



---

seit 1558

# Voruntersuchungen zur Simulation von supersymmetrischen YANG-MILLS-Theorien

MASTERARBEIT

zur Erlangung des akademischen Grades  
Master of Science (M.Sc.)  
im Studiengang Physik

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

eingereicht am 01.11.2016 von Marc Steinhauser  
geb. am 18.10.1991 in Biberach (Riß)



## **Gutachter**

Erstgutachter:

Universitätsprofessor Dr. rer. nat. Andreas Wipf  
Theoretisch-Physikalisches Institut  
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Zweitgutachter:

Dr. rer. nat. André Sternbeck  
Theoretisch-Physikalisches Institut  
Friedrich-Schiller-Universität Jena



*„Our claim here is that, contrary to widespread beliefs, SUSY and the lattice can happily coexist. [...] The simple idea behind our proposal is that, rather than try to have some version of SUSY on the lattice, one should let the lattice spoil SUSY if it so wishes. Our requirement is that SUSY, like chiral symmetry, should only be recovered in the continuum limit.“*

---

– CURCI & VENEZIANO [1]



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Physikalische Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1. Eichtheorien im Kontinuum . . . . .	3
2.2. Supersymmetrie . . . . .	4
2.3. $\mathcal{N}=1$ Super-YANG-MILLS-Theorie . . . . .	8
<b>3. Numerische Methodik</b>	<b>13</b>
3.1. Gitter-Grundlagen . . . . .	13
3.2. Monte-Carlo und <i>Importance Sampling</i> . . . . .	15
3.2.1. METROPOLIS-Algorithmus . . . . .	16
3.2.2. HMC-Algorithmus . . . . .	16
3.2.3. RHMC-Algorithmus . . . . .	17
3.3. Gitterwirkungen . . . . .	20
3.3.1. WILSON-Eichwirkung . . . . .	20
3.3.2. WILSON-DIRAC-Operator . . . . .	21
3.3.3. SYMANZIK-Verbesserung der Eichwirkung . . . . .	22
3.3.4. Randbedingungen . . . . .	22
3.4. Supersymmetrie auf dem Gitter . . . . .	22
3.4.1. Vorzeichenproblem . . . . .	23
3.4.2. Adjungierte Darstellung . . . . .	24
3.5. Numerische Lösung von linearen Gleichungssystemen . . . . .	24
3.6. Präkonditionierung . . . . .	25
3.6.1. Gerade-Ungerade-Präkonditionierung . . . . .	25
3.6.2. Rot-Schwarz-Präkonditionierung . . . . .	26
3.7. Messung von Observablen auf dem Gitter . . . . .	28
3.7.1. Hadron-Spektroskopie . . . . .	28
3.7.2. Weitere Observablen . . . . .	32
3.8. Extrapolation zum chiralen Limes & Kontinuumslices . . . . .	33
<b>4. Resultate</b>	<b>35</b>
4.1. Untersuchung des DIRAC-Operators . . . . .	35
4.2. Simulationsparameter . . . . .	40
4.3. Festlegung der Kopplung $\beta$ und des <i>Hopping</i> -Parameters $\kappa$ . . . . .	41
4.4. <i>Smearing</i> -Test . . . . .	46
4.5. Massenbestimmung . . . . .	46
4.5.1. Mesonen . . . . .	47
4.5.2. Gluino-Gluebälle . . . . .	51
4.5.3. Gluebälle . . . . .	52
4.6. Setzen der physikalischen Skala . . . . .	53
4.7. Endliche Temperatur . . . . .	57

<b>5. Schluss</b>	<b>59</b>
<b>A. Konventionen</b>	<b>I</b>
<b>B. Ergänzungen zu den numerischen Methoden</b>	<b>II</b>
B.1. MARKOV-Ketten und <i>Detailed Balance</i> . . . . .	II
B.2. Doppler-Problem . . . . .	III
B.3. Kraftberechnung in der fundamentalen Darstellung . . . . .	IV
B.4. Integration der Molekulardynamik . . . . .	V
B.5. SYMANZIK-Verbesserung des WILSON-DIRAC-Operators . . . . .	VI
B.6. <i>Binning</i> -Methode . . . . .	VII
B.7. <i>Jackknife</i> -Fehleranalyse . . . . .	VII
B.8. SAP-Methode . . . . .	VII
B.9. Multigrid-Methode . . . . .	VIII
<b>C. Literaturverzeichnis</b>	<b>IX</b>

# 1. Einleitung

Auf kleinen Skalen bietet die Quantentheorie eine äußerst erfolgreiche Beschreibung der Natur. Im Rahmen der Quantenmechanik sind die fundamentalen Teilchen wie das Elektron und deren Wechselwirkungen, z. B. das Photon, punktförmige Objekte [2–4]. Durch das Konzept der Quantenfeldtheorie werden die Elementarteilchen als lokale Feldanregungen und deren Wechselwirkungen beschrieben [5, 6]. Die drei fundamentale Theorien der elektromagnetischen, starken und schwachen Wechselwirkung sind im Standardmodell der Teilchenphysik zusammengefasst. Dieses enthält sowohl die Bausteine der Materie als auch die Wechselwirkungsteilchen. Alle Materieteilchen, zu denen die Quarks und Leptonen gehören, sind fermionisch und unterliegen somit dem PAULI-Prinzip. Demgegenüber sind alle Wechselwirkungsteilchen, wie das Photon und das Gluon, bosonisch. Mit dem Standardmodell ist eine etablierte  $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$  Eichtheorie zur Erklärung mikroskopischer Prozesse entstanden, die im Bereich niedriger, irdischer Energieskalen  $\lesssim \mathcal{O}(10 \text{ TeV})$  exzellente Voraussagen liefert. Lediglich die vierte heutzutage bekannte Wechselwirkung, die durch EINSTEINS allgemeine Relativitätstheorie beschriebene Gravitation, bleibt trotz intensiver Suche nach einer „*theory of everything*“ separiert. Auch aufgrund der 19 freien Parameter im Standardmodell, die nur durch experimentelle Messung bekannt sind, wird eine fundamentalere Theorie erwartet.

Supersymmetrie (Susy) ist der beliebteste Kandidat für eine Ergänzung des Standardmodells und wird bspw. auch in der Supergravitation und Stringtheorie benötigt. Durch die Supersymmetrie werden Materie und Wechselwirkung vereinigt. So erhält jedes Teilchen einen Superpartner, der dieselben Eigenschaften hat, mit Ausnahme, dass sich sein Spin um  $\frac{1}{2}$  unterscheidet. Dadurch hat jedes Fermion einen bosonischen Superpartner und umgekehrt. Durch diese Erweiterung können einige Schwachstellen des Standardmodells beseitigt oder abgeschwächt werden. Eine davon ist das sogenannte Hierarchie-Problem und betrifft die Masse des HIGGS-Bosons. Seine quadrierte nackte Masse divergiert mit der PLANCK-Masse zum Quadrat und dennoch ist die Masse des renormierten HIGGS-Bosons  $m_H \approx 125 \text{ GeV}$  deutlich leichter als die PLANCK-Masse  $m_P \approx 1,2 \cdot 10^{19} \text{ GeV}$ . Aus diesem Grund muss der Koeffizient vor der Divergenz auf viele Dezimalstellen feingetunt sein. Mit Hilfe der Supersymmetrie wäre dies nicht erforderlich, weil bosonische und fermionische Quantenkorrekturen mit umgekehrten Vorzeichen auftreten und sich in allen Ordnungen aufheben.

Durch die Supersymmetrie entsteht die Möglichkeit einer Vereinheitlichung der Eichsymmetrien (engl. *grand unified theory*, GUT) bei großen Energien, die durch ein modifiziertes Laufen der Kopplungskonstanten zustande käme. Fordern wir R-Parität (entspricht klassisch der  $U(1)_A$  Symmetrie), so müssen an allen Prozessen eine gerade Anzahl von Susy-Teilchen beteiligt sein, mit der Konsequenz, dass Susy-Teilchen nicht einfach zerfallen können. Folglich existiert ein leichtestes Susy-Teilchen (engl. *lightest supersymmetric particle*, LSP), das einen Kandidaten für die Dunkle Materie darstellt.

Mit großen Bestrebungen wird seit einiger Zeit nach direkten oder indirekten Signaturen der Supersymmetrie gesucht, z. B. am *large hadron collider* (LHC) am CERN. Obwohl die Auswirkungen bei Energieskalen auftreten, die mit heutigen Beschleunigerexperimenten getestet werden können, fehlen bisher eindeutige Resultate zugunsten der Supersymmetrie [7]. Aufgrund fehlender experimenteller Signale von Superpartnern bekannter Standardmodell-Teilchen, muss die Supersymmetrie – wenn sie existiert – bei niedrigen Energien spontan gebrochen sein, um die reale Welt zu beschreiben.

Die einfachste Erweiterung des Standardmodells ist das sogenannte minimale supersymmetrische Standardmodell (MSSM). Darin spielen supersymmetrische YANG-MILLS-Theorien (SYM) eine wichtige Rolle. In der phänomenologisch relevanten Erweiterung tritt nur eine Superladung auf [8]. Davon motiviert betrachten wir in dieser Arbeit die vierdimensionale  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie mit der Eichgruppe  $SU(3)$ . Diese Theorie ist das Pendant zum reinen Eichsektor der Quantenchromodynamik (QCD) und beschreibt die Wechselwirkung der Gluonen mit ihren Superpartnern, den Gluinos. Wie die QCD zeigt die  $\mathcal{N} = 1$  SYM bei hohen Energien asymptotische Freiheit und bei niedrigen Energien *Confinement*. Dadurch treten im Spektrum nur farblose Zustände wie Mesonen, Gluebälle und Gluino-Gluebälle, die eine Mischung aus bosonischen und fermionischen Freiheitsgraden sind, auf. Zur Untersuchung der gebundenen Zustände und des *Confinements* werden nicht-perturbative Methoden benötigt. Mit den, in der QCD etablierten, Monte-Carlo-Simulationen auf diskreten Raumzeitgittern [9, 10] können die postulierten Multipletts von VENEZIANO und YANKIELOWICZ sowie FARRAR, GABADADZE und SCHWETZ überprüft werden [11, 12]. Mit Hilfe der entarteten Multipletts kann im Umkehrschluss die Supersymmetrie im Kontinuumslimit der Gittersimulation getestet werden.

Wenn in einigen Jahren die Grundlagen der SYM-Theorie sowie der Supersymmetriebrechung gut verstanden und numerisch im Griff sind, erhoffen wir uns von den Gittersimulationen eine ähnliche Vorhersagekraft wie in der QCD. Um zur Super-QCD zu gelangen, wird die  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie an ein  $\mathcal{N} = 1$  WESS-ZUMINO-Modell gekoppelt, das Materie in Form von Fermionen in der fundamentalen Darstellung hinzufügt [13]. Das MSSM ist eine effektive Niedrigenergie-Theorie, in der rund 100 verschiedene Terme auftreten können, die die Susy schwach brechen. Um die Experimentatoren in die richtigen Richtungen des Parameterraums zu führen, wären Gitterrechnungen ein guter Wegweiser.

In dieser Arbeit wird die Methode nach CURCI und VENEZIANO verwendet, bei der die Supersymmetrie auf dem Gitter unter Verwendung von WILSON-Fermionen explizit gebrochen wird [1]. Bei diesem Ansatz muss durch *Feintuning* der Punkt gefunden werden, an dem die renormierte Gluinomasse  $m_g$  verschwindet und sowohl die Supersymmetrie als auch die chirale Symmetrie wiederhergestellt werden.

Die vorliegende Arbeit besteht aus drei Teilen und ist folgendermaßen gegliedert. Im ersten Teil werden die physikalischen Grundlagen dargestellt, beginnend mit Eichtheorien im Kontinuum. Im Anschluss wenden wir uns der Supersymmetrie zu und stellen nach einer allgemeinen Einführung die  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie inklusive ihrem Teilchenspektrum vor. Der zweite Teil behandelt die numerische Methodik und beginnt mit einer Einführung der Gitter-Grundlagen. Danach werden die Monte-Carlo-Methoden und die erforderlichen Gitterwirkungen vorgestellt. Im Folgenden behandeln wir die Herausforderungen, die durch Kombination der Supersymmetrie und Gittereichtheorie entstehen. Anschließend kommen Kapitel zum konjugierten Gradientenverfahren, zur Präkonditionierung und zu den Observablen mit Schwerpunkt Massenspektroskopie. Im weiteren Verlauf stellen wir das *Feintuning* zum chiralen Grenzwert und zum Kontinuumslimit vor. In Teil drei werden unsere Simulationsergebnisse und deren Auswertung präsentiert. Dazu gehört das Spektrum des DIRAC-Operators und die Festlegung des *Hopping*-Parameters für verschiedene Kopplungen  $\beta$ . Außerdem präsentieren wir die Messungen der adjungierten Mesonen, der Gluebälle und der Gluino-Gluebälle. Darüber hinaus schätzen wir die physikalische Gittergröße ab und untersuchen die Effekte endlicher Temperatur. Zum Schluss werden die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst und ein Ausblick auf zukünftige Vorhaben gegeben.

## 2. Physikalische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die physikalischen Grundlagen vorgestellt. Zu Beginn betrachten wir in Kap. 2.1 Eichtheorien im Kontinuum, bevor wir in Kap. 2.2 eine Einführung in die Supersymmetrie geben. Danach präsentieren wir die  $\mathcal{N} = 1$  Super-YANG-MILLS-Theorie, die im Mittelpunkt dieser Arbeit steht. In der Darstellung der Eichtheorie-Grundlagen folgen wir [14] und bei der Supersymmetrie sind [15–17] die primären Quellen. Daneben sind Einflüsse aus den Referenzen [18, 19] enthalten.

### 2.1. Eichtheorien im Kontinuum

Im Folgenden werden einige Aspekte von Eichtheorien vorgestellt, die für die Behandlung der SYM-Theorie hilfreich sind. Zum Zweck einer übersichtlichen Darstellung betrachten wir zunächst ein komplexes  $n$ -dimensionales Skalarfeld  $\phi(x) \in \mathbb{C}^n$  in  $d$  Dimensionen, das unter globalen Eichtransformationen  $\Omega \in U(n)$  wie folgt transformiert

$$\phi(x) \mapsto \Omega \phi(x). \quad (2.1)$$

Damit die Wirkung

$$S = \int d^d x (\partial_\mu \phi^\dagger \partial^\mu \phi - m^2 \phi^\dagger \phi) \quad (2.2)$$

auch unter lokalen Eichtransformationen invariant ist, wird das Skalarfeld an ein (liealgebrawertiges) Eichfeld  $A_\mu = A_\mu^a T_a$  mit den Generatoren  $T_a$  der Symmetriegruppe gekoppelt. Zugleich muss in der Wirkung die gewöhnliche Ableitung  $\partial_\mu$  durch die kovariante Ableitung  $D_\mu(A) = \partial_\mu - igA_\mu$  ersetzt werden. Mit Hilfe der kovarianten Ableitung definieren wir den antisymmetrischen Feldstärketensor

$$F_{\mu\nu}(A) = \frac{i}{g} [D_\mu(A), D_\nu(A)] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig [A_\mu, A_\nu], \quad (2.3)$$

der ebenfalls in der LIE-Algebra liegt. Somit erhalten wir die lokalen Eichtransformationen

$$\begin{aligned} \phi(x) &\mapsto \Omega(x)\phi(x), \\ D_\mu(A) &\mapsto \Omega(x)D_\mu(A)\Omega(x)^{-1}, \\ A_\mu &\mapsto \Omega(x)A_\mu\Omega(x)^{-1} - \frac{i}{g}(\partial_\mu\Omega(x))\Omega(x)^{-1}, \\ F_{\mu\nu}(A) &\mapsto \Omega(x)F_{\mu\nu}(A)\Omega(x)^{-1}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Mit Hilfe der Spur können wir den eichinvarianten YANG-MILLS-Term  $\text{tr}(F_{\mu\nu}F^{\mu\nu})$  formulieren. Durch die Ersetzungen  $x^0 \mapsto ix^0$ ,  $\partial_0 \mapsto -i\partial_0$ ,  $A_0 \mapsto -iA_0$  gelangen wir zu einer Euklidischen Theorie, die wir später zur numerischen Beschreibung benötigen.

Um den Paralleltransporter einzuführen betrachten wir ein kovariant konstantes Skalarfeld  $\phi$ ,  $D_\mu \phi = 0$ . Die Lösung dieser Gleichung entlang des Weges  $\mathcal{C}_{yx}$  von  $x$  nach  $y$  ergibt den Paralleltransporter. Dazu betrachten wir den Weg  $x(s)$  mit  $x(0) = x$ ,  $x(1) = y$  und  $s \in [0, 1]$ . Die Ableitung längs dieses Weges ist

$$0 = \dot{x}^\mu D_\mu \phi = \frac{dx^\mu}{ds} \left( \frac{d\phi(x(s))}{dx^\mu} - igA_\mu(x(s))\phi(x(s)) \right) = \frac{d\phi(s)}{ds} - igA_\mu(x(s))\frac{dx^\mu}{ds}\phi(s).$$

Interpretieren wir diese Gleichung als SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i \frac{d\phi(s)}{ds} = H(s)\phi(s) \quad (2.5)$$

mit Zeitparameter  $s$  und HAMILTON-Operator

$$H(s) = -gA_\mu(s) \frac{dx^\mu}{ds}, \quad (2.6)$$

dann erhalten wir in Analogie zur Quantenmechanik die Lösung  $\phi(y) = U(\mathcal{C}_{yx}, A)\phi(x)$  mit dem pfadgeordneten Gruppenelement

$$U(\mathcal{C}_{yx}, A) = \mathbf{p} e^{ig \int_0^1 ds A_\mu(x(s)) \dot{x}^\mu(s)}, \quad (2.7)$$

das unter lokalen Eichtransformationen gemäß

$$U(\mathcal{C}_{yx}, A) \mapsto \Omega(y)U(\mathcal{C}_{yx}, A)\Omega(x)^{-1} \quad (2.8)$$

transformiert und als Paralleltransporter bezeichnet wird. Mit  $\phi^\dagger(y) U(\mathcal{C}_{yx}, A) \phi(x)$  haben wir eine weitere eichinvariante Größe, die jedoch wegabhängig ist. Ein geschlossener Weg  $\mathcal{C}_{xx}$  wird in diesem Zusammenhang als WILSON-Schleife bezeichnet und  $\text{tr}(U(\mathcal{C}_{xx}, A))$  ist ebenfalls eichinvariant. In Kap. 3.3 werden wir bei der Formulierung der Gitterwirkung diese eichinvarianten Größen benötigen.

