int d^2x \partial^\mu \mathbf{n} \partial_\mu \mathbf{n} - i \bar{\psi} \not{\partial} \psi + \frac{1}{4}(\bar{\psi} \psi)^2. \quad (2.10)$$

Im Folgenden wird der Fall $N = 3$ genauer untersucht werden, da dieser eine Reihe von Analogien zu vierdimensionalen Eichtheorien aufweist. So konnte bereits E. Witten [1] feststellen, daß dieser Spezialfall eine erweiterte $\mathcal{N} = 2$ Supersymmetrie Algebra aufweist. Zumino gelang es 1979 zu zeigen, daß eine erweiterte Algebra genau dann existiert, wenn die Zielmannigfaltigkeit der Superfelder eine Kähler-

⁹Hierbei bezeichnet Δ den Laplaceoperator, $\Delta = \partial^\mu \partial_\mu$.

Mannigfaltigkeit ist [13].

2.2 Symmetrien

Die in Gleichung (2.10) angegebene Wirkung zeigt drei fundamentale Symmetrien, die kurz erläutert werden sollen.

2.2.1 Supersymmetrie

Entartung des Spektrums Supersymmetrische Modelle weisen eine Reihe interessanter Eigenschaften auf. Darunter fällt insbesondere die Entartung des Spektrums, d.i. jedem bosonischen Zustand entspricht ein zugehöriger fermionischer Zustand identischer Energie. Dies beruht auf der Beobachtung, daß die Generatoren supersymmetrischer Transformationen mit dem Generator der Raumzeittranslationen P_μ vertauschen und damit insbesondere mit dem Massenoperator $M^2 = P^\mu P_\mu$. Betrachte dazu die Ableitung im Superraum (2.3) als Generator supersymmetrischer Transformationen mit Superladung Q ,

$$[Q, \phi] = iQ\phi.$$

Man rechnet nach, daß der Antikommutator $\{Q^\alpha, \bar{Q}^\beta\}$ dem Generator der Raumzeittranslationen P_μ proportional ist,

$$\begin{aligned} [\{Q^\alpha, \bar{Q}^\beta\}, \phi] &= \{[Q^\alpha, \phi], \bar{Q}^\beta\} + \{[\bar{Q}^\beta, \phi], Q^\alpha\} \\ &= \{Q^\alpha, \bar{Q}^\beta\}\phi = -2i(\gamma^\mu)^{\alpha\beta} \frac{\partial\phi}{\partial x^\mu} = 2(\gamma^\mu)^{\alpha\beta} [P_\mu, \phi]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Weiter kommutiert Q^α in natürlicher Weise mit $\{Q^\alpha, \bar{Q}^\beta\}$ und daher insbesondere mit dem Hamiltonoperator des Systems als Generator der Zeitevolution. Folglich müssen Zustände, die durch Anwendung der Superladungen ineinander übergehen, den gleichen Energieeigenwert liefern. Im Rahmen des vorliegenden Modells konnte O. Alvarez [14] vermittels einer $1/N$ Expansion explizit demonstrieren, daß das Spektrum der Theorie im Grenzfall großer N aus Supermultipletts besteht, d.i. bosonischen und fermionischen Zuständen identischer Energie. Diese Vermutung wird im Fall $N > 4$ durch R. Shankar und E. Witten [15] bestätigt, die die exakte S-Matrix der elementaren Feldanregungen konstruieren.

Spontane Brechung Im Rahmen eines Artikels [16] entwickelte E. Witten eine Größe, anhand derer eine Antwort bezüglich der Möglichkeit spontaner Supersym-

metriebrechung gegeben werden kann. Diese Konstruktion wird heute als *Witten Index* Δ bezeichnet und errechnet sich aus der Differenz bosonischer und fermionischer Zustände verschwindender Energie,

$$\Delta \equiv \text{Sp}(-1)^F = n_B^{E=0} - n_F^{E=0}, \quad (2.12)$$

wobei folgende Heuristik gilt:

$$\Delta = \begin{cases} 0 & \text{spontane Brechung ist möglich,} \\ c \neq 0 & \text{spontane Brechung ist nicht möglich.} \end{cases}$$

Bereits in der genannten Veröffentlichung gibt E. Witten entsprechende Ergebnisse für das nichtlineare supersymmetrische $O(N)$ Sigma-Modell zu

$$\Delta = 1 + (-1)^{N-1} \xrightarrow{N=3} 2 \neq 0 \quad (2.13)$$

an, d.h. Supersymmetrie kann *nicht* spontan gebrochen werden. Es ist weiterhin möglich, eine Funktionalintegraldarstellung¹⁰ des Witten Index unter Verwendung der Superspur $s\text{Sp}$ anzugeben. Eine kurze Analyse [17] offenbart, daß der Witten Index mit einer verallgemeinerten „Zustandssumme“ für Superfelder übereinstimmt, sodass gilt:

$$\Delta = \int \mathcal{D}\phi \delta(\phi\phi - 1) e^{-S[\phi]},$$

unter Verwendung periodischer Randbedingungen¹¹ in ϕ . Insbesondere entspricht Δ dem gewohnten Pfadintegral der Supermultiplettfelder im Fall *periodischer Randbedingungen* in zeitlicher Richtung für fermionische Felder,

$$\Delta = \int \mathcal{D}\mathbf{n}\mathcal{D}\psi \delta(\mathbf{n}\mathbf{n} - 1)\delta(\mathbf{n}\psi) e^{-S[\mathbf{n},\psi]}, \quad (2.14)$$

wobei $\psi(x_0 + \beta, x_1) = \psi(x_0, x_1)$ und $\mathbf{n}(x_0 + \beta, x_1) = \mathbf{n}(x_0, x_1)$. Diese Beobachtung ist von großer Bedeutung für die Simulation supersymmetrischer Modelle. Um eine explizite Brechung der Supersymmetrie durch Randbedingungen der Supermultiplettfelder zu vermeiden, müssen sie in der gleichen Art und Weise gewählt werden, hier periodisch. In diesem Fall sind Erwartungswerte von Observablen nur dann wohldefiniert, falls der Witten Index nicht verschwindet. Im vorliegenden Modell ist

¹⁰Detaillierte Informationen finden sich in [17] und darin referenzierten Artikeln.

¹¹Die Rolle der Randbedingungen wird in späteren Kapiteln klar werden. Hier sei angemerkt, daß die Zustandssumme in einer endlichen Box betrachtet wird, deren zeitliche Ausdehnung mit der inversen Temperatur β identifiziert werden kann.

dies erfüllt (vergleiche (2.13)).

2.2.2 O(3)-Symmetrie

Sofort erkennt man, daß jede Komponente der Felder \mathbf{n} , $\boldsymbol{\psi}$ einer formgleichen Wirkung unterliegt, sodaß die Theorie im Ganzen einer globalen O(3)-Symmetrie folgen sollte. Dazu betrachte man eine verallgemeinerte Rotation im Komponentenraum des Superfeldes $\boldsymbol{\phi}$,

$$\boldsymbol{\phi} \rightarrow \boldsymbol{\phi}_R = O\boldsymbol{\phi}, \quad \phi_i \rightarrow O_{ij}\phi_j, \quad (2.15)$$

mit der reellen, orthogonalen Matrix¹² O , d.h. es gilt $O^T O = 1$. Die Wirkung transformiert dann gemäß

$$S \rightarrow S_R = \frac{1}{2g^2} \int d^2x d\bar{\theta} d\theta \bar{D} O_{ij} \phi_j D O_{ik} \phi_k = \frac{1}{2g^2} \int d^2x d\bar{\theta} d\theta \delta_{jk} \bar{D} \phi_j D \phi_k = S.$$

Dies impliziert natürlich eine entsprechende Symmetrie in den Feldern \mathbf{n} , $\boldsymbol{\psi}$. Die Zwangsbedingung $\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\phi} = 1$ ist trivial mit dieser Symmetrie verträglich.

2.2.3 Chirale Symmetrie

Weiterhin verhält sich die Wirkung invariant unter einer globalen, chiralen Symmetrietransformation,

$$\boldsymbol{\psi} \rightarrow \gamma_5 \boldsymbol{\psi}, \quad (2.16)$$

wobei γ_5 im Spinorraum der Komponentenfelder wirkt,

$$\psi_i^\alpha \rightarrow \gamma_5^{\alpha\beta} \psi_i^\beta \quad \text{für } i \in \{0, 1, 2\}. \quad (2.17)$$

Dies impliziert, daß $\bar{\boldsymbol{\psi}} = \boldsymbol{\psi}^T C \rightarrow (\gamma_5 \boldsymbol{\psi})^T C = \boldsymbol{\psi}^T \gamma_5^T C = \bar{\boldsymbol{\psi}} \gamma_5^T$. Die chirale Matrix γ_5 erfüllt die folgenden Relationen¹³,

$$\{\gamma_5, \gamma_\mu\} = 0, \quad \gamma_5^2 = 1, \quad [\gamma_5, C] = 0, \quad \gamma_5^T = -\gamma_5.$$

Der kinetische Term fermionischer Anregungen ist invariant,

$$\bar{\boldsymbol{\psi}} \not{\partial} \boldsymbol{\psi} \rightarrow \bar{\boldsymbol{\psi}} \gamma_5^T \not{\partial} \gamma_5 \boldsymbol{\psi} = -\bar{\boldsymbol{\psi}} \gamma_5^T \gamma_5 \not{\partial} \boldsymbol{\psi} = \bar{\boldsymbol{\psi}} \gamma_5 \gamma_5 \not{\partial} \boldsymbol{\psi} = \bar{\boldsymbol{\psi}} \not{\partial} \boldsymbol{\psi},$$

¹²Im Fall $\det(O) = 1$ ($\det(O) = -1$) beschreibt O eine Drehung (Spiegelung).

¹³Eine explizite Darstellung ist in Anhang B angegeben.

gleichfalls dem Vier-Fermi-Term,

$$(\bar{\psi}\psi)^2 \rightarrow (\bar{\psi}\gamma_5^T\gamma_5\psi)^2 = (-\bar{\psi}\gamma_5\gamma_5\psi)^2 = (-\bar{\psi}\psi)^2 = (\bar{\psi}\psi)^2.$$

Ein fermionischer Massenterm hingegen zeigt dieses Verhalten nicht,

$$\bar{\psi}m\psi \rightarrow \bar{\psi}\gamma_5^T m\gamma_5\psi = -\bar{\psi}\gamma_5\gamma_5\psi = -\bar{\psi}m\psi \neq \bar{\psi}m\psi,$$

derart, daß das Auftauchen massiver Zustände bei intakter chiraler Symmetrie unterdrückt wird. Bereits Betrachtungen der $1/N$ Expansion des supersymmetrischen, nichtlinearen $O(N)$ Sigma-Modells zeigen eine spontane Brechung der chiralen Symmetrie und, damit verbunden, massive Zustände (vergleiche O. Alvarez [14]). Diese Aussage wird durch J. Evans und T. Hollowood [18] bestätigt, die nichtverschwindende Massen in Sigma Modellen mit $CP(N)$ und $O(N)$ Zielmannigfaltigkeit für beliebige $N > 2$ finden.

2.3 Bisherige Studien

Den bisher genannten Publikationen kann entnommen werden, daß das supersymmetrische nichtlineare Sigma-Modell bereits viel Aufmerksammankeit genossen hat. Dabei erwiesen sich analytische Ansätze aufgrund der nichtperturbativen Effekte, die durch die Zwangsbedingungen induziert werden, als schwierig und Näherungsverfahren wie die $1/N$ Expansion sind nicht in der Lage, die vielfältigen Eigenschaften des Modells zu erfassen. Beispielsweise zeigt nur der Fall $N = 3$ Instantonmoden¹⁴ und eine erweiterte $\mathcal{N} = 2$ Supersymmetrie-Algebra. Eine numerische Behandlung auf dem Gitter könnte ein geeigneter Weg sein, um diese Probleme aufzulösen. Allerdings ist die Simulation supersymmetrischer Theorien nicht nur mit hohem Rechenaufwand verbunden, sondern wird auch von prinzipiellen Schwierigkeiten behindert, die mit der Diskretisierung der Raumzeit zusammenhängen und in Abschnitt 3.4.3 genauer erläutert werden. S. Catterall und S. Ghadab [20, 21] konnten einige dieser Probleme überwinden, indem sie beide Superladungen der $\mathcal{N} = 2$ Supersymmetrie zu einer nilpotenten Ladung Q verschmolzen, um eine Gitterwirkung mit exakter Q -Symmetrie zu gewinnen. Dies entspricht der exakten Verwirklichung einer Supersymmetrie auf dem Gitter und ermöglicht die Wiederherstellung der vollen Supersymmetrie im Kontinuumsimes der Simulation. Es gibt allerdings begründeten Anlaß, daß diese

¹⁴Das Sigma-Modell mit $O(3)$ Zielmannigfaltigkeit entspricht dem CP^1 Sigma-Modell. CP^N Sigma-Modelle weisen stets Instantonlösungen auf, während dies bei $O(N)$ Sigma-Modellen nur für $N = 3$ zutrifft [19].

Formulierung nicht in der Lage ist, die wichtige $O(3)$ Symmetrie im Kontinuumslimit wiederherzustellen¹⁵. Analytische Betrachtungen [22] schließen die Möglichkeit einer spontanen Brechung kontinuierlicher Symmetrien in zwei Dimensionen aus. Daher muss angenommen werden, daß die so gewonnenen Daten *nicht* dem supersymmetrischen nichtlinearen $O(3)$ Sigma-Modell entsprechen und keine Aussagen über das Verhalten der Theorie getroffen werden können. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wird eine Monte-Carlo-Simulation angestrengt, deren Gitterformulierung die $O(3)$ Symmetrie respektiert und daher einen invarianten Kontinuumslimit garantiert. In diesem Fall ist es allerdings nicht möglich, eine nilpotente Ladung Q zu konstruieren und das Erreichen eines supersymmetrischen Kontinuumslimit muss anhand der Simulationsdaten überprüft werden.

¹⁵Vergleiche hierzu die Dissertation von C. Wozar, Theoretisch-Physikalisches Institut, Friedrich Schiller Universität Jena.

3 Gitterquantenfeldtheorie

Ausgehend von einer Formulierung der Quantenfeldtheorie eingebettet in Minkowski Raumzeit wird der Pfad hin zu einer äquivalenten Theorie auf dem euklidischen Gitter aufgezeigt. Dies erlaubt eine numerische Behandlung unter Zuhilfenahme von Monte-Carlo-Methoden. Details des diskretisierten Modells werden im Hinblick auf Erhaltung wichtiger Symmetrien erläutert.

3.1 Euklidische Formulierung

Minkowski Raumzeit Betrachte das Wirkfunktional $S_M[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}] = \int d^2x \mathcal{L}_M[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}]$ mit der Lagrange-Dichte $\mathcal{L}_M[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}]$ des supersymmetrischen nichtlinearen Sigma-Modells. Die klassischen Felder $\mathbf{n}(x)$, $\boldsymbol{\psi}(x)$ definieren Abbildungen der zwei-dimensionalen Minkowski Raumzeit \mathcal{M} in eine Zielmannigfaltigkeit.¹⁶ Im Rahmen der „zweiten Quantisierung“¹⁷ werden $\mathbf{n}(x)$, $\boldsymbol{\psi}(x)$ zu Operatoren $\hat{\mathbf{n}}(x)$, $\hat{\boldsymbol{\psi}}(x)$ erhoben, die auf dem Hilbertraum der Vielteilchenzustände wirken („Fock-Raum“). Hierbei erfüllt $\hat{\mathbf{n}}$ Kommutator- sowie $\hat{\boldsymbol{\psi}}$ Antikommutatorrelationen.

Korrelationsfunktionen Jegliche Information einer Quantenfeldtheorie kann aus Korrelationsfunktionen extrahiert werden; genauer formuliert, lässt sich aus ihnen der Hilbertraum der vollständigen Theorie rekonstruieren [25]. Die *n-Punkt-Korrelationsfunktion* ist definiert als Vakuumerwartungswert des n-fachen Produktes der Feldoperatoren,

$$\langle \hat{\mathbf{n}}(x_1) \dots \hat{\mathbf{n}}(x_n) \rangle = \langle \Omega | \mathcal{T} \hat{\mathbf{n}}(x_1) \dots \hat{\mathbf{n}}(x_n) | \Omega \rangle, \quad (3.1)$$

wobei $\langle \Omega |$ den Vakuumzustand und \mathcal{T} den Zeitordnungsoperator bezeichnet (analog für $\hat{\boldsymbol{\psi}}$). Definiert auf einer Raumzeit mit Minkowski Signatur, bezeichnet man sie auch als „Wightman-Funktionen“. Korrelationsfunktionen können unter Verwendung des Feynman’schen Pfadintegrals [26, 27] dargestellt werden,

$$\langle \hat{\mathbf{n}}(x_1) \dots \hat{\mathbf{n}}(x_n) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\mathbf{n} \mathcal{D}\boldsymbol{\psi} \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \delta(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}) \mathbf{n}(x_1) \dots \mathbf{n}(x_n) e^{iS_M[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}]}. \quad (3.2)$$

Hierbei bezeichnet $S_M = \int d^2x \mathcal{L}[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}]$ die klassische, mikroskopische Wirkung und $Z = \int \mathcal{D}\mathbf{n} \mathcal{D}\boldsymbol{\psi} \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \delta(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}) e^{iS_M[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}]}$ das Pfadintegral ohne „Operatoreinsatz“,

¹⁶Hierbei ist das bosonische Feld \mathbf{n} als reellwertig aufzufassen, während $\boldsymbol{\psi}$ auf grassmannwertige, reelle Zahlen abbildet.

¹⁷Zum Verfahren der zweiten Quantisierung und elementarer Quantenfeldtheorie verweise ich auf [23, 24].

die *Vakuum-Vakuum-Amplitude*. Das Pfadintegral ist eine gewichtete Summe über alle Konfigurationen bezüglich $\mathbf{n}(x)$, $\psi(x)$. Diese sind reellwertige beziehungsweise grassmann-reellwertige Integrationsvariablen, die *nicht* an eine klassische Bewegungsgleichung geknüpft sind. Der Erwartungswert einer Observablen $\mathcal{O}(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\psi})$ ergibt sich zu

$$\langle \mathcal{O}(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\psi}) \rangle = \langle \Omega | \mathcal{T} \mathcal{O}(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\psi}) | \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\mathbf{n} \mathcal{D}\psi \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \delta(\mathbf{n} \cdot \psi) \mathcal{O}(\mathbf{n}, \psi) e^{iS_M[\mathbf{n}, \psi]}. \quad (3.3)$$

Wightman-Axiome Im Kontext der axiomatischen Quantenfeldtheorie werden physikalisch sinnvolle Merkmale eines Modells an Eigenschaften zugehöriger Korrelationsfunktionen geknüpft. Die Gesamtheit dieser Forderungen bezeichnet man als „Wightman-Axiome“. Sie erlauben einerseits eine mathematisch rigorose Behandlung der Quantenfeldtheorie, andererseits garantieren sie wichtige Konzepte wie Kausalität, Lokalität, Anomaliefreiheit und die Abwesenheit von Zuständen mit negativer Norm. Unglücklicherweise ist es bisher nicht gelungen, eine nicht-triviale, wechselwirkende Theorie zu formulieren, die alle Wightman-Axiome erfüllt¹⁸.

Euklidisches Pfadintegral Euklidische Theorien beschreiben Quantenfelder auf einer euklidischen Raumzeit. In diesem Zusammenhang erweist sich die folgende Beobachtung als besonders interessant. Die klassische Wirkung $S_M[\mathbf{n}, \psi]$ samt Minkowski Metrik $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1)$ (eine zeitartige, eine raumartige Dimension) und invariantem Längenelement¹⁹ $ds^2 = dt^2 - d\mathbf{x}^2$,

$$S_M = \int d^2x \mathcal{L}_M[\mathbf{n}, \psi] = \frac{1}{2g^2} \int dt d\mathbf{x} \left(\partial_\mu \mathbf{n} \partial^\mu \mathbf{n} - i\bar{\psi} \not{\partial} \psi - \frac{1}{4} (\bar{\psi} \psi)^2 \right),$$

geht unter der analytischen Fortsetzung²⁰ $t \rightarrow -i\tau$, $\tau \in \mathbb{R}$, über in

$$\begin{aligned} S_M &\rightarrow iS = \\ &\frac{1}{2g^2} \int (-id\tau) d\mathbf{x} \left(i^2 \partial_\tau \mathbf{n} \partial_\tau \mathbf{n} - \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{n} \partial_{\mathbf{x}} \mathbf{n} - i\bar{\psi} (i^2 \gamma_0 \partial_\tau - \gamma_1 \partial_{\mathbf{x}}) \psi - \frac{1}{4} (\bar{\psi} \psi)^2 \right) \\ &= \frac{i}{2g^2} \int d\tau d\mathbf{x} \left(\nabla \mathbf{n} \nabla \mathbf{n} - i\bar{\psi} \gamma_\mu \partial_\mu \psi + \frac{1}{4} (\bar{\psi} \psi)^2 \right), \quad (3.4) \end{aligned}$$

¹⁸Hiermit beschäftigt sich eines der *Millennium-Probleme* des *Clay Mathematics Institute*, vergleiche http://www.claymath.org/millennium/Yang-Mills_Theory/.

¹⁹In Analogie zur relativistischen Konvention wird der „Viererortsvektor“ in den folgenden Schritten mit x benannt, während \mathbf{x} den üblichen Raumortsvektor und t die Zeitvariable repräsentieren.

²⁰Aus dieser Vorschrift folgt, daß $\partial_t \rightarrow i\partial_\tau$ und $\gamma_0 \rightarrow i\gamma_0$ zu ersetzen ist.

mit dem *Nabla*-Operator ∇ in zwei Dimensionen. Das so erhaltene Funktional S lässt sich als Wirkung in einer euklidischen Raumzeit interpretieren. Man bezeichnet es daher als „Euklidische Wirkung“. Ist sie nach unten beschränkt, so lässt das euklidische Pfadintegral²¹,

$$\langle \mathcal{O}(\hat{\mathbf{n}}, \hat{\boldsymbol{\psi}}) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\mathbf{n} \mathcal{D}\boldsymbol{\psi} \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \delta(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\psi}) \mathcal{O}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}) e^{-S[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}]}, \quad (3.5)$$

eine anschauliche Interpretation zu: Analog zur *kanonischen Verteilung der statistischen Mechanik* handelt es sich hierbei um eine Summierung über alle Konfigurationen bezüglich \mathbf{n} und $\boldsymbol{\psi}$, gewichtet mit dem Faktor $e^{-S[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}]} / Z$. Dabei entspricht Z gerade der *Zustandssumme*. Hier zeigen sich große Vorteile gegenüber der Formulierung in Minkowski Raumzeit. Der stark oszillierende Wichtungsfaktor e^{iS_M} des Pfadintegrals weist im euklidischen Fall exponentiell abfallendes Verhalten $\propto e^{-S}$ auf und erlaubt die strenge Konstruktion eines Maßes auf allen Pfaden, dem Wiener-Maß. Ist die euklidische Wirkung nach unten beschränkt, so kann der Maßfaktor als *Wahrscheinlichkeitsmaß* interpretiert werden und eröffnet die Möglichkeit zur Anwendung von Monte-Carlo-Techniken. Der Übergang zum euklidischen Pfadintegral ist fundiert durch analytische Fortsetzung der Wightman-Funktionen nach Korrelationsfunktionen zu imaginären Zeiten, den Schwingerfunktionen. Dabei greift ein wichtiges Rekonstruktionstheorem. Unterliegen die Schwingerfunktionen bestimmten Forderungen, den *Osterwalder-Schrader-Axiomen* [28], so ist es möglich, ausgehend von euklidischer Formulierung, eine äquivalente Theorie in Minkowski Raumzeit anzugeben, die den Wightman-Axiomen gehorcht.

3.2 QFT auf dem Raumzeitgitter

Endliches Volumen Es ist unmittelbar klar, daß der Aufwand zur Simulation quantenfeldtheoretischer Modelle von der Anzahl der zu berücksichtigenden Freiheitsgrade abhängt. Daher beschränkt man sich üblicherweise auf endliche Volumina, d.h. man simuliert das Modell in einer Box. In diesem Fall ist man gezwungen, Randbedingungen an den Grenzen dieser Box festzulegen. In Kapitel 2.2.1 wurde argumentiert, daß im vorliegenden Fall periodische Randbedingungen sowohl für bosonische als auch fermionische Felder in zeitlicher wie räumlicher Richtung gewählt werden dürfen. Aus der Theorie des euklidischen Pfadintegrals ist bekannt, daß die endliche Ausdehnung in zeitlicher Richtung der inversen Temperatur des Systems

²¹Der Übergang zum euklidischen Pfadintegral erfolgt durch folgende Ersetzung: $t \rightarrow -i\tau$, $iS_M \rightarrow -S$.

entspricht. Der Grenzfall verschwindender Temperatur wird daher im Limes großer zeitlicher Boxgröße erreicht.

Diskretisierung Vermittels Einführung eines Raumzeitgitters Λ_a mit Gitterabstand a ,

$$\Lambda_a = \left\{ x = (x_0, x_1) = a(n_0, n_1) \mid n_0 = 0, \dots, L_0 - 1 \ \& \ n_1 = 0, \dots, L_1 - 1 \right\}, \quad (3.6)$$

erhält das Pfadintegralmaß eine wohldefinierte Bedeutung,

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}\mathbf{n} \mathcal{D}\boldsymbol{\psi} \delta(\mathbf{n}^2 - 1) \delta(\mathbf{n}\boldsymbol{\psi}) e^{-S_E[\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}]} \\ &\longrightarrow \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{n}_x d\boldsymbol{\psi}_x \delta(\mathbf{n}_x^2 - 1) \delta(\mathbf{n}_x \boldsymbol{\psi}_x) e^{-S(\{\mathbf{n}_x, \boldsymbol{\psi}_x\}_x)}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Die Felder \mathbf{n}_x , $\boldsymbol{\psi}_x$ leben auf den Gitterpunkten x der diskretisierten Raumzeit. Die euklidische Wirkung S geht hierbei in eine Gitterformulierung über. Es ist durchaus möglich, daß verschiedene Gitterwirkungen derselben Wirkung im Kontinuum entsprechen und derartige Wahlfreiheiten können zur Optimierung genutzt werden. Insbesondere Ableitungen unterliegen dieser Mehrdeutigkeit und ihnen zugehörige Operatoren entsprechen Matrizen, die Felder verschiedener Gitterpunkte verknüpfen. Man schreibt also

$$S(\{\mathbf{n}_x, \boldsymbol{\psi}_x\}) = \frac{\beta}{2} \left\{ \sum_{x, y \in \Lambda} \mathbf{n}_x K_{xy} \mathbf{n}_y + \sum_{\substack{x, y \in \Lambda \\ \alpha, \beta = 0, 1}} \bar{\boldsymbol{\psi}}_x^\alpha M_{xy}^{\alpha\rho} \boldsymbol{\psi}_y^\rho + \frac{1}{4} \sum_{x \in \Lambda} (\bar{\boldsymbol{\psi}} \boldsymbol{\psi})_x^2 \right\}, \quad (3.8)$$

unter Einführung der bosonischen Ableitungsmatrix $-\Delta \rightarrow K_{xy}$ sowie der fermionischen Ableitungsmatrix $-i\gamma_\mu \partial_\mu \rightarrow M_{xy}^{\alpha\rho}$ mit den Spinor-Indices α, ρ . Weiterhin wird die Kopplungskonstante im Rahmen der diskretisierten Formulierung nach $\beta = g^{-2}$ umbenannt. In (3.8) wurde der Gitterabstand $a \equiv 1$ gesetzt. Die entsprechenden Faktoren lassen sich unter Zuhilfenahme der folgenden Ersetzungen rekonstruieren, wobei Größen mit Hut den dimensionsbehafteten Größen entsprechen:

$$\begin{aligned} \beta &\rightarrow \hat{\beta} = \beta, \\ \mathbf{n}_x &\rightarrow \hat{\mathbf{n}}_x = \mathbf{n}_x, \\ \boldsymbol{\psi}_x &\rightarrow \hat{\boldsymbol{\psi}}_x = \sqrt{a} \boldsymbol{\psi}_x, \\ K_{xy} &\rightarrow \hat{K}_{xy} = a^2 K_{xy}, \\ M_{xy} &\rightarrow \hat{M}_{xy} = a M_{xy}. \end{aligned}$$

Diskretisierung der Raumzeit liefert überdies einen natürlichen Mechanismus zur Regularisierung der Theorie, da Impulse auf die Brillouin Zone des Gitters beschränkt sind und so insbesondere einer oberen Schranke unterliegen (vergleiche Anhang A),

$$p_\mu \leq \frac{\pi}{a}.$$

Numerische Behandlung Das diskretisierte, euklidische Pfadintegral lässt die Bestimmung von Erwartungswerten physikalischer Observablen zu,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}) \rangle &= \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{n}_x d\boldsymbol{\psi}_x \delta(\mathbf{n}_x^2 - 1) \delta(\mathbf{n}_x \boldsymbol{\psi}_x) \mathcal{O}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}) e^{-S(\{\mathbf{n}_x, \boldsymbol{\psi}_x\}_x)} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{g \in \Gamma} \mathcal{O}(g) e^{-S(g)}. \end{aligned}$$

In Praxis zeigt sich jedoch, daß die Anzahl der zu summierenden Konfigurationen g aus dem Konfigurationsraum Γ bei diskreten Problemen bereits enorm ist, bei kontinuierlichen Problemen schlichtweg unendlich. Bei näherer Betrachtung offenbart sich, daß nur ein kleiner Teil des Konfigurationsraumes in signifikantem Maß zu dieser Summe beiträgt: die Umgebung minimaler Wirkung. Konfigurationen, für die S große Werte annimmt, sind exponentiell unterdrückt. Eine Approximation ergibt sich für den Fall der Summierung nur endlich vieler Konfigurationen,

$$\langle \mathcal{O}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}) \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \mathcal{O}(g_k). \quad (3.9)$$

Hierbei müssen Konfigurationen g_k entsprechend dem Wahrscheinlichkeitsmaß $p(g_k) = e^{-S(g_k)}/Z$ verteilt sein („Importance Sampling“). Der mit dieser Approximation verknüpfte statistische Fehler ist von Ordnung \sqrt{M}^{-1} .