## 2.2. Supersymmetrie

Eine klassische Symmetrie ist dadurch charakterisiert, dass sie die Wirkung invariant lässt. Folglich ist auf der Ebene der LAGRANGE-Dichte maximal eine Divergenz  $\delta\mathcal{L} = \partial_\mu V^\mu$  erlaubt. Nach dem NOETHER-Theorem gehört zu jeder kontinuierlichen Symmetrie ein erhaltener NOETHER-Strom

$$J^\mu = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta(\partial_\mu\phi)} \delta\phi - V^\mu, \quad \partial_\mu J^\mu = 0. \quad (2.9)$$

Durch Integration seiner Zeitkomponente über die räumlichen Koordinaten erhalten wir daraus die NOETHER-Ladung

$$Q = \int d^{d-1}x J^0, \quad \frac{dQ}{dt} = 0. \quad (2.10)$$

Wir beginnen mit den Raumzeit-Symmetrien und betrachten dazu die POINCARÉ-Gruppe, die auch inhomogene LORENTZ-Gruppe genannt wird. Mit dieser Gruppe

$$\text{iL} = \left\{ (\Lambda, a) \mid a \in \mathbb{R}^d, \Lambda \in \text{L}(\mathbb{R}^d), \Lambda^T \eta \Lambda = \eta \right\} \quad (2.11)$$

werden die linearen POINCARÉ-Transformationen  $x^\mu \mapsto \Lambda^\mu_\nu x^\nu + a^\mu$  beschrieben. Dabei bezeichnet  $\Lambda$  ein Element der LORENTZ-Gruppe und  $\eta$  steht für die Metrik mit der Signatur  $(+, -, \dots, -)$ . Die POINCARÉ-Gruppe ist ein semidirektes Produkt zwischen den Raumzeittranslationen und den LORENTZ-Transformationen. Sie wird durch die antisymmetrischen Generatoren<sup>[1]</sup>  $M_{\mu\nu} = -M_{\nu\mu}$  und

<sup>[1]</sup> $M_{ij}$  beschreibt infinitesimale Rotationen und  $M_{0i}$  infinitesimale Boosts.

den Impulsen  $P_\mu$  erzeugt:

$$(\mathbb{1}, a) = e^{ia^\mu P_\mu}, \quad (\Lambda, 0) = e^{\frac{i}{2}\omega^{\mu\nu} M_{\mu\nu}}. \quad (2.12)$$

Jeder Generator  $M_{\mu\nu}$  ist eine antisymmetrische Matrix, die durch

$$[M_{\mu\nu}]_{\rho\sigma} = -[M_{\mu\nu}]_{\sigma\rho} = -i(\eta_{\mu\rho}\eta_{\nu\sigma} - \eta_{\nu\rho}\eta_{\mu\sigma}) \quad (2.13)$$

definiert ist. Die POINCARÉ-Algebra, die später zur Super-LIE-Algebra erweitert wird, lautet damit

$$\begin{aligned} [P_\mu, P_\nu] &= 0, \\ [M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] &= i(\eta_{\mu\rho}M_{\nu\sigma} + \eta_{\nu\sigma}M_{\mu\rho} - \eta_{\mu\sigma}M_{\nu\rho} - \eta_{\nu\rho}M_{\mu\sigma}), \\ [M_{\mu\nu}, P_\rho] &= i(\eta_{\mu\rho}P_\nu - \eta_{\nu\rho}P_\mu). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Nun wenden wir uns der Supersymmetrie zu, die fermionische Materieteilchen und bosonische Kraftteilchen miteinander vereinigt. Eine Supersymmetrietransformation transformiert ein Fermion in ein Boson und umgekehrt, d. h. sie ändert den Spin der Teilchen. Sowohl der Ausgangs- als auch der Endzustand gehören zum selben Multiplett. In Multipletts werden die Teilchen zusammengefasst, die bei ungebrochener Supersymmetrie dieselbe Masse besitzen. Jedes Multiplett enthält mindestens ein Boson und ein Fermion, deren Spins sich um  $\frac{1}{2}$  unterscheiden. Teilchen und Superpartner tragen dieselbe elektrische Ladung, Farbladung, Hyperladung und denselben schwachen Isospin. Außerdem muss in jeder supersymmetrischen Theorie die Anzahl der bosonischen Freiheitsgrade mit den fermionischen übereinstimmen.

Das COLEMAN-MANDULA-Theorem verbietet in mehr als zwei Dimensionen Raumzeitsymmetrien mit internen Symmetrien nicht-trivial zu kombinieren: Die allgemeinste Symmetriegruppe der Streumatrix ist ein direktes Produkt der POINCARÉ-Gruppe und einer internen Symmetriegruppe [20]. Mit Hilfe fermionischer Generatoren und unter Verwendung des Antikommutators können wir das Theorem jedoch umgehen [8, 21]. Der infinitesimale Parameter  $\epsilon$  der Supersymmetrietransformation  $\delta_\epsilon$  ist grassmannwertig und trägt die Massendimension  $-\frac{1}{2}$ . In  $\delta_\epsilon = \bar{\epsilon}Q$  steckt die majoranawertige Superladung  $Q$  mit den Komponenten  $Q_\alpha$ ,  $\alpha = 1, \dots, 2^{\lfloor d/2 \rfloor}$ . Ein MAJORANA-Spinor ist dadurch ausgezeichnet, dass er unter Ladungskonjugation invariant ist. Modelle mit erweiterter Supersymmetrie enthalten mehrere Superladungen  $Q_\alpha^i$ ,  $i = 1, \dots, \mathcal{N}$ . Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf die  $\mathcal{N} = 1$  Super-YANG-MILLS-Theorie mit einer einzigen Superladung. Die Super-Algebra ist eine  $\mathbb{Z}_2$ -graduierte LIE-Algebra mit bosonischen Operatoren  $B$  und fermionischen Operatoren  $F$  mit den Eigenschaften

$$[B_i, B_j] \sim B_k, \quad [B_i, F_j] \sim F_k, \quad \{F_i, F_j\} \sim B_k. \quad (2.15)$$

Genauer ausgedrückt ist sie die Erweiterung der POINCARÉ-Algebra und durch Gl. (2.14) sowie

$$[P_\mu, Q_\alpha] = 0, \quad (2.16)$$

$$[M_{\mu\nu}, Q_\alpha] = (\Sigma_{\mu\nu}Q)_\alpha, \quad (2.17)$$

$$\{Q_\alpha, \bar{Q}^\beta\} = 2(\gamma^\mu)_\alpha{}^\beta P_\mu \quad (2.18)$$

gegeben. In App. A gehen wir näher auf die DIRAC-Matrizen  $\gamma^\mu$  ein. Wie Gl. (2.17) zeigt, transformieren

die Superladungen unter LORENTZ-Transformationen wie Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen<sup>[2]</sup>. Das Produkt zweier Spinoroperatoren muss wie ein Vektoroperator transformieren und der einzige vom COLEMAN-MANDULA-Theorem erlaubte Vektoroperator ist  $P_\mu$ . Auf der rechten Seite von Gl. (2.18) kann deshalb nur der Impulsoperator  $P_\mu$  stehen. Somit ergibt die Hintereinanderausführung zweier Susy-Transformationen eine Translation.

Im Folgenden präsentieren wir einige charakteristische Eigenschaften der Super-Algebra. Zuerst zeigen wir die Aussage des O'RAIFEARTAIGH-Theorems, dass Superpartner bei ungebrochener Supersymmetrie dieselbe Masse besitzen [22]. Aus Gl. (2.16) lässt sich ablesen, dass die Superladungen translationsinvariant sind. Ausgehend von einem Boson  $|\mathcal{B}\rangle$  der Masse  $m_B > 0$  und einem Fermion  $|\mathcal{F}\rangle$  der Masse  $m_F > 0$ , die durch die Superladung  $\mathcal{Q}$  ineinander transformiert werden,

$$\mathcal{Q}|\mathcal{B}\rangle = |\mathcal{F}\rangle, \quad \mathcal{Q}|\mathcal{F}\rangle = |\mathcal{B}\rangle, \quad (2.19)$$

folgt mit Gl. (2.16) unmittelbar

$$m_B^2|\mathcal{B}\rangle = P_\mu P^\mu |\mathcal{B}\rangle = P_\mu P^\mu \mathcal{Q}|\mathcal{F}\rangle = \mathcal{Q} P_\mu P^\mu |\mathcal{F}\rangle = m_F^2 \mathcal{Q}|\mathcal{F}\rangle = m_F^2 |\mathcal{B}\rangle.$$

Superpartner haben folglich entartete Massen,  $m_B = m_F$ . Als nächstes untersuchen wir, warum die Vakuumenergie verschwindet und das Spektrum supersymmetrischer Theorien folglich keine negativen Energiezustände enthält. Den Zustand mit kleinster Energie bezeichnen wir als Vakuumzustand  $|0\rangle$ . Zur Herleitung starten wir mit Gl. (2.18), die wir zu

$$\{\mathcal{Q}_\alpha, \mathcal{Q}_\beta\} = (\mathcal{C}\gamma^\mu)_{\alpha\beta} P_\mu \quad (2.20)$$

umformen. Nach Multiplikation mit  $\gamma_2$  und Spurbildung erhalten wir die Vakuumenergie

$$E_0 = \langle 0|P_0|0\rangle = \frac{1}{4}(\gamma_2)^{\alpha\beta} \langle 0|\{\mathcal{Q}_\alpha, \mathcal{Q}_\beta\}|0\rangle.$$

Wenn die Supersymmetrie ungebrochen ist folgt aus  $\mathcal{Q}_\alpha|0\rangle = 0$ , dass die Vakuumenergie  $E_0$  verschwindet. Damit stellt die Supersymmetrie eine mögliche Erklärung für das Problem der kosmologischen Konstanten dar, das den unerklärten Widerspruch zwischen quantenfeldtheoretischem Vakuumerwartungswert und der beobachteten kosmologischen Konstanten betrifft. Erst im Rahmen der Supersymmetrie ist die Vakuumenergie ohne Renormierung und ohne eine unnatürliche Addition exakt Null [23], wobei heutige experimentelle Resultate für eine kosmologische Konstante mit dem kleinen positiven Wert  $1,1 \cdot 10^{-52} \text{ m}^{-2}$  sprechen [24]. Durch diese Charakteristik ist die Vakuumenergie ein Ordnungsparameter für die Supersymmetriebrechung: Die Supersymmetrie ist genau dann gebrochen, wenn die Energie des Grundzustands  $E_0 > 0$  ist.

Zustände mit positiver Energie können nicht unter Supersymmetrie invariant sein, sodass zu jedem Teilchen ein Superpartner gehört. Für  $P_\mu \neq 0$  können wir zeigen, dass in Supermultipletts dieselbe Anzahl der Zustände bosonisch bzw. fermionisch sind. Die Superladung  $\mathcal{Q}$  bildet nur Zustände innerhalb

---

<sup>[2]</sup>Der Gesamtdrehimpuls  $M_{\mu\nu} = L_{\mu\nu} + \Sigma_{\mu\nu}$  setzt sich aus Bahndrehimpuls  $L_{\mu\nu} = -x_\mu P_\nu + x_\nu P_\mu$  und Spin  $\Sigma_{\mu\nu}$  zusammen.

eines Multipletts aufeinander ab, weshalb wir

$$N_S = \text{tr}_S \left( (-1)^F \{ \mathcal{Q}_\alpha, \mathcal{Q}_\beta \} \right) \quad (2.21)$$

mit der Spur  $\text{tr}_S$  über einem fixierten Supermultiplett betrachten. Zudem haben wir in Gl. (2.21) die Fermionenzahl  $F$  und den Operator  $(-1)^F$  mit

$$(-1)^F |\mathcal{B}\rangle = |\mathcal{B}\rangle, \quad (-1)^F |\mathcal{F}\rangle = -|\mathcal{F}\rangle, \quad \{ \mathcal{Q}_\alpha, (-1)^F \} = 0 \quad (2.22)$$

eingeführt. Der Antikommutator mit der Superladung  $\mathcal{Q}_\alpha$  resultiert aus der Eigenschaft, dass  $\mathcal{Q}_\alpha$  Bosonen in Fermionen abbildet und umgekehrt. Unter Verwendung der Zyklizität der Spur in

$$\begin{aligned} N_S &= \text{tr}_S \left( (-1)^F \mathcal{Q}_\alpha \mathcal{Q}_\beta + (-1)^F \mathcal{Q}_\beta \mathcal{Q}_\alpha \right) \\ &= -\text{tr}_S \left( \mathcal{Q}_\alpha (-1)^F \mathcal{Q}_\beta + \mathcal{Q}_\beta (-1)^F \mathcal{Q}_\alpha \right) \\ &= -\text{tr}_S \left( (-1)^F \mathcal{Q}_\beta \mathcal{Q}_\alpha + (-1)^F \mathcal{Q}_\alpha \mathcal{Q}_\beta \right) \\ &= -N_S \end{aligned}$$

folgern wir mit Gl. (2.20), dass

$$N_S = \text{tr}_S \left( (-1)^F \{ \mathcal{Q}_\alpha, \mathcal{Q}_\beta \} \right) = \text{tr}_S \left( (-1)^F (\mathcal{C}\gamma^\mu)_{\alpha\beta} P_\mu \right) = 0.$$

Im Fall  $P_\mu \neq 0$  erhalten wir,  $\text{tr}_S \left( (-1)^F \right) = n_B - n_F = 0$ , die gleiche Anzahl von  $n_B$  bosonischen und  $n_F$  fermionischen Zuständen im betrachteten Supermultiplett. Jedoch ist der Zustand des Vakuums translationsinvariant und der Impulsoperator damit  $P_\mu = 0$ . In diesem Fall kann die Anzahl  $n_B^0$  der bosonischen Grundzustände von der Anzahl  $n_F^0$  der fermionischen Grundzustände abweichen. WITTEN entdeckte, dass mit Hilfe von

$$I_W = \text{tr} \left( (-1)^F \right) \quad (2.23)$$

einfache Schlüsse über die Susy-Brechung gezogen werden können [25]. Gegenüber unserer vorherigen Betrachtung läuft die Summe in Gl. (2.23) über den ganzen HILBERT-Raum. Wie wir gesehen haben, treten alle Zustände mit positiver Energie gepaart auf, wodurch der WITTEN-Index  $I_W = n_B^0 - n_F^0$  die Differenz zwischen der Anzahl bosonischer Grundzustände und der Anzahl fermionischer Grundzustände angibt. Dabei können folgende Fälle unterschieden werden. Bei  $I_W \neq 0$  kann die Supersymmetrie nicht spontan gebrochen sein und wir haben mindestens einen fermionischen ( $I_W < 0$ ) oder bosonischen ( $I_W > 0$ ) Grundzustand. In diesem Fall kann die Supersymmetrie nur durch Addition nicht-invarianter Terme in der LAGRANGE-Dichte explizit gebrochen werden. Bei  $I_W = 0$  liegen hingegen gleich viele fermionische und bosonische Grundzustände vor. Dann ist entweder  $n_B^0 = n_F^0 = 0$  und die Supersymmetrie gebrochen oder  $n_B^0 = n_F^0 \neq 0$  mit ungebrochener Supersymmetrie. Wie wir in Kap. 2.3 argumentieren werden ist in der  $\mathcal{N} = 1$  Super-YANG-MILLS-Theorie  $I_W = N_c$  und somit keine spontane Supersymmetriebrechung möglich.

Das *Non-Renormalization*-Theorem besagt, dass Susy in allen Ordnungen der Störungstheorie ungebrochen ist, wenn die klassische Theorie auf *tree-level* supersymmetrisch ist [26]. Dies geschieht durch die gegenseitige Aufhebung der fermionischen und bosonischen *Loop*-Korrekturen. In der Konsequenz kann eine Supersymmetrie nur nicht-perturbativ gebrochen werden, bspw. spontan durch einen

nicht-verschwindenden Vakuumerwartungswert. Bei einer schwachen Susy-Brechung verändert sich die Theorie nur bei kleinen Energien. Dies kann z. B. durch Addition einer Masse zu allen Superpartner erreicht werden. Wenn die Zusatzmasse  $m$  groß genug gewählt wird, können die postulierten Susy-Teilchen mit heutigen Beschleunigern nicht gemessen werden und die Supersymmetrie bleibt mit den experimentellen Daten verträglich. Im Ultravioletten ist die Physik unabhängig von dieser Wahl und die Supersymmetrie bleibt dort ungebrochen. Auf dem Gitter nutzen wir die Masse  $m$  als Renormierungsparameter.

### 2.3. $\mathcal{N}=1$ Super-Yang-Mills-Theorie

Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf die  $\mathcal{N}=1$  Super-YANG-MILLS-Theorie mit der Eichgruppe  $SU(3)$ . Sie ist die supersymmetrische Erweiterung der reinen QCD-Gluodynamik. Zu dieser Theorie existieren bereits viele nicht-perturbative analytische Resultate, bspw. zum chiralen Kondensat und zur Beta-Funktion [27–29]. Wir werden unseren Fokus auf die numerische Simulation dieser Theorie und ihr Massenspektrum legen.

Bei niedrigen Energien zeigt die  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie *Confinement*. Dadurch sind nicht die Elementarteilchen selbst, sondern nur die aus ihnen zusammengesetzten Zustände detektierbar – genauso wie in der QCD, wo die Hadronen aus Quarks und Gluonen aufgebaut sind. Der *Confinement-Deconfinement*-Phasenübergang ist in Abb. 1 skizziert. Die supersymmetrische Erweiterung der YANG-MILLS-Theorie beschreibt die Wechselwirkung zwischen den Eichbosonen (Gluonen) und ihren supersymmetrischen Partnern (Gluinos). Das Eichfeld  $A_\mu$  transformiert in der adjungierten Darstellung der Eichgruppe  $SU(N_c)$ . In dieser Theorie tritt ein einziges MAJORANA-Fermion (Gluino)  $\lambda$  auf, das aufgrund der Supersymmetrie ebenfalls in der adjungierten Darstellung transformieren muss. MAJORANA-Fermionen tragen keine elektrische Ladung und sind ihre eigenen Antiteilchen. In unserem Szenario ist  $N_c = 3$  und sowohl das Eichfeld als auch die MAJORANA-Fermionen besitzen  $N_c^2 - 1 = 8$  Farbfreiheitsgrade.

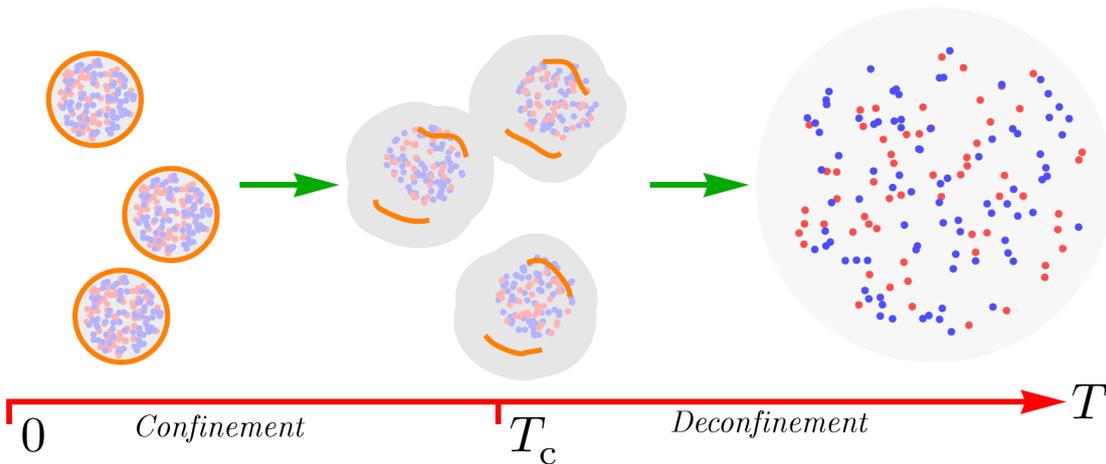


Abb. 1: In der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie ist die Eichkopplung wie in der QCD bei hohen Energien asymptotisch frei und wird im infraroten Grenzfall sehr stark. Bei hohen Temperaturen können wir die Gluonen und Gluinos als freies Gas betrachten. Demgegenüber setzt bei niedrigen Temperaturen *Confinement* ein, wodurch keine freien Farbladungen auftreten dürfen. Der *Confinement*-Phasenübergang findet bei der kritischen Temperatur  $T = T_c$  statt. [17]

Zunächst stellen wir in diesem Abschnitt die masselose Darstellung der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie vor. Nach dem CPT-Theorem<sup>[3]</sup> gehört zu jedem masselosen Zustand mit der Helizität  $\Lambda$  auch die entgegengesetzte Helizität  $-\Lambda$ . In einem irreduziblen Multipllett liegen 1+1 Zustände mit Helizität  $\Lambda$  und  $\Lambda - \frac{1}{2}$ . Für eine CPT-invariante Theorie benötigen wir deshalb mindestens zwei CLIFFORD-Vakua. Die  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie ist ein Vektor-Multipllett, deren CLIFFORD-Vakua  $|\Omega\rangle$ ,  $|\Omega'\rangle$  die Helizität  $\Lambda = 1$  bzw.  $\Lambda' = -\frac{1}{2}$  besitzen. Mit

$$\text{Helizität } \underbrace{1, \overbrace{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{\lambda}, -1}_{A_\mu} \quad (2.24)$$

erhalten wir ein MAJORANA-Fermion  $\lambda$  und ein Eichfeld  $A_\mu$ , was in der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie einem Gluon & Gluino entspricht. In den effektiven Wirkungen für niedrige Energien werden wir zudem auf zwei massive Multiplletts stoßen. Diese bestehen aus einem Spin- $\frac{1}{2}$ -MAJORANA-Fermion, einem skalaren sowie einem pseudoskalaren Boson.