Thermodynamischer und Kontinuumslimes Diskretisierung des Modells geht mit der Einführung von Gitterartefakten, d.h. Zusatztermen, die Potenzen des Gitterabstands a tragen, einher. Dabei erschließt sich der Gitterabstand, mit dem ein Teilchen „aufgelöst“ wird, aus seiner Korrelationslänge ξ/a , die aus Monte-Carlo-Simulationen bestimmt werden kann. Im vorliegenden Modell kann sie mittels globaler Kopplung β variiert werden und im Limes $\beta \rightarrow \infty$ gilt $\xi/a \rightarrow \infty$, d.h. bei festem ξ folgt $a \rightarrow 0$ (*Kontinuumslimes*²²). Bei festgehaltenem Gittervolumen

²²Die übliche Vorgehensweise zur Bestimmung des Kontinuumslimes sieht vor, das System in der Nähe eines Phasenübergangs zweiter Ordnung zu betrachten, da die Korrelationslänge an diesem Übergang divergiert. Dies ist hier jedoch nicht möglich, da das Modell schlicht keinen geeigneten

$V = L_0 L_1$ führt diese Prozedur auf den Grenzfall der freien Theorie, da das *physikalische Volumen* $V_{phys} = a^2 L_0 L_1$ verschwindet. Eine sinnvollere Herangehensweise fixiert die physikalische Skala, während gleichzeitig große Gittervolumina (*thermodynamischer Limes*) und kleine -abstände betrachtet werden. Eine Möglichkeit zur Festsetzung der Skala wird in Kapitel 5.4 erläutert.

3.3 Wilson-Fermionen

Im Rahmen der Gitterformulierung entspricht die Matrix $M_{xy,ij}^{\alpha\beta} = \delta_{ij} M_{xy}^{\alpha\beta}$ mit den Gitterindizes x, y , Komponentenindizes i, j und Spinorindizes α, β , der fermionischen Ableitung $i\gamma_\mu \partial_\mu$ in euklidischer Raumzeit. Eine mögliche Wahl besteht in der *Zentrumsableitung*,

$$\partial_{xy}^\mu = \frac{1}{2a} (\delta_{x+a\hat{\mu},y} - \delta_{x-a\hat{\mu},y}), \quad (3.10)$$

die auf eine antisymmetrische Ableitungsmatrix führt. Hierbei bezeichnet μ verschiedene Gitterrichtungen und $\hat{\mu}$ den zugehörigen Einheitsvektor. Diese Formulierung ist allerdings von einem wohlbekannten Makel befallen. Betrachtet man den Gitterpropagator, so zeigt sich, daß dieser am Rand der Brillouin-Zone zusätzliche Pole aufweist, die keinem physikalischen Freiheitsgrad entsprechen (*Fermiondoppler-Problem*, [29]). Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Vorschlag von Kenneth Wilson (1975) verfolgt, um Dopplermoden zu unterdrücken. Dieser sieht die Modifizierung der Ableitung vor,

$$M_{xy}^{\alpha\beta} = \gamma_\mu^{\alpha\beta} \partial_{xy}^\mu + \delta^{\alpha\beta} \frac{ra}{2} \hat{\Delta}_{xy}. \quad (3.11)$$

Hierbei bezeichnet $\hat{\Delta}_{xy} = \Delta_{xy}^{a=1}$ den dimensionslosen Laplaceoperator auf dem Gitter,

$$\Delta_{xy} = \frac{1}{a^2} \sum_{\mu} (\delta_{x+a\hat{\mu},y} + \delta_{x-a\hat{\mu},y} - 2\delta_{xy}). \quad (3.12)$$

Der so eingeführte *Wilson-Term* S_W mit reellem *Massenparameter* r verschwindet im naiven Kontinuumsimes,

$$S_W = \frac{ra}{2} \sum_{x,y} \bar{\psi}_x^\alpha \delta^{\alpha\beta} \Delta_{xy} \psi_y^\beta \xrightarrow{a \rightarrow 0} 0.$$

Gleichzeitig wird der Propagator dahingehend gewandelt, daß Anregungen aus den Ecken der Brillouin-Zone eine zusätzliche, vom Gitterabstand abhängige Masse erhalten. So werden Doppler im Kontinuumsimes extrem schwer und mit dem Verlust ihrer Dynamik schwindet der Einfluß auf das Pfadintegral. Nachteile dieses Ansatz-

Phasenübergang aufweist.

zes werden in der Einführung zusätzlicher Gitterartefakte und dem Verlust chiraler Symmetrie (vergleiche Kapitel 3.4.2) offenbar.

Bosonische Ableitung Soll Hoffnung bezüglich supersymmetrischer Eigenschaften auf dem Gitter bestehen bleiben, so dürfen bosonische und fermionische Ableitungsmatrizen nicht willkürlich gewählt werden. Anhand des Wess-Zumino-Modells konnten Erfahrungen (vergleiche [30]) gesammelt werden, die Anlaß zu folgender Wahl geben:

$$K_{xy} = - \sum_{\mu} \left(\partial_{xy}^{\mu} \right)^2 + \left(\frac{r}{2} \Delta_{xy} \right)^2 = - \underbrace{\sum_{\mu} \sum_z \partial_{xz}^{\mu} \partial_{zy}^{\mu}}_{\Delta_{xy}^S} + \frac{r^2}{4} L_{xy}, \quad (3.13)$$

mit dem Laplaceoperator Δ_{xy}^S der Zentralableitung,

$$\Delta_{xy}^S = \sum_{\mu} \sum_z \partial_{xz}^{\mu} \partial_{zy}^{\mu} = \frac{1}{4a^2} \sum_{\mu} [\delta_{x+2a\hat{\mu},y} + \delta_{x-2a\hat{\mu},y} - 2\delta_{xy}], \quad (3.14)$$

und dem quadrierten Laplaceoperator,

$$L_{xy} = \sum_z \Delta_{xz} \Delta_{zy} = \frac{1}{a^4} \sum_{\mu, \nu = \pm 0, \pm 1} \left(\delta_{x+a\hat{\mu}+a\hat{\nu},y} - 2\delta_{x+a\hat{\mu},y} + \delta_{xy} \right). \quad (3.15)$$

3.4 Symmetrien

Zur Konstruktion entsprechender Gittermodelle ist die exakte Nachbildung von Symmetrien des ursprünglichen Modells (O(3) Symmetrie, chirale Symmetrie, Supersymmetrie) erstrebenswert, mindestens jedoch sollten diese im Kontinuumsimes wiederhergestellt werden.

3.4.1 O(3)-Symmetrie

Ordnungsparameter Im Rahmen von Monte-Carlo-Simulationen werden häufig *Ordnungsparameter* zur Untersuchung von Symmetrien genutzt. Diese zeigen unterschiedliches Verhalten im Fall gebrochener oder ungebrochener Realisierung. Die O(3)-Symmetrie kann beispielsweise durch den Vakuumerwartungswert des \mathbf{n} -Feldes charakterisiert werden. Unter Rotation im Komponentenraum transformiert er analog dem Superfeld (vergleiche Kapitel 2.2.2),

$$\phi \rightarrow \phi_R = O\phi \quad \Rightarrow \quad \langle \mathbf{n} \rangle \rightarrow \langle O\mathbf{n} \rangle.$$

Bei intakter $O(3)$ -Symmetrie verhält sich die Wirkung invariant unter Rotation. Der Vakuumerwartungswert erhält dann Beiträge beliebiger Richtungen des \mathbf{n} -Vektors. Das Resultat folgt durch Mittelung über alle Richtungen und erbringt

$$\langle \mathbf{n} \rangle = \mathbf{0} \quad \text{im ungebrochenen Fall.} \quad (3.16)$$

Nun betrachte man die gebrochene Realisierung, d.i. die Wirkung ist *nicht* invariant unter Rotation im Komponentenraum. Da sie positiv-definit ist, muss eine spezielle Ausrichtung existieren, die sie minimiert. Der Erwartungswert wird dann durch Fluktuationen um dieses Minimum dominiert und verschwindet nicht, d.h.

$$\langle \mathbf{n} \rangle \neq \mathbf{0} \quad \text{im gebrochenen Fall.} \quad (3.17)$$

Ordnungsparameter erlauben insbesondere die Unterscheidung von Phasen intakter und spontan gebrochener Symmetrie in Modellen, die Phasenübergänge zeigen. In diesem Fall werden Symmetrien zwar von der Wirkung respektiert, aber dynamisch durch den Grundzustand gebrochen. Im Rahmen des vorliegenden Modells ist bekannt, daß eine spontane Brechung kontinuierlicher Symmetrien nicht möglich ist [22]. Die bisher verwendete Formulierung vermittelt zwar einen manifest invarianten Charakter der $O(3)$ Symmetrie, ist aufgrund der Nebenbedingungen aber schwierig zu simulieren. Daher ist es nötig, alternative Formulierungen zu untersuchen.

Projektion der Wirkung Eine mögliche Variante besteht in der *stereographischen Projektion*. Betrachte dazu die N Superfelder ϕ_i , wobei folgende Bezeichnung verwendet werden soll: $\phi_{\perp}^T = (\phi_1, \dots, \phi_{N-1})$. Dann ist $\phi^T = (\phi_{\perp}, \phi_N)$. Unter Einführung der $N - 1$ Superfelder ξ_i definiert man:

$$\phi_{\perp} = \frac{2\xi}{1 + \xi\xi}, \quad \phi_N = \frac{1 - \xi\xi}{1 + \xi\xi}. \quad (3.18)$$

Dies impliziert

$$\phi\phi = \frac{4\xi\xi + (1 - \xi\xi)^2}{(1 + \xi\xi)^2} = \frac{4\xi\xi + 1 - 2\xi\xi + (\xi\xi)^2}{(1 + \xi\xi)^2} = \frac{(1 + \xi\xi)^2}{(1 + \xi\xi)^2} = 1,$$

d.h. die Nebenbedingungen sind unter dieser Umschrift automatisch erfüllt. Weiter wählen wir das Wirkfunktional (2.6) als Ausgangspunkt und integrieren entsprechen-

de Hilfsfelder nach Projektion der Feldvariablen aus. Notiert man die Expansion

$$\boldsymbol{\xi}(x, \theta) = \mathbf{u}(x) + i\bar{\theta}\boldsymbol{\lambda}(x) + \frac{i}{2}\bar{\theta}\theta\mathbf{g}(x),$$

so folgen die Transformationsvorschriften der Multipllettfelder,

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_\perp &= 2\rho\mathbf{u}, \\ \boldsymbol{\psi}_\perp &= 2\rho\boldsymbol{\lambda} - 4\rho^2(\mathbf{u}\boldsymbol{\lambda})\mathbf{u}, \\ \mathbf{f}_\perp &= 2\rho\mathbf{g} - 2\rho^2\mathbf{u}(2\mathbf{u}\mathbf{g} - i\bar{\boldsymbol{\lambda}}\boldsymbol{\lambda} + 4i\rho(\mathbf{u}\bar{\boldsymbol{\lambda}})(\mathbf{u}\boldsymbol{\lambda})) + 4i\rho^2\bar{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{u}\boldsymbol{\lambda}), \end{aligned}$$

sowie

$$\begin{aligned} n_N &= \rho(1 - \mathbf{u}^2), \\ \psi_N &= -4\rho^2\mathbf{u}\boldsymbol{\lambda}, \\ f_N &= -4\rho^2\mathbf{u}\mathbf{g} + 2i\rho^2\bar{\boldsymbol{\lambda}}\boldsymbol{\lambda} - 8i\rho^3(\mathbf{u}\bar{\boldsymbol{\lambda}})(\mathbf{u}\boldsymbol{\lambda}), \end{aligned}$$

mit $\rho(\mathbf{u}) = (1 + \mathbf{u}^2)^{-1}$. Die Transformation des Pfadintegrals wird durch die *Superdeterminante* der Variablentransformation charakterisiert,

$$Z \rightarrow \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\boldsymbol{\lambda}_x d\mathbf{g}_x \text{sdet}_x \{(\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{f}) \rightarrow (\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{g})\} e^{-S(\{\mathbf{u}_x, \boldsymbol{\lambda}_x, \mathbf{g}_x\}_x)},$$

wobei sdet eine Verallgemeinerung der Jacobi Determinante darstellt,

$$\text{sdet} \{(\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{f}) \rightarrow (\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{g})\} = \frac{\det \left(\frac{\partial n_i}{\partial u_j} - \frac{\partial n_i}{\partial \lambda_k^\alpha} \left(\frac{\partial \lambda}{\partial \psi} \right)_{kl}^{\alpha\beta} \frac{\partial \psi_l^\beta}{\partial u_j} \right)}{\det \left(\frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \right)}.$$

Hierbei werden die Nebenbedingungen für die Felder \mathbf{n} , $\boldsymbol{\psi}$ und \mathbf{f} genutzt, um die Freiheitsgrade entsprechend einzuschränken, sodaß eine sinnvolle Definition der Superdeterminante gewährleistet werden kann. Nach einer etwas längeren Rechnung stellt sich heraus, daß $\text{sdet}_x \{(\mathbf{n}, \boldsymbol{\psi}, \mathbf{f}) \rightarrow (\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{g})\} = 1$. Dies vereinfacht das Pfadintegralmaß erheblich, sodaß lediglich die Projektion der euklidischen Wirkung verbleibt, was ohne weitere Umschweife ausgeführt werden kann. Die Ausintegration des Hilfsfeldes \mathbf{g} trägt einen Faktor $\propto \beta^{-V} \prod_{x \in \Lambda} \rho_x^{-2}$ zur Normierung der Zustandssumme bei und es verbleibt die Wirkung:

$$S = \frac{\beta}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \left(4\rho_x \mathbf{u}_x K_{xy} \mathbf{u}_y \rho_y + \rho_x (1 - \mathbf{u}_x^2) K_{xy} (1 - \mathbf{u}_y^2) \rho_y + \bar{\lambda}_{x,i} \tilde{Q}_{xy,ij}^{\alpha\beta} \lambda_{y,j}^\beta + 4\rho_x^4 (\bar{\boldsymbol{\lambda}}_x \delta_{xy} \boldsymbol{\lambda}_y)^2 \right),$$

mit der *Fermionmatrix* $\tilde{Q}_{xy,ij}^{\alpha\beta}$,

$$\tilde{Q}_{xy,ij}^{\alpha\beta} = 4\rho_x(\delta_{ik} - 2u_{x,i}u_{x,k}\rho_x)M_{xy}^{\alpha\beta}(\delta_{kj} - 2u_{y,k}u_{y,j}\rho_y) + 16\rho_x^2u_{x,i}\delta_{ij}M_{xy}^{\alpha\beta}u_{y,j}\rho_y^2.$$

Hubbard-Stratonovich Transformation Der Vier-Fermi Term $\propto (\bar{\lambda}\lambda)^2$ kann durch eine Hubbard-Stratonovich Transformation bearbeitet werden. Die Idee besteht hierbei darin, ein zusätzliches dynamisches Boson-Feld σ derart einzuführen, daß der Vier-Fermi Term nach Ausintegration reproduziert wird. Im Detail setzt man

$$2\beta\rho_x^4(\bar{\lambda}_x\delta_{xy}\lambda_y)^2 \stackrel{!}{=} \frac{\beta}{2}\sigma_x^2 + \frac{\beta}{2}\bar{\lambda}_x\kappa\sigma_x\delta_{xy}\lambda_y,$$

mit einer Konstanten κ . Diese Konstruktion führt zu einem Gaußschen Integral in σ , mit Bewegungsgleichung

$$\sigma_x = -\frac{1}{2}\bar{\lambda}_x\kappa\delta_{xy}\lambda_y,$$

und liefert $\kappa = \pm 4i\rho_x^2$. Der Faktor i kann für die weitere Behandlung der Fermionmatrix vernachlässigt werden und es verbleibt das Pfadintegral

$$Z = \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{n}_x d\lambda_x d\sigma_x \rho_x^{-2} e^{-S(\{\mathbf{n}_x, \lambda_x\}_x)}, \quad (3.19)$$

mit der diskretisierten Wirkung

$$\begin{aligned} S = \frac{\beta}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} & \left(4\rho_x \mathbf{u}_x K_{xy} \mathbf{u}_y \rho_y \right. \\ & + \rho_x (1 - \mathbf{u}_x^2) K_{xy} (1 - \mathbf{u}_y^2) \rho_y + \sigma_x \delta_{xy} \sigma_y \\ & \left. + \bar{\lambda}_{x,i}^\alpha Q_{xy,ij}^{\alpha\beta} \lambda_{y,j}^\beta \right), \quad (3.20) \end{aligned}$$

und Fermionmatrix

$$\begin{aligned} Q_{xy,ij}^{\alpha\beta} = 4\rho_x(\delta_{ik} - 2u_{x,i}u_{x,k}\rho_x)M_{xy}^{\alpha\beta} & \\ (\delta_{kj} - 2u_{y,k}u_{y,j}\rho_y)\rho_y + 16\rho_x^2u_{x,i}\delta_{ij}M_{xy}^{\alpha\beta}u_{y,j}\rho_y^2 & \\ + 4\rho_x\sigma_x\delta_{xy}\delta_{ij}\delta^{\alpha\beta}\rho_y. & \quad (3.21) \end{aligned}$$

3.4.2 Chirale Symmetrie

Das Wirkfunktional (3.8) ist invariant unter einer diskreten chiralen Transformation (vergleiche Kapitel 2.2.3). Zur Unterdrückung störender Fermiondoppler wurde ein Zusatzterm S_W eingeführt, der zwar im Kontinuumsimes naiv verschwindet, bei

endlichem Gitterabstand aber zu einer expliziten Verletzung der chiralen Symmetrie führt. Es gilt, daß

$$\begin{aligned}
S_W &= \frac{r}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \bar{\psi}_x^\alpha \delta^{\alpha\beta} \Delta_{xy} \psi_y^\beta \\
&\rightarrow \frac{r}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \bar{\psi}_x^\alpha \gamma_5^T \delta^{\alpha\beta} \Delta_{xy} \gamma_5 \psi_y^\beta = \frac{r}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \bar{\psi}_x^\alpha (-\gamma_5^2) \delta^{\alpha\beta} \Delta_{xy} \psi_y^\beta \\
&= -\frac{r}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \bar{\psi}_x^\alpha \delta^{\alpha\beta} \Delta_{xy} \psi_y^\beta \neq S_W
\end{aligned}$$

Hierbei wurde benutzt, daß $[\gamma_5, C] = 0$, $\gamma_5^T = -\gamma_5$ und $\gamma_5^2 = 1$. Um den Grad der Verletzung zu quantifizieren, besteht auch hier die Möglichkeit, Ordnungsparameter wie das *chirale Kondensat* zu untersuchen. Diese Observable transformiert unter chiraler „Rotation“ analog dem oben angeführten Wilson-Term. Dabei entspricht die chirale Symmetrie einer \mathbb{Z}_2 -Symmetrie des Kondensats. Im ungebrochenen Fall erhält der Erwartungswert Beiträge von positiven und negativen Teilen, sodass er verschwindet, während gebrochene Symmetrie der Bevorzugung eines Vorzeichens, verbunden mit nichtverschwindendem Resultat, entspricht. Zusammengefasst,

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle = \begin{cases} 0 & \text{im ungebrochenen Fall} \\ c \neq 0 & \text{im gebrochenen Fall.} \end{cases} \quad (3.22)$$

Für das vorliegende Modell erwartet man aufgrund des Wilson-Terms eine explizit gebrochene chirale Symmetrie.

3.4.3 Supersymmetrie

Im Allgemeinen führt eine Diskretisierung der Raumzeit zum Verlust der Supersymmetrie. Die Superalgebra als Erweiterung der Poincare-Algebra wird dabei explizit durch die Gitterstruktur gebrochen. In Gleichung (2.11) wurde gezeigt, daß der Antikommutator der Generatoren supersymmetrischer Transformationen dem Generator der Raumzeittranslationen entspricht. Infinitesimale Rotationen oder Translationen können aber auf dem Gitter nicht durchgeführt werden, sodaß Supersymmetrie als nicht mit dem Gitteransatz vereinbar scheint. Beachtet man, daß beispielsweise Translationsinvarianz nicht vollständig, sondern nur bis auf Translationen um Ganzzahlvielfache des Gitterabstandes gebrochen ist, so kann unter Umständen ein supersymmetrischer Kontinuumslimit durch Feineinstellung („*fine tuning*“) der Modellparameter gewonnen werden. Weiterhin konnten Modelle mit erweiterter Supersymmetriealgebra konstruiert werden, die zumindest einen Teil der Supersymmetrie

exakt auf dem Gitter respektieren und so den Aufwand an fine tuning deutlich reduzieren. Einen Überblick über die genannten Techniken und Probleme gibt [31] und darin referenzierte Artikel. In dieser Arbeit wird eine in Kapitel 3.4.1 vorgestellte stereographisch projizierte Gitterformulierung verwendet, deren vorrangiges Ziel die Implementierung der $O(3)$ Symmetrie darstellt. Untersuchungen von supersymmetrisch-verbesserten Formulierungen müssen in darauf aufbauenden Arbeiten betrachtet werden.

4 Monte-Carlo-Techniken

Das folgend dargelegte Kapitel behandelt die angewandten Methoden zur numerischen Simulation des supersymmetrischen, nichtlinearen Sigma-Modells auf dem Gitter sowie die Extraktion physikalisch relevanter Information. Die Ausführungen zu grundlegenden Techniken orientieren sich an den einschlägigen Lehrbüchern von *Montvay & Münster, Rothe, Berg* sowie *Gattringer & Lang* [32, 29, 33, 34]. Insbesondere folgen die Kapitel über Markov-Ketten und Metropolis-Algorithmus dem Buch von Rothe.

4.1 Markov-Ketten

Das mathematische Gerüst der Markov-Ketten eignet sich zur Formulierung eines stochastischen Prozesses, der es erlaubt, Feldkonfigurationen nach einem vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsmaß zu erzeugen. Man spricht in diesem Fall von *Markov-Chain-Monte-Carlo* (MCMC) Simulationen, oder kurz MC Simulationen.

Eine *Feldkonfiguration* des Systems, d.h. eine explizite Wahl der Freiheitsgrade auf allen Raumzeitpunkten, werde mit C bezeichnet. Zur besseren Übersicht werden verschiedene Konfigurationen durch einen Index $i \in \mathbb{N}$ unterschieden, $\{C_1, C_2, \dots, C_N\}$. Die Feldkonfigurationen können als Zufallsvariablen eines stochastischen Prozesses interpretiert werden, der, ausgehend von einer Konfiguration C_i , mit der Übergangswahrscheinlichkeit $P(C_i \rightarrow C_j) \equiv P_{ij}$ eine Konfiguration C_j erzeugt. Hierbei gelte, dass $P_{ij} \geq 0$ (positive Übergangswahrscheinlichkeit) und $\sum_j P_{ij} = 1$ (Normierung). Fordert man zusätzlich die *Markov-Bedingung* $P(C_i \rightarrow C_j) = P(C_i, C_j)$, d.i. die Übergangswahrscheinlichkeit hängt nur von der direkt vorausgegangenen Konfiguration, nicht aber von anderen Konfigurationen ab, so handelt es sich bei dem betrachteten Prozess um einen *Markov-Prozess*. Die Menge der so generierten Konfigurationen $\{C_{\tau_i}\}_i$ bezeichnet man als *Markov-Kette*. Basierend auf diesen Konfigurationen lassen sich Observablen \mathcal{O} durch „Zeitmittelung“ bestimmen,

$$\langle \mathcal{O}(C) \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \mathcal{O}(C_{\tau_k}),$$

falls die Konfigurationen innerhalb der Markov-Kette nach dem gewünschten Wahrscheinlichkeitsmaß $p(C) = \frac{e^{-S_E(C)}}{Z}$ mit einer euklidischen Wirkung S_E verteilt sind (*importance sampling*, vgl. Kapitel 3.2). Im Hinblick darauf betrachten wir nun einen Markov-Prozess, der die folgenden Merkmale aufweist:

irreduzibel Eine Markov-Kette heißt irreduzibel, wenn für jede zwei Konfigurationen C_i, C_j ein $N \in \mathbb{N}$ derart existiert, dass $N < \infty$ und

$$P_{ij}^{(N)} = \sum_{\{i_k\}} P_{i_1 i_1} P_{i_1 i_2} \cdots P_{i_{N-1} j} \neq 0,$$

d.h. die Übergangswahrscheinlichkeit, von einer Konfiguration C_i nach endlich vielen Schritten zu einer Konfiguration C_j zu gelangen, ist stets größer Null.

aperiodisch Eine Markov-Kette heißt aperiodisch, wenn für alle $i, N \in \mathbb{N}$ gilt, dass $P_{ii}^{(N)} \neq 0$.

positiv-rekurrent Sei $p_{ii}^{(N)}$ die Wahrscheinlichkeit, entlang von N Markov-Schritten von einer Konfiguration C_i zu sich selbst überzugehen, ohne diese Konfiguration in einem Zwischenschritt zu erreichen. Eine Markov-Kette heißt positiv-rekurrent, wenn die mittlere Rekurrenzzeit $\tau_i = \sum_{N=1}^{\infty} N p_{ii}^{(N)}$ endlich ist.

Eine irreduzible, aperiodische und positiv-rekurrente Markov-Kette heißt **ergodisch**. Dann existiert der Grenzfal²³ für $N \rightarrow \infty$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_{ij}^{(N)} = \pi_j, \tag{4.1}$$

wobei die Grenzwahrscheinlichkeiten π_j eindeutig bestimmt sind und den Bedingungen $\pi_j \geq 0$, $\sum_j \pi_j = 1$ sowie $\pi_j = \sum_i \pi_i P_{ij}$ genügen. Die Grenzwahrscheinlichkeiten sind unabhängig von der Wahl der Startkonfiguration des Markov-Prozesses und gehen aus einem weiteren Markov-Schritt unverändert hervor. Dies charakterisiert den Grenzfal als Gleichgewichtszustand des Markovprozesses, wobei π_j gerade die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten der Konfiguration C_j angibt. Erfüllt die so generierte Markovkette zusätzlich die Bedingung, dass

$$\tau_i^{(2)} \equiv \sum_{N=1}^{\infty} N^2 p_{ii}^{(N)} < \infty,$$

so entspricht der statistische Mittelwert über alle Konfigurationen (*Zeitmittel* bezüglich der Monte-Carlo-Zeit) dem *Scharmittel*,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_i \pi_i \mathcal{O}(C_i),$$

²³siehe [29], Kap. 16.2

bei einer statistischen Unsicherheit von $O(N^{-1/2})$. Dies entspricht der in Kap. 3.2 gewünschten Form. Es bleibt zu zeigen, welcher Form die Grenzwahrscheinlichkeiten π_i genügen. Dazu betrachte man die Bilanzgleichung

$$-\sum_j p^t(C_i)P_{ij} + \sum_j p^t(C_j)P_{ji} \equiv \Delta p^t(C_i).$$

Zu einer festen Monte-Carlo-Zeit t repräsentiert der erste (zweite) Term den „Abfluß“ („Zufluß“) an Wahrscheinlichkeitsdichte für die Konfiguration C_i im Falle eines weiteren Monte-Carlo-Schrittes. Im Grenzfall ist $p^t(C_i) \rightarrow \pi_i$ stationär, $\Delta p^t(C_i) \rightarrow \Delta \pi_i = 0$. Setzt man nun voraus, daß für die Übergangswahrscheinlichkeiten die *detaillierte Bilanzgleichung*

$$\frac{e^{-S_E(C_i)}}{Z} P_{ij} = \frac{e^{-S_E(C_j)}}{Z} P_{ji} \quad (4.2)$$

erfüllt ist, so folgt, dass die Grenzwahrscheinlichkeiten π_i dem Gibbs-Ensemble $p(C_i) = \frac{e^{-S_E(C_i)}}{Z}$ entsprechen (vgl. [29], Kap. 16.2). Damit ist gezeigt, dass der so definierte Markov-Prozess den richtigen Grenzwert liefert. Aus den Details des Beweises folgt außerdem, dass die Abweichung der durch die Markov-Kette beschriebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung von der Gleichgewichtsverteilung mit jedem weiteren Monte-Carlo-Schritt geringer wird (vgl. ebd.).

Unter den aufgeführten Bedingungen an den Markov-Prozess hebt sich das *detaillierte Gleichgewicht* (4.2) besonders hervor. Es sichert den korrekten Grenzwert für die möglichen Verfahren der Monte-Carlo-Simulation durch eine Forderung an die Übergangswahrscheinlichkeit P_{ij} , lässt aber Freiraum zur Gestaltung von effektiven Algorithmen. Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden zwei Algorithmen, die das detaillierte Gleichgewicht erfüllen, vorgestellt: der *Metropolis-* sowie der *Hybrid-Monte-Carlo-*Algorithmus.

4.2 Metropolis-Algorithmus

Der Metropolis-Algorithmus wurde 1953 von Metropolis et. al. zur numerischen Auswertung der Zustandsgleichung beliebiger, aus elementaren Strukturen zusammengesetzter, Systeme vorgeschlagen.

The purpose of this paper is to describe a general method, suitable for fast electronic computing machines, of calculating the properties of any substance which may be considered as composed of interacting individual molecules. (Metropolis et. al. [35])

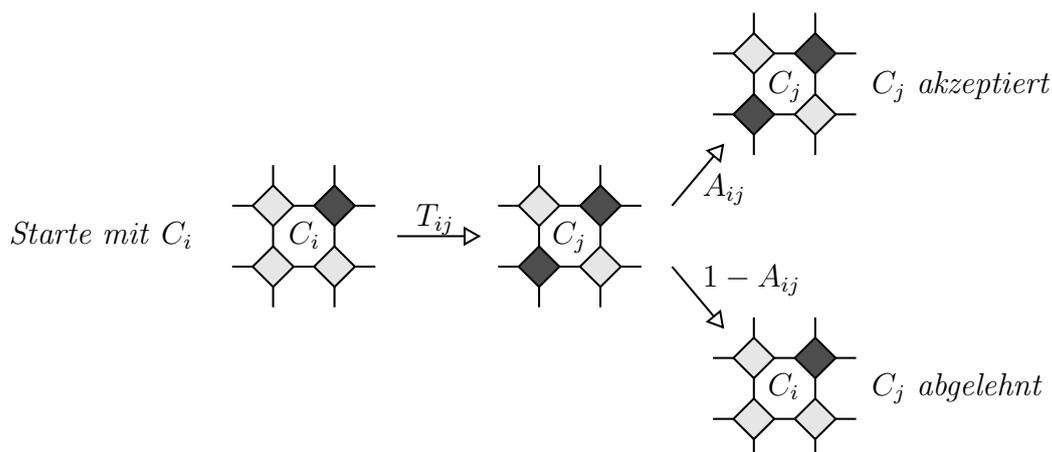


Abbildung 1: Ablaufschema eines lokalen Metropolis-Schrittes. Die Übergangswahrscheinlichkeit P_{ij} der Erzeugung einer Konfiguration C_j ausgehend von einer Konfiguration C_i wird in zwei Schritte zerlegt, Test (T_{ij}) und Akzeptanz (A_{ij}), so dass $P_{ij} = T_{ij} \cdot A_{ij}$.

Der Anwendungsbereich moderner Monte-Carlo-Techniken erstreckt sich über ein sehr weitläufiges Areal verschiedenster „Systeme“, insbesondere außerhalb der theoretischen Chemie, auf die Metropolis et. al. ursprünglich abzielten. Grundlage dieses Erfolges ist die 1953 vorgeschlagene Methode zum „Abtasten“ des Pfadintegrals, der Metropolis-Algorithmus. Hierbei wird die Übergangswahrscheinlichkeit P_{ij} des Markov-Prozesses in zwei Teilschritte zerlegt,

$$P_{ij} = T_{ij} \cdot A_{ij}.$$

T_{ij} bezeichnet man als Testwahrscheinlichkeit, A_{ij} als Akzeptanzwahrscheinlichkeit. Ausgehend von einer Konfiguration C_i entwirft der Algorithmus anhand eines spezifischen, zufallsbasierten Verfahrens mit Wahrscheinlichkeit T_{ij} eine Testkonfiguration C_j . In einem zweiten Verfahren wird anhand eines zufälligen Wurfs darüber entschieden, ob diese Konfiguration als Ausgangspunkt des nächstfolgenden Monte-Carlo-Schrittes angenommen (*accepted*) oder verworfen (*rejected*) wird. Die Wahrscheinlichkeit der Annahme ist hierbei gleich A_{ij} . In jedem Fall wird die Markov-Kette um eine weitere Konfiguration ergänzt: die ursprüngliche Konfiguration C_i im Fall *reject* bzw. die Testkonfiguration C_j im Fall *accept*. Zur Berechnung physikalischer Erwartungswerte wird jeder Eintrag der Markov-Kette mit dem gleichen Gewicht berücksichtigt. Dies entspricht der Idee des *importance sampling*: Statt Konfigurationen zufällig über den Phasenraum verteilt zu ziehen und anhand ihres Beitrags zum Pfadintegral zu wichten, werden die Konfigurationen bereits ihrem Beitrag ent-

sprechend gezogen und gleichwertig gewichtet.

Detailliertes Gleichgewicht Die Wahrscheinlichkeit, ausgehend von der Konfiguration C_i den Testkandidaten C_j vorzuschlagen, erfülle die Bedingung

$$T_{ij} = T_{ji}. \quad (4.3)$$

Dies kann beispielsweise durch einen einfachen Wurf erreicht werden. Potts-Modelle der statistischen Mechanik verfügen über einen Freiheitsgrad je Gitterpunkt, der q verschiedene Werte annehmen kann. Ein lokaler Metropolis-Schritt am Gitterpunkt x besteht nun daraus, eine Zufallszahl aus $\{1, \dots, q\}$ zu ziehen und diese dem Freiheitsgrad am Ort x zuzuordnen. Die Änderung der Wirkung dient zur Entscheidung über Annahme oder Ablehnung der so generierten Konfiguration: Ist $S_E(C_j) \leq S_E(C_i)$, so wird die neue Konfiguration C_j mit Sicherheit angenommen; ist $S_E(C_j) > S_E(C_i)$, so wird eine Zufallszahl ξ aus $[0, \dots, 1]$ gezogen; im Fall $\xi \leq \frac{e^{-S_E(C_j)}}{e^{-S_E(C_i)}}$ wird die neue Konfiguration angenommen, andernfalls abgelehnt. Das detaillierte Gleichgewicht hält in beiden Fällen.

1. Fall $S_E(C_j) \leq S_E(C_i)$. Dann ist $P_{ij} = T_{ij} \cdot 1$, $P_{ji} = T_{ji} \cdot \frac{e^{-S_E(C_i)}}{e^{-S_E(C_j)}}$ und

$$\begin{aligned} e^{-S_E(C_i)} P_{ij} &= e^{-S_E(C_j)} P_{ji} \\ e^{-S_E(C_i)} T_{ij} &= e^{-S_E(C_j)} T_{ji} \frac{e^{-S_E(C_i)}}{e^{-S_E(C_j)}} \\ T_{ij} &= T_{ji}. \quad \checkmark \end{aligned}$$

2. Fall $S_E(C_j) > S_E(C_i)$. Dann ist $P_{ij} = T_{ij} \cdot \frac{e^{-S_E(C_j)}}{e^{-S_E(C_i)}}$, $P_{ji} = T_{ji} \cdot 1$ und

$$\begin{aligned} e^{-S_E(C_i)} P_{ij} &= e^{-S_E(C_j)} P_{ji} \\ e^{-S_E(C_i)} T_{ij} \frac{e^{-S_E(C_j)}}{e^{-S_E(C_i)}} &= e^{-S_E(C_j)} T_{ji} \\ T_{ij} &= T_{ji}. \quad \checkmark \end{aligned}$$

Interessant ist der zweite Fall. Er erlaubt dem Algorithmus, die Wirkung des Systems zu erhöhen und so neben dem klassischen Pfad minimaler Wirkung auch leicht deformierte Pfade in dessen Nachbarschaft zu berücksichtigen. Diese tragen Informationen zu den Quantenkorrekturen des Systems und erlauben die numerische Auswertung der Quantenfeldtheorie.

Der Metropolis-Algorithmus eignet sich vor allem zur Simulation von Systemen mit ultralokaler²⁴ Wechselwirkung. Hierbei können Gitterpunkte nacheinander für sich aktualisiert werden und die (einmalige) Aktualisierung jedes Gitterpunktes wird als *sweep* bezeichnet. Sie lässt sich in diesem Fall schnell berechnen, da die Änderung der Wirkung bei Aktualisierung eines einzelnen Punktes lediglich aus der Wechselwirkung zwischen dem aktuell betrachteten Gitterpunkt und seiner Nachbarschaft resultiert. Anders verhält es sich bei Systemen mit nichtlokaler Wechselwirkung. Hier muss die gesamte Wirkung bei Änderung eines einzelnen Gitterpunktes neu berechnet werden, was den Algorithmus empfindlich verlangsamt. Ein wichtiges Beispiel nichtlokaler Wechselwirkung ist die Simulation dynamischer Fermionen, die für die Auswertung supersymmetrischer Theorien essentiell ist.

Ein weiteres Problem des Metropolis-Algorithmus resultiert direkt aus der lokalen Aktualisierung des Gitters („Punkt für Punkt“) und wird als *critical slowing down* bezeichnet. Die Extraktion physikalischer Information aus Gittersimulationen gelingt in Bereichen kritischer Kopplung, wenn die Korrelationslänge viel größer als charakteristische Längenskalen des Gitters, wie beispielsweise der Gitterabstand, aber geringer als die physikalische Ausdehnung der Box, ist. In diesem Bereich neigen statistische Systeme dazu, zusammenhängende Gruppen von Freiheitsgraden „paralleler“ Ausrichtung zu zeigen (*Cluster*). Am Beispiel des bereits genannten Potts-Modells entspricht dieses Verhalten „Inseln“ mit einem definierten q -Wert auf jedem Gitterpunkt. Gitterpunkte, die von einem solchen Cluster umschlossen sind, korrespondieren bei einer lokalen Aktualisierung ihrer Freiheitsgrade zu einer starken Erhöhung der Wirkung, sodass die Annahme der gewonnenen Testkonfiguration sehr unwahrscheinlich ist. Die Anzahl an Gitterpunkten, die so pro sweep tatsächlich aktualisiert werden können, reduziert sich auf die Punkte an den Rändern der Cluster. Dies führt zu einer hohen Korrelation zwischen aufeinander folgenden Konfigurationen im Bereich kritischer Kopplung, da die Cluster nur sehr langsam aktualisiert werden können. Dabei gilt: Je geringer der Abstand zur kritischen Kopplung, desto größer die Ausdehnung der Cluster. Im Grenzfall kritischer Kopplung wird der Metropolis-Algorithmus ineffizient bis hin zum vollständigen Versagen des Aktualisierungsschemas. Ein System auf dem Gitter mit Volumen $V = L^d$ zeigt im Bereich kritischer Kopplung ein definiertes Verhalten der integrierten Autokorrelationszeit

²⁴Man unterscheidet die Begriffe *ultralokal*, *lokal* und *nichtlokal* zur Beschreibung der Ausdehnung von Wechselwirkungen zwischen den Punkten eines Raumzeitgitters. Hierbei bezeichnet „lokal“ eine Wechselwirkung, die exponentiell mit dem Abstand abfällt, während „ultralokale“ Wechselwirkungen ausschließlich zwischen Punkten einer begrenzten Nachbarschaft vermittelt werden.

τ_{int} (vgl. Kap. 4.7) nach dem Potenzgesetz

$$\tau_{int} \propto L^{d+z},$$

wobei z als *dynamischer kritischer Exponent* bezeichnet wird, der sowohl vom verwendeten Algorithmus als auch der betrachteten Observablen abhängt [33, 32]. Lokale Algorithmen wie der Metropolis-Algorithmus erreichen üblicherweise Werte von $z \approx 2$, während spezialisierte Algorithmen wie der *Cluster-Algorithmus*²⁵ nah an $z \approx 0$ herankommen. Schlüssel ist hierbei ein globales Aktualisierungsschema, das es ermöglicht, viele Gitterpunkte auf einmal zu erfassen.

4.3 Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus

Der *Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus* (kurz: HMC-Algorithmus) wurde in den 80'er Jahren vorgeschlagen und stellt heute den Standardalgorithmus zur Behandlung von Gittermodellen mit nichtlokaler Wechselwirkung, insbesondere dynamischer Fermionen, dar [37]. Aus historischer Sicht ergänzt der HMC-Algorithmus die bekannten *Langevin*²⁶- bzw. *Molekulardynamik*²⁷-Algorithmen um einen zusätzlichen Akzeptanz-Schritt analog dem Metropolis-Algorithmus, um die diesen Verfahren anhaftenden, systematischen Fehler stochastisch zu negieren.

Basierend auf der vorangegangenen Diskussion kann man den HMC-Algorithmus auch als Erweiterung des Metropolis-Schemas auffassen. Während der Akzeptanzschritt unverändert beibehalten wird, verwendet man zur Generierung der Testkonfiguration eine globale Aktualisierungsmethode, den *Molekulardynamik*-Schritt. Aus Kap. 4.2 ist bekannt, dass dieses Schema die gewünschte Verteilung liefert, falls für die Wahrscheinlichkeit, aus der Konfiguration C_i die Testkonfiguration C_j zu erhalten, gilt, dass $T_{ij} = T_{ji}$ (Gl. (4.3)).

Molekulardynamik-Schritt Ziel der Monte-Carlo-Simulation ist die Auswertung von Erwartungswerten der Form $\langle \mathcal{O}(n) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}n \mathcal{O}(n) e^{-S_E[n]}$, mit dem reellwertigen Feld n und $Z = \int \mathcal{D}n e^{-S_E[n]}$ sowie einer euklidischen Wirkung S_E . Die hier vorgestellte Methode findet allgemeine Anwendung und ist nicht auf das supersymmetrische nichtlineare Sigma-Modell beschränkt. Offensichtlich ändert sich der Erwartungswert nicht bei Erweiterung mit einer Konstanten in Form eines Gauß'schen

²⁵Ein typischer Cluster-Algorithmus ist der *Swendsen-Wang-Cluster-Algorithmus* [36].

²⁶Der Langevin-Algorithmus basiert auf der Langevin-Gleichung der statistischen Mechanik und wurde 1981 von G. Parisi und Y. Tonin vorgeschlagen [38].

²⁷Angeregt 1982 von D. Callaway und A. Rahman, vgl. [39].

Integrals, const. = $\int \mathcal{D}p e^{-\frac{p^2}{2}}$,

$$\langle \mathcal{O}(n) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}n \mathcal{O}(n) e^{-S_E[n]}}{\int \mathcal{D}n e^{-S_E[n]}} = \frac{\int \mathcal{D}n \mathcal{D}p \mathcal{O}(n) e^{-\left(\frac{p^2}{2} + S_E[n]\right)}}{\int \mathcal{D}n \mathcal{D}p e^{-\left(\frac{p^2}{2} + S_E[n]\right)}}.$$

Der Exponent $\frac{p^2}{2} + S_E[n]$ geht nach Diskretisierung in die Form $\sum_{x \in \Lambda} \frac{p_x^2}{2} + S_E(\{n_x\})$ über und wird als Hamiltonfunktion eines Systems der klassischen, statistischen Mechanik interpretiert. Hierbei übernimmt n_x die Rolle der Ortsfreiheitsgrade, während p_x die dazu kanonisch konjugierte Variable (Impulsfreiheitsgrade) darstellt. Entsprechend kann man $\frac{p_x^2}{2}$ als kinetischen Term und $S_E(\{n_x\})$ als *Potentialterm* auffassen. Zur Generierung einer Testkonfiguration wird dieses System anhand der kanonischen Bewegungsgleichungen entwickelt. Aus der Theorie kanonischer Systeme ist bekannt, dass dem System dabei nur ein Teil des Phasenraumes zugänglich ist, der durch die Gesamtenergie $E = \sum_{x \in \Lambda} \frac{p_x^2}{2} + S_E(\{n_x\})$ charakterisiert wird. Insbesondere beinhaltet dieser Bereich die Nachbarschaft minimalen Potentials, d.i. minimaler Wirkung S_E .

Integration der Bewegungsgleichungen Entsprechend ihrem Beitrag zum Pfadintegral müssen die „Impulse“ p_x nach einer Gauß'schen Verteilung gewürfelt werden. Darauf folgt die Integration der Bewegungsgleichungen zur (fiktiven) Zeit t über den Zeitraum t' , d.h. die Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{aligned} n_x(t+t') &= n_x(t) + t' \frac{\partial n_x}{\partial t}(t) + O(t'^2) \\ p_x(t+t') &= p_x(t) + t' \frac{\partial p_x}{\partial t}(t) + O(t'^2). \end{aligned}$$

In Bezug auf Hamilton'sche Systeme ist bekannt, dass $\frac{\partial n_x}{\partial t}(t) = p_x(t)$ und $\frac{\partial p_x}{\partial t}(t) = -\frac{\partial S_E}{\partial n_x}(t)$ (*Kraftterm*), so dass

$$\begin{aligned} n_x(t+t') &= n_x(t) + t' p_x(t) + O(t'^2) \\ p_x(t+t') &= p_x(t) + t' \left(-\frac{\partial S_E}{\partial n_x} \right)(t) + O(t'^2). \end{aligned}$$

Die Integration der Bewegungsgleichungen gelingt unter Zuhilfenahme eines numerischen Integrationsschemas. Diese unterscheiden sich nach der höchsten in den Bewegungsgleichungen berücksichtigten Ordnung in t' , oder nach zusätzlichen Optimierungen. In der Simulation des supersymmetrischen, nichtlinearen Sigma-Modells

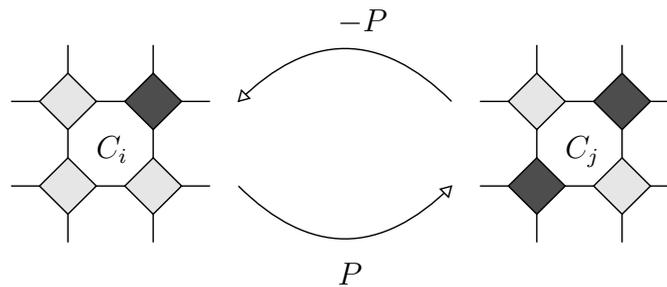


Abbildung 2: Im *Molekular-dynamik-Schritt* gelangt man durch Integration fiktiver Bewegungsgleichungen zur Testkonfiguration C_j . Zur Sicherung der gewünschten Grenzverteilung im Markov-Prozeß muss das Integrationsschema *zeitreversibel* sein, d.h. bei Umkehrung der fiktiven Impulse $P \rightarrow -P$ gewinnt man nach Integration die Ausgangskonfiguration C_i zurück.

kommen optimierte²⁸ Integratoren zweiter und vierter Ordnung zum Einsatz.

Durch Integration der Bewegungsgleichungen gelangt man von der Konfiguration $C_i \equiv C(t)$ unter Verwendung der Impulse $p(t) \equiv P$ zur Testkonfiguration $C_j \equiv C(t + t')$. Verläuft die Integration exakt, so sichert der klassische Determinismus, dass eine Evolution ausgehend von $C(t) = C_j$ und $p(t) = -P$ die Ausgangskonfiguration $C(t + t') = C_i$ zurück liefert²⁹. Numerische Integratoren diskretisieren die Bewegungsgleichungen und lösen das so gewonnene Gleichungssystem auf den Stützstellen mit Abstand δt . Eine wichtige Größe zur Beurteilung der Integration ist die „Gesamtenergie“ E des fiktiven klassischen Systems, die unter den kanonischen Bewegungsgleichungen invariant ist. So verursacht der einfache *LeapFrog*-Integrator [29] Fehler in E von der Ordnung $O(\delta t^2)$. Das detaillierte Gleichgewicht hält in diesem Fall genau dann stand, wenn der Integrator *symplektisch*³⁰ und *zeitreversibel* (siehe Abb.2) ist. In diesem Fall können systematische Fehler, die der endlichen Schrittweite δt geschuldet sind, stochastisch durch den Akzeptanzschritt korrigiert werden. Damit wird der Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus zu einem *exakten* Algorithmus.

²⁸Vergleiche [40] zur Optimierung von Integratoren, die zur MC-Simulation geeignet sind, und [41] zur Beschleunigung des HMC-Algorithmus durch Fourier-Methoden. Dabei wird eine verallgemeinerte Bewegungsgleichung unter Zuhilfenahme der Fouriertransformation verwendet.

²⁹Dies entspricht gerade einer Umkehr der Zeitrichtung.

³⁰Hierbei bezeichnet Symplektizität die Erhaltung des Phasenraumvolumens $dndp$.

4.4 Fermionen

Der fermionische Beitrag zur Wirkung (3.20) des nichtlinearen, supersymmetrischen Sigma-Modells ist quadratisch in den Feldern,

$$Z = \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x d\boldsymbol{\lambda}_x \rho_x^{-2} e^{-(S_{bos} + \frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \bar{\lambda}_x Q_{xy} \lambda_y)},$$

und kann nach den Regeln der Berezin-Integration [12] ausgeführt werden. Im Fall von Majorana-Fermionen $\boldsymbol{\lambda}$ liefert dies die *Pfaff'sche Determinante*,

$$\text{Pf}(P) = \int \prod_{x \in \Lambda} d\boldsymbol{\lambda}_x e^{-\frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \bar{\lambda}_x Q_{xy} \lambda_y}, \quad (4.4)$$

wobei $P = CQ$ mit der Ladungskonjugationsmatrix C . Da P ausschließlich reelle Einträge besitzt, ist auch $\text{Pf} P$ reell. Allerdings kann die Pfaff'sche Determinante sowohl positives als auch negatives Vorzeichen annehmen und stört so die Interpretation des Wichtungsfaktors im Pfadintegral als Wahrscheinlichkeitsmaß (Positivität), eine grundlegende Voraussetzung für die Anwendbarkeit von Monte-Carlo-Techniken. Eine Möglichkeit, dieses Problem zu umgehen, besteht darin, die Pfaff'sche Determinante als Observable aufzufassen. Der Erwartungswert der Observablen $\mathcal{O}(\mathbf{u}, \boldsymbol{\lambda}, \sigma)$ ist dann gegeben durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\langle \text{Pf}(P) \mathcal{O}(\mathbf{u}, \sigma) \rangle_{\mathbf{u}, \sigma}}{\langle \text{Pf}(P) \rangle_{\mathbf{u}, \sigma}}.$$

Hier bezeichnet $\langle \dots \rangle_{\mathbf{u}, \sigma}$ die Mittelung über bosonische Freiheitsgrade,

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\mathbf{u}, \sigma} = \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x \rho_x^{-2} \mathcal{O}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\}) e^{-S_{bos}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\})}.$$

Dieser Ansatz, obgleich formal exakt, leidet darunter, dass die Beiträge der einzelnen Konfigurationen zum Mittelwert stark fluktuieren und so eine sehr hohe Anzahl an Konfigurationen nötig ist, um einen stabilen Mittelwert zu erhalten. Weiterhin muss die Pfaff'sche Determinante in jedem Schritt exakt berechnet werden. Eine andere Möglichkeit, das Problem anzugreifen, besteht darin, den Beitrag der Fermionen direkt in der Erzeugung der Konfigurationen zu berücksichtigen. Im *Re-weighting* Verfahren wird das Vorzeichen bei der Generation von Konfigurationen vernachlässigt und $\text{sgn}(\text{Pf} P) = 1$ gesetzt, während Observablen unter Hinzunahme der Beiträge negativer Wichtung bestimmt werden. Dabei nutzt man die Relation

$\det(P) = \text{Pf}^2(P)$ und schreibt

$$Z = \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x \rho_x^{-2} \det^{\frac{1}{2}}(P) e^{-S_{bos}} = \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x e^{-S_{eff}}, \quad (4.5)$$

mit $\det^{\frac{1}{2}}(P) > 0$ und der *effektiven Wirkung*

$$S_{eff} = \frac{\beta}{2} \left\{ \sum_{x,y \in \Lambda} \mathbf{n}_x(\mathbf{u}_x) K_{xy} \mathbf{n}_y(\mathbf{u}_y) + \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x^2 \right\} + 2 \sum_{x \in \Lambda} \log(\rho_x) - \frac{1}{2} \log(\det P). \quad (4.6)$$

Observablen \mathcal{O} können dann durch Inklusion des Vorzeichens gewonnen werden,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x \text{sgn}(\text{Pf} P) \mathcal{O}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\}) e^{-S_{eff}}}{\int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x \text{sgn}(\text{Pf} P) e^{-S_{eff}}}. \quad (4.7)$$

Ist $\langle \text{sgn}(\text{Pf} P) \rangle \approx 0$, so ist dieser Erwartungswert nicht mehr wohldefiniert und die Simulation versagt (*Vorzeichenproblem, sign problem*). Dieser Sachverhalt wird in Kapitel 5.2 eingehender untersucht. Wirkung (4.6) schließt Beiträge dynamischer Fermionen in Form einer effektiven, nichtlokalen Wechselwirkung der bosonischen Freiheitsgrade ein und erlaubt so die Behandlung mit den bereits vorgestellten Monte-Carlo-Methoden. Im Rahmen der hier verwendeten Implementierung wird die Fermionmatrix sowie der entsprechende Kraftterm exakt ausgewertet.

4.5 Präkonditionierung

Konditionszahl Gegeben sei das lineare Gleichungssystem

$$Qx = b, \quad (4.8)$$

mit der reellen, invertierbaren Matrix Q und den Spaltenvektoren x, b . Hierbei werden Q und b als gegeben angenommen, während x unbekannt ist. Unter einer Deformation $b \rightarrow b + \Delta b$ geht x in $x + \Delta x$ über. Es folgt, dass

$$\Delta x = Q^{-1} \Delta b. \quad (4.9)$$

$\| \cdot \|$ bezeichne eine Matrixnorm mit den üblichen Eigenschaften. Dann gilt

$$\|\Delta x\| \leq \|Q^{-1}\| \|\Delta b\|.$$

Unter Beachtung von $\|b\| \leq \|Q\| \|x\|$ folgt eine obere Grenze für den relativen Fehler in x unter Deformation von b ,

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \|Q\| \|Q^{-1}\| \cdot \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}. \quad (4.10)$$

Man bezeichnet den Proportionalitätsfaktor $\|Q\| \|Q^{-1}\|$ als *Konditionszahl* κ der Matrix und nennt Q *schlecht konditioniert* (*gut konditioniert*) falls $\kappa \gg 1$ ($\kappa \approx 1$)³¹.

Numerische Inversion Die Anwendung der inversen Matrix Q^{-1} auf einen Vektor kann numerisch effektiv durch iterative Verfahren wie BiCGstab-Löser berechnet werden. Dabei hängt das Konvergenzverhalten des Algorithmus von der Konditionszahl $\kappa(Q)$ der Matrix Q ab. Diese Operation wird im Rahmen von Monte-Carlo-Simulationen besonders häufig benötigt, um den *Kraftterm* zur Integration der Pseudo-Bewegungsgleichungen zu berechnen (vergleiche den Abschnitt „Molekulardynamik-Schritt“ in Kapitel 4.3). Dabei muss die inverse Fermionmatrix angewendet werden, die für das vorliegende Modell $(4V)^2$ Elemente umfasst, wobei V das Gittervolumen bezeichnet. Mit steigendem Volumen wächst der numerische Aufwand stark und die Inversion nimmt typischerweise den Großteil der Rechenzeit einer Monte-Carlo-Simulation in Anspruch.

Ein Ansatz, um diesen Vorgang³² zu beschleunigen, besteht darin, die Fermionmatrix derart zu manipulieren, daß ihre Konditionszahl sinkt. Dies geht in der Regel mit einer Verringerung der Anzahl an CG-Iterationen einher und führt daher zu einem schnelleren Algorithmus. Die Fermionmatrix Q geht im Pfadintegral als Fermiondeterminante ein. Man betrachte nun eine weitere, invertierbare $4V \times 4V$ Matrix P , sodass

$$\det(Q) = \det(PP^{-1}Q) = \det(P)\det(P^{-1}Q). \quad (4.11)$$

Zur Berechnung des Kraftterms wird nun die Matrix $P^{-1}Q$ herangezogen, die unter Umständen besser konditioniert ist als Q . Der Preis für diese Optimierung besteht in der zusätzlichen Anwendung des *Präkonditionierers* P sowie dem Beitrag $\det P$ zum Pfadintegral. Ein guter Präkonditionierer ermöglicht die Beschleunigung der Monte-Carlo-Simulation im Ganzen. Dies kann im einfachsten Fall durch eine feldu-

³¹Aus der Eigenschaft $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$ folgt sofort, dass $1 \leq \|Q\| \|Q^{-1}\|$.

³²Bezüglich der Anwendung von Präkonditionierungsmethoden in Monte-Carlo-Simulationen geben die Arbeiten [42, 43, 44] Aufschluß.

nabhängige Matrix erreicht werden, die dem *freien Diracoperator*³³ entspricht,

$$P_{xy,ij}^{\alpha\beta} = \delta_{ij}(\gamma^{\alpha\beta}\partial_{xy}^S - m\delta_{xy}\delta^{\alpha\beta}). \quad (4.12)$$

Hier bezeichnet ∂_{xy}^S die symmetrische Gitterableitung sowie m einen freien Parameter zur Optimierung der Konditionszahl. Dieser Präkonditionierer geht aus der Fermionmatrix (3.21) des supersymmetrischen, nichtlinearen Sigma-Modells durch „Einfrieren“ der Felder $\mathbf{u}_x \equiv 0$ hervor. Der Parameter m entspricht dem Erwartungswert von σ , dem bosonischen Feld resultierend aus der 4-Fermi-Wechselwirkung. Da P feldunabhängig ist, liefert $\det(P)$ nur einen konstanten Beitrag zum Pfadintegral und kann daher bei der Bildung von Erwartungswerten ignoriert werden.