Im Folgenden betrachten wir *off-shell*  $SU(N_c)$  Eichtheorien mit einem masselosen MAJORANA-Spinor  $\lambda = \lambda^a T_a$ , einem masselosen Vektorfeld  $A_\mu = A_\mu^a T_a$  und einem Hilfsfeld  $\mathcal{G} = \mathcal{G}^a T_a$ , die allesamt in der adjungierten Darstellung der Eichgruppe transformieren. Alle Felder sind wie angegeben Linearkombinationen der LIE-Algebra-Generatoren  $T_a \in \mathfrak{g}$ . Unter Eichtransformationen mit  $g \in G$  transformieren die Felder gemäß

$$\begin{aligned} A_\mu &\mapsto g A_\mu g^{-1} + i g \partial_\mu g^{-1}, & \delta A_\mu &= D_\mu \omega, \\ \lambda &\mapsto g \lambda g^{-1}, & \delta \lambda &= i[\omega, \lambda], \\ \mathcal{G} &\mapsto g \mathcal{G} g^{-1}, & \delta \mathcal{G} &= i[\omega, \mathcal{G}]. \end{aligned} \quad (2.25)$$

In der rechten Spalte von Gl. (2.25) sind die infinitesimalen Eichtransformationen  $g = e^{i\omega} \approx \mathbb{1} + i\omega$  aufgeführt. Mit der kovarianten Ableitung in der adjungierten Darstellung  $D_\mu \lambda = \partial_\mu \lambda - i[A_\mu, \lambda]$  und dem Feldstärketensor  $F_{\mu\nu}$  aus Gl. (2.3) können wir die LAGRANGE-Dichte

$$\mathcal{L} = \text{tr} \left( -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{i}{2} \bar{\lambda} \not{D} \lambda + \frac{1}{2} \mathcal{G}^2 \right) \quad (2.26)$$

der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie formulieren. Zu ihr gehören die infinitesimalen Supersymmetrie-Transformationen

$$\left. \begin{aligned} \delta_\alpha A_\mu &= i \bar{\alpha} \gamma_\mu \lambda \\ \delta_\alpha \lambda &= i F^{\mu\nu} \Sigma_{\mu\nu} \alpha + i \mathcal{G} \gamma_5 \alpha \\ \delta_\alpha \mathcal{G} &= \bar{\alpha} \gamma_5 \not{D} \lambda \end{aligned} \right\} \Rightarrow \delta_\alpha \mathcal{L} = \bar{\alpha} \partial_\mu V^\mu. \quad (2.27)$$

In der letzten Gleichung haben wir das Potenzial

$$V^\mu = \frac{1}{2} \text{tr} \left( (*F^{\mu\nu} \gamma_5 - i F^{\mu\nu}) \gamma_\nu \lambda \right) + \frac{1}{2} \text{tr} (\mathcal{G} \gamma_5 \gamma^\mu \lambda), \quad (2.28)$$

mit dem dualen Feldstärketensor  $*F^{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} F_{\alpha\beta}$  eingeführt. Aus den Susy-Transformationen folgt

<sup>[3]</sup>Das CPT-Theorem besagt, dass alle physikalischen Gesetze unter kombinierter Transformation der Ladungskonjugation  $\mathcal{C}$ , Parität  $\mathcal{P}$  und Zeitumkehr  $\mathcal{T}$  invariant sind [30, 31].

der NOETHER-Strom

$$J^\mu = -\text{tr}(*F^{\mu\nu}\gamma_5 + iF^{\mu\nu})\gamma_\nu\lambda \quad (2.29)$$

und die Superladung

$$\mathcal{Q} = \int d^3x \left( (i\Pi_i - B_i\gamma_5)\gamma_i\lambda \right) \quad (2.30)$$

mit dem chromomagnetischen Feld  $B_i$  und dem chromoelektrischen Feld  $E_i = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta A_i} = \Pi_i$ , welches zu  $A_i$  konjugiert ist. Der Kommutator zweier Supersymmetrie-Transformationen ist

$$\begin{aligned} [\delta_{\alpha_1}, \delta_{\alpha_2}]A_\mu &= -2i(\bar{\alpha}_2\gamma^\nu\alpha_1)\partial_\nu A_\mu + D_\mu\omega, \\ [\delta_{\alpha_1}, \delta_{\alpha_2}]\lambda &= -2i(\bar{\alpha}_2\gamma^\nu\alpha_1)\partial_\nu\lambda + i[\omega, \lambda], \\ [\delta_{\alpha_1}, \delta_{\alpha_2}]\mathcal{G} &= -2i(\bar{\alpha}_2\gamma^\nu\alpha_1)\partial_\nu\mathcal{G} + i[\omega, \mathcal{G}], \end{aligned} \quad (2.31)$$

mit einer Translation und einer zusätzlichen infinitesimalen Eichtransformation mit dem Eichparameter  $\omega = 2i(\bar{\alpha}_2\gamma^\nu\alpha_1)A_\nu$ . Für die Gittersimulationen wechseln wir zur *on-shell*-Formulierung. Dazu eliminieren wir das Hilfsfeld  $\mathcal{G}$  durch seine Bewegungsgleichung,  $\mathcal{G} = 0$ . Führen wir zusätzlich einen Gluino-Massenterm ein, der die Supersymmetrie weich bricht, so erhalten wir die *on-shell* LAGRANGE-Dichte

$$\mathcal{L}_{\text{SYM}} = \text{tr} \left( -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{i}{2}\bar{\lambda}\not{D}\lambda - \frac{m_g}{2}\bar{\lambda}\lambda \right). \quad (2.32)$$

Der Faktor  $\frac{1}{2}$  vor den Fermionen dient zur Berücksichtigung der MAJORANA-Freiheitsgrade. Würde das Gluino  $\lambda$  durch ein DIRAC-Fermion in der fundamentalen Darstellung ersetzt und  $m_g = 0$  masselos gewählt, dann entspräche Gl. (2.32) der QCD-Wirkung mit einem Quark-*Flavor*. Die SYM-Wirkung  $S_{\text{SYM}} = \int d^4x \mathcal{L}_{\text{SYM}}$  ist klassisch invariant unter LORENTZ-Transformationen, lokalen Eichtransformationen und Skalentransformationen. Bei masselosem Gluino,  $m_g = 0$ , haben wir zusätzlich die globale Abelsche chirale  $U(1)_A$ -Symmetrie

$$\lambda \mapsto e^{i\alpha\gamma_5}\lambda, \quad \bar{\lambda} \mapsto \bar{\lambda}e^{i\alpha\gamma_5} \quad (2.33)$$

und die Supersymmetrie

$$\delta A_\mu = i\bar{\epsilon}\gamma_\mu\lambda, \quad \delta\lambda = i\Sigma_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\epsilon \quad (2.34)$$

mit dem globalen majoranawertigen Susy-Parameter  $\epsilon$ . Wie in der QCD verlieren wir bei der Quantisierung die Skaleninvarianz durch die Spur-Anomalie, da die Spur des Energie-Impuls-Tensors

$$T_\mu^\mu = -\frac{g^2 N_c}{32\pi^2} \text{tr}(F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}) \quad (2.35)$$

nur bei  $g = 0$  verschwindet. Infolgedessen entstehen bei niedrigen Energien die gebundenen Zustände. Bei der ebenfalls anomalen chiralen Symmetrie bleibt eine  $\mathbb{Z}_{2N_c}$ -Restsymmetrie bestehen,

$$\lambda \mapsto e^{i\frac{2\pi n}{2N_c}\gamma_5}\lambda \quad \text{mit} \quad n \in \{1, \dots, 2N_c\}. \quad (2.36)$$

Durch ein Gluinokondensat  $\langle\bar{\lambda}\lambda\rangle \neq 0$  wird die Restsymmetrie wiederum spontan zu einer  $\mathbb{Z}_2$ -Symmetrie gebrochen. Letztendlich verbleiben  $N_c$  verschiedene Grundzustände, die sich in der Phase des Gluinokondensats unterscheiden. Dadurch ist der WITTEN-Index der  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie  $I_W = N_c$ . Durch

$m_g \neq 0$  wird diese Entartung verschoben, sodass für  $m_g \geq 0$  das Kondensat  $\langle \bar{\lambda}\lambda \rangle \geq 0$  wird. Wenn die chirale Symmetrie spontan gebrochen ist, erwarten wir bei der renormierten Gluinomasse  $m_g^{\text{ren}} = 0$  einen Phasenübergang erster Ordnung [32].

## Teilchenspektrum

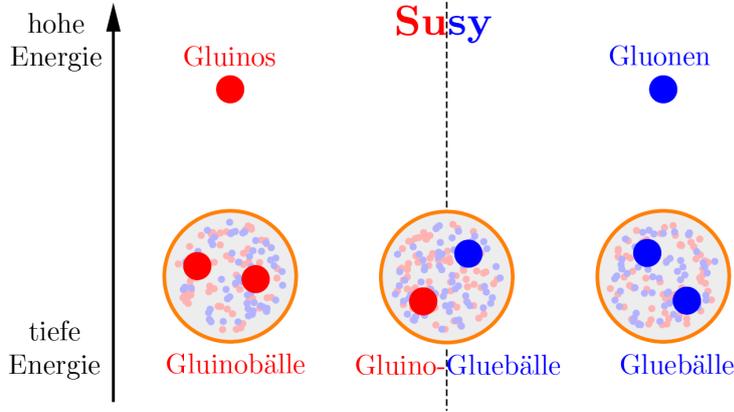


Abb. 2: Bei niedrigen Energien treten als farblose gebundene Zustände Gluebälle, Gluino-Gluebälle und mesonartige Gluinobälle auf, die in entarteten Multipletts angeordnet sind. Bei hohen Energien besteht die  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie aus freien Gluonen und Gluinosen. [17]

Bei hohen Energien besteht die  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie aus freien Gluonen und Gluinosen. Durch das *Confinement* treten bei niedrigen Energien nur farblose Zustände auf. Wie in Abb. 2 dargestellt sind dies mesonartige Gluinobälle, Gluebälle und Gluino-Gluebälle. Dieses Teilchenspektrum kann mit einer effektiven LAGRANGE-Dichte beschrieben werden. In der ungebrochenen Supersymmetrie erwarten wir zwei entartete Massenmultipletts mit unterschiedlichen Massen. Diese chiralen WESS-ZUMINO-Multipletts bestehen beide aus einem skalaren, einem pseudoskalaren und einem fermionischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen. Die physikalische Zustände werden jedoch Mischungen aus Gluon-Gluon, Gluon-Gluino und Gluino-Gluino sein, wodurch sich die Massendifferenz zwischen den entarteten Multipletts vergrößert. Durch eine Gluinomasse  $m_g \neq 0$  wird die Supersymmetrie weich gebrochen und die Massen innerhalb der Multipletts verschoben, wobei das pseudoskalare Boson die größte und das skalare Boson die kleinste Veränderung erfährt [33]. Die Anordnung der im Folgenden vorgestellten Multipletts ist in Abb. 3 zusammengefasst.

In [11] wurde von VENEZIANO und YANKIELOWICZ ein erstes Supermultiplett beschrieben, das wir wegen seines Teilcheninhalts als „mesonischen Typ“ bezeichnen. Die Namensgebung der Teilchen ist an die QCD angelehnt, wobei der Präfix „a-“ auf die adjungierte Darstellung hinweist. Mit dem Ausdruck  $J^{Pc}$  fassen wir den Gesamtdrehimpuls  $J$ , die Parität  $p = \pm 1$  und die Ladungskonjugation  $c = \pm 1$  zusammen. Das VENEZIANO-YANKIELOWICZ-Multiplett besteht aus

- einem bosonischen skalaren  $0^{++}$  Gluinoball  $a-f_0 \sim \bar{\lambda}\lambda$ ,
- einem bosonischen pseudoskalaren  $0^{-+}$  Gluinoball  $a-\eta' \sim \bar{\lambda}\gamma_5\lambda$  und
- einem majoranawertigen Spin- $\frac{1}{2}$ -Gluino-Glueball  $\sim F_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}\lambda$ .

Der darin auftretende exotische Gluino-Glueball hat kein Pendant in der QCD. Von FARRAR, GABADADZE und SCHWETZ wurde in [12] ein zweites Supermultiplett eingeführt, indem sie die effektive Wirkung um einen zusätzlichen Term ergänzten. Dadurch enthält dieses Multiplett Gluebälle und wird als „gluonischer Typ“ bezeichnet. Im FARRAR-GABADADZE-SCHWETZ-Multiplett sind

- ein bosonischer skalarer  $0^{++}$  Glueball  $\sim F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}$ ,
- ein bosonischer pseudoskalarer  $0^{-+}$  Glueball  $\sim \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} F^{\mu\nu} F^{\rho\sigma}$  und
- ein majoranawertiger Spin- $\frac{1}{2}$ -Gluino-Glueball  $\sim F_{\mu\nu} \Sigma^{\mu\nu} \lambda$  enthalten.

Die Autoren argumentieren in [12], dass im supersymmetrischen Limes die Glueball-Zustände leichter seien als die Gluinoball-Zustände. Unter Verwendung anderer Argumente und Hinweisen aus der QCD wurde in [34] jedoch geschlussfolgert, dass die Gluinoball-Zustände die leichtesten sind. Bisher gibt es keine einheitliche Meinung, welche der beiden Behauptungen korrekt ist. Die Entartung der Multipletts ist ein nicht-perturbativer Effekt und die Massenbestimmung per Störungsrechnung nicht zugänglich. Deshalb bieten sich nicht-perturbative Untersuchungen auf dem Gitter an, um das korrekte Massenspektrum zu identifizieren.

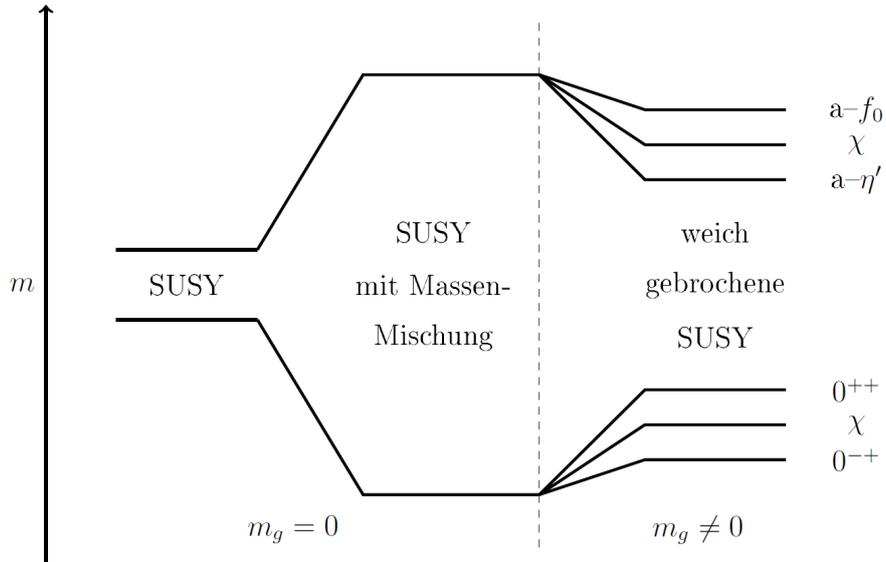


Abb. 3: Skizze der Massenniveaus: In den drei Bereichen sind (i) die beiden reinen Supermultipletts, (ii) deren Massenmischung und (iii) die weiche Supersymmetriebrechung dargestellt. [12, 35]

### 3. Numerische Methodik

In diesem Kapitel widmen wir uns den numerischen Methoden, die wir zur Simulation der  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie benötigen. Die Darstellung der allgemeinen Grundlagen beruht vorrangig auf den Quellen [14, 36] und anhand von [13, 17, 37] haben wir die Teile mit Supersymmetrie-Bezug erarbeitet. Als weitere Quellen, insbesondere im Kapitel über die Observablen, wurden [18, 38, 39] genutzt. Dieses Kapitel beginnen wir mit einigen allgemeinen Begriffen und Definitionen für die Gitterformulierung. Danach stellen wir folgende Monte-Carlo-Methoden vor: METROPOLIS-, Hybrid-Monte-Carlo- und rationaler Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus. Im Anschluss leiten wir sowohl für den Eichsektor als auch für die Fermionen die notwendigen Gitterwirkungen her, bevor wir in Kap. 3.4 auf die Eigenarten der Supersymmetrie eingehen. Es folgen Kapitel zum konjugierten Gradientenverfahren, zur Präkonditionierung und zur Messung der Observablen auf dem Gitter. Diesen Teil schließen wir mit dem chiralen Grenzwert und dem Kontinuumslimit ab. In App. B stellen wir einige weiterführende Themen wie das Doppler-Problem, die Kraftberechnung und Integration der Molekulardynamik vor.

#### 3.1. Gitter-Grundlagen

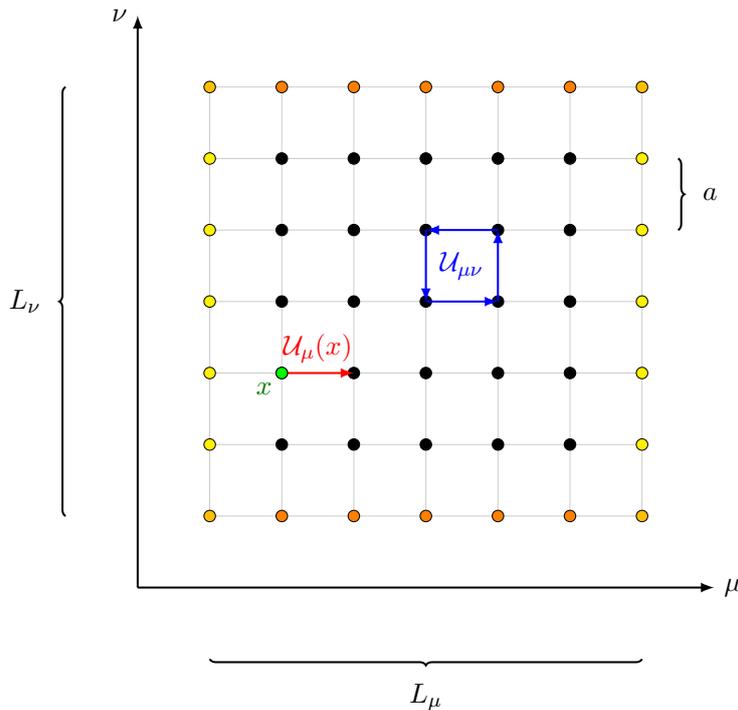


Abb. 4: Zweidimensionale Darstellung des Raumzeitgitters  $\Lambda$  mit Kantenlängen  $L_\mu$  &  $L_\nu$  und Gitterkonstanten  $a$ : In grün ist der Gitterpunkt mit der Koordinate  $x$  hervorgehoben. Mit rot ist die Linkvariable  $\mathcal{U}_\mu(x)$  zwischen den Gitterpunkten  $x$  und  $x + \hat{e}_\mu$  dargestellt. Die Plakette  $\mathcal{U}_{\mu\nu}$  ist in blau gezeigt. Durch die periodischen Randbedingungen werden die gelben und orangenen Punkte jeweils miteinander identifiziert.

Um unsere Theorie in der Euklidischen Raumzeit  $\mathbb{R}^n$  zu simulieren, nutzen wir eine Gitterdiskretisierung. Dieses Gitter  $\Lambda$  wählen wir hyperkubisch mit dem Gitterabstand  $a$  zwischen benachbarten

Gitterpunkten:  $x^\mu = an^\mu$ ,  $n \in \mathbb{Z}^d$ . Auf dem Computer müssen wir uns auf ein endliches Gitter mit  $N_\mu$  Gitterpunkten in Richtung  $\mu = 1, \dots, d$  und dem Volumen  $V = a^d N_1 \cdot \dots \cdot N_d$  beschränken. Wie in Abb. 4 farblich angedeutet, nutzen wir periodische Randbedingungen, wodurch ein Torus mit diskreter Translationsinvarianz entsteht. Durch das Gitter erhalten wir automatisch eine Regularisierung, im Ultravioletten durch den endlichen Gitterabstand  $a$  und im Infraroten durch das endliche Gittervolumen  $|\Lambda| = V$ . Außerdem sind die Impulse  $\mathcal{P}_\mu \in [0, 2\pi)$  dadurch auf die erste BRILLOUIN-Zone eingeschränkt. Den Grenzwert  $V \rightarrow \infty$  nennt man den thermodynamischen Limes und  $a \rightarrow 0$  wird als Kontinuumsliches bezeichnet.