„even-odd“-Präkonditionierung Eine weitere Möglichkeit der Präkonditionierung ist das *even-odd*-Verfahren, das auf folgender Beobachtung basiert. Man nehme an, daß Q zerlegt werden kann,

$$Q = 1 - L - U, \quad (4.13)$$

wobei L (U) eine untere (obere) Dreiecksmatrix ist, mit der Blockdarstellung

$$L = \begin{pmatrix} L_{oo} & L_{oe} \\ L_{eo} & L_{ee} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ L_{eo} & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

und gleichermaßen für U ,

$$U = \begin{pmatrix} U_{oo} & U_{oe} \\ U_{eo} & U_{ee} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & U_{oe} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Bedeutung der Indizes e, o wird später klar werden. Nun betrachte man die Matrix $\bar{Q} = (1 - L)^{-1}Q(1 - U)^{-1}$. Man rechnet leicht nach, daß $(1 - L)^{-1} = (1 + L)$ bzw. $(1 - U)^{-1} = (1 + U)$. Dann folgt für \bar{Q} in Blockform,

$$\bar{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ L_{eo} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -U_{oe} \\ -L_{eo} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & U_{oe} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \bar{Q}_{ee} \end{pmatrix}.$$

³³Diese Methode der Präkonditionierung hat sich vor allem in Wess-Zumino und Yukawa-Higgs [45] Modellen als ertragreich bewiesen.

Hierbei ist $\bar{Q}_{ee} = 1 - L_{eo}U_{oe}$. Es gilt daher, daß

$$\begin{aligned} \det(Q) &= \det\left((1-L)(1-L)^{-1}Q(1-U)^{-1}(1-U)\right) \\ &= \underbrace{\det(1-L)}_1 \underbrace{\det\left((1-L)^{-1}Q(1-U)^{-1}\right)}_{\det(\bar{Q})=\det(\bar{Q}_{ee})} \underbrace{\det(1-U)}_1 \\ &= \det(\bar{Q}_{ee}). \end{aligned}$$

Die $4V \times 4V$ Fermionmatrix Q lässt sich im Zuge dieser Prozedur auf die $2V \times 2V$ Matrix \bar{Q}_{ee} reduzieren. Die Konditionszahl dieser Matrix ist Gegenstand einer Untersuchung in Kapitel 5.8. Nun bleibt zu zeigen, ob die Fermionmatrix Q des supersymmetrischen, nichtlinearen Sigma-Modells nach der Vorschrift (4.13) zerlegt werden kann.

Ordnungsschemata Das *even-odd*-Präkonditionierungsschema kann als spezieller Fall der *iLU*-Präkonditionierungsmethode³⁴ aufgefasst werden. Hierbei wird versucht, durch Postulierung von (willkürlichen) Ordnungsschemata in Bezug auf die Gitterindizes die Form (4.13) zu erreichen. Das EO-Schema erhält man nach folgender Konstruktion: Betrachte ein zweidimensionales Gitter³⁵ mit Kantenlängen L_0 , L_1 und eine Fermionmatrix, die nur nächste Nachbarn koppelt. Sind sowohl L_0 als auch L_1 gerade, dann lassen sich die Gitterpunkte $x \in \Lambda$ derart in zwei Untermengen Λ_e (*even*) und Λ_o (*odd*) teilen, daß die Fermionmatrix ausschließlich Gitterpunkte verschiedener Untergitter koppelt (ausgenommen sei hierbei der Selbstwechselwirkungsterm), vergleiche Abbildung 3. Man sieht ein, daß nächste-Nachbar-Kopplung sowie gerade Gitterabmessungen bei periodischen Randbedingungen dazu führen, daß jeder Nachbar eines ausgewählten Gitterpunktes gerade dem komplementären Untergitter angehört. Zunächst betrachte man den *Wilson-Diracoperator* als Fermionmatrix, der dieser Prozedur unterworfen werden kann,

$$\begin{aligned} Q_{xy}^{\alpha\beta} &\equiv M_{xy}^{\alpha\beta} = \beta \left(\gamma_\mu \partial_{xy,\mu}^S + \frac{r}{2} \Delta_{xy} \right) \\ &= \beta \left[\sum_\mu \left(\frac{\gamma_\mu}{2} (\delta_{x+\hat{\mu},y} - \delta_{x-\hat{\mu},y}) + \frac{r}{2} (\delta_{x+\hat{\mu},y} + \delta_{x-\hat{\mu},y} - 2\delta_{xy}) \right) \right] \\ &= -2r\beta \left[\delta_{xy} - \frac{1}{4r} \sum_\mu (\delta_{x+\hat{\mu},y}(r + \gamma_\mu) + \delta_{x-\hat{\mu},y}(r - \gamma_\mu)) \right] \quad (4.15) \\ &\stackrel{!}{=} \text{const} \cdot (1_{xy}^{\alpha\beta} - L_{xy}^{\alpha\beta} - U_{xy}^{\alpha\beta}). \end{aligned}$$

³⁴Details zu möglichen Ordnungsschemata können [44] entnommen werden.

³⁵Die Verallgemeinerung der Konstruktion auf höherdimensionale Gitter ist klar.

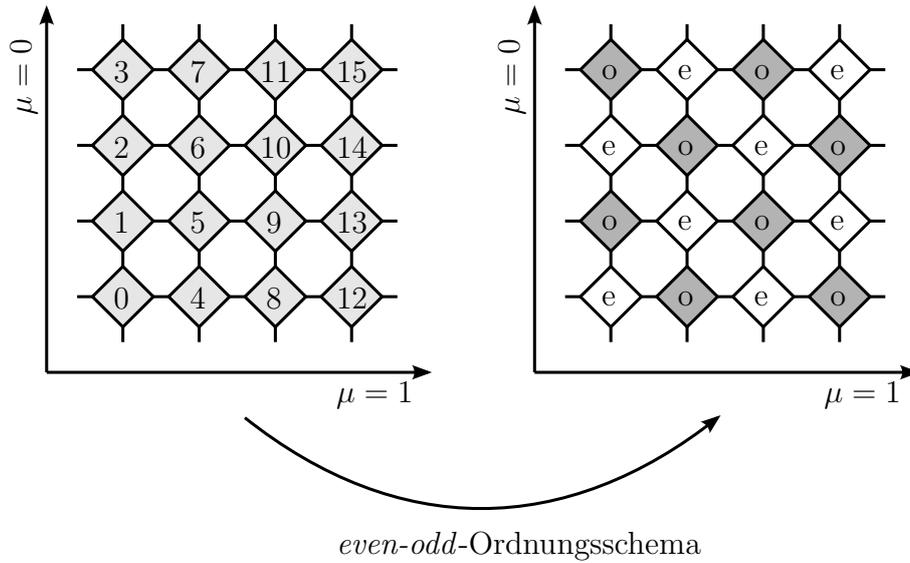


Abbildung 3: Das Ordnungsschema sortiert die Gitterpunkte $x \in \Lambda$ in zwei Untergitter Λ_e, Λ_o derart, daß eine *even-odd*-Präkonditionierung der Fermionmatrix möglich ist. Hierbei ist zu beachten, daß dieses Schema nur bei (periodischen) Gittern mit geraden Kantenlängen anwendbar ist. In diesem Fall gehören die Nachbarn eines ausgewählten Gitterpunktes dem komplementären Untergitter an.

Wie gewünscht, tritt nur nächste-Nachbar-Wechselwirkung auf. Allgemein gilt für die Determinante einer Matrix, daß sie unter Vertauschung zweier Zeilen bzw. zweier Spalten ein Minuszeichen akquiriert. Daraus folgt sofort, daß sich die Determinante bei einer Umsortierung der Gitterindizes nicht ändert, da jeweils zwei Spalten sowie zwei Zeilen getauscht werden. Eine Möglichkeit, die Fermionmatrix explizit zu konstruieren, besteht darin, die Gitterpunkte fortlaufend zu nummerieren und entsprechend anzuordnen. Dabei wird die Konvention gewählt, Gitterpunkte parallel zu den Kanten abzuschreiten, wobei die Richtungen μ auf dem Gitter nacheinander durchlaufen werden (siehe Abbildung 3, links). Die Fermionmatrix koppelt die Gitterpunkte $x, y \in \Lambda$ dann in dieser Reihenfolge,

Q_{xy}	y	0	1	2	...	$V-1$
x	0	Q_{00}	Q_{01}	Q_{02}	...	$Q_{0,V-1}$
	1	Q_{10}	Q_{11}	Q_{12}	...	$Q_{1,V-1}$
	2	Q_{20}	Q_{21}	Q_{22}	...	$Q_{2,V-1}$
	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
	$V-1$	$Q_{V-1,0}$	$Q_{V-1,1}$	$Q_{V-1,2}$...	$Q_{V-1,V-1}$

Unter Ausnutzung der Freiheit zur Umsortierung der Zeilen und Spalten findet sich eine bessere Anordnung. Hat man eine Unterteilung des Gitters in zwei Untergitter Λ_e, Λ_o wie oben beschrieben, so ordnet man die Fermionmatrix zuerst nach Zugehörigkeit zu den jeweiligen Untergittern, danach beliebig. Es ergibt sich eine Blockform,

$$\begin{array}{c|cc}
 Q_{xy} & y & \Lambda_o & \Lambda_e \\
 \hline
 x & & & \\
 \Lambda_o & & Q_{oo} & Q_{oe} \\
 \Lambda_e & & Q_{eo} & Q_{ee}
 \end{array}$$

wobei Q_{oo}, Q_{oe}, Q_{eo} und Q_{ee} beliebig sortiert sind. Da der betrachtete Diracoperator nur Gitterpunkte verschiedener Untergitter koppelt, trägt lediglich der Term $-2r\beta\delta_{xy}$ aus Gleichung (4.15) zu den Matrizen Q_{oo}, Q_{ee} bei. Der konstante Faktor beeinflußt die Bildung von Erwartungswerten nicht und kann daher ignoriert werden, sodaß $Q_{oo} = 1 = Q_{ee}$. Damit nimmt die Fermionmatrix die gewünschte Form an,

$$\begin{array}{c|cc}
 Q_{xy} & y & \Lambda_o & \Lambda_e \\
 \hline
 x & & & \\
 \Lambda_o & & 1 & Q_{oe} \equiv -U_{oe} \\
 \Lambda_e & & Q_{eo} \equiv -L_{eo} & 1
 \end{array}$$

und es gilt $Q = 1 - L - U$. Die Bezeichnung *even-odd*-Präkonditionierung resultiert daraus, daß die Untergitter Λ_e, Λ_o bei geeigneter Konvention gerade den Gitterpunkten mit geradem (*even*) bzw. ungeradem (*odd*) Gitterindex entsprechen. Folglich koppelt die Matrix Q_{eo} Gitterpunkte mit geradem Index an ihre Nachbarn mit ungeradem Index. Die Verwendung von Ordnungsschemata liefert eine Konstruktionsvorschrift, um Fermionmatrizen in Blockform zu überführen. Dabei existiert die Möglichkeit, komplexere Sortierungen mit mehr als zwei Untergittern zu verwenden, oder den einzelnen Untergittern weitere Struktur aufzuerlegen.

Diracoperator auf dem Untergitter Wie im vorhergehenden Abschnitt dargestellt wurde, kann der *Wilson-Diracoperator* $M_{xy}^{\alpha\beta}$ auf die präkonditionierte Matrix $Q' \equiv \bar{Q}_{ee} = 1 - Q_{eo}Q_{oe}$ reduziert werden. Dies entspricht einer „Ausintegration“ der *ungeraden* Gitterpunkte³⁶. Wie sich zeigen wird, resultiert dies in einem Diracoperator mit übernächster-Nachbar-Wechselwirkung, der nur *gerade* Gitterpunkte

³⁶Die Gitterpunkte $x \in \Lambda_o$ ($x \in \Lambda_e$) werden hier als ungerade (gerade) Gitterpunkte bezeichnet.

koppelt. Unter Verwendung von

$$\delta_{xy}^{eo} = \begin{cases} 1 & x \text{ gerade, } y \text{ ungerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.16)$$

folgt, daß

$$Q'_{xy} = \delta_{xy} - \sum_z M_{xz} \delta_{xz}^{eo} M_{zy} \delta_{zy}^{oe}, \quad (4.17)$$

wobei

$$\begin{aligned} \sum_z M_{xz} \delta_{xz}^{eo} M_{zy} \delta_{zy}^{oe} &= \sum_z \left\{ - \sum_\mu [\delta_{x+\hat{\mu},z}(r + \gamma_\mu) + \delta_{x-\hat{\mu},z}(r - \gamma_\mu)] \right\} \cdot \\ &\quad \left\{ - \sum_\nu [\delta_{z+\hat{\nu},y}(r + \gamma_\nu) + \delta_{z-\hat{\nu},y}(r - \gamma_\nu)] \right\} \\ &= \sum_{\mu,\nu=0,1} \left[\delta_{x+\hat{\mu}+\hat{\nu},y}(r + \gamma_\mu)(r + \gamma_\nu) + \delta_{x+\hat{\mu}-\hat{\nu},y}(r + \gamma_\mu)(r - \gamma_\nu) + \right. \\ &\quad \left. \delta_{x-\hat{\mu}+\hat{\nu},y}(r - \gamma_\mu)(r + \gamma_\nu) + \delta_{x-\hat{\mu}-\hat{\nu},y}(r - \gamma_\mu)(r - \gamma_\nu) \right] \\ &= \sum_{\substack{\mu=\pm 0,\pm 1 \\ \nu=\pm 0,\pm 1}} [\delta_{x+\hat{\mu}+\hat{\nu},y}(r + \gamma_\mu)(r + \gamma_\nu)], \end{aligned} \quad (4.18)$$

mit der Abkürzung $\gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu$. Diese Matrix beinhaltet eine zusätzliche Selbstwechselwirkung im Fall $\mu = -\nu$, die verschwindet, falls $r^2 = 1$,

$$(r + \gamma_\mu)(r - \gamma_\mu) = r^2 - \gamma_\mu^2 = r^2 - 1 \stackrel{r^2=1}{=} 0.$$

Der resultierende Dirac-Operator kann als Operator auf zwei verschiedenen Gittern mit doppeltem Gitterabstand aufgefasst werden (vergleiche Abbildung 4) und hat die Form

$$\begin{aligned} Q'_{xy} = \delta_{xy} - \sum_{\mu=0,1} \left[\delta_{x+2\hat{\mu},y} 2(1 + \gamma_\mu) + \delta_{x-2\hat{\mu},y} 2(1 - \gamma_\mu) \right] + \\ \sum_{\substack{\mu,\nu=0,1 \\ \mu \neq \nu}} \left[\delta_{x+\hat{\mu}+\hat{\nu}} (1 + \gamma_\mu)(1 + \gamma_\nu) + 2\delta_{x+\hat{\mu}-\hat{\nu}} (1 + \gamma_\mu - \gamma_\nu) + \right. \\ \left. \delta_{x-\hat{\mu}-\hat{\nu}} (1 - \gamma_\mu)(1 - \gamma_\nu) \right]. \end{aligned}$$

Es ist ebenfalls möglich, die vollständige Fermionmatrix des supersymmetrischen, nichtlinearen Sigma-Modells in dieser Form zu schreiben. Aufgrund der komplizierten Abhängigkeit von bosonischen Freiheitsgraden gelingt die Entkoppelung *gerader*

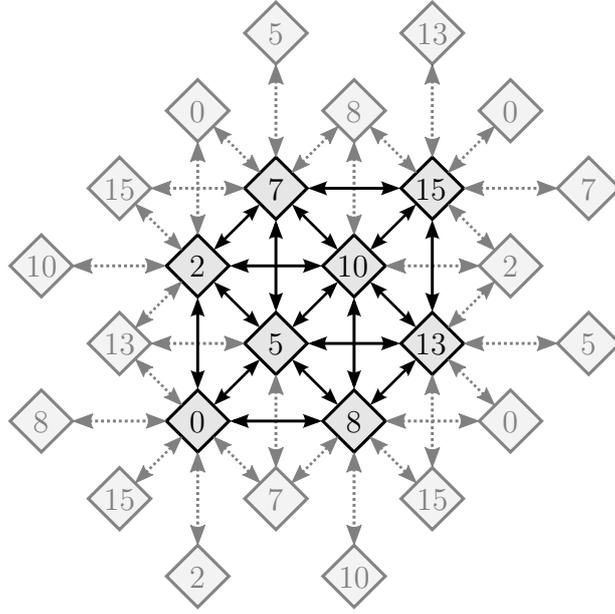


Abbildung 4: Der *even-odd*-präkonditionierte Dirac-Operator Q' beschreibt nächste-Nachbar-Wechselwirkungen auf dem Untergitter $\Lambda_e = \{0, 2, 5, 7, 8, 10, 13, 15\}$ mit doppeltem Gitterabstand, falls die Wilson-Masse $r = \pm 1$ gewählt wird. Die Abbildung zeigt die Wechselwirkung jedes Gitterpunktes mit seinen acht Nachbarn, die den acht übernächsten Nachbarn auf dem vollen Gitter Λ entsprechen. Die Nummerierung der Gitterpunkte ist analog Abb. 3 (links) gewählt.

und *ungerader* Gitterpunkte nicht. Stattdessen trägt der überstrichene Gitterpunkt bei übernächster-Nachbar-Wechselwirkung bei. Detailliertere Erläuterungen hierzu finden sich in Anhang E.

4.6 Observablen auf dem Gitter

Korrelator Die *Green'schen Funktionen* sind Korrelationsfunktionen der Felder und enthalten alle Informationen über die Dynamik einer Quantenfeldtheorie. Insbesondere erlaubt es die Bestimmung der *Zweipunktsfunktion*, physikalische Massen aus einer Monte-Carlo-Simulation zu extrahieren. Im Operatorformalismus lautet die Zustandssumme Z_β ,

$$Z_\beta = \text{Sp} \left[e^{-\beta \hat{H}} \right],$$

mit dem *Hamiltonoperator* \hat{H} des Systems und der inversen Temperatur β . Wie gewohnt ist die Spur des Operators \hat{O} definiert, $\text{Sp} [\hat{O}] = \sum_i \langle i | \hat{O} | i \rangle$, wobei $|i\rangle$ eine vollständige Orthonormalbasis im Hilbertraum der Theorie bezeichnet. Im Übergang zum Pfadintegralformalismus zeigt sich, daß β mit der Ausdehnung des Gitters in zeitlicher Richtung identifiziert werden kann. Unter Verwendung der Eigenwertgleichung

chung $\hat{H} |i\rangle = E_i |i\rangle$ ³⁷ kann die Spur ausgeführt werden,

$$Z_\beta = \sum_i \langle i | e^{-\beta \hat{H}} |i\rangle = \sum_i e^{-\beta E_i} \langle i | i \rangle = \sum_i e^{-\beta E_i}. \quad (4.19)$$

Man definiert den *euklidischen Korrelator* $C(t)$,

$$\begin{aligned} C(t) &= \left\langle \hat{O}_2(t) \hat{O}_1(0) \right\rangle_\beta = \frac{1}{Z_\beta} \text{Sp} \left[e^{-(\beta-t)\hat{H}} \hat{O}_2 e^{-t\hat{H}} \hat{O}_1 \right] \\ &= \frac{1}{Z_\beta} \sum_{i,j} \langle j | e^{-(\beta-t)\hat{H}} \hat{O}_2 |i\rangle \langle i | e^{-t\hat{H}} \hat{O}_1 |j\rangle \\ &= \frac{1}{Z_\beta} \sum_{i,j} e^{-(\beta-t)E_j} \langle j | \hat{O}_2 |i\rangle e^{-tE_i} \langle i | \hat{O}_1 |j\rangle, \end{aligned}$$

mit den (vorerst unbestimmten) Operatoren \hat{O}_1, \hat{O}_2 . Unter Verwendung von Gleichung (4.19) ergibt sich nach Ausklammern eines Faktors $e^{-\beta E_0}$ in Zähler und Nenner, daß

$$C(t) = \frac{\sum_{i,j} \langle j | \hat{O}_2 |i\rangle \langle i | \hat{O}_1 |j\rangle e^{-t\Delta E_i} e^{-(\beta-t)\Delta E_j}}{1 + e^{-\beta\Delta E_1} + e^{-\beta\Delta E_2} + \dots},$$

wobei $\Delta E_i = E_i - E_0$. Im Limes $\beta \rightarrow \infty$ (Temperatur gegen Null) reduziert sich der Nenner auf Eins, während der Zähler nur dann ungleich Null ist, wenn $\Delta E_j = E_j - E_0 = 0$, d.i. $|j\rangle = |0\rangle$. Es bleibt, daß

$$C(t) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \sum_i \langle 0 | \hat{O}_2 |i\rangle \langle i | \hat{O}_1 |0\rangle e^{-t\Delta E_i}. \quad (4.20)$$

Diese Gleichung kann genutzt werden, um die Energieniveaus von Teilchen zu bestimmen. Dabei geht man wie folgt vor: Zur Auswertung der Anregungsenergien des bosonischen n -Feldes wählt man als Operator \hat{O}_1 denjenigen Operator, der eine Anregung erzeugt, $\hat{O}_1 \equiv \hat{n}^\dagger$. Der Operator \hat{O}_2 zerstört eine Anregung, $\hat{O}_2 \equiv \hat{n}$. Die Matrixelemente $\langle i | \hat{n}^\dagger |0\rangle$ verschwinden genau dann, wenn die Energieeigenzustände keine Anregungen des n -Feldes zeigen. Der einfachste Fall eines nichtverschwindenden Überlapps tritt für den Zustand $|n\rangle = \hat{n}^\dagger |0\rangle$ auf, der eine einfache Anregung des Vakuums beinhaltet. Höherangeregte Zustände $|n'\rangle, |n''\rangle, \dots$ tragen ebenfalls zur Summe bei, sodaß

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle \hat{n}(t) \hat{n}^\dagger(0) \rangle_\beta = |\langle n | \hat{n}^\dagger |0\rangle|^2 e^{-tE_n} + |\langle n' | \hat{n}^\dagger |0\rangle|^2 e^{-tE_{n'}} + \dots, \quad (4.21)$$

³⁷Der Einfachheit halber wird angenommen, daß das Spektrum diskret und nichtentartet ist, d.h. $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$. Insbesondere ist der Vakuumzustand $|0\rangle$ eindeutig. Die Energieeigenzustände $|i\rangle$ sind orthogonal und normiert.

mit

$$E_n < E_{n'} < E_{n''} < \dots$$

Für große t sind die Beiträge höherangeregter Zustände exponentiell unterdrückt und das Abfallverhalten des Korrelators wird von der Grundzustandsenergie E_n des betrachteten Teilchens dominiert. Durch Variation der Erzeuger- und Vernichteroperatoren lassen sich so Grundzustandsenergien verschiedener, auch zusammengesetzter, Teilchen bestimmen.

timeslice-Korrelator In der Regel betrachtet man zur Bestimmung der Massen von Teilchen *timeslice*-Operatoren (*Zeitscheiben*-Operatoren). Diese erhält man durch partielle Fouriertransformation³⁸,

$$\hat{n}(p, t) = \frac{1}{\sqrt{L_1}} \sum_{x \in \Lambda} e^{-ipx} \hat{n}(x, t). \quad (4.22)$$

Der Übergang zum Pfadintegralformalismus geht mit einer Ersetzung von Operatoren durch Funktionale einher und man schreibt

$$\begin{aligned} C(p, t) &= \langle \hat{n}(p, t) \hat{n}^\dagger(p, 0) \rangle_\beta \\ &= \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x \frac{1}{L_1} \left(\sum_y e^{-ipy} n_{y,t} \right) \left(\sum_z e^{ipz} n_{z,0} \right) e^{-S_{eff}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\})}. \end{aligned}$$

Hier läuft die Summe über y und z über Gitterpunkte zu einer festgehaltenen Zeitkoordinate t , d.h. über eine *Zeitscheibe* zur Zeit t . Aufgrund des endlichen Gittervolumens ist p auf die Brillouinzone des Gitters beschränkt. Die inverse Temperatur β bestimmt die Ausdehnung des Gitters in zeitlicher Richtung. Offensichtlich ist es im Rahmen einer Gittersimulation nicht möglich, den Grenzwert $\beta \rightarrow \infty$ tatsächlich auszuführen. Wir wollen daher davon ausgehen, daß β derart gewählt wird, daß das Abfallverhalten des Korrelators von der Grundzustandsenergie dominiert wird. Die physikalische Masse folgt für $p = 0$, dann gilt für den Korrelator $C(p = 0, t) \equiv C(t)$, daß

$$C(t) = \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x L_1 \bar{n}(t) \bar{n}(0) e^{-S_{eff}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\})}. \quad (4.23)$$

Hier steht $\bar{n}(t)$ für das raum-gemittelte n -Feld zur festgehaltenen Zeit t (*Zeitscheibe*), $\bar{n}(t) = \frac{1}{L_1} \sum_x n(x, t)$ mit der Länge L_1 des Gitters in räumlicher Richtung. Wie im vorherigen Abschnitt gezeigt, lässt sich auf diese Weise aus dem Abfallverhalten des

³⁸Erläuterungen zu den gewählten Konventionen finden sich in Anhang A.

Korrelators für große Zeiten t die Ruhemasse m des betrachteten Teilchens bestimmen. Unter Ausnutzung der periodischen Randbedingungen in zeitlicher Richtung lassen sich statistische Fluktuationen glätten. Man schreibt kurz,

$$C(t, t') = \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x L_1 \bar{n}(t) \bar{n}(t') e^{-S_{eff}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\})},$$

und bestimmt die Masse aus dem Abfallverhalten des Korrelators

$$C(t) = \sum_{t'} C(t + t', t'). \quad (4.24)$$

Korrelatoren der projizierten Felder Zur Bestimmung der fermionischen Masse geht man analog vor. Wählt man $\hat{O}_1 \equiv \hat{\psi}_i$ und $\hat{O}_2 \equiv \hat{\psi}_i$ zur Erzeugung bzw. Vernichtung eines Fermions mit Index i , dann folgt

$$\begin{aligned} C(t, t') &= \langle \hat{\psi}_i(p=0, t) \hat{\psi}_i(p=0, t') \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x d\boldsymbol{\lambda}_x \sum_{\alpha=0}^1 \sum_{y,z} \frac{1}{L_1} \psi_{(y,t),i}^\alpha \bar{\psi}_{(z,t'),i}^\alpha e^{-S_{bos}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\}) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\lambda}, P\boldsymbol{\lambda})}, \end{aligned}$$

mit $(\boldsymbol{\lambda}, P\boldsymbol{\lambda}) = \sum_{x,y} \sum_{i,j} \sum_{\alpha,\beta} \lambda_{x,i}^\alpha P_{xy,ij}^{\alpha\beta} \lambda_{y,j}^\beta$ und $P = CQ$. Dieser Korrelator kann in Form von Korrelatoren der projizierten Fermionen λ ausgedrückt werden und wird so einer Auswertung zugänglich. Dabei gibt es verschiedene Kombinationsmöglichkeiten. Für $i = 0, \dots, N-1$ gilt

$$\psi_{x,i}^\alpha = 2\rho_x \lambda_{x,i}^\alpha - 4\rho_x^2 \sum_{l=0}^{N-1} u_{x,l} \lambda_{x,l}^\alpha u_{x,i},$$

und für $i = N$ ist

$$\psi_{x,N}^\alpha = -4\rho_x^2 \sum_{k=0}^{N-1} u_{x,k} \lambda_{x,k}^\alpha,$$

sodaß sich folgende Korrelatoren formulieren lassen ($i, j = 0, \dots, N-1$):

$$\begin{aligned} \langle \psi_{x,i}^\alpha \psi_{y,j}^\beta \rangle &= \langle 4\rho_x \lambda_{x,i}^\alpha \lambda_{y,j}^\beta \rho_y - 8\rho_x \lambda_{x,i}^\alpha \sum_l \lambda_{y,l}^\beta u_{y,l} u_{y,j} \rho_y^2 \\ &\quad - 8\rho_x^2 u_{x,i} \sum_k u_{x,k} \lambda_{x,k}^\alpha \lambda_{y,j}^\beta \rho_y + 16\rho_x^2 u_{x,i} \sum_{k,l} u_{x,k} \lambda_{x,k}^\alpha \lambda_{y,l}^\beta u_{y,l} u_{y,j} \rho_y^2 \rangle \\ \langle \psi_{x,i}^\alpha \psi_{y,N}^\beta \rangle &= \langle -8\rho_x \lambda_{x,i}^\alpha \sum_k \lambda_{y,k}^\beta u_{y,k} \rho_y^2 + 16\rho_x^2 u_{x,i} \sum_{k,l} u_{x,k} \lambda_{x,k}^\alpha \lambda_{y,l}^\beta u_{y,k} \rho_y^2 \rangle \\ \langle \psi_{x,N}^\alpha \psi_{y,j}^\beta \rangle &= \langle -8\rho_x^2 \sum_k u_{x,k} \lambda_{x,k}^\alpha \lambda_{y,j}^\beta \rho_y + 16\rho_x^2 \sum_{k,l} u_{x,k} \lambda_{x,k}^\alpha \lambda_{y,l}^\beta u_{y,l} u_{y,j} \rho_y^2 \rangle \\ \langle \psi_{x,N}^\alpha \psi_{y,N}^\beta \rangle &= \langle 16\rho_x^2 \sum_{k,l} u_{x,k} \lambda_{x,k}^\alpha \lambda_{y,l}^\beta u_{y,l} \rho_y^2 \rangle. \end{aligned}$$

Da es sich um Majorana-Fermionen handelt, gilt weiter

$$\langle \psi_{x,i}^\alpha \bar{\psi}_{y,j}^\beta \rangle = \sum_\rho C^{\rho\beta} \langle \psi_{x,i}^\alpha \psi_{y,j}^\rho \rangle,$$

mit der Ladungskonjugationsmatrix C . Die Korrelatoren der projizierten Fermionen können schließlich nach den Regeln der Berezin-Integration ausgewertet werden,

$$\begin{aligned} \langle \lambda_{x,i}^\alpha \lambda_{y,j}^\beta \rangle &= \frac{1}{Z} \int \prod_{z \in \Lambda} d\mathbf{u}_z d\sigma_z d\boldsymbol{\lambda}_z \lambda_{x,i}^\alpha \lambda_{y,j}^\beta e^{-S_{bos}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\}) - \frac{1}{2} \sum_{x,y} \lambda_{x,i}^\alpha P_{xy,ij}^{\alpha\beta} \lambda_{y,j}^\beta} \\ &= \frac{1}{Z} \int \prod_{z \in \Lambda} d\mathbf{u}_z d\sigma_z (P^{-1})_{xy,ij}^{\alpha\beta} e^{-S_{eff}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\})} \\ &= \langle (P^{-1})_{xy,ij}^{\alpha\beta} \rangle_{eff}. \end{aligned}$$

Die Korrelatoren der ursprünglichen Variablen können dann durch entsprechende Zusammensetzung unter Verwendung der inversen Fermionmatrix P^{-1} bestimmt werden.

Chirales Kondensat Das chirale Kondensat ist ein wichtiger Ordnungsparameter, der es erlaubt, spontane Brechung der chiralen Symmetrie zu untersuchen. Die Extraktion des Kondensats aus Simulationsdaten verläuft dabei analog zum fermio-

nischen Korrelator. Schreibt man

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}\psi \rangle &\equiv \frac{1}{2L_0L_1N} \sum_{y \in \Lambda} \sum_{i=0}^N \sum_{\alpha=0}^1 \langle \bar{\psi}_{y,i}^\alpha \psi_{y,i}^\alpha \rangle \\ &= \frac{1}{2L_0L_1N} \sum_{y \in \Lambda} \sum_{i=0}^N \sum_{\alpha=0}^1 \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x d\boldsymbol{\lambda}_x \bar{\psi}_{y,i}^\alpha \psi_{y,i}^\alpha e^{-S_{bos}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\}) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\lambda}, P\boldsymbol{\lambda})}, \end{aligned}$$

so lässt sich dieser Erwartungswert durch Erwartungswerte der projizierten Fermionen ausdrücken,

1.Fall: Für $i = 0, \dots, N-1$ folgt, daß

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}_{y,i}^\alpha \psi_{y,i}^\alpha \rangle &= \langle 4\rho_y \bar{\lambda}_{y,i}^\alpha \lambda_{y,i}^\alpha \rho_y \\ &\quad - 8\rho_y \bar{\lambda}_{y,i}^\alpha \left(\sum_j u_{y,j} \lambda_{y,j}^\alpha \right) u_{y,i} \rho_y^2 - 8\rho_y^2 u_{y,i} \left(\sum_j u_{y,j} \bar{\lambda}_{y,j}^\alpha \right) \lambda_{y,i}^\alpha \rho_y \\ &\quad + 16\rho_y^2 u_{y,i} \left(\sum_j u_{y,j} \bar{\lambda}_{y,j}^\alpha \right) \left(\sum_j u_{y,j} \lambda_{y,j}^\alpha \right) u_{y,i} \rho_y^2 \rangle. \end{aligned}$$

2.Fall: Ist $i = N$, dann gilt

$$\langle \bar{\psi}_{y,N}^\alpha \psi_{y,N}^\alpha \rangle = \langle 16\rho_y^2 \sum_{k,l} u_{y,k} \bar{\lambda}_{y,k}^\alpha \lambda_{y,l}^\alpha u_{y,l} \rho_y^2 \rangle.$$

Diese Erwartungswerte können ausgeführt werden,

$$\begin{aligned} \langle \bar{\lambda}_{y,i}^\alpha \lambda_{y,i}^\alpha \rangle &= \sum_{\rho} C^{\rho\alpha} \langle \lambda_{y,i}^\rho \lambda_{y,i}^\alpha \rangle \\ &= \sum_{\rho} C^{\rho\alpha} \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x d\boldsymbol{\lambda}_x \lambda_{y,i}^\rho \lambda_{y,i}^\alpha e^{-S_{bos}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\}) - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\lambda}, P\boldsymbol{\lambda})} \\ &= \sum_{\rho} C^{\rho\alpha} \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x (P^{-1})_{xx,ii}^{\rho\alpha} e^{-S_{eff}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\})} \\ &= \sum_{\rho} C^{\rho\alpha} \langle (P^{-1})_{xx,ii}^{\rho\alpha} \rangle_{eff}. \end{aligned}$$

Die Matrix P ist antisymmetrisch, so auch die Inverse P^{-1} , d.h.

$$(P^{-1})_{xx,ii}^{00} = (P^{-1})_{xx,ii}^{11} = 0$$

und

$$(P^{-1})_{xx,ii}^{10} = -(P^{-1})_{xx,ii}^{01}.$$

Dann folgt unter Verwendung der expliziten Darstellung der Ladungskonjugationsmatrix C , daß

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha} \langle \bar{\lambda}_{y,i}^{\alpha} \lambda_{y,i}^{\alpha} \rangle &= \sum_{\alpha, \rho} C^{\rho\alpha} \langle \lambda_{y,i}^{\rho} \lambda_{y,i}^{\alpha} \rangle \\ &= -\langle (P^{-1})_{xx,ii}^{01} \rangle_{eff} + \langle (P^{-1})_{xx,ii}^{10} \rangle_{eff} \\ &= 2\langle (P^{-1})_{xx,ii}^{10} \rangle_{eff}. \end{aligned}$$

Bosonische Wirkung Üblicherweise steht die Bildung von Erwartungswerten im Fokus von Monte-Carlo-Simulationen. Aufgrund des Normierungsfaktors Z , der Zustandssumme, ist es dabei erlaubt, konstante Faktoren zu ignorieren. Ist man allerdings an der freien Energie oder der Zustandssumme selbst interessiert, so muss man diese Faktoren beachten. Für die folgende Betrachtung sind zwei Beiträge besonders wichtig: Die Ersetzung des 4-Fermi-Terms durch den Stratonovich-Trick resultiert in einem Faktor $\propto \beta^{V/2}$, während die Ausintegration der Hilfsfelder im Zuge der Projektion der Wirkung mit $\propto \beta^{-V}$ zu Buche schlägt, insgesamt also $\propto \beta^{-V/2}$ (vgl. Kap. 2.2.2). Betrachte nun die Zustandssumme auf dem Gitter,

$$Z = const \cdot \beta^{-V/2} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x e^{-S_{eff}(\{\mathbf{u}_x, \sigma_x\})},$$

mit der effektiven Wirkung

$$S_{eff} = \frac{\beta}{2} \underbrace{\left(\sum_{x,y} n_x(u) K_{xy} n_y(u) + \sum_x \sigma_x^2 \right)}_{S_B} + 2 \sum_x \log(\rho_x) - \frac{1}{2} \log(\det(P)).$$

Die Variation der freien Energie nach β lautet dann

$$\frac{\delta}{\delta\beta}(\log Z) = \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x \left[-\frac{V}{2} \beta^{-V/2-1} e^{-S_{eff}} - \beta^{-V/2} e^{-S_{eff}} \frac{\delta}{\delta\beta}(S_{eff}) \right]. \quad (4.25)$$

Die Fermionmatrix $P = CQ$ enthält lediglich einen Faktor β , sodaß

$$\frac{\delta}{\delta\beta} \frac{1}{2} \log(\det(P)) = \frac{\delta}{\delta\beta} \frac{1}{2} \log(\beta^{2NV} \det(P/\beta)) = \frac{\delta}{\delta\beta} NV \log(\beta \det(P/\beta)) = \frac{NV}{\beta},$$

wobei $2NV$ gerade der Kantenlänge der Fermionmatrix entspricht. Damit ergibt sich, daß

$$\frac{\delta}{\delta\beta} S_{eff} = \frac{1}{2} S_B - \frac{NV}{\beta}.$$

S. Catterall [20] konnte zeigen, daß die erweiterte $\mathcal{N} = 2$ Supersymmetrie des nicht-linearen $O(3)$ Sigma Modells die Konstruktion einer nilpotenten Ladung Q zulässt und in diesem Fall $\frac{\delta}{\delta\beta}(\log Z) = 0$ gilt. Angewandt auf Gleichung (4.25) erhält man

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\delta}{\delta\beta}(\log Z) \\
\Leftrightarrow 0 &= \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x \left[-\frac{V}{2} \beta^{-V/2-1} - \beta^{-V/2} \left(\frac{1}{2} S_B - \frac{2V}{\beta} \right) \right] e^{-S_{eff}} \\
\Leftrightarrow \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x \frac{1}{2} S_B e^{-S_{eff}} &= \frac{1}{\beta} \left(2V - \frac{V}{2} \right) \\
\Leftrightarrow \frac{1}{Z} \int \prod_{x \in \Lambda} d\mathbf{u}_x d\sigma_x S_B e^{-S_{eff}} &= 3 \frac{V}{\beta} \\
\Leftrightarrow \langle S_B \rangle_{eff} &= 3 \frac{V}{\beta}.
\end{aligned}$$

Der einfach zugängliche Erwartungswert von S_B kann also mit der Q -Exaktheit der Wirkung im Kontinuumsimes verknüpft werden und liefert so wichtige Informationen über das Verhalten der Gittertheorie.

4.7 Fehleranalyse

Im Folgenden werden die grundlegenden Techniken zur Bestimmung stochastischer Fehler dargelegt. Dabei orientieren sich die Ausführungen am Buch von *Berg*, [33].

JackKnife Der *JackKnife*-Ansatz zur Fehlerabschätzung ist das Standardverfahren innerhalb von Monte-Carlo-Simulationen. Es erlaubt die *erwartungstreue* Bildung von Mittelwert \bar{f} und Standardabweichung $s(f)$ einer Funktion f der Daten x_i im üblichen Sinne,

$$\bar{f} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^J \tag{4.26}$$

$$s(f) = \sqrt{\frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (f_i^J - \bar{f})^2}, \tag{4.27}$$

wobei f_i^J definiert ist als

$$f_i^J = f(x_i^J) \quad \text{mit} \quad x_i^J = \frac{1}{N-1} \sum_{k \neq i} x_k. \tag{4.28}$$

Im Fall $f_i^J = x_i^J$ erhält man die reguläre Formel zur Bestimmung der Standardabweichung zurück.

Autokorrelation Bei der Bestimmung des *JackKnife*-Fehlers wird angenommen, daß die Daten x_i statistisch unabhängig voneinander sind. In Monte-Carlo-Simulationen ist es allerdings oft der Fall, daß aufeinanderfolgende Konfigurationen einer Markov-Kette korreliert sind. Ein Maß für die Korrelation ist die *Autokorrelationszeit* τ , die von den Simulationsparametern und der gewählten Observablen abhängt. Dabei fasst man die Konfigurationsnummer als *Monte-Carlo-Zeit* auf und definiert mit $t = |i - j|$ die *Autokorrelationsfunktion*

$$C(t) = C_{ij} = \langle (f_i - \langle f_i \rangle)(f_j - \langle f_j \rangle) \rangle = \langle f_i f_j \rangle - \langle f_i \rangle \langle f_j \rangle. \quad (4.29)$$

Im Fall $t = 0$ entspricht sie gerade der Varianz der Observablen f ,

$$C(0) = C_{ii} = \langle (f_i - \langle f_i \rangle)^2 \rangle = s^2(f). \quad (4.30)$$

Für große t zeigt die Autokorrelationsfunktion ein exponentiell abfallendes Verhalten,

$$C(t) \propto e^{-t/\tau}, \quad (4.31)$$

mit der *Autokorrelationszeit* τ . Man betrachte nun die Varianz des Schätzers $\bar{f} = 1/N \sum_i f_i$ zur Bestimmung des Mittelwertes,

$$\begin{aligned} s^2(\bar{f}) &= \langle (\bar{f} - \langle f \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \langle (f_i - \langle f_i \rangle)(f_j - \langle f_j \rangle) \rangle \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} (\langle f_i f_j \rangle - \langle f_i \rangle \langle f_j \rangle) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} C_{ij}. \end{aligned}$$

Die Summe lässt sich auflösen, sodaß

$$s^2(\bar{f}) = \frac{1}{N^2} \left(NC(0) + 2 \sum_{t=1}^{N-1} (N-t)C(t) \right) = \frac{s^2(f)}{N} \left(1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \left(1 - \frac{t}{N} \right) c(t) \right), \quad (4.32)$$

wobei $c(t) = C(t)/C(0)$. Im Fall unkorrelierter Daten ist $s^2(\bar{f}) = s^2(f)/N$, der zusätzliche Faktor wird als *integrierte Autokorrelationszeit* τ_{int} bezeichnet,

$$\tau_{int} = 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \left(1 - \frac{t}{N} \right) c(t). \quad (4.33)$$

Die Bestimmung von τ_{int} ermöglicht die Abschätzung der Varianz des Mittelwertes korrelierter Daten. Da die Bestimmung der Autokorrelationsfunktion sehr aufwendig ist, bietet sich hierzu eine effiziente Methode an, die auf der Anwendung von Renormierungsgruppentransformationen³⁹ basiert („binning“, „blocking“). Gegeben eine Menge⁴⁰ M von Daten x_1, \dots, x_N , betrachte man die transformierte Menge $M' = \{x'_i\}$ mit $x'_i = \frac{1}{2}(x_{2i-1} + x_{2i})$ und $|M'| \equiv N' = N/2$. Wie im Folgenden gezeigt wird, bleiben Mittelwert \bar{x} und Varianz $s^2(\bar{x})$ unverändert. Für \bar{x} gilt:

$$\bar{x}' = \frac{1}{N'} \sum_i x'_i = \frac{2}{N} \sum_i \frac{1}{2}(x_{2i-1} + x_{2i}) = \frac{1}{N} \sum_j x_j = \bar{x},$$

während die Auswertung der Varianz etwas involvierter ist. Das Transformationsverhalten der Autokorrelationsfunktion ist leicht ersichtlich. Für $C'(0) = C'_{ii}$ ergibt sich beispielsweise, daß

$$\begin{aligned} C'_{ii} &= \langle x'_i x'_i \rangle - \langle x'_i \rangle \langle x'_i \rangle \\ &= \frac{1}{4} \left(\langle x_{2i-1} x_{2i-1} + 2x_{2i-1} x_{2i} + x_{2i} x_{2i} \rangle - \langle x_{2i-1} \rangle^2 - 2\langle x_{2i-1} \rangle \langle x_{2i} \rangle - \langle x_{2i} \rangle^2 \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\underbrace{\langle x_{2i-1} x_{2i-1} \rangle - \langle x_{2i-1} \rangle^2}_{C(0)} + 2 \underbrace{\langle x_{2i-1} x_{2i} \rangle - \langle x_{2i-1} \rangle \langle x_{2i} \rangle}_{C(1)} + \underbrace{\langle x_{2i} x_{2i} \rangle - \langle x_{2i} \rangle^2}_{C(0)} \right) \\ &= \frac{1}{2} (C(0) + C(1)). \end{aligned}$$

Allgemein erhält man die Transformationsrelationen

$$C'(t) = \begin{cases} \frac{1}{2}C(0) + \frac{1}{2}C(1) & \text{falls } t = 0, \\ \frac{1}{4}C(2t-1) + \frac{1}{2}C(2t) + \frac{1}{4}C(2t+1) & \text{falls } t > 0. \end{cases} \quad (4.34)$$

³⁹Diese Methode ist seit den 1980er Jahren bekannt und wird in [46] beschrieben.

⁴⁰Der Einfachheit halber werde angenommen, daß $N = 2^n$ mit $n \in \mathbb{N}$.

Angewandt auf Gleichung (4.32) folgt, daß

$$\begin{aligned}
 s^2(\bar{x}') &= \frac{1}{N'^2} \sum_{ij} C'_{ij} = \frac{1}{N'} \left[C'(0) + 2 \sum_{t=1}^{N'-1} \left(1 - \frac{t}{N'}\right) C'(t) \right] \\
 &= \frac{2}{N} \left[\frac{1}{2}C(0) + \frac{1}{2}C(1) + 2 \sum_{t=1}^{N/2-1} \left(1 - \frac{2t}{N}\right) \left(\frac{1}{4}C(2t-1) + \frac{1}{2}C(2t) + \frac{1}{4}C(2t+1) \right) \right] \\
 &= \frac{1}{N} \left[C(0) + C(1) + 2 \left(1 - \frac{2}{N}\right) \left(\frac{1}{2}C(1) + C(2) + \frac{1}{2}C(3) \right) + 2 \left(1 - \frac{4}{N}\right) \cdot \right. \\
 &\quad \left. \left(\frac{1}{2}C(3) + C(4) + \frac{1}{2}C(5) \right) + 2 \left(1 - \frac{6}{N}\right) \left(\frac{1}{2}C(5) + C(6) + \frac{1}{2}C(7) \right) + \dots \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left(1 - \frac{N-2}{N}\right) \left(\frac{1}{2}C(N-3) + C(N-2) + \frac{1}{2}C(N-1) \right) \right] \\
 &= \frac{1}{N} \left[C(0) + 2C(1) \left(1 - \frac{1}{N}\right) + 2C(2) \left(1 - \frac{2}{N}\right) + 2C(3) \left(1 - \frac{3}{N}\right) + \dots \right. \\
 &\quad \left. + 2C_i \left(1 - \frac{i}{N}\right) + \dots + 2C_{N-2} \left(1 - \frac{N-2}{N}\right) + C_{N-1} \left(1 - \frac{N-2}{N}\right) \right].
 \end{aligned}$$

Nach Zufügen einer Null, $0 = \frac{1}{N}C_{N-1}(1 - \frac{N}{N})$, lässt sich die Summe kompakt schreiben und es folgt das gewünschte Ergebnis,

$$s^2(\bar{x}') = \frac{1}{N} \left[C(0) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \left(1 - \frac{i}{N}\right) C_i \right] = s^2(\bar{x}).$$

Aus Gleichung (4.32) ist sofort ersichtlich, daß

$$s^2(\bar{x}) \geq \frac{C(0)}{N} \xrightarrow{\text{blocking}} \frac{\frac{1}{2}(C(0) + C(1))}{N'} = \frac{C(0) + C(1)}{N}.$$

Unter Anwendung der „blocking“-Transformation wächst diese untere Schranke, falls $C(1) \neq 0$, und die „Parameter“ $C(t)$ werden gegen einen Fixpunkt⁴¹ $(C(t)/N) \propto 0$ für $t = 1, \dots, N$ und $(C(0)/N) \propto 1$ getrieben. An diesem Fixpunkt ist $s^2(\bar{x}) = C(0)/N = s^2(x)/N$ und die Varianz des Mittelwertes kann nach der Standardformel berechnet werden. Betrachtet man Observablen $f_i = f(x_i)$, so lässt sich das Verfahren ebenfalls anwenden und unter Zuhilfenahme der *JackKnife*-Methode aus Gleichung (4.27) kann die Varianz des Mittelwertes zuverlässig abgeschätzt werden. Neben dem „blocking“ besteht auch die Möglichkeit, Daten in anderer Form zusam-

⁴¹Einzelheiten zur Bestimmung des Fixpunktes können [46] entnommen werden.

menzufassen, um den Fixpunkt zu erreichen. In praktischen Rechnungen verfährt man nach dem folgenden Schema: Wende die gewünschte Transformation sukzessiv an. Bestimme nach jeder Anwendung den Schätzwert $s^2(\bar{f})$. Der Fixpunkt ist dann erreicht, wenn der Schätzwert stabil wird, d.h. ein Plateau erreicht.

5 Ergebnisse aus der Gittersimulation

Im Folgenden sollen einige Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation vorgestellt werden. Dabei kommen Gittervolumina von 6×6 , 8×8 , 10×10 und 12×12 zum Einsatz, die auf einem Ensemble von modernen Quad-Core Prozessoren simuliert wurden. Diese vergleichsweise kleinen Gitter führen zu *finite-size*-Effekten, auf die an entsprechender Stelle eingegangen wird. Die Auswertung konzentriert sich auf die drei wichtigen, globalen Symmetrien des Modells und ihren Status auf dem Gitter.

5.1 Konsistenztests

Die numerische Implementierung des stereographisch projizierten Modells umfasst viele tausend Zeilen Quelltext, sodaß man die Möglichkeit von Fehlern im Programmcode selbst in Betracht ziehen muss. Es ist daher sinnvoll, Ergebnisse der Simulation Konsistenztests zu unterziehen, deren Ausgang man mit Sicherheit voraussagen kann. Dazu zählen Tests des Algorithmus an sich, wie beispielsweise der Energieerhaltung⁴² im Molekulardynamik-Schritt des Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus, als auch Tests des Modells, wie die Respektierung der Symmetrien. Dabei besteht die Möglichkeit, mit analytischen Ergebnissen⁴³ zu vergleichen, oder durch numerische Auswertung unter Verwendung verschiedener Methoden. Das nichtlineare, supersymmetrische Sigma-Modell wird dementsprechend innerhalb unserer Arbeitsgruppe⁴⁴ durch zwei Gittersimulationen mit unterschiedlicher Diskretisierung untersucht, sowie einer Behandlung im Rahmen der funktionalen Renormierungsgruppe und einer analytischen Betrachtung mittels Instantonlösungen unterzogen. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde eine der beiden Gittersimulationen durchgeführt.

5.2 Pfaff'sche Determinante

Das Einführungskapitel 4.4 verweist mit Gleichung (4.7) auf das *Vorzeichenproblem*, das häufig bei der Simulation von Majorana-Fermionen auftritt und die Effizienz des Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus deutlich verringern kann. Aus einer parallelen Untersuchung des Sigma-Modells unter Verwendung der *SLAC*-Ableitung⁴⁵ ist be-

⁴²Vergleiche hierzu Kapitel 4.3.

⁴³Eine analytisch zugängliche Observable ist beispielsweise die *step scaling* Funktion [47].

⁴⁴Dies umfasst die Arbeitsgruppe Quantenfeldtheorie des Theoretisch-Physikalischen Instituts, Friedrich Schiller Universität Jena.

⁴⁵Die *SLAC*-Ableitung ist eine diskretisierte Form der Ableitung, die es erlaubt, chirale Symmetrie auf dem Gitter zu erhalten. Allerdings verletzt der nichtlokale Charakter dieser Ableitung die Reflektionspositivität, die unter Umständen im Kontinuumslimit wiederhergestellt werden kann. Weitere Details finden sich in dem Grundlagenpapier [48].

kannt, daß die Pfaff'sche Determinante sowohl positive als auch negative Vorzeichen annimmt. Es zeigt sich, daß das Vorzeichen an das chirale Kondensat geknüpft ist: Konfigurationen, denen ein Kondensat nahe der Minima des effektiven Potentials zugeordnet werden kann, resultieren in positivem Vorzeichen, während Konfigurationen, die negatives Vorzeichen aufweisen, nur in der Nähe verschwindenden Kondensats auftreten (siehe Abbildung 5). Die hier verwendete *Wilson*-Ableitung bricht

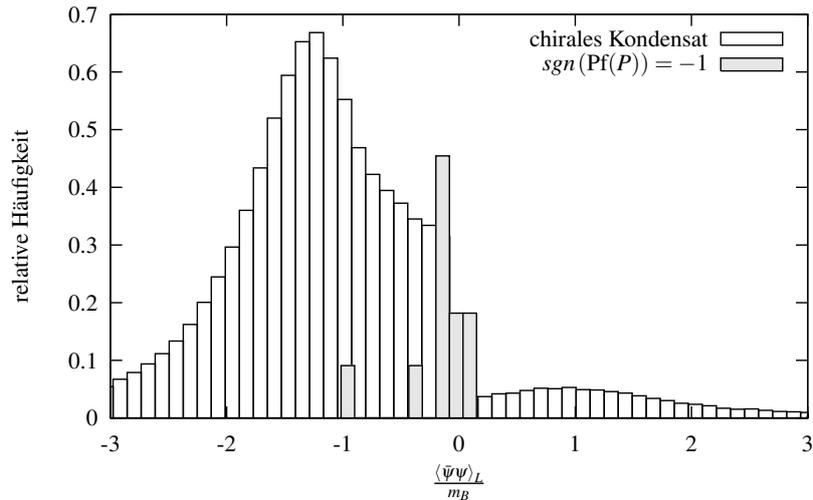


Abbildung 5: Basierend auf einer Kette von 1.000.000 Konfigurationen eines 6x6 Gitters bei sehr hoher Kopplung $\beta = 100$ wurden 944 Konfigurationen mit negativem Vorzeichen gezählt. Diese treten in Blöcken konstanten chiralen Kondensats auf, wobei hohe Autokorrelation zu lediglich elf verschiedenen Blöcken führt. Diese Blöcke sind im Vordergrund grau hinterlegt, während im Hintergrund das Histogramm des räumlich gemittelten chiralen Kondensats über alle Konfigurationen gezeigt wird.

die chirale Symmetrie bei endlichem Gitterabstand. Im Bereich $\beta \in [0.5, 2]$, der für die Auswertung von Gitterobservablen interessant ist, zeigt sich, daß Konfigurationen mit negativem Vorzeichen nicht auftreten (siehe Abbildung 6). Observablen können daher ohne zusätzlichem Rückwichten gemessen werden. Erhöht man die Kopplung, so steigt die Korrelationslänge weit über die Gitterabmessungen hinaus. Im Extremfall ist der Einfluß des Wilson-Terms klein und Konfigurationen tunneln zwischen positivem und negativem Kondensat (vergleiche Kapitel 5.6). Dann finden sich auch unter Verwendung der Wilson-Ableitung Vorzeichenwechsel, die allerdings für praktische Belange unerheblich sind.

5.3 O(3)-Symmetrie

Ordnungsparameter Bereits in Kapitel 2.2 wurde gezeigt, daß der Vakuumerwartungswert des bosonischen n -Feldes als Ordnungsparameter benutzt werden kann,

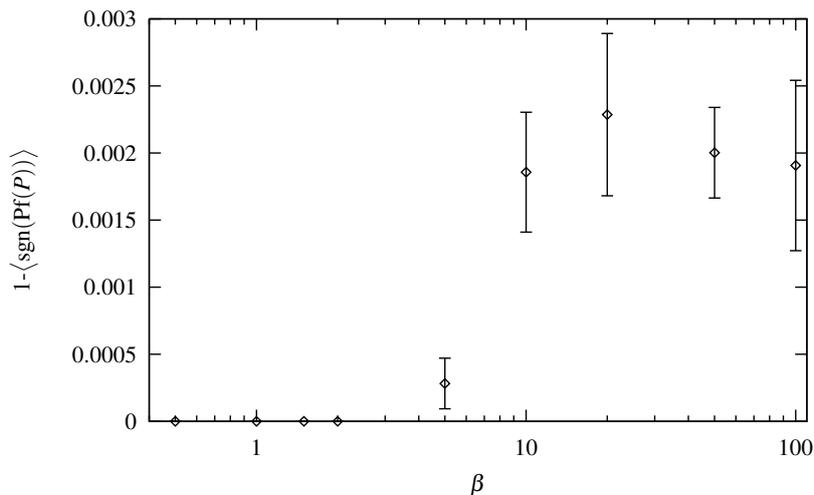


Abbildung 6: Der Erwartungswert des Vorzeichens der Pfaff'schen Determinante nimmt im physikalisch interessanten Bereich $\beta = 0, 5 \dots 2$ exakt den Wert eins an, d.h. die Pfaff'sche Determinante wechselt nie das Vorzeichen. Dieses Verhalten ist in der durch den *Wilson*-Term explizit gebrochenen chiralen Symmetrie begründet. Abweichungen von der bevorzugten Vorzeichenwahl sind sehr unwahrscheinlich und treten nur bei sehr hohen Kopplungen ($\beta \geq 5$) und dann nur über eine geringe Anzahl an Konfigurationen auf. Dargestellte Daten basieren auf Simulationen eines 6×6 Gitters über 500.000 bis 1.000.000 Konfigurationen, abhängig von der Kopplungsstärke.

um den Zustand der $O(3)$ -Symmetrie auf dem Gitter zu charakterisieren. Da die stereographische Projektion des Modells im Hinblick auf eine manifest $O(3)$ -invariante Theorie eingesetzt wurde, ist zu erwarten, daß $\langle n_i \rangle$ für $i = 0, 1, 2$ verschwindet,

$$\langle n_i \rangle \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{für } i = 0, 1, 2.$$

Hierzu betrachte man die Histogramme in Abbildung 7, die die Verteilung des räumlich gemittelten Feldes $\langle n_i \rangle_\Lambda = \frac{1}{L_0 L_1} \sum_{x \in \Lambda} n_{x,i}$ über alle Konfigurationen zeigen. Aus diesen Daten kann das effektive Potential proportional zu Minus dem Logarithmus der absoluten Häufigkeit abgeleitet werden. Man erkennt, daß der Erwartungswert im Mittel über alle Konfigurationen verschwindet (vergleiche dazu Tabelle 1). Im Regime kleinen β 's ist die Korrelation zwischen n -Feldern verschiedener Gitterpunkte gering, sodaß sich eine Entropie-dominierte, d.i. statistisch geprägte, Ausrichtung ergibt. Entsprechend variiert das räumlich gemittelte Feld nah um $\langle \mathbf{n} \rangle_\Lambda \approx 0$. Erhöht man die Kopplung, so erhöht sich ebenfalls die Korrelationslänge und in Analogie zu klassischen statistischen Systemen dominieren Konfigurationen aus der Umgebung minimaler Gesamtenergie. Bei festgehaltener Anzahl an Gitterpunkten schrumpft das physikalische Volumen und über das Gitter verteilte Fluktuationen

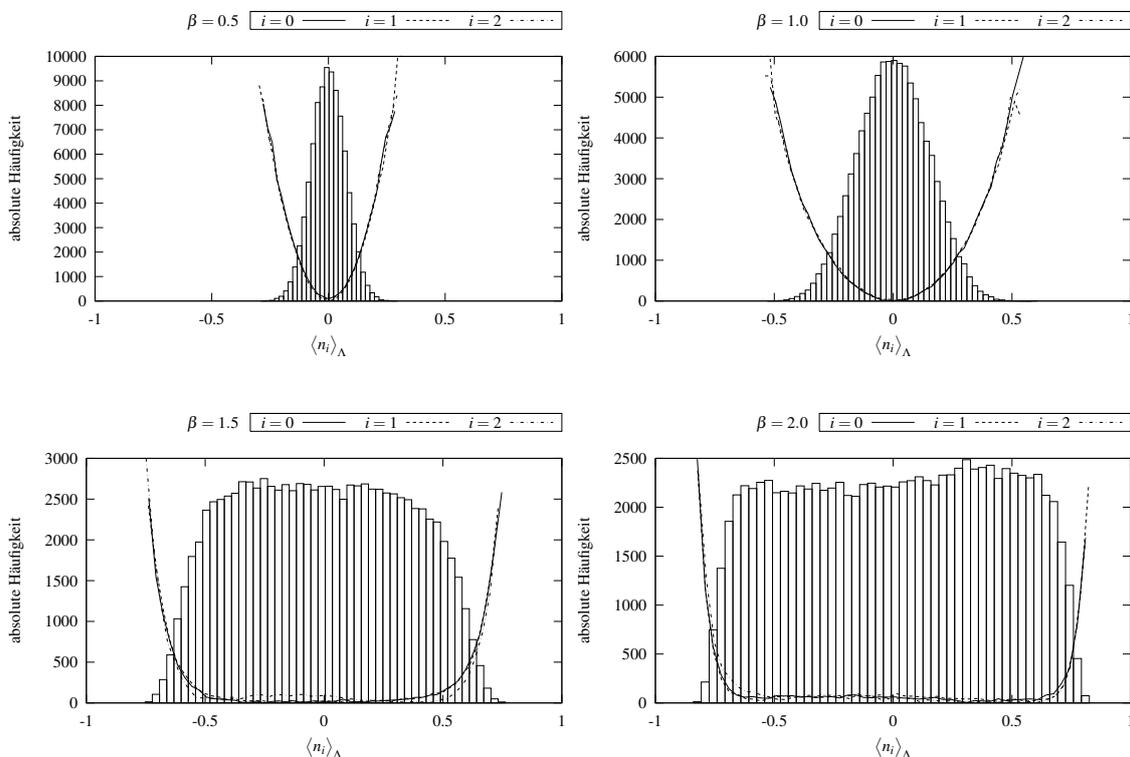


Abbildung 7: Die Histogramme des räumlich gemittelten n_i -Feldes korrespondieren vier verschiedenen physikalischen Volumina. Dabei entspricht hohe Kopplung β geringem Gitterabstand und bei konstanter Anzahl an Gitterpunkten kleinem physikalischen Volumen. Entsprechend zeigt sich eine Verbreiterung der Histogramme, resultierend aus der Glättung räumlicher Fluktuationen. Das Mittel über alle Konfigurationen verschwindet und signalisiert so die Unversehrtheit der $O(3)$ -Symmetrie auf dem Gitter. Dargestellt sind die Histogrammdata der dritten Feldkomponente sowie die effektiven Potentiale aller Feldkomponenten, ausgewertet auf 90.000 Konfigurationen bei einem Gittervolumen von $V = 12 \times 12$.