In der Gitterformulierung von Eichtheorien trifft man häufig auf Wechselwirkungen  $(\phi_x, \phi_y)$  zwischen nächsten Nachbarn  $x$  und  $y$ . Dieses Produkt ist unter lokalen Eichtransformationen  $\phi_x \mapsto \Omega_x \phi_x$  nicht invariant. Mit Hilfe des Paralleltransporters  $\mathcal{U}_{xy} \in G$  von  $y$  nach  $x$  können wir das eichinvariante Produkt  $(\phi_x, \mathcal{U}_{xy} \phi_y)$  bilden. Als Weg wählen wir den direkten Link zwischen diesen beiden Punkten. So werden die Eichfelder in natürlicher Weise mit den Gitterlinks assoziiert, vgl. Kap. 2.1. Zum gerichteten Gitterlink von  $x$  nach  $y = x \pm \hat{e}_\mu$  gehört das Eichfeld

$$\mathcal{U}_{xy} = \mathbf{p} e^{ig \int_x^y A_\mu(x) dx^\mu}, \quad (3.1)$$

das wir in verkürzter Schreibweise auch mit  $\mathcal{U}_\mu(x) = \mathcal{U}_{x,\mu} = e^{igaA_\mu(x)}$  bezeichnen. Die Linkvariable beinhaltet im Exponenten das interpolierte Eichfeld  $A_\mu(x) = A_\mu^a(x)T_a$ . Als entgegengerichtetes Gitterfeld haben wir die Inverse  $\mathcal{U}_{x,\mu}^{-1} = \mathcal{U}_{x+\mu,-\mu}$ . Geschlossene Schleifen entsprechen einem pfadgeordneten Produkt von Gitterlinks und werden WILSON-Schleifen genannt. Durch die Zyklizität der Spur können wir aus ihnen durch Spurbildung eichinvariante Größen bilden. Rechteckige Schleife mit den Kantenlängen  $R$  &  $T$  bezeichnen wir mit  $\mathcal{W}(R, T)$  und aus ihrem Skalierungsverhalten  $\lim_{T \rightarrow \infty} \mathcal{W}(R, T) \sim e^{-TV(R)}$  können wir in der reinen Eichtheorie das *Confinement* untersuchen. Das bekannte Flächengesetz für WILSON-Schleifen besagt, dass bei einem exponentiellen Abfall  $e^{-\sigma \cdot RT}$  mit der Fläche  $A = RT$  *Confinement* vorliegt und bei  $e^{-\gamma \cdot \text{Umfang}}$  die Theorie *deconfined* ist [9]. Die kleinstmögliche Schleife auf dem Gitter

$$\mathcal{U}_{x,\mu\nu} = \mathcal{U}_{x+\nu,-\nu} \mathcal{U}_{x+\mu+\nu,-\mu} \mathcal{U}_{x+\mu,\nu} \mathcal{U}_{x,\mu} = \mathcal{U}_{x,\nu}^{-1} \mathcal{U}_{x+\nu,\mu}^{-1} \mathcal{U}_{x+\mu,\nu} \mathcal{U}_{x,\mu} \quad (3.2)$$

nennt man Plakette (s. Abb. 4). Später werden wir in Kap. 3.3.1 aus Plaketten eine Gittereichwirkung konstruieren. Zur Kraftberechnung werden wir außerdem den *Staple*

$$W_{x,\mu} = \sum_{\substack{\nu=0 \\ \nu \neq \mu}}^{d-1} \left( \mathcal{U}_{x+\mu,\nu} \mathcal{U}_{x+\nu,\mu}^\dagger \mathcal{U}_{x,\nu}^\dagger + \mathcal{U}_{x+\mu,-\nu,\nu}^\dagger \mathcal{U}_{x-\nu,\mu}^\dagger \mathcal{U}_{x-\nu,\nu} \right) \quad (3.3)$$

benötigen, der in Abb. 5 dargestellt ist. Eine WILSON-Schleife, die bei festem  $\vec{x}$  ausschließlich in zeitlicher Richtung verläuft und durch (anti)periodische Randbedingungen geschlossen ist, bezeichnet man als POLYAKOV-Schleife

$$P(\vec{x}) = \text{tr} \left( \prod_{j=0}^{N_t-1} \mathcal{U}_0(j, \vec{x}) \right). \quad (3.4)$$

Im Erwartungswert  $\langle P \rangle = e^{-F_a/T}$  tritt die freie Energie eines statischen Quarks in der fundamentalen Darstellung auf. Wenn dieser Erwartungswert *quenched* ungleich Null ist, liegt *Deconfinement* vor.

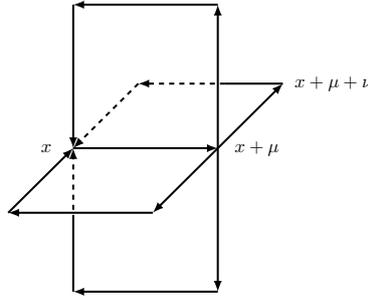


Abb. 5: Dargestellt ist der *Staple*  $\mathcal{W}(x, \mu)$  in drei Dimensionen.

Wenn wir vom internen Unterraum sprechen, so bezeichnen wir damit den zu jedem Gitterpunkt gehörenden Unterraum der Spinor-, Farb- und *Flavor*-Indizes. In der fundamentalen Darstellung nimmt der Farbindex  $N_c$  Werte an bzw. in der adjungierten Darstellung  $N_c^2 - 1$ . In der vierdimensionalen  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie mit Eichgruppe  $SU(3)$  haben wir nur einen *Flavor*, womit der interne Unterraum die Größe  $N_{\text{int}} = 32$  hat.

### 3.2. Monte-Carlo und *Importance Sampling*

Zur numerischen Simulation betrachten wir die Euklidische Wirkung  $S_E[\phi]$  auf einer Raumzeitdiskretisierung  $\Lambda$ . Die Felder  $\phi(x)$  sind von der Raumzeitkoordinate  $x$  abhängig. Mit diesen Größen kann das Euklidische Pfadintegral als

$$Z = \int_{\Lambda} \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]} \quad (3.5)$$

geschrieben werden. Zur Berechnung von Observablen  $O$  wird das Ensemblemittel

$$\langle O \rangle = \int_{\Lambda} p[\phi] O[\phi] \quad \text{mit} \quad p[\phi] = \frac{\mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]}}{Z} \quad (3.6)$$

gebildet. Für die Integration dieses hochdimensionalen Integrals sind gewöhnliche numerische Integrationsroutinen ungeeignet. Um ein solches Integral zu berechnen nutzen wir die Äquivalenz zwischen Gl. (3.6) und dem Mittelwert der Observable  $O$  in einem kanonischen Ensemble aus. Mit der Exponentialfunktion als statistisches BOLTZMANN-Gewicht werden viele Bereiche des Konfigurationsraumes von  $\mathcal{U}$  unterdrückt. Beim *Importance Sampling* nutzen wir diese Beobachtung, um das Integral effizient zu berechnen. Mit einer Monte-Carlo-Methode erzeugen wir eine MARKOV-Kette (vgl. App.B.1) für die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $p[\phi]$ . Wenn die Feldkonfigurationen  $C[\phi]$  gemäß  $p[\phi]$  verteilt sind, dann kann der Erwartungswert aus Gl. (3.6) durch die endliche Summe

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N O[C_n] \quad (3.7)$$

approximiert werden. In der reinen YANG-MILLS-Theorie werden die Zufallsvariablen gemäß der Wahrscheinlichkeitsdichte  $P[\mathcal{U}] = \frac{e^{-S_E[\mathcal{U}]}}{Z}$  gezogen und der Integrand wird durch Konfigurationen  $\mathcal{U}$  dominiert, die zu einer kleinen Wirkung  $S_E[\mathcal{U}]$  gehören. Wenn in der Theorie Fermionen vorhanden sind, dann tritt im Wahrscheinlichkeitsmaß zusätzlich pro *Flavor* die Determinante des dazugehörigen DI-

RAC-Operators auf. Durch MARKOV-Ketten kann man die Gültigkeit der Approximation aus Gl. (3.7) für  $N \rightarrow \infty$  sicherstellen. Eine Fehlerabschätzung bei endlichem  $N$  ist über

$$\langle O \rangle - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(\{U_i\}) \sim \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \quad (3.8)$$

möglich, d. h. die Abweichung vom exakten Resultat ist unabhängig von der Dimension des Integrals. In der Praxis schätzen wir den Fehler durch die *Jackknife*-Methode (s. App. B.7) ab und nutzen dabei das sogenannte *Binning* (s. App. B.6).

### 3.2.1. Metropolis-Algorithmus

Mit dem in Alg. 1 vorgestellten METROPOLIS-Algorithmus können nach  $P(x)$  verteilte Zufallsvariablen  $\{x_1, \dots, x_N\}$  erzeugt werden. Dieser Algorithmus kann immer angewandt werden, ist jedoch oft nicht effektiv.

---

#### Algorithmus 1 : METROPOLIS-Algorithmus

---

**Input** : Anzahl  $N$ , Anfangspunkt  $x_0$

**Output** : nach  $P(x)$  verteilte Zufallsvariablen  $\{x_1, \dots, x_N\}$

```

1 for  $i=1:N$  do
2   wähle gleichverteilte Zufallszahl  $r \in [0, 1]$ 
3   wähle Zufallsvariable  $x'$ 
4   if  $P(x')/P(x_{i-1}) > r$  then
5     |  $x_i = x'$ 
6   else
7     |  $x_i = x_{i-1}$ 

```

---

Für  $P(x') > P(x_{i-1})$  ist die *If*-Schleife wegen  $r \in [0, 1]$  stets erfüllt. Physikalisch ausgedrückt steht  $P(x) = e^{-S}$  für den Gewichtungsfaktor im Euklidischen Pfadintegral. Die Bedingung in Codezeile 4 ist von der Änderung der Wirkung  $\Delta S = S' - S_{i-1}$  über  $\exp^{-\Delta S}$  abhängig. Folglich versucht der METROPOLIS-Algorithmus die Energie des Systems zu minimieren, indem Verringerungen  $\Delta S < 0$  immer akzeptiert werden. Vergrößerungen  $\Delta S > 0$  werden hingegen lediglich mit einer Wahrscheinlichkeit angenommen, die mit wachsendem  $\Delta S$  exponentiell gegen Null geht.

### 3.2.2. HMC-Algorithmus

Für die Simulation von Eichtheorien ist der sogenannte Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus (HMC) eine weit verbreitete Methode zur Erzeugung von MARKOV-Ketten [40]. Dieser Algorithmus besteht aus der Kombination einer molekulardynamischen Evolution und einem METROPOLIS-Akzeptanzschritt. Für die Molekulardynamik definieren wir eine HAMILTON-Funktion  $H[\mathcal{P}, \mathcal{U}] = S[\mathcal{U}] + \frac{\mathcal{P}^2}{2}$  mit kanonisch konjugierten Impulsen  $\mathcal{P}$  und integrieren die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen entlang der fiktiven HMC-Zeit  $\tau$ . Die Impulse  $\mathcal{P}$  werden zu Beginn jeder Trajektorie durch einen Zufallszahlengenerator

gaußverteilt erzeugt und entsprechen keinen echten physikalischen Impulsen. Definieren wir die Kraft  $F_{x\mu}[\mathcal{U}] = \frac{\delta S[\mathcal{U}]}{\delta \mathcal{U}_\mu(x)}$ , dann lauten die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen der Molekulardynamik

$$\frac{d\mathcal{P}_\mu(x)}{d\tau} = -\frac{\delta H[\mathcal{P}, \mathcal{U}]}{\delta \mathcal{U}_\mu(x)} = -\frac{\delta S[\mathcal{U}]}{\delta \mathcal{U}_\mu(x)} = -F_{x\mu}, \quad (3.9)$$

$$\frac{d\mathcal{U}_\mu(x)}{d\tau} = \frac{\delta H[\mathcal{P}, \mathcal{U}]}{\delta \mathcal{P}_\mu(x)} = \mathcal{P}_\mu(x). \quad (3.10)$$

Im Falle der YANG-MILLS-Theorie liegen die Impulse  $\mathcal{P}$  und Kräfte  $F$  in der LIE-Algebra. Die Integratoren der Entwicklungskoeffizienten  $\mathcal{P}_\mu^a(x)$  und  $F_\mu^a[\mathcal{U}(x)]$  lauten

$$T_{\mathcal{P}}(\delta\tau) : \mathcal{P}_\mu^{a(i)}(x) \mapsto \mathcal{P}_\mu^{a(i+1)}(x) = \mathcal{P}_\mu^{a(i)}(x) - \delta\tau F_\mu^a[\mathcal{U}^{(i)}(x)], \quad (3.11)$$

$$T_{\mathcal{U}}(\delta\tau) : \mathcal{U}_\mu^{(i)}(x) \mapsto \mathcal{U}_\mu^{(i+1)}(x) = e^{i\delta\tau \mathcal{P}_\mu^{a(i)}(x) T_a} \mathcal{U}_\mu^{(i)}(x). \quad (3.12)$$

In Theorien mit der Eichgruppe  $SU(N_c)$  ist die HMC-Kraft durch

$$F_{x,\mu}^a[\mathcal{U}^{(i)}] = \frac{\beta}{N_c} \text{Im tr} \left( T^a \mathcal{U}_\mu^{(i)}(x) \mathcal{W}_\mu^{(i)}(x) \right) \quad (3.13)$$

mit dem *Staple*  $\mathcal{W}_\mu^{(i)}(x)$  gegeben, s. App. B.3. Könnten wir die Bewegungsgleichungen exakt integrieren, dann wäre die Energiedifferenz  $\Delta H = H' - H = 0$  und die neue Konfiguration würde immer akzeptiert werden. In der Praxis führt die numerische Integration jedoch zu einer geringen Energiedifferenz. Erst durch den METROPOLIS-Schritt am Ende jeder Trajektorie wird der Algorithmus exakt, das bedeutet numerische Integrationsfehler aus der molekulardynamischen Trajektorie pflanzen sich nicht in das Endresultat fort. Dennoch beeinflusst der Integrator den HMC-Algorithmus, denn je geringer seine Diskretisierungseffekte ausfallen desto größer ist die Akzeptanzrate. Mit der Schrittweite  $\delta\tau$  kann zwischen Genauigkeit und Rechenzeit abgewogen werden. Ist der Integrator (bis auf Maschinengenauigkeit) zeitreversibel und phasenraumvolumenerhaltend, dann ist die *detailed balance* Bedingung erfüllt (vgl. App. B.1). In Algorithmus 2 wird der HMC-Algorithmus als Pseudocode zusammengefasst.

---

#### Algorithmus 2 : HMC-Algorithmus

---

**Input** : Anfangskonfiguration, Anzahl  $K$  der Konfigurationen, Anzahl  $N$  der Integrationsschritte,  
Trajektorienlänge  $\tau = N \cdot \Delta\tau$

**Output** :  $K$  Konfigurationen

- 1 **for**  $i=1:K$  **do**
  - 2     erzeuge gaußverteilte Impulse  $\mathcal{P}$
  - 3     integriere Molekulardynamik entlang der Zeit  $\tau$  mit  $N$  Integrationsschritten, s. App. B.4
  - 4     akzeptiere neue Konfiguration mit Wahrscheinlichkeit  $\min(1, e^{-\Delta H})$
- 

### 3.2.3. RHMC-Algorithmus

Der rationale Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus (RHMC) ist eine Kombination aus dem gewöhnlichen HMC-Algorithmus und einer rationalen Approximation zur Berechnung der inversen Fermionmatrix [41]. Weshalb wir diesen Algorithmus zur Simulation der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie benötigen, wird

im Folgenden klar. Ausgangspunkt für die Gittersimulation ist das Pfadintegral mit DIRAC- bzw. MAJORANA-Fermionen

$$Z_D = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\mathcal{U} e^{-S[\mathcal{U}] - \text{tr}(\bar{\psi} D[\mathcal{U}] \psi)} = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathcal{U} \det(D[\mathcal{U}]) e^{-S[\mathcal{U}]} \quad (3.14)$$

$$Z_M = \int \mathcal{D}\lambda \mathcal{D}\mathcal{U} e^{-S[\mathcal{U}] - \text{tr}(\bar{\lambda} D[\mathcal{U}] \lambda)} = \int \mathcal{D}\lambda \mathcal{D}\mathcal{U} e^{-S[\mathcal{U}] - \text{tr}(\lambda^T \mathcal{C} D[\mathcal{U}] \lambda)} = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathcal{U} \text{Pf}(\mathcal{C} D[\mathcal{U}]) e^{-S[\mathcal{U}]}, \quad (3.15)$$

wobei wir im letzten Schritt jeweils die GRASSMANN-Variablen ausintegriert haben, um auf dem Computer mit gewöhnlichen  $c$ -Zahlen rechnen zu können. In den vorangegangenen Gleichungen ist  $\psi$  ein DIRAC-Spinor mit  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ ,  $\lambda = \lambda_c$  ein MAJORANA-Spinor,  $\mathcal{U}$  das Eichfeld,  $D[\mathcal{U}]$  der DIRAC-Operator,  $\mathcal{C}$  die Ladungskonjugationsmatrix,  $\mathcal{N}$  ein Normierungsfaktor und Pf die Pfaffsche Determinante. Die verallgemeinerte Spur  $\text{tr}$  enthält hier neben der Summe über alle internen Indizes (Farbe, *Flavor* & Spinorindex) auch die Summation über die Raumzeitpunkte. Da die MAJORANA-Fermionen  $\lambda$  und  $\bar{\lambda}$  nicht unabhängig sind, läuft die Integration in Gl. (3.15) lediglich über eine GRASSMANN-Variable und das Gaußsche Integral ergibt eine Pfaffsche Determinante. Die allgemeine Definition der Pfaffschen Determinante für komplexe antisymmetrische  $(2n \times 2n)$ -Matrizen  $M$  mit den Einträgen  $m_{i,j}$  lautet

$$\text{Pf}(M) = \frac{1}{2^n n!} \varepsilon_{i_1 j_1 \dots i_n j_n} m_{i_1, j_1} \dots m_{i_n, j_n}. \quad (3.16)$$

Der Zusammenhang zur Determinante ist durch  $[\text{Pf}(M)]^2 = \det(M)$  gegeben. Aus diesem Grund spricht man gelegentlich bei MAJORANA-Fermionen von einem halben *Flavor*.

Führen wir den positiven hermiteschen Operator  $M = D^\dagger D$  sowie die Divisoren  $n = 2$  für DIRAC- und  $n = 4$  für MAJORANA-Fermionen ein, so können wir die Gleichungen (3.14) & (3.15) zu

$$Z = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathcal{U} \text{sign}(D[\mathcal{U}]) \left| (\det M)^{1/n} \right| e^{-S[\mathcal{U}]} \quad (3.17)$$

kombinieren. Das Vorzeichen  $\text{sign}(D[\mathcal{U}])$  steht bei DIRAC-Fermionen für das Vorzeichen der Determinanten  $\text{sign}(\det D[\mathcal{U}])$  und bei MAJORANA-Fermionen für das Vorzeichen der Pfaffschen Determinanten  $\text{sign}(\text{Pf} D[\mathcal{U}])$ . Wenn dieses Vorzeichen von Eins abweicht, führt dies zum sogenannten Vorzeichenproblem [42], worauf wir in Kap. 3.4.1 näher eingehen. Damit wir den RHMC-Algorithmus anwenden können, muss das Wahrscheinlichkeitsmaß positiv sein. Wir nehmen deshalb für die weitere Diskussion  $\text{sign}(D) = 1$  an.