$\langle n_i \rangle_\Lambda$	$\beta = 0.5$	$\beta = 1.0$	$\beta = 1.5$	$\beta = 2.0$
$i = 0$	$-6.6e-05 \pm 0.0002$	0.0012 ± 0.0006	-0.0105 ± 0.0046	0.0103 ± 0.0087
$i = 1$	$3.2e-06 \pm 0.0001$	$8.5e-05 \pm 0.0006$	-0.0043 ± 0.0058	0.0076 ± 0.0090
$i = 2$	-0.0013 ± 0.0011	0.0017 ± 0.0044	0.0109 ± 0.0240	0.0346 ± 0.0307

Tabelle 1: Der Vakuum Erwartungswert des räumlich gemittelten n_i -Feldes verschwindet zu hoher Genauigkeit. Im Regime großer β 's wächst die Autokorrelationszeit stark an, sodaß die Anzahl unabhängiger Konfigurationen sinkt. Besonders Komponente $i = 2$ weist hohe Korrelationen auf. Es konnte stichprobenartig gezeigt werden, daß eine Erhöhung der Anzahl an Konfigurationen zu einer Verringerung des Fehlers führt, derart, daß das Verschwinden des Erwartungswertes bestätigt wird.

treten zurück. Die Konfigurationen sind von einer zunehmend uniformen Ausrichtung geprägt. Hier zeigt die räumliche Mittelung kaum noch Effekt und so erreicht der Erwartungswert mitunter seine maximale „Auslenkung“ von ± 1 . In diesem Regime ist aufgrund von Autokorrelationen eine hohe Anzahl unabhängiger Konfigurationen nötig, um das Verschwinden des Vakuumerwartungswertes zu bestätigen.

Korrelatoren Eine charakteristische Eigenschaft der $O(3)$ -Symmetrie zeigt sich darin, daß jede Komponente n_i (ψ_i) der bosonischen (fermionischen) Felder der gleichen Wirkung unterworfen ist. Auch die Nebenbedingungen zeichnen keine Richtung im Zielraum aus. Erwartungswerte der Feldkomponenten sollten daher unabhängig von der Feldkomponente an sich sein. Dies lässt sich beispielsweise anhand von Korrelatoren untersuchen. Abbildung 8 zeigt, daß Graphen verschiedener Komponenten im Regime kleiner β 's übereinander liegen. Im Bereich großer β treten Abweichungen auf, falls nicht genügend Konfigurationen zur Mittelung herangezogen werden. Dieses Problem soll im Folgenden genauer erläutert werden.

Autokorrelation Bei der Untersuchung der $O(3)$ -Symmetrie offenbart sich eine hervorgehobene Stellung der dritten Feldkomponente, $n_2 = \rho(1 - \mathbf{u}^2)$. Ihre Erwartungswerte weisen eine im Vergleich zu anderen Komponenten deutlich höhere Autokorrelationszeit auf, siehe Tabelle 2. Dieses Verhalten zeigt sich ebenfalls bei Betrachtung anderer Observablen: Stets ist es die dritte Feldkomponente, die in besonderem Maße korreliert ist. Der Grund für diese Abweichung liegt in einem ungünstigen Zu-

τ	$\beta = 0.5$	$\beta = 1.0$	$\beta = 1.5$	$\beta = 2.0$
$i = 0$	2	2	24	32
$i = 1$	2	2	24	34
$i = 2$	12	64	555	884

Tabelle 2: Die Autokorrelationszeit τ des Vakuumerwartungswertes des räumlich gemittelten n_i -Feldes steigt mit höherer Kopplung. Besonders stark tritt dieser Effekt bei Komponente $i = 2$ auf. Die Werte basieren auf 100.000 Konfigurationen eines 12×12 Gitters.

sammenspiel zwischen stereographischer Projektion und Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus. Betrachte zwei Pseudo-Impulse q_i , die den bosonischen Feldvariablen u_i im Rahmen des Molekulardynamik-Schritts zugewiesen werden. Sie folgen einer *Normalverteilung*⁴⁶ mit Mittelwert null und Varianz eins. Diesen Impulsen korrespon-

⁴⁶Ist die Zufallsgröße X gemäß der Normalverteilung mit Mittelwert μ und Varianz σ^2 verteilt, so schreibt man $X \propto \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Die Zufallsvariable $Y = aX + b$ folgt dann der Verteilung $Y \propto \mathcal{N}(a\mu + b, a^2\sigma^2)$. Die Summe $Z = X + Y$ zweier Zufallsgrößen gehorcht der Normalverteilung $Z \propto \mathcal{N}(\mu_X, \sigma_X^2) + \mathcal{N}(\mu_Y, \sigma_Y^2) \propto \mathcal{N}(\mu_X + \mu_Y, \sigma_X^2 + \sigma_Y^2)$.

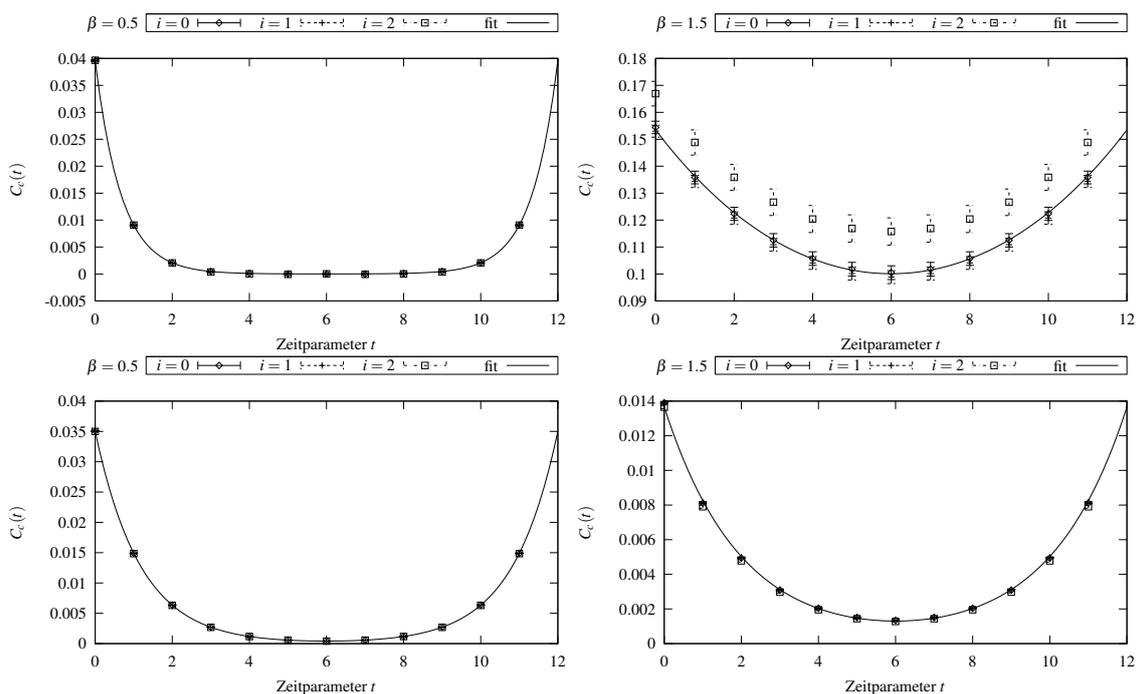


Abbildung 8: **Oben:** Ist die Kopplung β klein, so überdecken sich die verbundenen Korrelatoren $C_c(t)$ der einzelnen bosonischen Feldkomponenten n_i mit hoher Genauigkeit. Erhöht man β , so treten Abweichungen in der dritten Feldkomponente $i = 2$ auf, die mit einer stark anwachsenden Autokorrelation zusammenhängen. Untersuchungen mit verschiedenen Repliken bestätigen dieses Verhalten. **Unten:** Der fermionische Korrelator wird von diesem Problem kaum berührt und zeigt die Gleichartigkeit der Fermionkomponenten. **Beide** Korrelatoren wurden auf 100.000 Konfigurationen eines 12x12 Gitters bestimmt.

dieren drei Impulse p_i der ursprünglichen Feldvariablen n_i . Sie unterliegen ebenfalls einer Normalverteilung, deren Parameter durch Erwartungswerte projizierter Felder gegeben sind. Im Speziellen ergibt sich, daß

$$\begin{aligned} p_0 &\propto \mathcal{N}(0, \sigma_0^2 = \langle 16\rho^4 u_0^2 \mathbf{u}^2 + 4\rho^2 \rangle) \\ p_1 &\propto \mathcal{N}(0, \sigma_1^2 = \langle 16\rho^4 u_1^2 \mathbf{u}^2 + 4\rho^2 \rangle) \\ p_2 &\propto \mathcal{N}(0, \sigma_2^2 = \langle 16\rho^4 \mathbf{u}^2 \rangle). \end{aligned}$$

Eine numerische Auswertung zeigt, daß $\sigma_0^2 = \sigma_1^2 \approx 1,65$ während $\sigma_2^2 \approx 0,8$. Dieser Unterschied führt dazu, daß der Konfigurationsraum bezüglich der dritten Feldkomponente im Zuge der HMC-Aktualisierung langsamer durchschritten wird, so dass aufeinander folgende Konfigurationen eine höhere Korrelation in n_2 aufweisen. Die so generierte Markov-Kette respektiert nichtsdestotrotz die vollständige $O(3)$ -Symmetrie.

Symmetrisierung des HMC-Algorithmus Aufgrund der oben geschilderten Problematik ist es dem bisher verwendeten Algorithmus nicht möglich, alle Komponenten des bosonischen \mathbf{n} -Feldes in gleicher Weise zu behandeln. Zwar liefert er die korrekte asymptotische Verteilung, jedoch führen Autokorrelationseffekte bei endlicher Zahl an Konfigurationen zu Abweichungen. Das beobachtete Verhalten der dritten Feldkomponente kann anhand der Observable $\mathbf{u}^2 = u_0^2 + u_1^2$ studiert werden, denn für konstantes n_2 gilt

$$\text{const} = n_2 = \frac{1 - \mathbf{u}^2}{1 + \mathbf{u}^2} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{u}^2 = \frac{1 - n_2}{1 + n_2} = \text{const.} \quad (5.1)$$

Die Auszeichnung der *dritten* Feldkomponente findet ihren Ursprung in der Vorschrift zur stereographischen Transformation entlang der *dritten* Achse des Zielraums. Diese Wahl ist völlig beliebig und Projektionen auf andere Achsen entsprechen äquivalenten Formulierungen. Betrachte daher Variablen v, w , die durch Projektion entlang der ersten und zweiten Achse hervorgehen. Basierend auf einer wie bisher erzeugten Markov-Kette kann die Autokorrelationszeit der Quadrate $\mathbf{u}^2, \mathbf{v}^2$ und \mathbf{w}^2 verglichen werden. Tabelle 3 und Abbildung 9 bestätigen, daß der Phasenraum nicht gleichmäßig abgeschritten wird, sondern entlang einer nahezu festen Hyperebene, charakterisiert durch $\mathbf{u}^2 \approx \text{const}$. Eine Möglichkeit, das „Einfrieren“ einer Feldkomponente zu verhindern, besteht nunmehr darin, die Projektionsvariablen stetig zu wechseln und die Evolution der Felder zu separieren. Dazu geht man folgendermaßen vor: Beginne mit einer Konfiguration von Feldvariablen u , die

τ	$\beta = 0.5$	$\beta = 1.0$	$\beta = 1.5$	$\beta = 2.0$
\mathbf{u}^2	442	604	856	5568
\mathbf{v}^2	2	2	2	2
\mathbf{w}^2	2	2	2	2

Tabelle 3: Die Autokorrelationszeiten der Quadrate entlang verschiedener Achsen projizierter Felder zeigt ein starkes „Einfrieren“ des Monte-Carlo-Algorithmus entlang einer Hyperebene konstantem \mathbf{u}^2 . Diese Daten wurden auf 500.000 Konfigurationen eines 6x6 Gitters gewonnen.

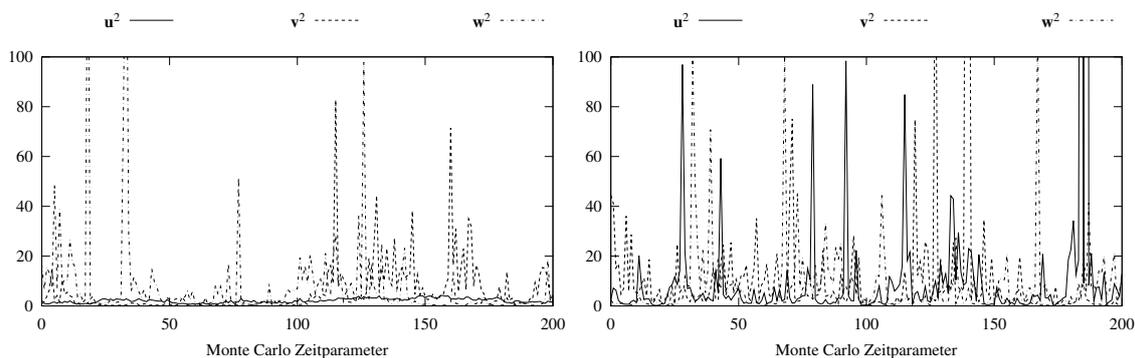


Abbildung 9: **Links** (naiver Algorithmus): Während die Zeitreihen der Quadrate \mathbf{v}^2 und \mathbf{w}^2 deutliche Fluktuationen zeigen, ändert sich \mathbf{u}^2 kaum. **Rechts** (verbessertes Algorithmus): Alle Komponenten fluktuieren gleichermaßen. **Beide** Zeitreihen stellen Daten eines 6x6 Gitters mit Kopplung $\beta = 1$ dar, wobei jeweils identische Parameter zur Erzeugung der Konfigurationen genutzt wurden.

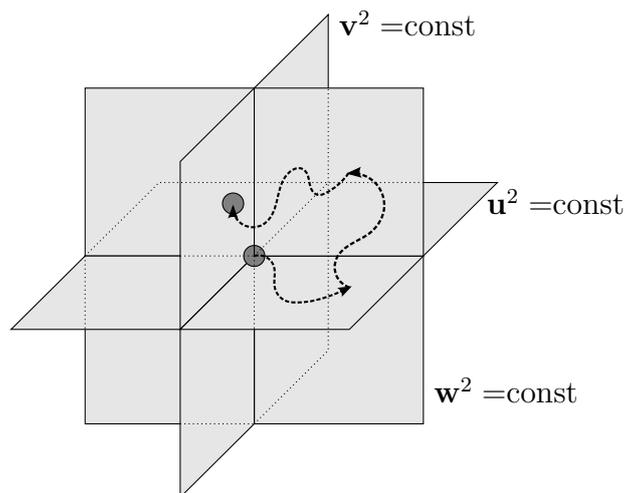


Abbildung 10: Der optimierte Algorithmus durchläuft den Konfigurationsraum in drei Schritten entlang der Ebenen $\mathbf{u}^2 \approx \text{const}$, $\mathbf{v}^2 \approx \text{const}$ sowie $\mathbf{w}^2 \approx \text{const}$ und ermöglicht so die Aktualisierung der Feldkonfigurationen in einer $O(3)$ -symmetrischen Weise.

bezüglich der dritten Achse projiziert wurden und aus einem bereits durchgeführten HMC-Schritt hervorgehen. Weitere Aktualisierungen sind auf eine Ebene konstantem n_2 beschränkt. Rechne daher in Variablen v um, die bezüglich der ersten Achse projiziert wurden. Dies ist ohne Umwege möglich. Aufgrund der $O(3)$ -Symmetrie unterliegen diese Variablen einer formgleichen Wirkung und können alsdann einer regulären HMC-Aktualisierung (d.i. Molekulardynamik mit frischen Impulsen und anschließendem Akzeptanzschritt) unterzogen werden. Dabei verläuft die Trajektorie des Algorithmus' entlang gleich bleibendem n_0 . Nach einem weiteren Wechsel der Variablen kann der Konfigurationsraum in anschließender Aktualisierung längs einer Ebene festem n_1 durchlaufen werden. Durch Transformation in die ursprünglichen u -Variablen und darauf folgendem HMC-Durchlauf schließt sich der Kreis. In die Markov-Kette aufgenommen werden hierbei nur die u -Konfigurationen, um Probleme bei der Bestimmung von Autokorrelationszeiten zu vermeiden. Andere Konfigurationen werden als lediglich temporärer Natur aufgefasst und verworfen. Dieser Dreischritt erfasst alle Komponenten analog und ermöglicht eine gleichmäßige Durchquerung des Phasenraumes. Die im Folgenden dargestellten Ergebnisse basieren auf der Verwendung des verbesserten Algorithmus.

5.4 Bosonische Masse

Der in Kapitel 4.6 beschriebene Zeitscheiben-Korrelator ermöglicht die Bestimmung der Ruhemassen des bosonischen \mathbf{n} -Feldes. Die Extraktion erfolgt mittels einer Reihe von Cosinus Hyperbolicus Fits der Korrelatordaten, bei denen nacheinander die äußersten Punkte des Korrelators, die Anteile höherangeregter Zustände enthalten können, ignoriert werden. Ändert sich die gewonnene Masse unter weiterer Reduktion nicht mehr, so akzeptiert man diesen Wert. Zur Extraktion physikalisch relevanter Informationen ist es insbesondere wichtig, den *Kontinuumslimes* durchzuführen, d.i. den Grenzfall verschwindenden Gitterabstands zu betrachten. Dies wird dann erreicht, wenn typische Skalen des Modells, wie Korrelationslängen der bosonischen und fermionischen Freiheitsgrade, viel größer als die durch den Gitterabstand a gesetzte Skala ist. In der vorliegenden Konstruktion kann dieser Grenzwert vermittels der globalen Kopplung β gesteuert werden. Dabei entspricht hohem β geringer Gitterabstand. Die Berechnung der Kontinuumswerte von Observablen geschieht durch schrittweises Erhöhen der Kopplung *bei konstanter physikalischer Skala*. Ändern sich Erwartungswerte bei weiterem Anstieg nicht mehr, so kann man davon ausgehen, daß der Gitterabstand vernachlässigbar fein ist. Während dieser Prozedur schrumpft das Volumen der physikalischen Box $V_{ph} = L_0 L_1 a^2$ und kann typische Compton-

Wellenlängen der Feldanregungen unterschreiten. Es bleibt die freie Theorie, in der Wechselwirkungen nicht mehr stattfinden. Um den gewünschten Grenzfall zu erhalten, benötigt man demnach große β und große Gittervolumina. Beides ist mit hohem Aufwand an Rechenzeit verbunden, sodass eine Beschleunigung des Algorithmus zu signifikanter Verbesserung der gewonnen Ergebnisse führen kann.

Der bosonischen Masse wird in den folgenden Betrachtungen eine besondere Rolle zuteil. Wie oben beschrieben, erfolgt die Extraktion von Observablen im Kontinuumslimes bei festgehaltener physikalischer Skala. Das supersymmetrische Sigma Modell lässt die Festsetzung durch externe Parameter nicht zu. Die einzig verfügbare Variable β ist durch Erreichen des Kontinuumslimes gebunden. Es bleibt, Skalen des Modells selbst zur Fixierung zu nutzen. Hierbei wurde die Korrelationslänge des bosonischen \mathbf{n} -Feldes gewählt. Dementsprechend ist die Bestimmung dieser Observable im Kontinuumslimes trivial, da festgehalten. Dies ist erlaubt, da aus analytischen Betrachtungen [18] bekannt ist, daß die bosonische Masse einen endlichen Wert annimmt. Die naive Masse $m_B a$, die aus dem Korrelator bestimmt werden kann, trägt die Dimension eines Gitterabstands und verschwindet erwartungsgemäß im Grenzfall hoher Kopplung (vergleiche Abbildung 11).

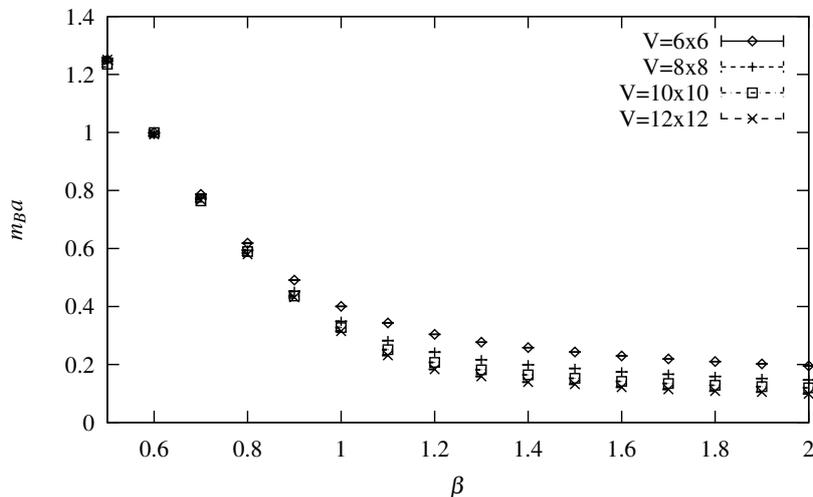


Abbildung 11: Die naive bosonische Masse verschwindet im Grenzfall hoher Kopplung β . Ein einfaches Bild zeichnet die zugehörige Korrelationslänge durch Gitterabmessungen beschränkt, entsprechend einer minimalen Masse. Die Abbildung zeigt, daß dieses Minimum erwartungsgemäß desto höher ist, je kleiner das Gitter.

5.5 Fermionische Masse

Analog dem bosonischen Fall kann auch die fermionische Masse einem entsprechenden Zeitscheiben-Korrelator,

$$C_{ij}^{\alpha\beta}(t) = \left\langle \sum_{x=0}^{L_1-1} \psi_{(x,t),i}^{\alpha} \bar{\psi}_{(x,0),j}^{\beta} \right\rangle,$$

entnommen werden. Hierbei zeigt sich, daß Korrelatoren verschiedener Spinorkomponenten $\alpha \neq \beta$ verschwinden, während die Summe $C_{ii}^{00} + C_{ii}^{11}$ das gewünschte Cosinus Hyperbolicus Verhalten zeigt. In Bezug auf die Indices der Fermionkomponenten verschwinden die Korrelatoren falls $i \neq j$, während sie für $i = j = 0, 1, 2$ erwartungsgemäß übereinander liegen (vergleiche Abbildung 12). Zur Bestimmung des Konti-

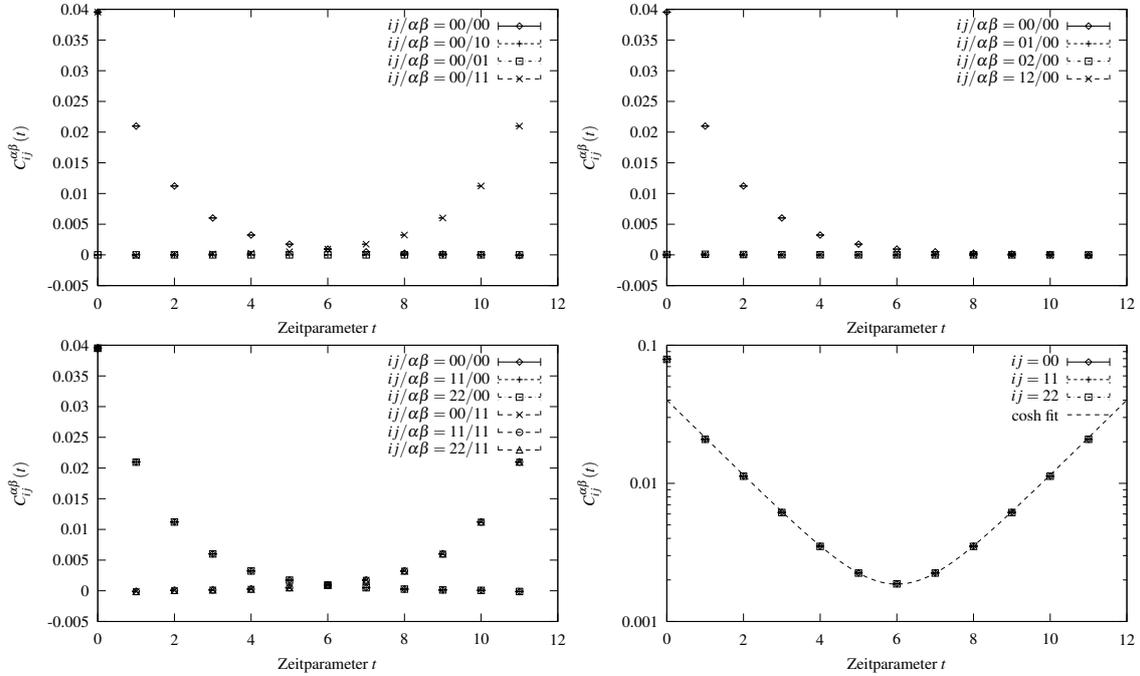


Abbildung 12: Der Fermionkorrelator $C_{ij}^{\alpha\beta}(t)$ wurde für verschiedene Kombinationen $ij/\alpha\beta$ der Komponentenindices i, j und Spinorindices α, β auf 250.000 Konfigurationen eines 12x12 Gitters ausgewertet. Im Fall unterschiedlicher Paarungen $\alpha \neq \beta$ oder $i \neq j$ verschwindet der Korrelator. Die Summe $C_{ii}^{00}(t) + C_{ii}^{11}(t)$ zeigt jeweils identisches Cosinus Hyperbolicus Verhalten für $i = 0, 1, 2$ und bestätigt so die O(3)-Symmetrie der Theorie.

numslimes betrachte man die dimensionslose Observable $m_{Fa}/m_{Ba} = m_F/m_B$, siehe Abbildung 13, wobei m_F aus dem Cosinus Hyperbolicus Fit des Korrelators $\sum_{i=0}^2 \sum_{\alpha=0}^1 C_{ii}^{\alpha\alpha}$ bestimmt wird. Die Figur zeigt deutlich, daß zur Extraktion von Kontinuumswerten kein passender Bereich vorhanden ist. Starke Unterschiede zwi-

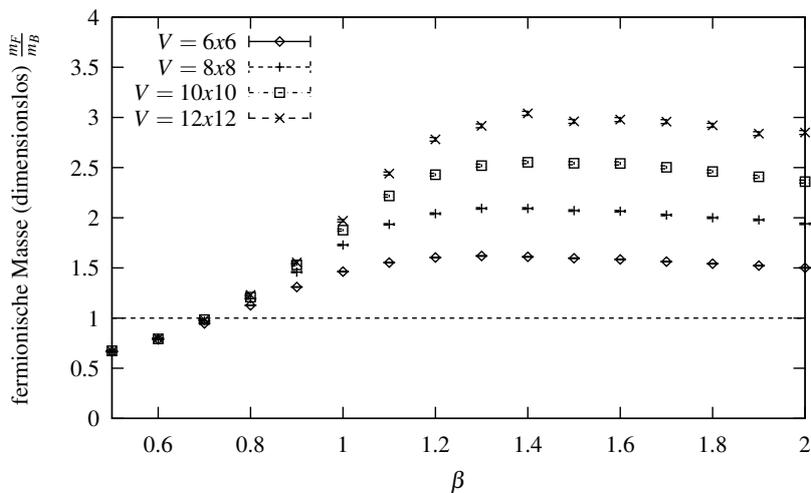


Abbildung 13: Das dimensionslose Verhältnis m_F/m_B erreicht den Kontinuumslimites nicht. Schon bei schwacher Kopplung treten hohe *finite-size*-Effekte auf. Im supersymmetrischen Fall ist eine Entartung des Spektrums zu erwarten, respektive $m_F/m_B = 1$. Die vorliegende Diskretisierung reproduziert dieses Verhalten nicht.

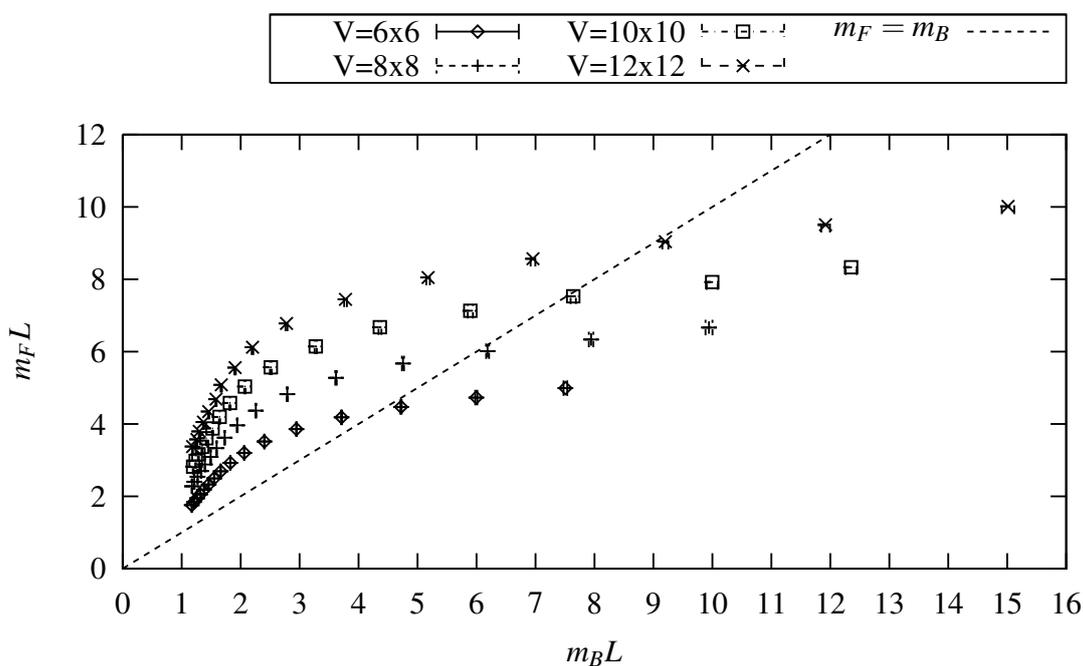


Abbildung 14: Schnitte konstanter Abszisse markieren Bereiche konstanter Boxgröße. Dabei gilt: Je größer das Gitter, desto höher muss die Kopplung gewählt werden, um diesen Bereich nicht zu verlassen. Die dargestellten Punkte entsprechen von rechts nach links den Kopplungen $\beta \in \{0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5, 2\}$.

schen verschiedenen Gittervolumina weisen auf den Einfluß von *finite-size*-Effekten hin, die eine Auswertung erschweren. Eine Alternative stellt die Untersuchung der dimensionslosen Observablen $m_F L = m_F a \cdot L/a$ dar, wobei L die physikalische Länge des Gitters bezeichnet, $L = L_0 a = L_1 a$ (falls $L_0 = L_1$). Diese Größe kann als Ausdehnung des Gitters in Einheiten der fermionischen Compton-Wellenlänge interpretiert werden. Stellt man sie über $m_B L$ dar, so entspricht die Ebene konstanter Abszisse einer festen physikalischen Skala (vergleiche Abbildung 14). Bei festgehaltener Gittergröße $L_0 L_1 = \text{const}$ dient der Kopplungsparameter β dem Durchfahren der gezeigten Kurven. Dabei entspricht hohe Kopplung kleinem physikalischen Volumen. Hier ist der Vergleich mit Daten der SLAC-Implementierung besonders interessant. Zwar sind diese augenscheinlich nicht inkompatibel, eine strenge Gegenüberstellung ist aber (noch) nicht möglich. Im Bereich hoher Kopplung treten aufgrund kleiner Gitter starke *finite-size*-Effekte auf, die eine Auswertung behindern. Geringere Kopplungen zeigen deutliche Gitterartefakte, die sich in einer signifikant erhöhten bosonischen Masse zeigen. Dies ist anhand der SLAC-Daten nicht zu beobachten. Das nutzbare Intervall zwischen kleiner physikalischer Box und Gitterartefakten ist allerdings für einen gründlichen Vergleich zu schmal. Aus den Abbildungen kann eine Tendenz für den Kontinuumslimit abgelesen werden, die die Entartung der Massen ausschließt. Es ist daher anzunehmen, daß die hier verwendete Diskretisierung nicht in der Lage ist, einen supersymmetrischen Kontinuumslimit zu erreichen. Verbindliche Aussagen erfordern aber die Untersuchung größerer Gitter.

5.6 Chirales Kondensat

Anhand analytischer Betrachtungen [18] sowie Daten aus Untersuchungen des Modells vermittelt der SLAC-Ableitung ist eine spontane Brechung der diskreten chiralen Symmetrie zu erwarten. Das chirale Kondensat als zugehöriger Ordnungsparameter akquiriert in diesem Fall einen nicht verschwindenden Vakuumerwartungswert. Aufgrund des begrenzten Gittervolumens existiert eine endliche Tunnelwahrscheinlichkeit zwischen den beiden Grundzuständen des Kondensats, sodass trotzdem ein Verschwinden des Ordnungsparameters möglich ist. Fehldeutungen lassen sich durch Untersuchung des effektiven Potentials vermeiden.

Im vorliegenden Modell induziert die Wilson-Ableitung eine zusätzliche explizite Verletzung der chiralen Symmetrie. Anhand der Histogramme in Abbildung 15 kann eine Überlagerung beider Effekte beobachtet werden. Das dimensionslose Kondensat $\langle \bar{\psi} \psi \rangle / m_B$ eignet sich zur Bestimmung des Kontinuumslimites. Leider zeigt sich auch hier die strenge Limitierung der Simulationen durch geringe Gittervolumina und ein

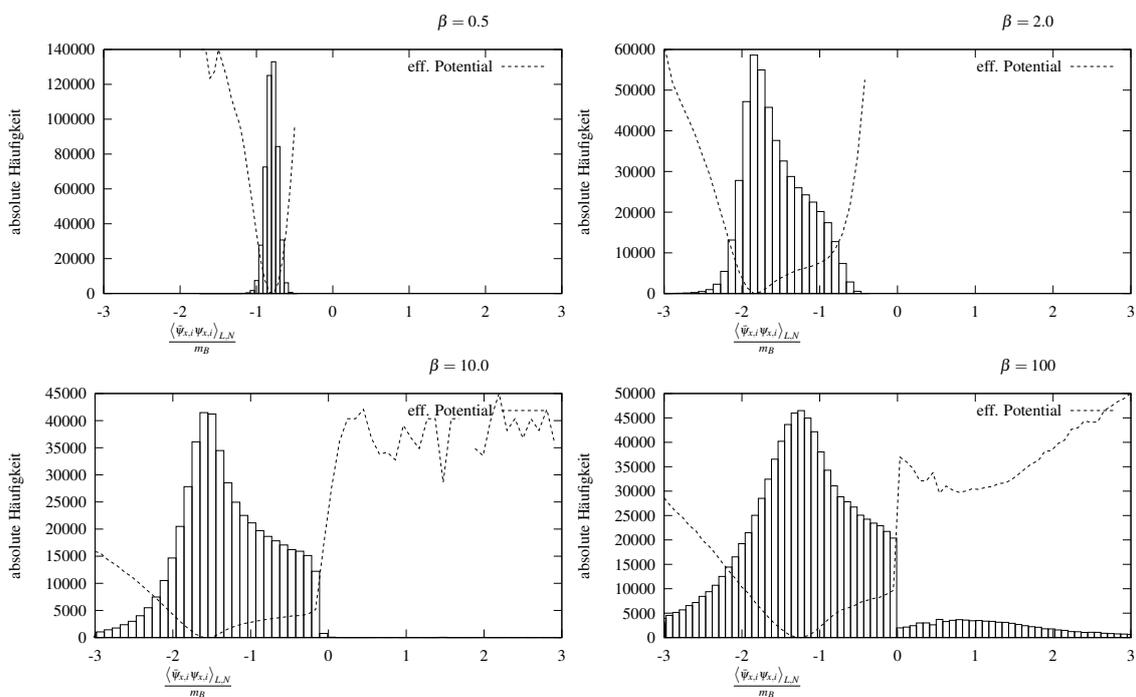


Abbildung 15: Die Histogramme des chiralen Kondensats deuten eine Überlagerung spontan und explizit gebrochener chiraler Symmetrie an. Im Bereich geringer Korrelationslängen dominiert der Einfluß des Wilson-Terms und das System hält sich ausschließlich in einem der beiden Grundzustände auf. Erhöht man β , so zeigt das effektive Potential eine Fortpflanzung zu kleinerem Kondensat. Für $\beta = 100$ erinnert die Form an ein *double well* Potential, typisch für spontan gebrochene Symmetrie mit zwei Grundzuständen, wobei ein Grundzustand vermittels Wilson-Ableitung angehoben wird. Diesem Bild entsprechend demonstriert der Algorithmus bei hoher Kopplung Tunneleffekte zwischen den Grundzuständen. Im Kontinuumsimes kann ein Abklingen der expliziten Verletzung erwartet werden, zurück bleibt die spontan gebrochene Symmetrie. Verwendet wurden jeweils zwischen 250.000 und 1.000.000 Konfigurationen eines 6x6 Gitters, wobei das Kondensat über alle Gitterindizes $x \in \Lambda$ sowie alle Komponenten $i = 0, 1, 2$ gemittelt wurde.

Kontinuumswert ist nicht zu ermitteln. Allerdings kann man tendenziell feststellen, daß im Grenzfall großen Volumens und kleiner Gitterabstände ein nicht verschwindender Wert zu erwarten ist. Dies wird durch Untersuchung des Kondensats bei festgehaltener physikalischer Skala bestätigt, vergleiche Abbildung 16.

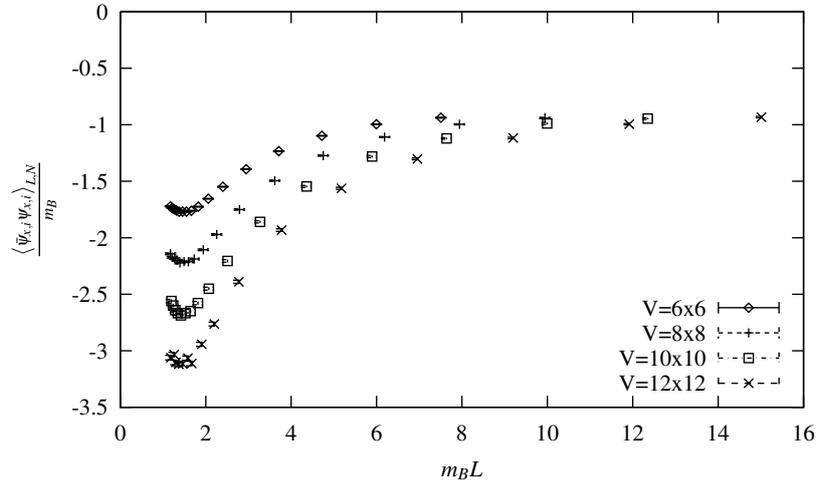


Abbildung 16: Bei festgehaltener physikalischer Skala $m_B L = \text{const}$ offenbart sich ein tendenziell endlicher Wert des dimensionslosen (gemittelten) chiralen Kondensats $\langle \bar{\psi}_{x,i} \psi_{x,i} \rangle_{L,N} / m_B$ im Grenzfall großen Volumens und geringen Gitterabstands.

5.7 Supersymmetrie

Bereits die Untersuchung der bosonischen und fermionischen Massen gab einen Hinweis darauf, daß die hier verwendete Implementierung nicht in der Lage ist, Supersymmetrie auf dem Gitter zu erhalten. In Kapitel 4.6 wurde eine nützliche Identität aufgezeigt, anhand derer die Wiederherstellung der Symmetrie im Kontinuumslimit demonstriert werden kann,

$$\langle S_B \rangle_{eff} = 3 \frac{V}{\beta},$$

mit $S_B = \sum_{x,y \in \Lambda} n_x(u) K_{xy} n_y(u) + \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x^2$. Vermittels Abbildung 17 beobachtet man, daß der gewünschte Wert erreicht wird, allerdings erst bei sehr hohem β . Im Vergleich zu Abbildung 14 offenbart sich, daß das physikalische Volumen in diesem Bereich kleiner als eine bosonische Compton-Wellenlänge ist, sodaß die Theorie effektiv frei wird und die Identität trivial erfüllt. Tiefer gehende Untersuchungen können in dieser Arbeit nicht adressiert werden, stattdessen muss auf den Ausblick verwiesen werden.

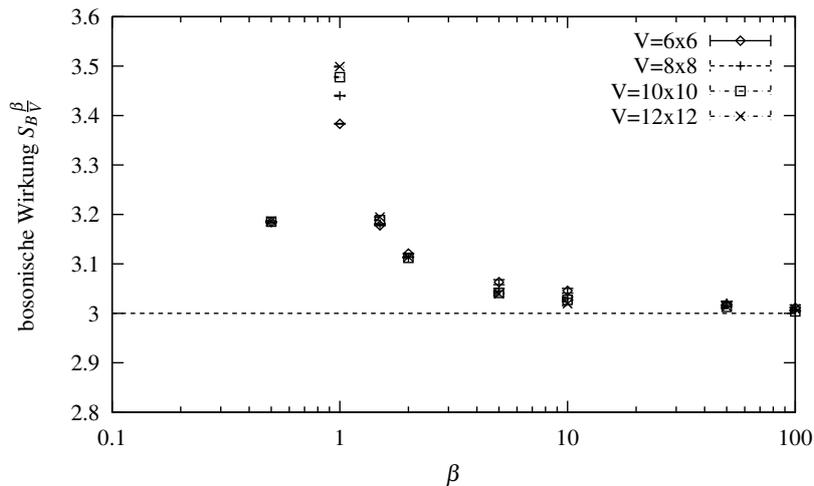


Abbildung 17: Im Fall erweiterter $\mathcal{N} = 2$ Supersymmetrie kann die Identität $\langle S_B \rangle_{eff} = 3 \frac{V}{\beta}$ durch Konstruktion einer nilpotenten Ladung gezeigt werden [20], vergleiche Kapitel 4.6. Hier wird versucht, dies zur Definition eines supersymmetrischen Kontinuumslimes auszunutzen. Zwar gelingt die Erfüllung der Identität, allerdings muss davon ausgegangen werden, daß die Größe der physikalischen Box in diesem Bereich so gering ist, daß keine verbindlichen Aussagen getroffen werden können.

5.8 Spektrum

Im Hinblick auf eine Erweiterung des bisher verwendeten Algorithmus sind Untersuchungen der Konditionszahl der Fermionmatrix von besonderem Interesse. In diesem Zusammenhang wurden zwei verschiedene Ansätze zur Präkonditionierung untersucht, vergleiche Kapitel 4.5. Basierend auf Konfigurationen, die mittels exakter Auswertung der Fermionmatrix generiert wurden, können Konditionszahlen und Eigenwerte unterschiedlicher Präkonditionierungsvorschriften ausgewertet werden. Dabei wurde die Fermionmatrix (3.21) unter Ausklammern exakt invertierbar

	naiv	even-odd	even-odd bei m_{min}
κ	400 (848)	64 (136)	61 (106)
λ_{min}	1.35 (3.44)	0.25 (0.08)	0.26 (0.11)
λ_{max}	85.48 (619.34)	2.10 (2.10)	2.09 (2.06)

Tabelle 4: Basierend auf einer Kette von 10.000 Konfigurationen eines 12x12 Gitters wurden Durchschnittswerte für Konditionszahl κ , kleinstem Eigenwert λ_{min} und größtem Eigenwert λ_{max} unter Verwendung verschiedener Präkonditionierungsschemata bestimmt. Dabei entspricht der jeweils erst angegebene Wert einer Kopplung $\beta = 0.5$ und in Klammern $\beta = 1.5$. Der Wert „even-odd bei m_{min} “ entspricht dem even-odd Verfahren unter zusätzlicher Verwendung des „freien“ Dirac Operators und gibt den jeweils niedrigstmöglichen Wert an.

rer Faktoren betrachtet (vergleiche Gleichung (E.1) in Anhang E). Aufgrund der reinen Messung der Konditionszahlen können an dieser Stelle keine Angaben zum tatsächlichen Performanzgewinn der Präkonditionierungsverfahren gemacht werden, die beobachtete starke Reduktion gibt aber durchaus Anlaß, ein positives Fazit zu ziehen. Dabei überzeugt vor allem das *even-odd* Verfahren, während die Anwendung des „freien“ Dirac Operators nur im Bereich hohen β 's zu einer signifikanten Verbesserung führt. Hier könnte eine Wirkungssteigerung durch Zulassen einer schwachen Feldabhängigkeit derart erreicht werden, daß eine Inversion des Präkonditionierers vergleichsweise günstig bleibt. Optimierungen dieser Art müssen aber direkt unter Verwendung des entsprechenden Algorithmus untersucht werden. Weiterhin könnten beide Verfahren kombiniert werden, was im Bereich großer β eine zusätzliche Verbesserung über das einfache even-odd Verfahren darstellt.

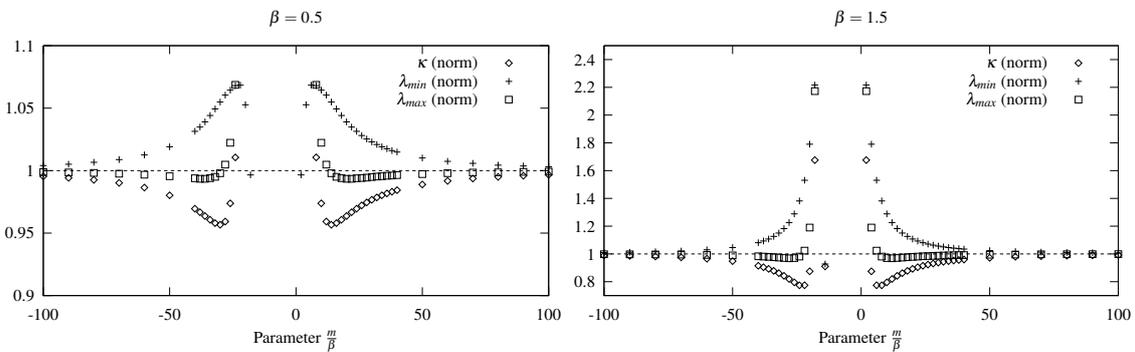


Abbildung 18: Die Abbildung zeigt Durchschnittswerte für Konditionszahl κ , kleinstem Eigenwert λ_{min} und größtem Eigenwert λ_{max} unter Verwendung beider Präkonditionierungsschemata, normiert auf die entsprechenden Werte der einfachen even-odd Präkonditionierung. Verwendet wurden je 10.000 Konfigurationen eines 6×6 Gitters.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Überblick In der Einleitung zu dieser Arbeit wurden Probleme im Zusammenhang mit unserem heutigen Verständnis von der Natur der Elementarteilchen und ihrer Wechselwirkungen aufgezeigt, und welche Bedeutung supersymmetrischen Theorien zur Auflösung dieser Schwierigkeiten beigemessen wird. Dabei ist eine Erweiterung des wohlbekanntes Standardmodells der Elementarteilchen, das sogenannte *Minimal Supersymmetrische Standardmodell*, von besonderem Interesse. Es handelt sich dabei um eine komplizierte, supersymmetrische Eichtheorie in vier Raumzeitdimensionen. Das supersymmetrische nichtlineare $O(3)$ Sigma-Modell in zwei Raumzeitdimensionen, das in Kapitel zwei vorgestellt wurde, teilt eine Reihe wichtiger Eigenschaften mit vierdimensionalen Eichtheorien, verspricht aber einen leichteren Zugang. Hier wurde eine Untersuchung mittels Monte-Carlo-Methoden gewählt, die in den Kapiteln vier und fünf eingehend beschrieben werden und es erlauben, nichtperturbative Effekte zu studieren. Dieser Ansatz sieht sich einigen Problemen konfrontiert, von denen insbesondere drei im Mittelpunkt dieser Arbeit stehen und anhand einer Gittersimulation in Kapitel fünf untersucht wurden. Diese sollen im folgenden rekapituliert werden.

Vorzeichenproblem Anhand einer Betrachtung unter Verwendung der SLAC-Diskretisierung konnte im Vorfeld festgestellt werden, daß diese Art der Diskretisierung ein Vorzeichenproblem aufweist, was zu einem ineffizienten Algorithmus führt. Überdies konnte man Anzeichen dafür finden, daß sich dieses Problem bei größeren Gittern stärker ausprägt und eine Simulation praktisch verhindert. Im Rahmen dieser Diplomarbeit wurde die alternative Wilson-Diskretisierung verwendet und es konnte gezeigt werden, daß in diesem Fall kein Vorzeichenproblem auftritt und eine Simulation auch im Bereich großer Gitter möglich ist. Ein Nachteil dieser Diskretisierung besteht allerdings darin, daß die chirale Symmetrie auf dem Gitter explizit gebrochen wird.

Konditionszahl Moderne Implementationen zur Monte-Carlo-Simulation von Quantenfeldtheorien verwenden einen Pseudofermionalgorithmus. Im Rahmen seiner Dissertation (2005) konnte M. Clark eine Erweiterung vorschlagen, den „*Rational Hybrid Monte Carlo*“-Algorithmus, der zu den leistungsfähigsten Algorithmen zählt, die heute verfügbar sind. Eine Kernkomponente dieses Verfahrens baut auf der schnellen numerischen Inversion großer Matrizen, deren Rechenaufwand durch die Konditionszahl der jeweiligen Matrizen charakterisiert wird. Die bereits erwähnte SLAC-

Diskretisierung unter Verwendung des RHMC-Algorithmus erwies sich als höchst ineffizient, da die Fermionmatrix des vorliegenden Modells sehr hohe Konditionszahlen zeigte. Die vorliegende Arbeit legt die Verwendung eines Präkonditionierungsverfahrens nahe. Dazu wurde eine Studie von zwei verschiedenen Methoden erstellt und es konnte gezeigt werden, daß die Konditionszahl der Fermionmatrix in signifikantem Maß abgesenkt werden kann. Das aufgezeigte Präkonditionierungsschema ist eine wichtige Voraussetzung für die Anwendbarkeit moderner Algorithmen und erst hierdurch wird die effektive Simulation des vorliegenden Modells bei großen Gittern ermöglicht.

O(3) Symmetrie Eine Monte-Carlo-Simulation des nichtlinearen supersymmetrischen O(3) Sigma-Modells wurde bereits 2003 von S. Catterall und S. Ghadab angestrengt. Nach gründlicher Prüfung der von beiden Autoren vorgeschlagenen Diskretisierung im Vorfeld dieser Arbeit wurde allerdings erkannt, daß die Simulationen nicht zu einer O(3) symmetrischen Theorie führen und daher verworfen werden müssen. Angesichts dieser Probleme untersucht die vorliegende Diplomarbeit eine Diskretisierung unter Verwendung der stereographischen Projektion, die eine manifest O(3) invariante Formulierung des Modells auf dem Gitter erlaubt. Dies wird anhand numerischer Daten bestätigt. Weiterhin wird eine Modifizierung des üblichen HMC Algorithmus vorgeschlagen und es kann gezeigt werden, daß diese verbesserte Variante eine deutlich effizientere Generierung von Gitterkonfigurationen erlaubt. Die Modifikation ist dabei nicht auf den hier verwendeten Algorithmus beschränkt, sondern lässt sich problemlos verallgemeinern.

Zusammenfassung In dieser Arbeit konnte eine Diskretisierung aufgezeigt werden, die die Anwendung leistungsfähiger Algorithmen erlaubt und eine bei endlichem Gitterabstand O(3) invariante Theorie ermöglicht. Somit wurden aufgezeigte Probleme gelöst und grundlegende Voraussetzungen für eine tiefgreifendere Untersuchung des vorliegenden Modells geschaffen. Leider muss man für dieses Ergebnis einen Preis zahlen: Die Verwendung der Wilson-Diskretisierung führt einen Zusatzterm ein, der die chirale Symmetrie des Modells explizit bricht und zusätzliche Gitterartefakte aufweist. Weiterhin ist es nicht möglich, eine zu S. Catterall und S. Ghadab analoge Konstruktion einer nilpotenten Ladung durchzuführen, die eine supersymmetrische Theorie im Kontinuumslimit garantiert. Weiterführende Betrachtungen sollten sich daher insbesondere darauf konzentrieren, mögliche Verbesserungen der vorgeschlagenen Wirkung derart zu erreichen, daß Supersymmetrie im Kontinuumslimit wiederhergestellt wird.