Anstatt die Determinante der sehr großen<sup>[4]</sup> Matrix explizit und numerisch teuer auszurechnen, führen wir sogenannte Pseudofermionen ein [43]. Dabei handelt es sich um bosonische Variablen, die genauso viele Freiheitsgrade wie die Fermionen besitzen. Im Pfadintegral tritt die (nicht-lokale) Determinante des DIRAC-Operators auf, die wir mit Hilfe von  $N_{\text{pf}}$  (lokalen) gaußverteilten Pseudofermionen  $\phi$  approximieren. Durch Einführung der bosonischen Wirkung

$$S_B[\mathcal{U}, \phi] = S[\mathcal{U}] + \text{tr} \sum_{p=1}^{N_{\text{pf}}} \phi_p^\dagger M^{-q} \phi_p \quad (3.18)$$

<sup>[4]</sup>In unserem Szenario enthält die Matrix  $n^2 = (\Lambda \cdot N_f \cdot N_c \cdot N_s)^2 \approx (16^4 \cdot 1 \cdot 8 \cdot 4)^2 \approx 4,4 \cdot 10^{12}$  komplexe Einträge.

und des Quotienten  $q = \frac{1}{nN_{\text{pf}}}$  können wir die Zustandsdichte aus Gl. (3.17) zu

$$Z = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathcal{U} \mathcal{D}\phi e^{-S_{\text{B}}[\mathcal{U}, \phi]} \quad (3.19)$$

umschreiben. Mit Hilfe einer rationalen Approximation, bei der eine beliebige Funktion durch

$$r(x) = x^{-q} \approx \alpha_0 + \sum_{r=1}^{N_{\text{R}}} \frac{\alpha_r}{x + \beta_r} \quad (3.20)$$

genähert wird, berechnen wir  $M^{-q}$ . Durch den REMEZ-Algorithmus können die Koeffizienten  $\alpha_i$  und  $\beta_i$  für eine beliebige rationale Zahl  $q$  bestimmt werden [44, 45]. Damit der RHMC-Algorithmus exakt bleibt, benötigen wir im Akzeptanzschritt  $r_{\text{Akzep}}(M) = M^{-q}$  Maschinengenauigkeit. Für die Molekulardynamik kann hingegen eine einfachere Approximation genutzt werden. Aus Gl. (3.18) folgt

$$\begin{aligned} S_{\text{B}}[\mathcal{U}, \phi] &= S[\mathcal{U}] + S_{\text{MD}}[\phi] + S_{\text{Akzep}}[\phi], \\ S_{\text{MD}}[\phi] &= \text{tr} \sum_{p=1}^{N_{\text{pf}}} \phi_p^\dagger r_{\text{MD}}(M) \phi_p, \\ S_{\text{Akzep}}[\phi] &= \text{tr} \sum_{p=1}^{N_{\text{pf}}} \phi_p^\dagger (r_{\text{Akzep}}(M) - r_{\text{MD}}(M)) \phi_p. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Damit auf dem gewählten Approximationsintervall  $I = \{x_{\text{min}}, x_{\text{max}}\}$  Maschinengenauigkeit erreichbar ist, muss die Berechnung der Koeffizienten  $\alpha_r$  und  $\beta_r$  mit 60-100 Dezimalstellen erfolgen. Die Konditionszahl (s. Gl. (3.34) für ihre Definition)  $\kappa_{N_{\text{pf}}}$  des Operators  $M^{-1/(nN_{\text{pf}})}$  ist die  $N_{\text{pf}}$ -te Wurzel der ursprünglichen Konditionszahl  $\kappa_1$  von  $M^{-1/n}$ , wodurch die Inversion einfacher und die Kraftberechnung schneller wird. Wie in [46] begründet wird, kann mit  $N_{\text{PF}} \approx \frac{\ln \kappa(M)}{n}$  aus der Konditionszahl die optimale Pseudofermionenanzahl abgeschätzt werden. In der Regel nutzen wir nur ein einziges Pseudofermion für unsere Simulationen. Im Pseudocode 3 ist der gesamte Algorithmus zusammengefasst.

Darüber hinaus ist eine dritte Approximation  $r_{\text{pf}}(M) \approx \sqrt{M^q}$  bei der Pseudofermion-Erzeugung aus einem gaußverteilten Zufallsvektor notwendig. Hierbei sollte die rationale Approximation ebenfalls bis auf Maschinengenauigkeit exakt sein. Für alle Approximationen wird das Intervall  $I = \{\lambda_{\text{min}}, \lambda_{\text{max}}\}$  so gewählt, dass sowohl der kleinste Eigenwert  $\lambda_{\text{min}}$  als auch der größte Eigenwert  $\lambda_{\text{max}}$  von  $M$  enthalten sind. Bei der Berechnung der Pseudofermionen nutzen wir in der Regel für die Anzahl der Koeffizienten  $N_{\text{R}} = 25$  und für die Eigenwerte  $\lambda_{\text{min}} = 10^{-5}$  &  $\lambda_{\text{max}} = 10$ . Typische Werte bei  $r_{\text{MD}}(M)$  sind  $N_{\text{R}} = 10$ ,  $\lambda_{\text{min}} = 10^{-3}$  und  $\lambda_{\text{max}} = 10$ . Hier ist eine gute Abwägung zwischen Genauigkeit und Geschwindigkeit besonders wichtig, denn die Kraftberechnung wird häufig ausgeführt. Die Präzision kann solange reduziert werden bis die Akzeptanzrate zu weit sinkt. Im Akzeptanzschritt wählen wir wie bei den Pseudofermionen meist  $N_{\text{R}} = 25$ ,  $\lambda_{\text{min}} = 10^{-5}$  sowie  $\lambda_{\text{max}} = 10$ .

---

**Algorithmus 3 : RHMC-Algorithmus**

---

**Input** : Anfangskonfiguration, Anzahl  $K$  der Konfigurationen, Anzahl  $N_{\text{pf}}$  der Pseudofermionen, Anzahl  $N$  der Integrationsschritte, Trajektorienlänge  $\tau = N \cdot \Delta\tau$

**Output** :  $K$  Konfigurationen

```
1 for  $i=1:K$  do
2   erzeuge gaußverteilte Impulse  $\mathcal{P}$ 
3   for  $j=1:N_{\text{pf}}$  do
4     erzeuge gaußverteilten komplexen Vektor  $\eta_j$ 
5     berechne  $\phi_j = r_{\text{pf}} \eta_j$ 
6   integriere Molekularodynamik entlang der Zeit  $\tau$  mit  $N$  Integrationsschritten unter Verwendung
   der rationalen Approximation  $r_{\text{MD}}(M)$ , s. App. B.4
7   akzeptiere neue Konfiguration mit Wahrscheinlichkeit  $\min(1, e^{-\Delta H})$  unter Verwendung der
   rationalen Approximation  $r_{\text{Akzep}}(M)$ 
```

---

Wenn die rationalen Approximationen für die Pseudofermionen und den Akzeptanzschritt in Maschinengenauigkeit erfolgen, dann ist der RHMC-Algorithmus genauso exakt wie der HMC-Algorithmus [40]. Exakt bezieht sich nur auf die Erzeugung und Konvergenz der MARKOV-Kette, denn unsere Simulationen enthalten statistische und systematische Fehlerquellen [47]. Bei der Näherung des Pfadintegrals durch eine endliche Anzahl von Konfigurationen entsteht eine statistische Unsicherheit, die bei verfügbarem Rechenbudget durch mehr Konfigurationen reduziert werden kann. Eine weitere Fehlerquelle ist der endliche Gitterabstand und die damit verbundenen Diskretisierungsfehler. Um diese systematische Ursache zu minimieren, können wir feinere Gitter und verbesserte Wirkungen (s. Kap. 3.3.3 und App. B.5) nutzen. Zuletzt resultiert aus dem endlichen Gittervolumen ein systematischer Fehler, weil die Massen derjenigen Zustände angehoben werden, die nicht auf das Gitter passen. Dies betrifft leichtere Teilchen stärker als schwerere, da die COMPTON-Wellenlänge proportional zur inversen Masse ist.

### 3.3. Gitterwirkungen

In den folgenden Abschnitten stellen wir die relevanten Gitterwirkungen vor. Namentlich sind dies für den Eichsektor die WILSON- und die SYMANZIK-Eichwirkung, sowie zur Behandlung der Fermionen der WILSON-DIRAC-Operator. Anschließend wenden wir uns den Randbedingungen der Felder zu.

#### 3.3.1. Wilson-Eichwirkung

Zur Herleitung der WILSON-Eichwirkung setzen wir in Gl. (3.2) das Eichfeld aus Gl. (3.1) ein und erhalten nach wenigen Umformungen

$$\mathcal{U}_{x,\mu\nu} = e^{iga^2 F_{\mu\nu} + \mathcal{O}(a^3)}. \quad (3.22)$$

Durch Addition der inversen Plakette und Entwicklung der Exponentialfunktion erhalten wir einen Ausdruck für das Quadrat des Feldstärketensors,

$$\mathcal{U}_{x,\mu\nu} + \mathcal{U}_{x,\mu\nu}^{-1} = 2 \cdot \mathbb{1} - g^2 a^4 F_{\mu\nu}^2 + \mathcal{O}(a^6). \quad (3.23)$$

Damit gelangen wir zur WILSON-Wirkung [9] für  $SU(N_c)$  Eichgruppen

$$S_g[\mathcal{U}] = \frac{\beta}{N_c} \sum_{\square} \text{tr} \left( \mathbb{1} - \frac{1}{2} (\mathcal{U}_{\square} + \mathcal{U}_{\square}^{\dagger}) \right) = \beta \sum_{x \in \Lambda} \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 4} \left( 1 - \frac{1}{N_c} \text{Re} [\text{tr} \mathcal{U}_{\mu\nu}] \right), \quad (3.24)$$

wobei die Summe über alle Plaketten  $\mathcal{U}_{\square}$  läuft. Der Parameter  $\beta = \frac{2N_c}{ag^2}$  hängt sowohl von der Eichgruppe als auch vom Gitterabstand  $a$  und der Kopplung  $g$  ab. Gegenüber der Kontinuumswirkung besitzt die Gitterformulierung aus Gl. (3.24) bei endlichen Gitterabständen  $a$  einen Diskretisierungsfehler der Ordnung  $\mathcal{O}(a^2)$ . Im Kontinuum ist eine Eichfixierung notwendig, um Divergenzen zu beseitigen. Auf dem Gitter ist dies nicht erforderlich, weil das HAAR-Maß  $\prod_l d\mathcal{U}_l$  über alle Links  $l$  normiert ist.

### 3.3.2. Wilson-Dirac-Operator

Mit Hilfe des WILSON-Massenterms werden die unphysikalischen Fermion-Doppler beseitigt, wie in App. B.2 erläutert wird. Damit können wir die fermionische WILSON-Wirkung

$$S_f^W[\psi(x), \bar{\psi}(x), \mathcal{U}(x)] = \sum_{f=1}^{N_f} a^4 \sum_{x,y \in \Lambda} \bar{\psi}^{(f)}(x) D_W^{(f)}(x,y) \psi^{(f)}(y) \quad (3.25)$$

für  $N_f$  Flavors mit dem WILSON-DIRAC-Operator

$$\left[ D_W^{(f)}(x,y) \right]_{ab}^{\alpha\beta} = \left( m^{(f)} + \frac{4}{a} \right) \delta_{\alpha\beta} \delta_{ab} \delta_{x,y} - \frac{1}{2a} \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} [\mathbb{1} - \gamma_{\mu}]_{\alpha\beta} \mathcal{U}_{\mu}(x) \delta_{x+\mu,y} \quad (3.26)$$

schreiben, wobei  $\gamma_{-\mu} \equiv -\gamma_{\mu}$  und  $\mathcal{U}_{-\mu}(x) \equiv \mathcal{U}_{\mu}^{\dagger}(x - \mu)$ . Diese Wirkung bricht die chirale Symmetrie bei endlichem Gitterabstand  $a$ . Im Kontinuumslimit wird die chirale Symmetrie wiederhergestellt, wenn die Masse  $m^{(f)}$  richtig abgestimmt ist (s. Kap. 3.8). Eine wichtige Eigenschaft des WILSON-DIRAC-Operators ist die  $\gamma_5$ -Hermizität,

$$D_W^{\dagger} = \gamma_5 D_W \gamma_5. \quad (3.27)$$

Durch Reskalierung der Spinoren können wir  $m^{(f)} + \frac{4}{a}$  absorbieren und erreichen

$$\left[ D_W^{(f)}(x,y) \right]_{ab}^{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ab} \delta_{x,y} - \kappa^{(f)} \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} [\mathbb{1} - \gamma_{\mu}]_{\alpha\beta} \mathcal{U}_{\mu}(x) \delta_{x+\mu,y}, \quad (3.28)$$

wodurch der erste Summand, der die Selbstwechselwirkung beschreibt, trivial wird. Der eingeführte Parameter  $\kappa^{(f)} = \frac{1}{2(am^{(f)}+4)}$  wird *Hopping-Parameter* genannt. Die fermionische Wirkung mit dem WILSON-DIRAC-Operator aus Gl. (3.28) besitzt  $\mathcal{O}(a)$  Diskretisierungsfehler.

### 3.3.3. Symanzik-Verbesserung der Eichwirkung

Bei der numerischen Umsetzung der Kontinuumswirkung haben wir gewisse Freiheiten. Von besonderem Interesse sind Gitterwirkungen, die gegenüber der naiven Diskretisierung bei endlichen Gitterabständen kleinere Diskretisierungsfehler besitzen. Solange die verbesserte Wirkung zum selben Kontinuumslikes führt, beschreiben wir weiterhin die gewünschte Theorie. Dadurch können wir eine schnellere Konvergenz in den Kontinuumslikes und geringere Symmetrieverletzungen bei endlichen Gitterabständen erreichen [48, 49].

Eine mögliche Verallgemeinerung der Eichwirkung aus Gl. (3.24) bezieht neben den Plaketten  $\mathcal{U}_\square$  zusätzlich alle rechteckigen Pfade um zwei Plaketten  $\mathcal{U}_{\square\square}$  mit ein:

$$S_g[\mathcal{U}] = \frac{\beta}{N_c} \left( c_0 \sum_{\square} \text{tr}(\mathbb{1} - \text{Re}\mathcal{U}_\square) + c_1 \sum_{\square\square} \text{tr}(\mathbb{1} - \text{Re}\mathcal{U}_{\square\square}) \right). \quad (3.29)$$

Werden die Koeffizienten  $c_0 = 1$  und  $c_1 = 0$  gesetzt, erhalten wir die WILSON-Wirkung aus Gl. (3.24). In Simulationen der YANG-MILLS-Theorie mit Fermionen bietet die *tree-level* verbesserte SYMANZIK-Eichwirkung mit den Koeffizienten  $c_0 = 1 - 8c_1$  und  $c_1 = -\frac{1}{2}$  den Vorteil, dass die statistischen Fluktuationen kleiner werden.

### 3.3.4. Randbedingungen

Für Eichtheorien mit Fermionen bei endlicher Temperatur benötigen wir antiperiodische Randbedingungen. Im Grenzwert  $V \rightarrow \infty$  sollten die Randbedingungen keine Rolle mehr spielen. In unserem Fall unterliegt das fermionische Feld  $\lambda$  zusätzlich der MAJORANA-Bedingung. Deshalb sind nur periodische (supersymmetrische) Randbedingungen oder antiperiodische (thermische) Randbedingungen mit erlaubt. Im erstgenannten Fall liefert das Pfadintegral den WITTEN-Index. Mit antiperiodischen Randbedingungen ergibt das Pfadintegral die thermische Zustandsdichte mit Temperatur  $T = \frac{1}{aN_t}$ , wodurch die Supersymmetrie gebrochen wird. Sowohl im periodischen als auch antiperiodischen Szenario sollte das Spektrum des DIRAC-Operators zur reellen Achse spiegelsymmetrisch sein. Demzufolge treten die Eigenwerten in komplexen Paaren auf und wir erhalten eine positive Determinante. Über das Vorzeichen der Pfaffschen Determinanten sind keine allgemeinen Aussagen möglich. In allen anderen Fällen wählen wir stets periodische Randbedingung, sowohl bei Fermionen in den räumlichen Richtungen als auch bei Bosonen in allen Raumzeitrichtungen.

## 3.4. Supersymmetrie auf dem Gitter

Bei der Simulation supersymmetrischer Theorien ergeben sich neue Herausforderungen, die über die bekannten Probleme der Gitter-QCD hinausgehen. Ihr Ursprung liegt in der Natur der Supersymmetrie selbst. Gewöhnlich werden Fermionen und Bosonen mit verschiedenen Methoden auf dem Gitter realisiert. Andererseits sind diese beiden Teilchentypen durch die Supersymmetrie eng miteinander verwoben. Von CURCI und VENEZIANO wurde die Euklidische Gitterformulierung der SYM-Theorie vorgeschlagen [1]. Für die Eichfelder wird die gewöhnliche WILSON-Wirkung aus Kap. 3.3.1 und für

die Gluinos WILSON-Fermionen in der adjungierten Darstellung genutzt. In unseren Simulationen verwenden wir die Eichwirkung mit SYMANZIK-Verbesserung aus Kap. 3.3.3. Wie in Kap. 2.2 dargestellt wurde, ist die Superalgebra die Erweiterung der POINCARÉ-Algebra. Auf dem Gitter ist die POINCARÉ-Symmetrie gebrochen, weil durch die Gitterstruktur keine infinitesimalen Translationen möglich sind. Dadurch ist auch die Supersymmetrie auf dem Gitter gebrochen [50]. Analytisch geht die Wirkung unter einer Supersymmetrietransformation meist in eine totale Ableitung  $\int d^4x \partial_\mu V^\mu$  über. Auf dem Gitter ist dies nur approximativ erfüllt, da für den letzten Schritt die LEIBNIZ-Regel benötigt wird, welche die diskrete Ableitung nicht erfüllt [51, 52]. Mit nicht-lokalen Ableitungen könnte die LEIBNIZ-Regel auf dem Gitter gerettet werden, jedoch ist unweigerlich die Lokalität oder die Supersymmetrie auf dem Gitter gebrochen. In einem allgemeineren Kontext ist das gängige Problem, Gitterfeldtheorien mit erhaltener Chiralität zu konstruieren, als NIELSEN-NINOMIYA-Theorem bekannt [53]. Unabhängig davon kann die Supersymmetrie durch das endliche Gittervolumen gebrochen sein. Zur Vernachlässigung dieser Effekte muss die Gitterlänge deutlich größer als die COMPTON-Wellenlänge des leichtesten Teilchens sein. Da das leichteste Teilchen der QCD, das Pion, in der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie keinem physikalischen Zustand entspricht, werden kleinere Volumeneffekte als in der QCD vermutet [54]. Der resultierende Fehler liegt bei einer Gittergröße von etwa 1,2 fm (in Einheiten der QCD) in derselben Größenordnung wie der statistische Fehler und kann in diesem Fall vernachlässigt werden [55]. Typischerweise führt die verbleibende Gittersymmetrie dazu, dass im Kontinuumslikes die volle Raumzeitsymmetrie wieder hergestellt wird. Hingegen bleibt die Supersymmetrie wie auch die chirale Symmetrie gebrochen. In [11] wurde gezeigt, dass der einzige supersymmetriebrechende Operator das Gluinokondensat ist, weshalb chirale GINSPARG-WILSON-Fermionen die erste Wahl wären [56]. Dennoch nutzen wir die deutlich einfacher zu simulierenden WILSON-Fermionen in Kombination mit einem *Feintuning* der Gluinomasse zum masselosen chiralen Limes (s. Kap. 3.8). Dadurch sollte im Kontinuumslikes die Supersymmetrie und die chirale Symmetrie wieder hergestellt werden.

### 3.4.1. Vorzeichenproblem

Mit dem regularisierten WITTEN-Index  $I_W = \text{tr} [(-1)^F e^{-\beta H}]$  besitzen wir ein Maß für die Differenz zwischen fermionischen und bosonischen Grundzuständen. Gegenüber der thermischen Zustandsdichte sind die fermionischen Zustände durch den Faktor  $(-1)^F$  negativ gewichtet. Wenn der WITTEN-Index  $I_W$  verschwindet, gibt es genauso viele positive wie negative Beiträge im Pfadintegral. Folglich sind wir mit einem Vorzeichenproblem konfrontiert und haben bei der Berechnung der Observablen im *Reweighting*

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{n=1}^N \text{sign}(D[C_n]) O(C_n)}{\sum_{n=1}^N \text{sign}(D[C_n])} \quad (3.30)$$

eine „Durch-Null-Division“. Mit antiperiodischen Fermion-Randbedingungen wird die Supersymmetrie gebrochen und infolgedessen das Vorzeichenproblem gemildert. Zur Wiederherstellung der Supersymmetrie muss abschließend eine Extrapolation in den Kontinuumslikes mit Temperatur  $T = 0$  durchgeführt werden.