A Konventionen

Im Allgemeinen wird die Einstein'sche Summenkonvention verwendet, das heißt, über zweifach auftretende Indizes ist zu summieren,

$$X_a Y_a \equiv \sum_a X_a Y_a.$$

Insbesondere gilt für Raumzeitindizes,

$$\partial^\mu \partial_\mu = \eta_{\mu\nu} \partial_\nu \partial_\mu \equiv \sum_\mu \sum_\nu \eta_{\mu\nu} \partial_\nu \partial_\mu.$$

Der metrische Tensor $\eta_{\mu\nu}$ trägt Lorentz-Signatur $(-1, 1)$ in Minkowski Raumzeit und triviale Signatur $(1, 1)$ in euklidischer Raumzeit,

$$\eta_{\mu\nu}^{Minkowski} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \eta_{\mu\nu}^{Euklid} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Somit hat das Linienelement ds^2 in zweidimensionaler Minkowski-Raumzeit die Gestalt

$$ds^2 = dx^\mu dx_\mu = \eta_{\mu\nu} dx_\nu dx_\mu = dx_1^2 - dt^2.$$

Soweit nicht anders genannt, bezeichnet δ_{xy} das Kroneckerdelta,

$$\delta_{xy} = \begin{cases} 1 & \text{falls } x=y \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

Fouriertransformation Die Fouriertransformation wird derart definiert, daß der Normierungsfaktor gleichmäßig aufgeteilt wird. Gegeben eine *Lebesgue-integrierbare* Funktion $f(x)$ ist die Fouriertransformierte $\mathcal{F}(f)$ gegeben durch

$$\mathcal{F}(f) \equiv f(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx} f(x).$$

Die inverse Transformation nimmt dann die folgende Form an,

$$\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(f)) \equiv f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{ipx} f(p).$$

Hierbei gilt wie üblich, daß

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ipx} = 2\pi\delta(p)$$

mit dem *Dirac-Delta* $\delta(x-y)$. Zur Realisierung von Monte-Carlo-Simulationen führt man ein Raumzeitgitter Λ mit Gitterabstand a ein, sodaß

$$\Lambda = \left\{ n = (n_0, n_1) \mid n_\mu = 0, 1, \dots, L_\mu \right\},$$

und $x_\mu = an_\mu$. Die *verallgemeinerten periodischen Randbedingungen*,

$$f(n + \hat{\mu}L_\mu) = e^{2\pi i\theta_\mu} f(n), \quad (\text{A.2})$$

führen im Fall $\theta_\mu = 0$ ($\theta_\mu = \frac{1}{2}$) auf *periodische* (*antiperiodische*) Randbedingungen. Bedingt durch die Diskretisierung der Raumzeit sind die Impulse des dualen Gitters auf die Brillouinzone beschränkt,

$$\tilde{\Lambda} = \left\{ p = (p_0, p_1) \mid p_\mu = \frac{2\pi}{aL_\mu}(k_\mu + \theta_\mu), k_\mu = -\frac{L_\mu}{2} - 1, \dots, \frac{L_\mu}{2} \right\}.$$

Hierbei ist die Definition der Impulse gerade so gewählt, daß die ebenen Wellen $e^{ip_\mu n_\mu a}$ den Randbedingungen (A.2) genügen. Allgemein gilt, daß

$$\frac{1}{L_\mu} \sum_{k_\mu=-L_\mu/2+1}^{L_\mu/2} e^{i\frac{2\pi}{L_\mu}k_\mu n_\mu} = \frac{1}{L_\mu} \sum_{k_\mu=0}^{L_\mu-1} e^{i\frac{2\pi}{L_\mu}k_\mu n_\mu} = \delta_{n_\mu 0}, \quad (\text{A.3})$$

mit dem *Kronecker-Delta* δ_{xy} . Dann kann man die Fouriertransformation auf dem Gitter definieren,

$$\mathcal{F}(f) \equiv f(p) = \frac{1}{\sqrt{L_0 L_1}} \sum_{n \in \Lambda} f(n) e^{-ipna} \quad (\text{A.4})$$

$$\mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(f)) \equiv f(n) = \frac{1}{\sqrt{L_0 L_1}} \sum_{p \in \tilde{\Lambda}} f(p) e^{ipna}. \quad (\text{A.5})$$

B Majorana Fermionen

Fermionen Der Operatorformalismus der Quantenfeldtheorie ordnet den klassischen, bosonischen Feldern im Rahmen der zweiten Quantisierung Feldoperatoren zu, die spezifische *Kommutator*-Relationen erfüllen. Bei der Untersuchung des freien

Dirac-Feldes stellt sich heraus, dass die Postulierung von Kommutator-Relationen zu einer nichtkausalen Theorie führt. Man sieht ein, dass es zur Konstruktion einer physikalisch sinnvollen Theorie nötig ist, *Antikommutator*-Relationen zu fordern. Dies resultiert in einer kausalen Theorie, deren Anregungen der *Fermi-Dirac-Statistik* genügen (vgl. *Spin-Statistik-Theorem*[49]). Dieser tief greifende Unterschied zwischen bosonischen und fermionischen Freiheitsgraden zeigt sich ebenfalls im Pfadintegralformalismus. Hier werden fermionische Felder durch *Grassmann-Zahlen* λ, η repräsentiert, die eine Grassmann-Algebra bilden,

$$\begin{aligned}\lambda\eta + \eta\lambda &= 0 \\ \lambda^2 = \eta^2 &= 0.\end{aligned}$$

Majorana-Fermionen Im Rahmen einer formalen Konstruktion (vgl. [50]) kann die Relation zwischen Dirac- und Majorana-Fermionen studiert werden. Hierbei zeigt sich, daß die Anzahl der Freiheitsgrade halbiert wird, d.i. zwei Majorana-Freiheitsgrade lassen sich einem Dirac-Freiheitsgrad zuordnen. In zwei Dimensionen findet man eine explizite Darstellung der Majorana Fermionen durch zweikomponentige, reelle grassmannwertige Spinoren λ , mit der Konjugation

$$\bar{\lambda} = \lambda^T C. \tag{B.1}$$

Die *Ladungskonjugationsmatrix* C besitzt die Gestalt

$$C = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{B.2}$$

Entsprechend notiert man die Gamma-Matrizen

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}. \tag{B.3}$$

Rechenregeln Im Folgenden sollen einige Identitäten angegeben werden, die im Umgang mit Majorana Fermionen und damit einhergehend grassmannwertigen Variablen häufig benötigt werden. Aus der expliziten Darstellung der relevanten Ma-

trizen folgt sofort, daß

$$\begin{aligned}
(\gamma^\mu)^2 &= 1 & C^2 &= -1 & (\gamma^5)^2 &= 1 \\
(\gamma^\mu)^T &= \gamma^\mu & C^T &= -C & (\gamma^5)^T &= -\gamma^5 \\
\{\gamma^\mu, C\} &= 0 & [C, \gamma^5] &= 0 & \{\gamma^\mu, \gamma^5\} &= 0,
\end{aligned}$$

für $\mu = 0, 1$. Dies lässt die Berechnung folgender Identitäten für beliebige Majorana Spinoren ϵ, θ zu:

$$\bar{\epsilon}\theta = \epsilon^T C \theta = \sum_{\alpha, \beta} \epsilon^\alpha C^{\alpha\beta} \theta^\beta = \sum_{\alpha, \beta} \theta^\beta C^{\beta\alpha} \epsilon^\alpha = \bar{\theta}\epsilon, \quad (\text{B.4})$$

$$\begin{aligned}
\bar{\epsilon}\gamma^\mu\theta &= \sum_{\alpha, \beta, \rho} \epsilon^\alpha C^{\alpha\beta} \gamma_\mu^{\beta\rho} \theta^\rho = - \sum_{\alpha, \beta, \rho} \epsilon^\alpha \gamma_\mu^{\alpha\beta} C^{\beta\rho} \theta^\rho \\
&= \sum_{\alpha, \beta, \rho} \theta^\rho C^{\beta\rho} \gamma_\mu^{\alpha\beta} \epsilon^\alpha = - \sum_{\alpha, \beta, \rho} \theta^\rho C^{\rho\beta} \gamma_\mu^{\beta\alpha} \epsilon^\alpha = -\bar{\theta}\gamma^\mu\epsilon. \quad (\text{B.5})
\end{aligned}$$

Sehr nützlich ist die Beobachtung, daß

$$\theta\bar{\theta} = \theta\theta^T C = \begin{pmatrix} \theta_0\theta_1 & 0 \\ 0 & \theta_0\theta_1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\bar{\theta}\theta \cdot 1_{2 \times 2}, \quad (\text{B.6})$$

mit $\bar{\theta}\theta = \theta^T C \theta = -2\theta_0\theta_1$. Gegeben sei nun ein reelles Superfeld $\phi(x, \theta)$ auf dem Superraum $\mathbb{S}^{2|2}$ mit reellen Koordinaten x^μ ($\mu = 0, 1$) und grassmannwertigen θ_0, θ_1 , wobei letztere zu einem Majorana Spinor θ zusammengefügt werden. Das Superfeld kann in Potenzen von θ expandiert werden,

$$\phi(x, \theta) = n(x) + i\bar{\theta}\psi(x) + \frac{i}{2}\bar{\theta}\theta f(x).$$

Damit können die Ableitungen nach Theta explizit angegeben werden:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\phi}{\partial\theta^\alpha} &= i \sum_{\beta} C^{\alpha\beta} \psi^\beta(x) + i \sum_{\beta} C^{\alpha\beta} \theta^\beta f(x) \\
&= -i \sum_{\beta} \psi^{\beta}(x) C^{\beta\alpha} - i \sum_{\beta} \theta^\beta C^{\beta\alpha} f(x) = -i\bar{\psi}^\alpha(x) - i\bar{\theta}^\alpha f(x), \quad (\text{B.7})
\end{aligned}$$

sowie

$$\frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}^\alpha} = \frac{\partial\phi}{\partial(\sum_\beta \theta^\beta C^{\beta\alpha})} = i\psi^\alpha(x) + i\theta^\alpha f(x). \quad (\text{B.8})$$

Insbesondere gilt, daß

$$\frac{\partial\phi}{\partial\theta^\alpha} = -i \sum_\beta (\psi^\beta C^{\beta\alpha} + \theta^\beta C^{\beta\alpha}) = - \sum_\beta \frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}^\beta} C^{\beta\alpha} = \sum_\beta C^{\alpha\beta} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}^\beta}, \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}^\alpha} &= i\psi^\alpha + i\theta^\alpha f = -i \sum_\beta (\psi^\beta + \theta^\beta f) (-\delta^{\beta\alpha}) = -i \sum_{\beta,\rho} (\psi^\beta + \theta^\beta f) (C^{\beta\rho} C^{\rho\alpha}) \\ &= \sum_\rho (-i \sum_\beta (\psi^\beta + \theta^\beta f) C^{\beta\rho}) C^{\rho\alpha} = \sum_\rho \frac{\partial\phi}{\partial\theta^\rho} C^{\rho\alpha}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

$$\bar{\epsilon} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}} = i\bar{\epsilon}\psi + i\bar{\epsilon}\theta f = i\bar{\psi}\epsilon + i\bar{\theta}f\epsilon = -\frac{\partial\phi}{\partial\theta}\epsilon. \quad (\text{B.11})$$

Unter einer zweiten Ableitung verstehe man folgendes,

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial\bar{\theta}\partial\bar{\theta}} = \frac{\partial}{\partial\bar{\theta}} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}} = \frac{\partial}{\partial\bar{\theta}} (i\psi + i\theta f) = if = -\frac{\partial}{\partial\bar{\theta}} (-i\bar{\psi} - i\bar{\theta}f) = -\frac{\partial}{\partial\bar{\theta}} \frac{\partial\phi}{\partial\theta} = -\frac{\partial^2\phi}{\partial\bar{\theta}\partial\theta}. \quad (\text{B.12})$$

Insbesondere folgt die wichtige Reihenentwicklung

$$\begin{aligned} \phi(x, \theta) + \bar{\epsilon} \frac{\partial\phi}{\partial\bar{\theta}} + \frac{1}{2} \bar{\epsilon}\epsilon \frac{\partial^2\phi}{\partial\bar{\theta}\partial\bar{\theta}} \\ = n + i\bar{\theta}\psi + \frac{i}{2} \bar{\theta}\bar{\theta}f + i\bar{\epsilon}\psi + i\bar{\epsilon}\theta f + \frac{i}{2} \bar{\epsilon}\epsilon f = n + i(\bar{\theta} + \bar{\epsilon})\psi + \frac{i}{2} (\bar{\theta}\bar{\theta} + 2\bar{\epsilon}\theta + \bar{\epsilon}\epsilon) f \\ = n + i(\bar{\theta} + \bar{\epsilon})\psi + \frac{i}{2} (\bar{\theta} + \bar{\epsilon}) (\theta + \epsilon) f = \phi(x, \theta + \epsilon). \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

C JenLaTT

Die Implementierung der Gittersimulation, die dieser Diplomarbeit zu Grunde liegt, basiert auf dem C++-Framework *JenLaTT*, daß grundlegende Routinen bereit stellt. Dazu gehören Basis-Klassen wie Speicherverwaltung und Applikationshüllen, aber auch höhere Methoden zur Fehleranalyse. In der Programmierphase des Diplomprojekts wurden Klassen und Methoden zur Durchführung des Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus angelegt, aus denen konkrete Algorithmen durch Vererbung hervorgehen. Weiterhin wurden Methoden zur Bestimmung verschiedener Observablen sowie

zugehörige Rumpfmethode implementiert. Alle hier präsentierten Ergebnisse wurden mit diesem Programmcode gewonnen. Dabei wurde objektorientiert vorgegangen, um eine hohe Wiederverwendbarkeit zu gewährleisten.

D Pseudofermionalgorithmus

Die exakte Berechnung der Fermiondeterminante und der inversen Fermionmatrix im Rahmen des hier verwendeten HMC-Algorithmus nehmen mit ca. 95% den Großteil der Rechenzeit zur Erzeugung der Konfigurationen in Anspruch. Um die Simulation größerer Gittervolumina zu ermöglichen, ist es unbedingt nötig, einen effektiveren Algorithmus zur Handhabung der Fermiondeterminante zu finden. Unter Verwendung des bisherigen Algorithmus konnte gezeigt werden, dass effektive Techniken zur Präkonditionierung der Fermionmatrix angewendet werden können. Dies legt die Implementierung eines Algorithmus nahe, der auf einer Umschrift der Fermiondeterminante unter Zuhilfenahme von bosonischen Hilfsfeldern ϕ (den *Pseudofermionen*) beruht. Die bekannte Beziehung,

$$\int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2}\phi^T Q \phi} = \frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{\det Q}}, \quad (\text{D.1})$$

kann benutzt werden, um das Pfadintegral neu zu formulieren,

$$Z = \int \mathcal{D}n \det Q e^{-S_{bos}[n]} = \text{const} \cdot \int \mathcal{D}n \mathcal{D}\phi e^{-(S_{bos}[n] + \frac{1}{2}\phi^T Q^{-T} Q^{-1} \phi)}.$$

Unter Einbeziehung des zusätzlichen, dynamischen Feldes ϕ gelingt die Approximation der Fermiondeterminante, wodurch die Simulation signifikant beschleunigt werden kann. Der tatsächliche Leistungszuwachs hängt hierbei von einem verfügbaren Präkonditionierungsschema ab. Im Rahmen des Pseudofermionalgorithmus ist es zur Evolution der Ausgangskonfiguration ausreichend, die inverse Fermionmatrix auf einen Vektor anzuwenden (Kraftterm). Dies geschieht in der Regel durch ein *BiCGstab* Schema, das das Problem iterativ löst. Die Effizienz des gesamten Algorithmus hängt empfindlich von der Anzahl an Iterationsschritten bis zur Konvergenz ab. Dabei beobachtet man, dass diese Anzahl mit der Konditionszahl der Fermionmatrix zusammenhängt und durch geeignete Präkonditionierung deutlich gesenkt werden kann [44]. Ausgehend von der Formulierung via Pseudofermionen existieren zahlreiche, fortgeschrittenere Algorithmen, beispielsweise der *RHMC*-Algorithmus, der eine Approximation der Fermiondeterminante durch rationale Funktionen nutzt [8].

E *even-odd-Präkonditionierung der vollen Fermionmatrix*

Analog zu Kapitel (4.5) wird das *even-odd-Präkonditionierungsverfahren* auf die vollständige Fermionmatrix angewandt. Durch die zusätzlichen, feldabhängigen Faktoren ergibt sich ein ungleich komplizierterer Ausdruck, der die Entkopplung von *geraden* und *ungeraden* Gitterpunkten nicht zeigt. Die Präkonditionierung verläuft in mehreren Schritten. Ausgehend von der Fermionmatrix

$$Q_{xy,ij}^{\alpha\beta} = 4\rho_x(\delta_{ik} - 2u_{x,i}u_{x,k}\rho_x)M_{xy}^{\alpha\beta}(\delta_{kj} - 2u_{y,k}u_{y,j}\rho_y)\rho_y + 16\rho_x^2u_{x,i}M_{xy}^{\alpha\beta}u_{y,j}\rho_y^2 + 4\beta\rho_x\sigma_x\delta_{xy}\rho_y,$$

mit dem *Wilson-Dirac-Operator*

$$M_{xy} = \beta \left(\gamma^\mu \partial_{xy}^\mu + \frac{r}{2} \Delta_{xy} \right),$$

kann eine Vereinfachung durch Abspaltung der ρ -Terme erreicht werden,

$$\det(Q) = \det \left(\begin{array}{cc} \ddots & 0 \\ & \rho_x \\ 0 & \ddots \end{array} \right) Q' \left(\begin{array}{cc} \ddots & 0 \\ & \rho_y \\ 0 & \ddots \end{array} \right) = \left(\prod_x \rho_x \right)^2 \det(Q'), \quad (\text{E.1})$$

mit

$$Q'_{xy,ij}{}^{\alpha\beta} = 4(\delta_{ik} - 2u_{x,i}u_{x,k}\rho_x)M_{xy}^{\alpha\beta}(\delta_{kj} - 2u_{y,k}u_{y,j}\rho_y) + 16\rho_xu_{x,i}M_{xy}^{\alpha\beta}u_{y,j}\rho_y + 4\beta\sigma_x\delta_{xy}.$$

Gemäß Gleichung (4.15) kann M_{xy} mittels eines geeigneten Ordnungsschemas geschrieben werden als $M = \text{const.}(1 - \bar{L} - \bar{U})$, wobei \bar{L} und \bar{U} der Form aus Gleichung (4.13) entsprechen. Dann folgt, daß Q' in der Form $Q' = D - L - U$ ausgedrückt werden kann, wobei D eine Diagonalmatrix ist,

$$\begin{aligned} D_{xy,ij}^{\alpha\beta} &= 4(\delta_{ik} - 2u_{x,i}u_{x,k}\rho_x)(-2r\beta\delta_{xy}\delta^{\alpha\beta})(\delta_{kj} - 2u_{y,k}u_{y,j}\rho_y) \\ &\quad + 16\rho_xu_{x,i}(-2r\beta\delta_{xy}\delta^{\alpha\beta})u_{y,j}\rho_y + 4\beta\sigma_x\delta_{xy}\delta^{\alpha\beta}\delta_{ij} \\ &= \delta_{xy}\delta^{\alpha\beta} \left[\delta_{ij}(-8r\beta + 4\beta\sigma_x) + 32r\beta u_{x,i}u_{x,j}(\rho_x - \rho_x^2 \sum_k u_{x,k}^2 - \rho_x^2) \right], \end{aligned}$$

mit

$$\rho_x - \rho_x^2 \sum_k u_{x,k}^2 - \rho_x^2 = \rho_x - \rho_x^2 (1 + \sum_k u_{x,k}^2) = \rho_x - \rho_x^2 \frac{1}{\rho_x} = 0.$$

Es bleibt, daß

$$D_{xy,ij}^{\alpha\beta} = \delta_{xy} \delta^{\alpha\beta} \delta_{ij} (-8r\beta + 4\beta\sigma_x).$$

Die Determinante lässt sich nun weiter zerlegen,

$$\det(Q) = \left(\prod_x \rho_x \right)^2 \det(D) \det(D^{-1}Q'). \quad (\text{E.2})$$

Die Matrix $D^{-1}Q'$ besitzt die gewünschte Form, $D^{-1}Q' = 1 - D^{-1}L - D^{-1}U$. Da D diagonal ist, behalten U und L nach Multiplikation ihre Form und $\det(D)$ lässt sich einfach berechnen, sodass sich ein effektives Präkonditionierungsschema ergibt. Wiederum ist es möglich, den präkonditionierten Dirac-Operator auf dem Untergitter zu berechnen. Dabei treten Ausdrücke der folgenden Form auf (vgl. Gleichung 4.17),

$$\sum_z M_{xz} \delta_{xz}^{eo} f_z M_{zy} \delta_{zy}^{oe},$$

wobei $f_z = f(\{u_{z,k}\}_k)$ eine Funktion der bosonischen Felder am Gitterpunkt z ist und δ_{xz}^{eo} , δ_{zy}^{oe} wie in Gleichung 4.16 definiert sind. Die Auswertung dieses Ausdrucks führt auf

$$\sum_z M_{xz} \delta_{xz}^{eo} f_z M_{zy} \delta_{zy}^{oe} = \sum_{\substack{\mu=\pm 0, \pm 1 \\ \nu=\pm 0, \pm 1}} [f_{x+\hat{\mu}}(r + \gamma_\mu)(r + \gamma_\nu) \delta_{x+\hat{\mu}+\hat{\nu},y}].$$

Im Fall $r^2 = 1$ entfällt der zusätzliche Selbstwechselwirkungsterm und es verbleiben die von der Betrachtung des Wilson-Dirac-Operators bekannten Wechselwirkungen, in denen Beiträge der Funktion f_z eingeschoben sind,

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{\mu=\pm 0, \pm 1 \\ \nu=\pm 0, \pm 1}} [f_{x+\hat{\mu}}(r + \gamma_\mu)(r + \gamma_\nu) \delta_{x+\hat{\mu}+\hat{\nu},y}] = \\ \sum_{\mu=0,1} [f_{x+\hat{\mu}} 2(1 + \gamma_\mu) \delta_{x+2\hat{\mu},y} + f_{x-\hat{\mu},y} 2(1 - \gamma_\mu) \delta_{x-2\hat{\mu},y}] + \\ \sum_{\substack{\mu=\pm 0, \pm 1 \\ \nu=\pm 0, \pm 1 \\ |\mu| \neq |\nu|}} [f_{x+\hat{\mu}} (1 + \gamma_\mu)(1 + \gamma_\nu) \delta_{x+\hat{\mu}+\hat{\nu},y}]. \end{aligned}$$

Beide Terme lassen sich einfach visualisieren und sind in Abbildung 19 dargestellt. Nach einer längeren, aber unkomplizierten Rechnung erhält man die präkonditio-

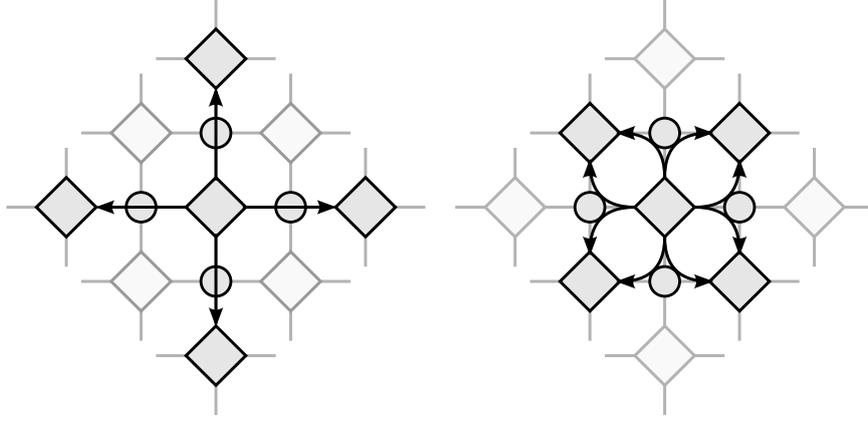


Abbildung 19: Unter Beachtung einer zusätzlichen Feldabhängigkeit geht die Entkopplung von geraden und ungeraden Gitterpunkten bei der *even-odd*-Präkonditionierung verloren. Zur Wechselwirkung zweier gerader Gitterpunkte trägt der jeweils überstrichene, ungerade Gitterpunkt bei.

nierte Fermionmatrix, $Q_p = 1 - D^{-1}LD^{-1}U$. Unter Verwendung der Abkürzung $d_x = (-8r\beta + 4\beta\sigma_x)^{-1}$ ergibt sich, daß

$$\begin{aligned}
 Q_p &= 1 - D^{-1}LD^{-1}U \\
 &= 1 - d_x \left\{ 16\delta_{ij}M_{xz}d_zM_{zy} - 32M_{xy}d_zM_{zy}u_{y,i}u_{y,j}\rho_y - 64M_{xz}d_zu_{z,i}u_{z,j}\rho_z^2M_{zy} \right. \\
 &\quad + 128 \sum_k M_{xz}d_zu_{z,i}u_{z,k}\rho_z^2M_{zy}u_{y,k}u_{y,j}\rho_y + 64M_{xz}d_zu_{z,i}(2\rho_z - 1)\rho_zM_{zy}u_{y,j}\rho_y \\
 &\quad - 32u_{x,i}u_{x,j}\rho_xM_{xz}d_zM_{zy} + 64u_{x,i} \sum_m u_{x,m}\rho_xM_{xz}d_zM_{zy}u_{y,m}\rho_yu_{y,j} \\
 &\quad + 128u_{x,i} \sum_m u_{x,m}\rho_xM_{xz}d_zu_{z,m}u_{z,j}\rho_z^2M_{zy} \\
 &\quad - 256 \sum_{k,m} u_{x,i}u_{x,m}\rho_xM_{xz}d_zu_{z,m}u_{z,k}\rho_z^2M_{zy}u_{y,k}u_{y,j}\rho_y \\
 &\quad - 128 \sum_m u_{x,i}u_{x,m}\rho_xM_{xz}d_z(2\rho_z - 1)\rho_zu_{z,m}M_{zy}u_{y,j}\rho_y \\
 &\quad + 64\rho_xu_{x,i}M_{xz}d_z(2\rho_z - 1)\rho_zu_{z,j}M_{zy} \\
 &\quad - 128 \sum_m \rho_xu_{x,i}M_{xz}d_zu_{z,m}(2\rho_z - 1)\rho_zM_{zy}u_{y,m}u_{y,j}\rho_y \\
 &\quad \left. + 256\rho_xu_{x,i}M_{xz}d_z(1 - \rho_z)\rho_zM_{zy}u_{y,j}\rho_y \right\},
 \end{aligned}$$

wobei $x, y \in \Lambda_e$ und $z \in \Lambda_o$. Hier bezeichnet M_{xy} den Wilson-Dirac-Operator. Es ist möglich, dieses *even-odd*-Schema mit der Präkonditionierungsmethode durch den „freien Dirac-Operator“ (vgl. Gleichung 4.12) zu kombinieren. Ein möglicher Ansatz besteht darin, den freien Dirac-Operator mittels *even-odd*-Schema zu bearbeiten und die resultierende Matrix auf Q_p anzuwenden.

Literatur

- [1] E. Witten, Phys. Rev. D **16**, 2991 (1977).
- [2] P. D. Vecchia und S. Ferrara, Nuclear Physics B **130**, 93 (1977).
- [3] E. Witten, Not.Amer.Math.Soc. **45**, 1124 (1998).
- [4] R. Haag, J. T. Lopuszanski, und M. Sohnius, Nuclear Physics B **88**, 257 (1975).
- [5] N. Arkani-Hamed, D. P. Finkbeiner, T. R. Slatyer, und N. Weiner, Phys. Rev. **D79**, 015014 (2009).
- [6] C. Amsler *et al.*, Physics Letters B **667**, 1 (2008), Review of Particle Physics.
- [7] M. F. Sohnius, Physics Reports **128**, 39 (1985).
- [8] M. A. Clark, PoS **LAT2006**, 004 (2006).
- [9] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields, Volume 3 Supersymmetry* (Cambridge University Press, 2000).
- [10] H. Kalka und G. Soff, *Supersymmetrie* (Teubner Verlag, 1997).
- [11] A. Salam und J. Strathdee, Nuclear Physics B **76**, 477 (1974).
- [12] F. A. Berezin, *The method of second quantization* (Academic Press, New York,, 1966).
- [13] B. Zumino, Physics Letters B **87**, 203 (1979).
- [14] O. Alvarez, Phys. Rev. D **17**, 1123 (1978).
- [15] R. Shankar und E. Witten, Phys. Rev. D **17**, 2134 (1978).
- [16] E. Witten, Nuclear Physics B **202**, 253 (1982).
- [17] S. Cecotti und L. Girardello, Physics Letters B **110**, 39 (1982).
- [18] J. Evans und T. Hollowood, Nuclear Physics B **352**, 723 (1991).
- [19] E. Witten, Nuclear Physics B **149**, 285 (1979).
- [20] S. Catterall und S. Ghadab, JHEP **05**, 044 (2004).
- [21] S. Catterall und S. Ghadab, JHEP **10**, 063 (2006).

- [22] N. D. Mermin und H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [23] M. E. Peskin und D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory* (Westview Press, 1995).
- [24] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields, Volume 1 Foundations* (Cambridge University Press, 1995).
- [25] A. S. Wightman, *Phys. Rev.* **101**, 860 (1956).
- [26] R. P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 367 (1948).
- [27] I. M. Gel'fand und A. M. Yaglom, *Journal of Mathematical Physics* **1**, 48 (1960).
- [28] K. Osterwalder und R. Schrader, *Communications in Mathematical Physics* **31**, 83 (1973).
- [29] H. J. Rothe, *Lattice Gauge Theories: An Introduction*, third ed. (World Scientific Publishing Company, 2005).
- [30] T. Kästner, G. Bergner, S. Uhlmann, A. Wipf, und C. Wozar, *Phys. Rev.* **D78**, 095001 (2008).
- [31] S. Catterall, D. B. Kaplan, und M. Unsal, *Phys. Rept.* **484**, 71 (2009).
- [32] I. Montvay und G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice* (Cambridge University Press, 1997).
- [33] B. A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and their Statistical Analysis* (World Scientific Publishing Company, 2004).
- [34] C. Gattringer und C. B. Lang, *Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation* (Springer, 2009).
- [35] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, und E. Teller, *The Journal of Chemical Physics* **21**, 1087 (1953).
- [36] R. H. Swendsen und J.-S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
- [37] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton, und D. Roweth, *Physics Letters B* **195**, 216 (1987).
- [38] G. Parisi und Y.-S. Tun, *Science in China Series A* **24**, 483 (1981).

- [39] D. J. E. Callaway und A. Rahman, Phys. Rev. Lett. **49**, 613 (1982).
- [40] I. P. Omelyan, I. M. Mryglod, und R. Folk, Computer Physics Communications **151**, 272 (2003).
- [41] S. Catterall und S. Karamov, Physics Letters B **528**, 301 (2002).
- [42] R. Gupta *et al.*, Phys. Rev. D **40**, 2072 (1989).
- [43] S. Fischer *et al.*, Comp. Phys. Commun. **98**, 20 (1996).
- [44] M. J. Peardon, (2000), arXiv:0011.080.
- [45] P. Gerhold, (2010), arXiv:1002.2569.
- [46] H. Flyvbjerg und H. G. Petersen, The Journal of Chemical Physics **91**, 461 (1989).
- [47] M. Lüscher, P. Weisz, und U. Wolff, Nuclear Physics B **359**, 221 (1991).
- [48] S. D. Drell, M. Weinstein, und S. Yankielowicz, Phys. Rev. D **14**, 1627 (1976).
- [49] R. F. Streater und A. S. Wightman, *PCT, Spin and Statistics, and All That* (Princeton University Press, 2000).
- [50] I. Montvay, (2001), arXiv:0108.011.

Danksagung

Besonderem Dank bin ich Prof. Andreas Wipf verpflichtet, der mir nicht nur die Möglichkeit geboten hat, dieses Thema im Rahmen meiner Diplomarbeit zu bearbeiten, sondern auch die Integration aller Diplomstudenten in den aktuellen Forschungsbetrieb sucht. Die Teilnahme am akademischen Alltag war stets größte Quelle meiner Motivation und eröffnete mir die theoretische Physik weit über die Grenzen dieser Arbeit hinaus.

Weiterhin danke ich meinem Betreuer, Dr. Christian Wozar, der meiner Fragen nie müde wurde und sein umfangreiches Verständnis Monte-Carlo-basierter Methoden gern teilte. Besonders fruchtbar waren überdies Diskussionen mit Raphael Flore, Björn Wellegehausen und Marianne Mastaler. Überdies danke ich Dr. Christian Wozar und Raphael Flore für die Korrektur meiner Diplomarbeit.

Schlussendlich gilt größter Dank meinen Eltern, die mir allzeit Unterstützung bieten, und meiner Freundin, auf deren unerschöpfliche Zuneigung ich mich stets verlassen kann.