In der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie tritt selbst bei nichtverschwindendem WITTEN-Index  $I_W \neq 0$  ein schwaches Vorzeichenproblem auf [13]. Eine mögliche Quelle für negative Beiträge kann in den Diskretisierungsfehlern liegen, die im Kontinuumslikes verschwinden würden. Darüber hinaus führen die MAJORANA-

Fermionen unserer Theorie dazu, dass anstatt einer gewöhnlichen Determinante eine Pfaffsche Determinante im Pfadintegral der Gl. (3.15) auftritt. Selbst wenn die Determinante stets positiv ist, sagt dies nichts über das Vorzeichen der Pfaffschen Determinante aus. Infolgedessen kann der Integrand aus Gl. (3.15) nicht als Wahrscheinlichkeitsmaß genutzt werden. Unter Vernachlässigung der Phase können wir  $\text{Pf}(\mathcal{CD}[\mathcal{U}])$  durch  $\sqrt{\det(\mathcal{CD}[\mathcal{U}])}$  ersetzen. Dieser Schritt kann durch  $\text{sign}[\text{Pf}(\mathcal{CD}[\mathcal{U}])]$  im *Reweighting*-Faktor kompensiert werden. Falls das Mittel  $\langle \text{sign}[\text{Pf}(\mathcal{CD}[\mathcal{U}])] \rangle = 0$  verschwindet, sind wir mit einem Vorzeichenproblem konfrontiert. Bei WILSON-Fermionen kann folglich ein negativer Beitrag zum WITTEN-Index  $I_W \neq 0$  entstehen. Dieser Anteil steigt im chiralen Grenzwert an, wird jedoch im Kontinuumslimit unterdrückt [57]. In unseren Simulationen kommt kein *Reweighting* zum Einsatz, da die Vorzeichenbestimmung der Pfaffschen Determinanten unpraktikabel ist.

### 3.4.2. Adjungierte Darstellung

Die Berechnung der Links in der adjungierten Darstellung

$$[\mathcal{V}_\mu(x)]_{ab} = 2 \text{tr} \left[ \mathcal{U}_\mu^\dagger(x) T_a^{\text{F}} \mathcal{U}_\mu(x) T_b^{\text{F}} \right] \quad (3.31)$$

erfolgt aus den LIE-Gruppen-Generatoren  $T_a^{\text{F}}$  sowie den Links  $\mathcal{U}_\mu(x) \in SU(3)$  in der fundamentalen Darstellung. Um diesen häufigen Vorgang zu beschleunigen nutzen wir die Matrixstruktur der Generatoren  $T_a^{\text{F}}$  (s. App. A) zur Implementation von expliziten Formeln, welche die Matrixelemente von  $\mathcal{U}_\mu$  mit  $\mathcal{V}_\mu$  verknüpfen und mit *Mathematica* vereinfacht wurden. Dadurch sparen wir in der Matrixmultiplikation  $\mathcal{U}_\mu^\dagger(x) T_a^{\text{F}} \mathcal{U}_\mu(x) T_b^{\text{F}}$  viele Operationen, da die Generatoren  $T_a^{\text{F}}$  viele Null-Einträge besitzen. Auch die Berechnung der Ableitung in der adjungierten Darstellung

$$\frac{\delta [\mathcal{V}_\mu(x)]_{ab}}{\delta [\mathcal{U}_\mu(x)]^{\alpha\beta}} = \left[ i\mathcal{P} \left( \mathcal{U}_\mu T_b^{\text{F}} \mathcal{U}_\mu^\dagger T_a^{\text{F}} - T_a^{\text{F}} \mathcal{U}_\mu T_b^{\text{F}} \mathcal{U}_\mu^\dagger \right) \right]_{\alpha\beta} \quad (3.32)$$

wurde auf die Komponenten der Matrixdarstellung heruntergebrochen und die entstehenden Terme mit *Mathematica* vereinfacht.

### 3.5. Numerische Lösung von linearen Gleichungssystemen

In der rationalen Approximation aus Gl. (3.20) erfordert jeder Summand eine Inversion der großen Matrix  $M$ . Eine exakte Berechnung wäre numerisch zu aufwendig und deshalb wird ein Iterationsverfahren eingesetzt. Bei hermiteschen, positiv definiten Matrizen ist das Verfahren der konjugierten Gradienten (engl. *conjugate gradients*, CG) sehr effektiv. In der Variante für *Multishifts* kann diese Methode ohne nennenswert höheren Aufwand sogar alle Summanden aus Gl. (3.20) simultan berechnen [58]. In beiden Fällen muss die Matrix  $M$  pro Iterationsschritt einmal angewandt und ein KRYLOV-Raum aufgebaut werden. Die *Multishift*-Variante profitiert davon, dass auch hier nur ein KRYLOV-Raum notwendig ist, weil die um ein Vielfaches der Identität verschobenen linken Seiten alle in jenem liegen. Im CG-Verfahren wird ein System der Form

$$\mathbf{M}\vec{x} = \vec{b} \quad (3.33)$$

nach  $\vec{x}$  aufgelöst ohne die Matrix  $\mathbf{M}$  explizit zu invertieren. Eine Kenngröße für den numerischen Aufwand stellt die Konditionszahl

$$\kappa = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \quad (3.34)$$

dar. Für die rationale Approximation bedeutet dies, je kleiner der Koeffizient  $\beta_r$  ist, desto mehr Iterationsschritte werden benötigt. Mit kleiner werdenden  $\beta_r$  sinken zugleich die Koeffizienten  $\alpha_r$  im Nenner, sodass ihr Kraftbeitrag ebenfalls geringer ausfällt. Diese Beobachtung kann mit dem RHMC-Algorithmus berücksichtigt werden. Zum einen können wir die Summanden mit kleinem Kraftbeitrag problemlos mit weniger Zeitschritten entlang der HMC-Trajektorie integrieren. Zum anderen führt eine höhere untere Schranke des Approximationsintervalls  $I$  zu größeren  $\beta_r$  und dadurch zu einer schnelleren Konvergenz des CG-Verfahrens. Bei der Berechnung der Pseudofermionen sowie im Akzeptanzschritt müssen die Inversionen bis auf Maschinengenauigkeit exakt sein, weshalb wir dort als Abbruchkriterium  $10^{-16}$  wählen. In der Molekulardynamik ist keine exakte Lösung notwendig, wodurch wir zwischen den Rechenkosten der Kraftberechnung und der Akzeptanzrate abwägen können. Meist ist  $10^{-2}$  eine gute Wahl für die Genauigkeit. [47]

### 3.6. Präkonditionierung

Grundsätzlich existieren zwei verschiedene Arten von Präkonditionierung. Zum einen diejenige zur Lösung von Gleichungen und zum anderen diejenige, welche die Faktorisierung der Quark-Determinanten in Gl. (3.17) bestimmt. Diese beiden Typen sind unabhängig voneinander und können somit getrennt festgelegt werden [59]. Zur Verbesserung der Kondition unseres DIRAC-Operators und einer daraus resultierenden Beschleunigung der Simulation ist eine Präkonditionierung hilfreich. Dazu wird die Struktur der DIRAC-Matrix ausgenutzt und das Raumzeitgitter  $\Lambda$  umgeordnet.

#### 3.6.1. Gerade-Ungerade-Präkonditionierung

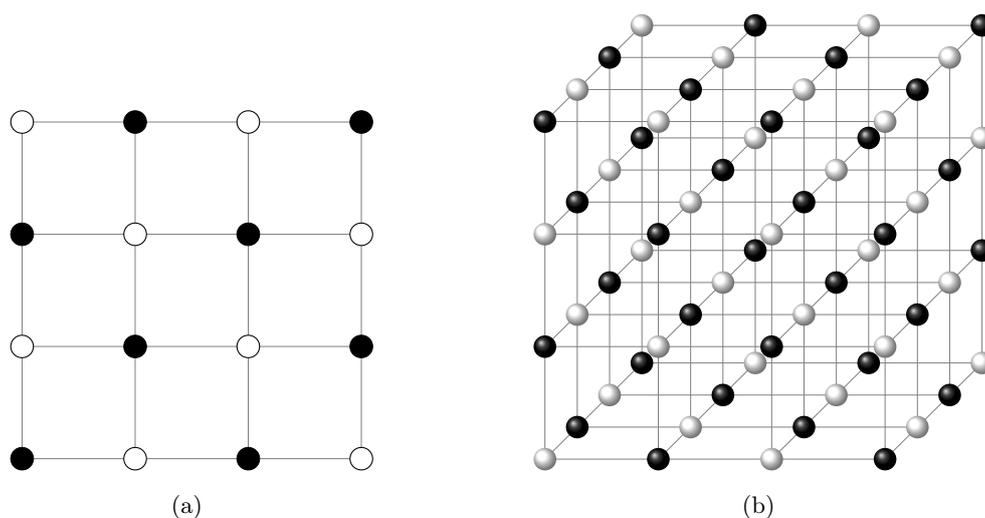


Abb. 6: Gerade-Ungerade-Präkonditionierung in (a) zwei und (b) drei Dimensionen. Schwarz bzw. weiß symbolisiert die geraden bzw. ungeraden Gitterpunkte.

Bei der oft genutzten Gerade-Ungerade-Präkonditionierung (engl. *even-odd*, eo) wird das Gitter in zwei Untergitter aufgeteilt. Das eine umfasst alle geraden, das andere alle ungeraden Gitterpunkte. Wenn die Koordinaten eines Gitterpunktes  $P = (x_0, x_1, x_2, x_3)$  die folgende Bedingung erfüllt nennen wir ihn

$$(-1)^{x_0+x_1+x_2+x_3} = \begin{cases} 1 \dots \text{gerade,} \\ -1 \dots \text{ungerade.} \end{cases} \quad (3.35)$$

Daraus resultiert die in Abb. 6 visualisierte Gitteraufteilung. In der Folge nimmt der DIRAC-Operator eine Blockstruktur an,

$$D = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & D_{eo} \\ D_{oe} & \mathbb{1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ D_{oe} & \mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & \mathbb{1} - D_{oe}D_{eo} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & D_{eo} \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

Dabei nutzen wir, dass der WILSON-DIRAC-Operator in der Form von Gl. (3.28) eine triviale Selbstwechselwirkung besitzt. In den Submatrizen  $D_{eo}$  &  $D_{oe}$  stecken die Wechselwirkungen zwischen geraden und ungeraden bzw. ungeraden und geraden Gitterpunkten. Nach der LU-Zerlegung ist die Quark-Determinante aus Gl. (3.17) auf den halb so großen Unterraum reduziert:

$$[\det(D^\dagger D)]^{\frac{1}{n}} = [\det(\mathbb{1} - D_{oe}D_{eo})^\dagger]^{\frac{1}{n}} [\det(\mathbb{1} - D_{oe}D_{eo})]^{\frac{1}{n}}. \quad (3.37)$$

Mit Hilfe von  $(D^\dagger D)' = 2D^\dagger D'$  aus Gl. (B.17) und  $(\mathbb{1} - D_{oe}D_{eo})' = -D'_{oe}D_{eo} - D_{oe}D'_{eo}$  kann die, durch den Strich gekennzeichnete, Ableitung von  $D^\dagger D$  nach dem Eichfeld  $\mathcal{U}_\mu(x)$  berechnet werden. Unter Verwendung von  $N_{\text{pf}}$  Pseudofermionen findet schließlich die Kraftberechnung auf dem geraden und ungeraden Unterraum statt.

### 3.6.2. Rot-Schwarz-Präkonditionierung

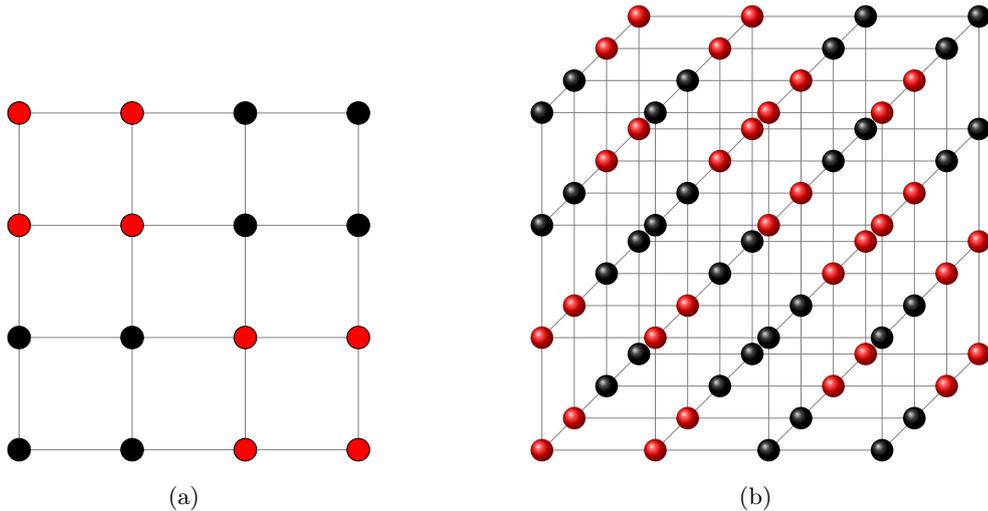


Abb. 7: Rot-Schwarz-Präkonditionierung in (a) zwei und (b) drei Dimensionen mit Unterblöcken der Größe  $2^d$ .

Aus dem Jahr 1890 stammt die Grundidee von SCHWARZ [60], nach der das Gitter in Unterblöcke unterteilt wird. Ursprünglich enthielt die Methode überlappende Unterblöcke. Bei vierdimensionalen Raumzeitgittern würde sich der Überlapp schnell zu vielen Gitterpunkten aufsummieren, die viel Rechenzeit erfordern. Für unsere Präkonditionierung ist deshalb eine überlappungsfreie Gitteraufteilung von Vorteil. Zur effektiveren Implementierung nehmen wir an, dass die Blöcke gerade Kantenlängen besitzen und das gesamte Gitter wie in Abb. 7 schachbrettartig unterteilbar ist. Nach LÜSCHER wollen wir diese Methode im Folgenden Rot-Schwarz-Präkonditionierung (engl. *red-black*, rb) nennen [61]. Gelegentlich findet man auch den Namen *SCHWARZ-Alternating-Procedure* (SAP) hierfür. Mit dieser Präkonditionierung können wir den DIRAC-Operator in der Blockstruktur

$$\begin{aligned} D &= \begin{pmatrix} D_{rr} & D_{rb} \\ D_{br} & D_{bb} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ D_{br}D_{rr}^{-1} & \mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{rr} & 0 \\ 0 & D_{bb} - D_{br}D_{rr}^{-1}D_{rb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & D_{rr}^{-1}D_{rb} \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ D_{br}D_{rr}^{-1} & \mathbb{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{rr} & 0 \\ 0 & D_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & \mathbb{1} - D_{bb}^{-1}D_{br}D_{rr}^{-1}D_{rb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & D_{rr}^{-1}D_{rb} \\ 0 & \mathbb{1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.38)$$

formulieren. Dabei enthält die Submatrix  $D_{rr}$  alle Wechselwirkungen zwischen roten Gitterpunkten,  $D_{rb}$  zwischen roten und schwarzen,  $D_{br}$  zwischen schwarzen und roten sowie  $D_{bb}$  zwischen schwarzen. Im Gegensatz zur Gerade-Ungerade-Präkonditionierung sind nun die Blöcke auf der Diagonalen nicht länger trivial. Infolgedessen wird die Quark-Determinante von  $[\det(D^\dagger D)]^{\frac{1}{n}}$  aus Gl. (3.17) zu

$$[\det(D^\dagger D)]^{\frac{1}{n}} = [\det(D_{rr}^\dagger D_{rr})]^{\frac{1}{n}} [\det(D_{bb}^\dagger D_{bb})]^{\frac{1}{n}} [\det(\mathbb{1} - D_{bb}^{-1}D_{br}D_{rr}^{-1}D_{rb})^\dagger]^{\frac{1}{n}} [\det(\mathbb{1} - D_{bb}^{-1}D_{br}D_{rr}^{-1}D_{rb})]^{\frac{1}{n}}. \quad (3.39)$$

Die Ableitung von  $(D^\dagger D)$  ist dadurch aufwendiger und erfordert zwei verschiedene Methoden. Die beiden letzten Faktoren aus Gl. (3.39)

$$\begin{aligned} (\mathbb{1} - D_{bb}^{-1}D_{br}D_{rr}^{-1}D_{rb})' &= D_{bb}^{-1}D_{bb}'D_{bb}^{-1}D_{br}D_{rr}^{-1}D_{rb} - D_{bb}^{-1}D_{br}'D_{rr}^{-1}D_{rb} \\ &\quad + D_{bb}^{-1}D_{br}D_{rr}^{-1}D_{rr}'D_{rr}^{-1}D_{rb} - D_{bb}^{-1}D_{br}D_{rr}^{-1}D_{rb}' \end{aligned} \quad (3.40)$$

berechnen wir wie bei der Gerade-Ungerade-Präkonditionierung mit  $N_{\text{pf}}$  Pseudofermionen auf dem roten bzw. schwarzen Unterraum. Jedoch ist hier die Inverse von  $D_{rr}$  und  $D_{bb}$  erforderlich. Wenn wir die Gitterblöcke klein genug wählen ( $2^d$  oder  $4^d$ ), dann können wir die notwendige Inversion exakt berechnen. Die beiden ersten Faktoren aus Gl. (3.39) können wir zu

$$\begin{aligned} \det(D_{rr}^\dagger D_{rr})^{\frac{1}{n}} \det(D_{bb}^\dagger D_{bb})^{\frac{1}{n}} &= \prod_{\substack{\text{schwarze} \\ \text{Blöcke } \beta}} \det(D_{\beta\beta}^\dagger D_{\beta\beta})^{\frac{1}{n}} \prod_{\substack{\text{rote} \\ \text{Blöcke } \rho}} \det(D_{\rho\rho}^\dagger D_{\rho\rho})^{\frac{1}{n}} \\ &= e^{\frac{1}{n} \sum_{\beta} \ln \det(D_{\beta\beta}^\dagger D_{\beta\beta})} e^{\frac{1}{n} \sum_{\rho} \ln \det(D_{\rho\rho}^\dagger D_{\rho\rho})} \end{aligned} \quad (3.41)$$

umformen. In der Zustandssumme  $Z = \int \mathcal{D}\mathcal{U} \det(D_{rr}^\dagger D_{rr})^{\frac{1}{n}} \det(D_{bb}^\dagger D_{bb})^{\frac{1}{n}} e^{-S[\mathcal{U}]} \equiv \int \mathcal{D}\mathcal{U} e^{-S_{\text{red}}[\mathcal{U}]}$  erhält die reduzierte Wirkung  $S_{\text{red}}[\mathcal{U}] = S[\mathcal{U}] - V[\mathcal{U}]$  auf diese Weise den Term

$$V[\mathcal{U}] = \frac{1}{n} \sum_{\beta} \ln \det(D_{\beta\beta}^\dagger D_{\beta\beta}) + \frac{1}{n} \sum_{\rho} \ln \det(D_{\rho\rho}^\dagger D_{\rho\rho}) = \frac{1}{n} \sum_{\beta} \ln |\det(D_{\beta\beta})|^2 + \frac{1}{n} \sum_{\rho} \ln |\det(D_{\rho\rho})|^2 \quad (3.42)$$

mit der Ableitung

$$V' = \frac{1}{n} \sum_{\beta} \text{tr} \left( D_{\beta\beta}^{\dagger} D_{\beta\beta} \right)^{-1} \left( D_{\beta\beta}^{\dagger} D_{\beta\beta} \right)' + \frac{1}{n} \sum_{\rho} \text{tr} \left( D_{\rho\rho}^{\dagger} D_{\rho\rho} \right)^{-1} \left( D_{\rho\rho}^{\dagger} D_{\rho\rho} \right)' \quad (3.43)$$

$$= \frac{2}{n} \sum_{\beta} \text{tr} D_{\beta\beta}^{-1} D'_{\beta\beta} + \frac{2}{n} \sum_{\rho} \text{tr} D_{\rho\rho}^{-1} D'_{\rho\rho}. \quad (3.44)$$

Die  $\gamma_5$ -Hermizität beruht auf der internen Struktur der DIRAC-Matrix und ist an jedem Gitterpunkt gültig. Folglich erben die Unterblöcke der Rot-Schwarz-Präkonditionierung die  $\gamma_5$ -Hermizität und wir können für die Differenziation erneut die Formel aus Gl. (B.17) nutzen.

### 3.7. Messung von Observablen auf dem Gitter

In Gittersimulationen waren Hadronenmassen schon immer eine interessante Messgröße, insbesondere in der Gitter-QCD. Zur Charakterisierung der unterschiedlichen Hadronen dienen neben ihrer Masse die Quantenzahlen Ladung, Spin, Isospin, Parität, *Flavor* und Baryonenzahl. Beispielsweise besitzt das ladungsneutrale Pion der QCD  $|\pi^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|u\bar{u}\rangle - |d\bar{d}\rangle)$  die Masse  $m_{\pi^0} \approx 135 \text{ MeV}$ , den Gesamtspin  $J = 0$ , den Isospin  $I = 1$  mit  $I_3 = 0$  sowie die Parität  $P = -1$ . Im zweiten Abschnitt dieses Kapitels werden als weitere Observablen das chirale Kondensat und ihre Suszeptibilität vorgestellt.

#### 3.7.1. Hadron-Spektroskopie

Wir beginnen mit der Definition des Euklidischen Korrelators

$$C(t, T) = \langle O_2(t) O_1(0) \rangle_T = \frac{\text{tr} \left( e^{-(T-t)\hat{H}} \hat{O}_2 e^{-t\hat{H}} \hat{O}_1 \right)}{\text{tr} \left( e^{-T\hat{H}} \right)}. \quad (3.45)$$

Nach Wahl einer Orthonormalbasis  $|n\rangle$  erhalten wir daraus

$$C(t, T) = \frac{\sum_{m,n} e^{-(T-t)E_m} \langle m | \hat{O}_2 | n \rangle e^{-tE_n} \langle n | \hat{O}_1 | m \rangle}{\sum_n e^{-TE_n}}. \quad (3.46)$$

Unter der Annahme  $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$  verbleibt im Grenzwert  $T \rightarrow \infty$  im Nenner nur der Term mit dem Grundzustand  $E_n = 0$  und im Zähler trägt nur  $|m\rangle = |0\rangle$  bei

$$C(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} C(t, T) = \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_n \langle 0 | \hat{O}_2 | n \rangle \langle n | \hat{O}_1 | 0 \rangle e^{-tE_n}. \quad (3.47)$$

Nun wählen wir als Operatoren  $\hat{O}_1 = \hat{O}_H^{\dagger}$  den Erzeuger eines bestimmten Hadrons und als  $\hat{O}_2 = \hat{O}_H$  dessen Vernichter. Als Interpolatoren  $\bar{O}_H$  &  $O_H$  werden die dazugehörigen Funktionale der Gitterfelder bezeichnet. Auf diese Weise können wir aus

$$C_H(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} \langle O_H(t) \bar{O}_H(0) \rangle_T = |\langle g | \hat{O}_H^{\dagger} | 0 \rangle|^2 e^{-tE_g} + |\langle 1 | \hat{O}_H^{\dagger} | 0 \rangle|^2 e^{-tE_1} + \dots \quad (3.48)$$

die Energie des Grundzustands des Hadrons  $|g\rangle$ , seines ersten angeregten Zustands  $|1\rangle$  usw. extrahieren. Im Grenzwert  $t \rightarrow \infty$  wird der Korrelator wegen  $E_g < E_1$  vom Grundzustand dominiert. Mittels der Energie-Impulsbeziehung  $E(\vec{p}) = \sqrt{m_H^2 + \vec{p}^2} (1 + \mathcal{O}(a\vec{p}))$  können wir nach Projektion auf den Impuls  $\vec{p} = \vec{0}$  die dazugehörige Hadronmasse  $E|_{\vec{p}=\vec{0}} \approx m_H$  bestimmen. Ein allgemeiner Meson-Interpolator hat mit  $\Gamma \in \{\mathbb{1}, \gamma_5, \gamma_0\gamma_5, \gamma_i, \dots\}$  die Form

$$O_M(x) = \bar{\psi}^{(f)}(x)\Gamma\psi^{(f)}(x). \quad (3.49)$$

Gegenüber DIRAC-Fermionen können bei MAJORANA-Fermionen auch WICK-Kontraktionen zwischen zwei gleichen Fermionen auftreten. Zunächst führen wir den Multiindex  $\alpha = (x, \mu, c, f)$  ein, der neben der Raumzeitkoordinate auch die Spinorkomponente sowie den Farb- und *Flavor*index beinhaltet. Damit erhalten wir die Zweipunktfunktion

$$\langle T\lambda_{\alpha_1}\lambda_{\alpha_2} \rangle = \left\langle \tilde{\Delta}_{\alpha_1\alpha_2} \right\rangle_{\text{eff}} \quad (3.50)$$

sowie die Vierpunktfunktion

$$\begin{aligned} \langle T\lambda_{\alpha_1}\lambda_{\alpha_2}\lambda_{\alpha_3}\lambda_{\alpha_4} \rangle &= \left\langle \overbrace{\lambda_{\alpha_1}\lambda_{\alpha_2}\lambda_{\alpha_3}\lambda_{\alpha_4}} + \overbrace{\lambda_{\alpha_1}\lambda_{\alpha_2}\lambda_{\alpha_3}\lambda_{\alpha_4}} + \overbrace{\lambda_{\alpha_1}\lambda_{\alpha_2}\lambda_{\alpha_3}\lambda_{\alpha_4}} \right\rangle \\ &= \left\langle \tilde{\Delta}_{\alpha_1\alpha_2}\tilde{\Delta}_{\alpha_3\alpha_4} + \tilde{\Delta}_{\alpha_1\alpha_4}\tilde{\Delta}_{\alpha_2\alpha_3} - \tilde{\Delta}_{\alpha_1\alpha_3}\tilde{\Delta}_{\alpha_2\alpha_4} \right\rangle_{\text{eff}}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

In den beiden Gleichungen tritt der Propagator  $\tilde{\Delta} = \tilde{D}^{-1} = (CD)^{-1}$  auf und der Mittelwert bezieht sich auf  $e^{-S_{\text{eff}}}$ . Die effektive Wirkung  $S_{\text{eff}}[\mathcal{U}] = S[\mathcal{U}] - \ln \text{Pf}(CD[\mathcal{U}])$  folgt aus der alternativen Formulierung

$$Z_M = \int \mathcal{D}\mathcal{U} e^{-S[\mathcal{U}] + \ln \text{Pf}(CD[\mathcal{U}])} = \int \mathcal{D}\mathcal{U} e^{-S_{\text{eff}}[\mathcal{U}]} \quad (3.52)$$

für das Pfadintegral aus Gl. (3.15). Wir schreiben nun die Ortskoordinate unseres Multiindex  $\alpha = (\mu, c, f)$  explizit aus. Zur Massenextraktion aus Operatoren der Form  $O_{\alpha\beta}(x) = \lambda_{\alpha}(x)\lambda_{\beta}(x)$  nutzen wir Gl. (3.51) für den Korrelator

$$\langle O_{\alpha\beta}(x)O_{\gamma\delta}(y) \rangle = \left\langle \tilde{\Delta}_{\alpha\beta}(x, x)\tilde{\Delta}_{\gamma\delta}(y, y) + \tilde{\Delta}_{\alpha\delta}(x, y)\tilde{\Delta}_{\beta\gamma}(x, y) - \tilde{\Delta}_{\alpha\gamma}(x, y)\tilde{\Delta}_{\beta\delta}(x, y) \right\rangle_{\text{eff}}. \quad (3.53)$$

Wir sehen anhand der Argumente der Propagatoren, dass der erste Summand in Gl. (3.53) aus zwei unverbundenen Anteilen besteht, wohingegen wir aus den beiden anderen Summanden zusammenhängende Diagramme erhalten. Für diese verschiedenen Fälle nutzen wir unterschiedliche Methoden. Numerisch sind die unverbundenen Beiträge schwieriger zu berechnen und erfordern eine höhere Statistik als die verbundenen Diagramme <sup>[5]</sup>.

Der komplette Quarkpropagator  $\tilde{D}^{-1}(x, y)$  ist eine extrem große  $N_{\text{int}}V \times N_{\text{int}}V$  Matrix, deren explizite Berechnung zu teuer und deren Aufbewahrung zu speicherintensiv ist. Obwohl die DIRAC-Matrix  $\tilde{D}$  dünn besetzt ist, gilt dies für ihre Inverse  $\tilde{D}^{-1}$  im Allgemeinen nicht. Jedes Element  $[\tilde{D}^{-1}(y, x)]_{\beta, \alpha}$  verbindet eine Quelle am Punkt  $(x, \alpha)$  mit einer Senke bei  $(y, \beta)$ . Zur Berechnung des zusammenhän-

<sup>[5]</sup>Beim neutralen Pion  $\pi^0$  der QCD heben sich alle unverbundenen Anteile gegenseitig heraus, wenn die Massen der leichten Quarks  $m^{(u)} = m^{(d)}$  und somit die dazugehörigen Propagatoren gleich sind. Dann sind die Korrelatoren für  $\pi^{+,0}$  ebenfalls gleich und folglich auch ihre Massen  $m_{\pi^{\pm}} = m_{\pi^0}$ .

genden Beitrags nutzen wir aus, dass alle Propagatoren auf einer gemeinsamen Eichfeldkonfiguration beruhen und somit korreliert sind. Dadurch ist es ausreichend nur eine Spalte

$$[\tilde{D}^{-1}(y, x_0)]_{\beta\alpha_0} = \sum_{x, \alpha} [\tilde{D}^{-1}(y, x)]_{\beta\alpha} [S_0^{x_0, \alpha_0}(x)]_{\alpha} \quad (3.54)$$

zwischen einer festen Punktquelle  $[S_0^{x_0, \alpha_0}(x)]_{\alpha} \equiv \delta_{x, x_0} \delta_{\alpha, \alpha_0}$  und allen anderen Gitterpunkten zu ermitteln. Insgesamt benötigen wir für alle internen Freiheitsgrade  $\alpha = (\mu, c, f)$  Punktquellen, die wir an dem Ort der Interpolatorquelle  $\bar{O}_H(x_0)$  platzieren. Entgegenlaufende Propagatoren können ohne explizite Berechnung durch die  $\gamma_5$ -Hermitizität der DIRAC-Matrix gewonnen werden. Als Resultat erhalten wir einen *Point-To-All*-Propagator.

Bei den unverbundenen Diagrammen verwenden wir hingegen stochastische Schätzer [62, 63]. In dieser Methode wird genutzt, dass für jedes Matrixelement des Propagators

$$\tilde{\Delta}_{ij} = \lim_{N_S \rightarrow \infty} \left\langle \eta_j^\dagger \chi_i \right\rangle \quad \text{mit} \quad \chi = \tilde{\Delta} \eta \quad \text{und} \quad \lim_{N_S \rightarrow \infty} \left\langle \eta_j^\dagger \eta_i \right\rangle = \delta_{ij} \quad (3.55)$$

gilt. Das Ensemblemittel liefert auch mit einer endlichen Anzahl  $N_S$  von Zufallsschätzern ein ausreichend exaktes Ergebnis. In unseren Simulationen verwenden wir zur Erzeugung der Zufallsquellen  $\eta_i$  Zufallswerte  $\frac{1}{\sqrt{2}}(\pm 1 \pm i)$ , das komplexe  $\mathbb{Z}_2$ -Rauschen. Mit  $N_S \approx 10$  lassen sich bereits zuverlässige Resultate für lokale Observablen wie das chirale Kondensat gewinnen. Um verlässliche Werte für den unverbundenen Anteil des Vierpunktkorrelators zu erzielen, sind jedoch mehr stochastische Schätzer notwendig. Insbesondere in der Nähe des kritischen Punktes sind die unverbundenen Beiträge relevant. Ihre statistischen Fluktuationen sind generell stärker als diejenigen des verbundenen Anteils.

Die  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie enthält nur einen *Flavor*, wodurch die Mesonen den 1-*Flavor*-Mesonen der QCD ähneln. Dadurch ist das adjungierte Pion kein Meson, sondern ein Diquark und beschreibt keinen physikalischen Zustand. Wie sein Pendant aus der QCD besitzt es nur verbundene Beiträge, wodurch es leicht messbar ist. Das  $a\text{-}\eta'$ -Meson ist bis auf den unverbundenen Anteil mit dem Pion identisch. Wie in der QCD benötigen die Gluebälle eine hohe Statistik. Im Gegensatz zur QCD existieren in unserer Theorie keine einfachen mesonischen Zustände, die nur aus verbundenen Anteilen bestehen. Hier sind wir stets mit den schwierig zu bestimmenden unverbundenen Anteilen konfrontiert.

## Adjungierte Mesonen

In der QCD sind Mesonen mit gerader und ungerader Parität nahezu entartet, bspw. das skalare  $f_0$ -Meson ( $J^{PC} = 0^{++}$ ) der Masse  $(990 \pm 20)$  MeV und pseudoskalare  $\eta'$ -Meson ( $J^{PC} = 0^{-+}$ ) der Masse  $(957,78 \pm 0,06)$  MeV. Im Rahmen der QCD existiert keine Erklärung für diesen Befund, der in der  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie durch die Entartung der adjungierten Mesonen im VENEZIANO-YANKIELOWICZ-Multiplett fest verwurzelt ist. Im Grenzwert  $SU(N_c) \rightarrow \infty$  ist die 1-*Flavor*-QCD äquivalent zur  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie, sodass die beobachtete kleine Massendifferenz zwischen  $f_0$  und  $\eta'$  ein Effekt der Ordnung  $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N_c}\right)$  sein könnte [28, 29]. Durch diese Äquivalenz können mit Hilfe der Supersymmetrie Resultate für die QCD berechnet werden. Auf dem Gitter werden beiden adjungierten Mesonen  $a\text{-}\eta'$  und  $a\text{-}f_0$

mit den Operatoren

$$O_{a-\eta'}(x) = \bar{\lambda}(x)\gamma_5\lambda(x) \quad \text{und} \quad O_{a-f_0}(x) = \bar{\lambda}(x)\lambda(x) \quad (3.56)$$

gemessen. Beide Teilchen enthalten sowohl verbundene als auch unverbundene Beiträge. Nahe am kritischen Punkt dominieren die schwer zu messenden unverbundenen Anteile. Schreiben wir die Operatoren mit  $\Gamma = \{\mathbb{1}, \gamma_5\}$ , so erhalten wir zwischen der Quelle bei  $(0, \vec{y})$  und der Senke  $(t, \vec{x})$  den Korrelator

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \langle \bar{\lambda}(x)\Gamma\lambda(x)\bar{\lambda}(y)\Gamma\lambda(y) \rangle \\ &= \frac{1}{L^3} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \langle \text{tr}(\Gamma\tilde{D}_{xx}^{-1})\text{tr}(\Gamma\tilde{D}_{yy}^{-1}) \rangle - 2 \sum_{\vec{x}} \langle \text{tr}(\Gamma\tilde{D}_{xy}^{-1}\Gamma\tilde{D}_{yx}^{-1}) \rangle. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Der verbundene Anteil

$$C_{a-\pi}(t) = 2 \sum_{\vec{x}} \langle \text{tr}(\gamma_5\tilde{D}_{xy}^{-1}\gamma_5\tilde{D}_{yx}^{-1}) \rangle \quad (3.58)$$

mit  $\Gamma = \gamma_5$  ist das adjungierte Pion  $a-\pi$ . In der QCD entsteht das Pion als GOLDSTONE-Boson bei der chiralen Symmetriebrechung. Wir nutzen das adjungierte Pion obwohl es in der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie keinen physikalischen Zustand beschreibt. Mit seiner Hilfe können wir den kritischen Punkt suchen, weil dort im Kontinuumslimit seine Masse verschwindet. Um den Beitrag des Vakuumerwartungswertes aus Gl. (3.57) zu beseitigen muss zusätzlich der Betrag

$$\frac{1}{L^3} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \langle \text{tr}(\Gamma\tilde{D}_{xx}^{-1}) \rangle \langle \text{tr}(\Gamma\tilde{D}_{yy}^{-1}) \rangle \quad (3.59)$$

subtrahiert werden.

## Gluino-Gluebälle

Zur Messung der Gluino-Gluebälle  $F_{\mu\nu}\Sigma^{\mu\nu}\lambda$  wird der Operator

$$[O_{g\bar{g}}(x)]_\alpha = [\Sigma_{ij}]_{\alpha\beta} \text{tr}(F^{ij}(x)\lambda^\beta(x)) \quad (3.60)$$

mit der antisymmetrisierten *Clover*-Plakette (vgl. Gl. (B.25))

$$F_{\mu\nu} = \frac{1}{4i} \sum_{\mu < \nu} \left( \mathcal{U}_{\mu\nu}(x) - \mathcal{U}_{\mu\nu}^\dagger(x) \right) \quad (3.61)$$

genutzt. Die Indizes  $i, j$  laufen in Gl. (3.60) nur über die räumlichen Richtungen. Aus diesem Operator folgt der Korrelator

$$C(x, y) = \left\langle [\Sigma_{ij}]_{\alpha\beta} \text{tr}(F^{ij}(x)T^a) [D_W^{-1}(x, y)]_{ab}^{\alpha\beta} \text{tr}(F^{lm}(y)T^b) [\Sigma_{lm}]_{\rho\alpha} \right\rangle \quad (3.62)$$

zwischen der Quelle  $y$  und der Senke  $x$ . Obwohl dieser Korrelator keinen unverbundenen Anteil enthält, erfordert er aufgrund der Eichfeld-Fluktuationen eine hohe Statistik. Zu den beiden Multipletts gehören der Grundzustand des Gluino-Glueballs sowie sein erster angeregter Zustand. Mit *Smearing* der Links und der Punktquelle kann die Signalqualität verbessert werden (s. Kap. 4.4).

## Gluebälle

Gluebälle transformieren im Kontinuum unter der Drehgruppe  $SO(3)$ , die durch das Gitter auf die kubische Gruppe heruntergebrochen wird. Für den skalaren Glueball  $F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$  mit den Quantenzahlen  $J^{PC} = 0^{++}$  ist

$$O_{++}(x) = \text{tr}(\mathcal{U}_{12}(x) + \mathcal{U}_{23}(x) + \mathcal{U}_{31}(x)). \quad (3.63)$$

ein möglicher Gitteroperator. Beim pseudoskalaren Glueball  $\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}F^{\mu\nu}F^{\rho\sigma}$  mit  $J^{PC} = 0^{-+}$  kann der Operator

$$O_{-+}(x) = \sum_R \left( \text{tr}(\mathcal{W}(\mathcal{C})) - \text{tr}(\mathcal{W}(P\mathcal{C})) \right) \quad (3.64)$$

verwendet werden [64]. In Gl. (3.64) läuft die Summe über alle Rotationen  $R$  der kubischen Gruppe. Die WILSON-Schleifen verlaufen entlang des Weges  $\mathcal{C}$  und seines Spiegelbilds  $P\mathcal{C}$ . Ein beispielhafter Weg  $\mathcal{C}$  ist in Abb. 8 dargestellt. Typischerweise sind Gluebälle stark verrauscht und erfordern eine hohe Statistik. Die Signalqualität profitiert meist von einer größeren Operatorbasis und *Smearing* [64, 65].

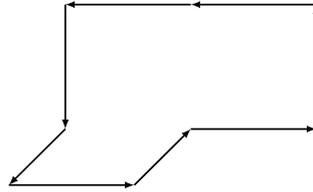


Abb. 8: Dreidimensionales Beispiel eines Weges für den pseudoskalaren Glueball mit negativer Parität.

### 3.7.2. Weitere Observablen

Als weitere Observable kann die POLYAKOV-Schleife  $P$  relativ einfach berechnet werden, indem man die Eichlinks entlang geschlossener Schleifen in Zeitrichtung multipliziert und anschließend die Spur bildet (vgl. Gl. (3.4)). Wie in Kap. 3.1 erwähnt dient sein Wert als Ordnungsparameter für das *Confinement*. Daneben bietet die Plakette eine schnell zu berechnende Abschätzung über die bosonische Wirkung, die Autokorrelation und statistische Fluktuationen. Von Interesse ist außerdem das einfach zu messende Gluino-Kondensat

$$\Sigma(m_g) = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln Z}{\partial m_g} = \frac{1}{2V} \sum_x \langle \bar{\lambda}(x)\lambda(x) \rangle = \frac{1}{2V} \langle \text{tr} \tilde{D}_{xx}^{-1} \rangle_{\text{eff}}, \quad (3.65)$$

mit dem wir die chirale Symmetrie untersuchen können. Die Ableitung nach der nackten Masse  $m_g$  ergibt die chirale Suszeptibilität

$$\begin{aligned} \chi_\Sigma(m_g) &= \frac{\partial \Sigma}{\partial m_g} = V \left( \left\langle \frac{1}{4V^2} \sum_{x,y} \bar{\lambda}(x)\lambda(x)\bar{\lambda}(y)\lambda(y) \right\rangle - \left\langle \frac{1}{2V} \sum_x \bar{\lambda}(x)\lambda(x) \right\rangle^2 \right) \\ &= \frac{1}{4V} \left\langle (\text{tr} \tilde{D}_{xx}^{-1})^2 \right\rangle_{\text{eff}} - \frac{1}{2V} \left\langle (\text{tr} \tilde{D}_{xy}^{-2}) \right\rangle_{\text{eff}} - \frac{1}{4V} \left\langle \text{tr} \tilde{D}_{xx}^{-1} \right\rangle_{\text{eff}}^2, \end{aligned} \quad (3.66)$$

die durch ihre unverbundenen Anteile schwieriger zu messen ist.

### 3.8. Extrapolation zum chiralen Limes & Kontinuumsliches

Wenn die fermionische Wirkung mit GINSPARG-WILSON-Fermionen formuliert wird, dann ist im Kontinuumsliches sichergestellt, dass sowohl die Supersymmetrie als auch die chirale Symmetrie wiederhergestellt werden [13]. Kommen hingegen WILSON-Fermionen zum Einsatz, dann stoßen wir auf das sogenannte „Feintuning-Problem“. In unseren Simulationen verwenden wir die einfacher zu berechnenden WILSON-Fermionen und müssen im Gegenzug den *Hopping*-Parameter  $\kappa$  abstimmen.

Aufgrund der Supersymmetriebrechung durch das Gitters entstehen in der effektiven Wirkung supersymmetriebrechende *Counter*-Terme. In der hier betrachteten  $\mathcal{N}=1$  SYM verbleibt aufgrund der Eich- und Gittersymmetrie als einzige Größe die Gluino-Masse [1]. Um die gebrochene Supersymmetrie wiederherzustellen, ist ein Feintuning notwendig, damit das Gluino im Kontinuumsliches masselos wird. Jedoch kann seine Masse nicht direkt bestimmt werden, denn das Gluino stellt aufgrund des *Confinements* keinen physikalischen Zustand dar. Als Messgröße betrachten wir das adjungierte Pion  $a-\pi$ , das in der  $\mathcal{N}=1$  SYM-Theorie keinem physikalischen Zustand entspricht, weil die Theorie nur ein einziges MAJORANA-Fermion behandelt. Analog zur 1-*Flavor*-QCD wird das Modell *partially quenched* um einen zweiten Gluino-Typ und das dazugehörige bosonische Geist-Gluino erweitert [66, 67]. In Referenz [11] wurde für die SYM-Theorie mit Hilfe der OZI-Approximation gezeigt, dass das Quadrat der Masse des adjungierten Pions proportional zur Gluinomasse ist,

$$m_{a-\pi}^2 \propto m_g. \quad (3.67)$$

Die OZI-Regel wurde ursprünglich in der QCD eingeführt und ist nach OKUBO, ZWEIG und IZUKA benannt. Ihre Aussage betrifft FEYNMAN-Diagramme, die durch Trunkierung der Gluon-Vertices in getrennte Diagramme zerfallen. In der OZI-Approximation werden diese Diagramme vernachlässigt, weil ihre Beiträge klein sind. Die Beziehung aus Gl. (3.67) dient zur Extrapolation in den chiralen Limes, da das Verschwinden der Gluinomasse bis auf Gitterartefakte gleichbedeutend mit dem Verschwinden der Pionmasse ist. Für jede Kopplung  $\beta$  ist der kritische Punkt verschieden und der *Hopping*-Parameter  $\kappa$  muss demzufolge neu bestimmt werden. Beim kritischen Wert  $\kappa_c$ , bei dem die Pionmasse verschwindet, sollte das chirale Kondensat einen Phasenübergang erster Ordnung durchlaufen. Somit erreichen wir mit dem Feintuning des *Hopping*-Parameters zugleich die Wiederherstellung der chiralen Symmetrie und der Supersymmetrie im Kontinuumsliches.

Nachdem wir den den chiralen Grenzwert gebildet haben, muss als Nächstes der Kontinuumsliches betrachtet werden. Idealerweise würden wir den Kontinuumsliches  $a \rightarrow 0$  (entspricht  $\beta \rightarrow \infty$ ) bei unendlichem Volumen  $V$  bestimmen. Jedoch können wir in der Praxis lediglich möglichst kleine Gitterkonstanten  $a$  für ein konstantes endliches Volumen betrachten. Aus diesem Grund müssen wir Diskretisierungsfehler berücksichtigen oder möglichst stark reduzieren. Dies ist durch verbesserte Gitterwirkungen erreichbar, s. Kap. 3.3.3 & App. B.5.



## 4. Resultate

In diesem Kapitel stellen wir unsere Simulationsergebnisse vor. Zu Beginn untersuchen wir das Spektrum und die Struktur des WILSON-Operators, um im Anschluss geeignete Simulationsparameter zu ermitteln. Danach bestimmen wir für diverse Kopplungen  $\beta$  den kritischen *Hopping*-Parameter  $\kappa_c$ . Dazu nutzen wir sowohl die Masse des adjungierten Pions als auch das chirale Kondensat. Im nächsten Teil betrachten wir das Teilchenspektrum, indem wir die Massen von  $a\text{-}\eta'$ ,  $a\text{-}f_0$ , den Gluino-Gluebällen und der Gluebälle messen. Um die Gittermassen mit physikalischen Größen in Relation zu setzen, präsentieren wir die physikalische Skala der Gitterkonstanten. Zu den Untersuchungen gehören außerdem unsere Simulationen bei endlicher Temperatur mit dem *Confinement-Deconfinement*-Phasenübergang und der Wiederherstellung der chiralen Symmetrie.

Über den Diagrammen sind die festgehaltenen Simulationsparameter angegeben. In der Regel sind dies die räumliche Gitterlänge, die Kopplung  $\beta$  und der *Hopping*-Parameter  $\kappa$ . Standardmäßig ist das Gitter in Zeitrichtung doppelt so groß, wenn nicht explizit benannt.

### 4.1. Untersuchung des Dirac-Operators

Die Konditionszahl der DIRAC-Matrix wird durch die kleinen Eigenwerte dominiert. In Abb. 9 ist der Logarithmus der 100 kleinsten Eigenwerte der Matrix  $D^\dagger D$ , die bei der Kraftberechnung auftritt, mit bzw. ohne Präkonditionierung als Histogramm abgebildet. Für die Abbildung konnten nur wenige Konfigurationen auf einem  $8^3 \times 16$ -Gitter berücksichtigt werden, weil die Eigenwerte-Berechnung großer Matrizen zeitintensiv ist. Im Vergleich ist zu erkennen, dass durch die Präkonditionierung die kleinsten Werte nicht so klein sind wie im ursprünglichen Operator und die gesamte Verteilung nach rechts verschoben ist. Die Konditionszahl des unpräkonditionierten DIRAC-Operators ist  $\kappa = \frac{4,5354}{0,0001} \approx 4,5 \cdot 10^4$  etwa um den Faktor 2 größer als mit Gerade-Ungerade-Präkonditionierung,  $\kappa = \frac{4,5291}{0,0002} \approx 2,2 \cdot 10^4$ . In Folge der besseren Konditionszahl konvergiert der CG-Löser schneller und benötigt weniger Rechenzeit.

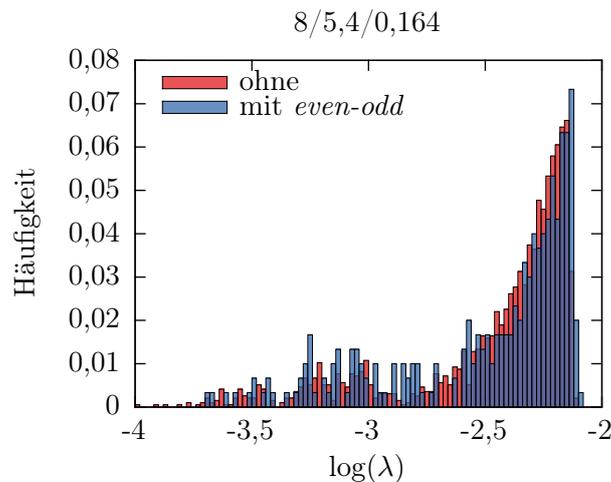


Abb. 9: Vergleich der kleinsten Eigenwerte  $\log(\lambda)$  von  $D^\dagger D$  zwischen dem gerade-ungerade-präkonditionierten DIRAC-Operator und dem unveränderten DIRAC-Operator.

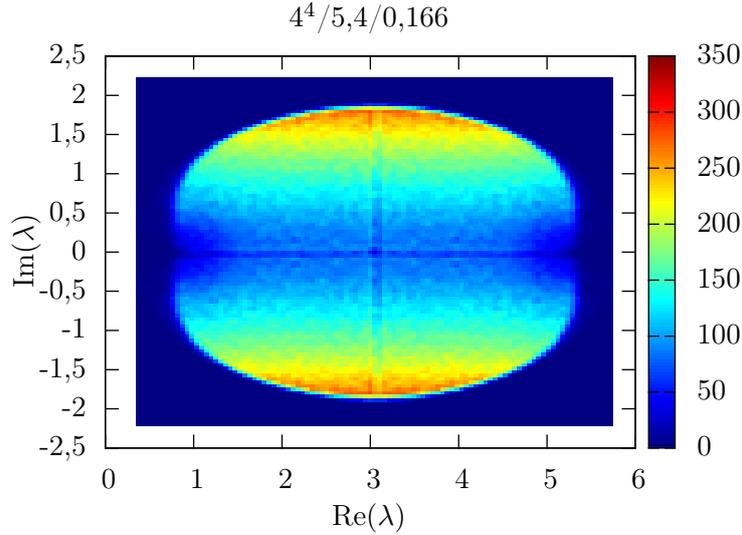


Abb. 10: Zweidimensionales Histogramm aller exakt berechneter Eigenwerte von 100 Konfigurationen auf einem  $4^4$ -Gitter.

Auf einem  $4^4$ -Gitter können die Eigenwerte der DIRAC-Matrix relativ einfach exakt berechnet werden. Als zweidimensionales Histogramm sind in Abb. 10 nahe am kritischen Punkt alle Eigenwerte von 100 Konfigurationen analysiert. Daran erkennen wir, dass auf dem  $4^4$ -Gitter die meisten Eigenwerte einen Realteil zwischen 2 und 4 sowie einen Imaginärteil vom Betrag 1 bis 2. Besonders wichtig ist das geringe Vorkommen sehr kleiner Eigenwerte, die zu einer großen Konditionszahl führen würden. Darüber hinaus stellen wir fest, dass das komplette Spektrum vollständig in der Halbebene mit positivem Realteil liegt. Bei größeren Gitter liegen deutlich mehr kleine Eigenwerte vor, die zudem näher an den Ursprung rücken. Dadurch vergrößert sich die Konditionszahl und der CG-Löser konvergiert langsamer.

Zu Beginn einer Simulation befindet sich das System typischerweise nicht in einem Gleichgewichtszustand. Deshalb beginnt jede Simulation mit einer sogenannten Thermalisierungsphase, in der die Konfigurationen so lange aktualisiert werden bis sie sich im thermischen Gleichgewicht befinden. Wie in Abb. 11 erkennbar ist, bildet sich sowohl bei der Plakette als auch beim chiralen Kondensat ab Konfiguration 50 ein Plateau. Von diesem Zeitpunkt an fluktuiert ihre Größe nur noch durch statistische Fluktuationen. Alle folgenden Konfigurationen können zur Messung dieser Observablen herangezogen werden. Wichtig ist dabei, dass zwischen aufeinanderfolgenden Messungen ausreichend viele Konfigurationen unberücksichtigt bleiben, um die Autokorrelation<sup>[6]</sup> so klein wie möglich zu halten. In der Praxis ist eine Autokorrelationsanalyse bei normalen Simulationsparametern zu aufwendig.

In Abb. 12 haben wir die Eigenwerte einer Simulation zu Beginn sowie nach 1, 10 und 99 RHMC-Iteration in der komplexen Ebene visualisiert. Die Abbildung zeigt durch ihre Spiegelsymmetrie an der reellen Achse, dass die Eigenwerte aufgrund der  $\gamma_5$ -Symmetrie in komplex konjugierten Paaren auftreten und somit zu einer reellen positiven Determinante führen. Daraus schließen wir für die Pfaffsche

<sup>[6]</sup>Die Autokorrelation ist von der Observablen abhängig: Bei lokalen Observablen ist sie in der Regel kleiner. Auch der Monte-Carlo-Algorithmus kann einen Einfluss auf die Korrelationslänge nehmen.

Determinante, dass sie keinen Imaginärteil enthält. Die dargestellte Simulation beginnt mit einem Kaltstart, bei dem alle Eichfelder als Identität initialisiert werden. Dadurch besitzt das Spektrum nur wenige Eigenwerte mit einer hohen Entartung. Nach der ersten Konfiguration ist das Spektrum bereits deutlich breiter und enthält bei den kleinsten bzw. größten Eigenwerten noch Löcher. Sie verschwinden im Laufe der Iterationsschritte und sind ein Zeichen unzureichender Thermalisierung. Zum Vergleich zeigt Abb. 11(b) das chirale Kondensat, das direkt vom Spektrum abhängt und von den kleinen Eigenwerten dominiert wird. Nach Gl. (3.65) können wir mit den berechneten Eigenwerte das chirale Kondensat  $\Sigma = \frac{1}{2V} \langle \text{tr} \tilde{D}_{xx}^{-1} \rangle_{\text{eff}} = \frac{1}{2V} \sum_{\lambda} \frac{1}{\lambda}$  exakt bestimmen. Im Vergleich mit dem Resultat der stochastischen Schätzer zeigt sich eine gute Übereinstimmung. Das komplette Spektrum thermalisiert nur langsam, wodurch das chirale Kondensat erst nach etwa 50 Konfigurationen das thermische Gleichgewicht erreicht.

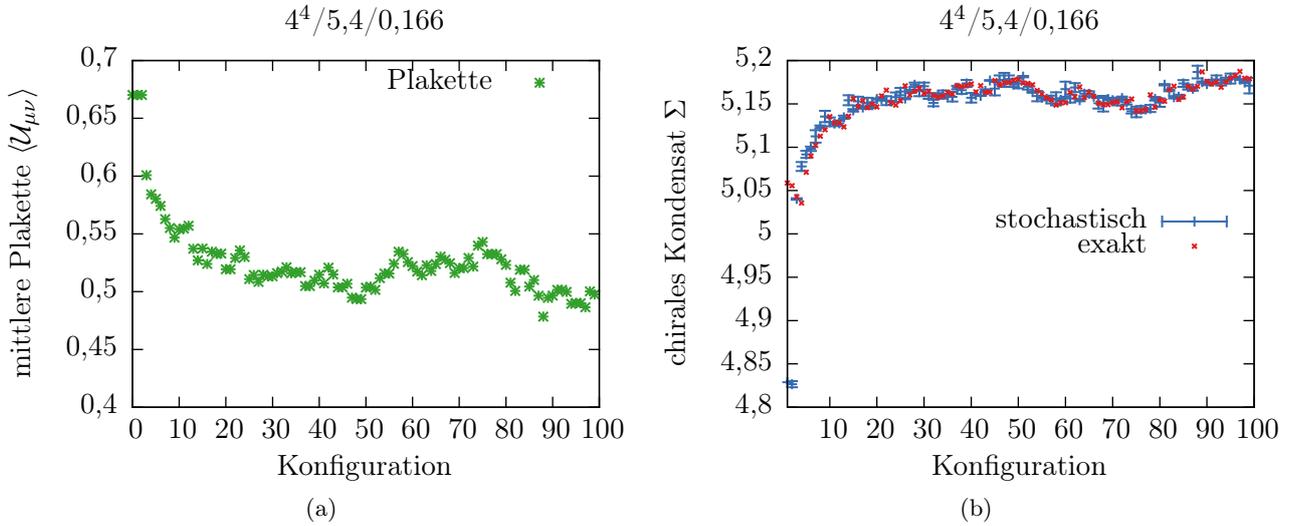


Abb. 11: Thermalisierung (b) der Plakette und (a) des chiralen Kondensats nahe des kritischen Punktes  $\kappa_c \approx 0,167$ . Als Vergleich ist in (b) das aus den exakten Eigenwerten berechnete chirale Kondensat dargestellt. Durch die stochastischen Schätzer sind im approximierten chiralen Kondensat statistische Fluktuationen enthalten.

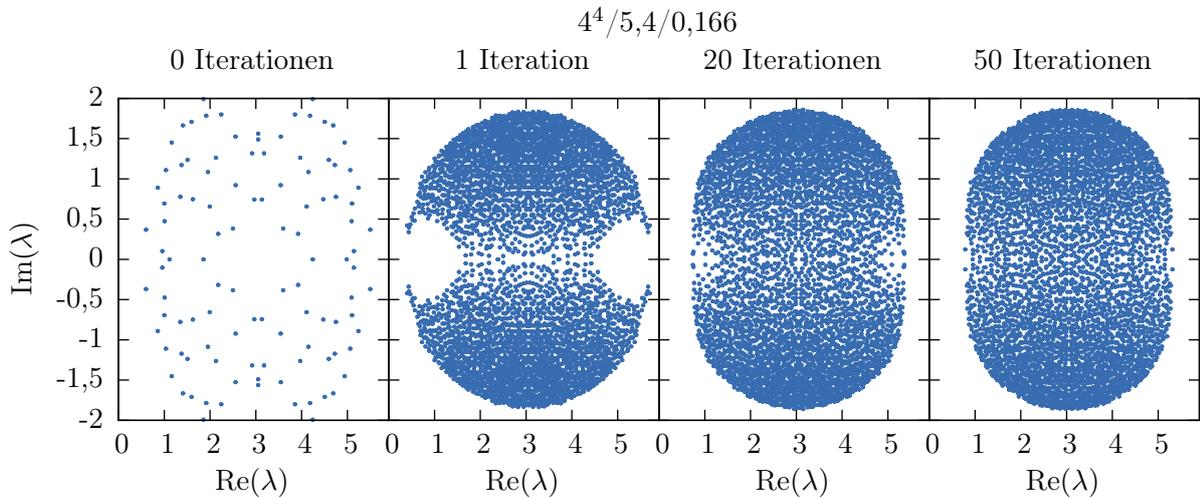


Abb. 12: Eigenwerte des DIRAC-Operators in komplexer Ebene im Verlauf der Simulation.

In diesem Abschnitt präsentieren wir die Struktur der DIRAC-Matrix für verschiedene Präkonditionierungen. Zur Untersuchung wählen wir ein zweidimensionales  $8 \times 8$  Gitter, bei dem die dazugehörige DIRAC-Matrix die Dimension  $\dim(D) = \dim(\Lambda) \cdot (N_c^2 - 1) \cdot N_s = 8^2 \cdot 8 \cdot 2 = 1024$  besitzt. Unabhängig von der Präkonditionierung sind nur  $66\,560/1\,048\,576 \approx 6,3\%$  der Einträge ungleich Null<sup>[7]</sup>. In Abb. 13 ist die Struktur der DIRAC-Matrix visualisiert. Jedes blaue Kästchen entspricht darin einem  $16 \times 16$  Block, dessen Einträge die Wechselwirkung der internen Farb- und Spinorindizes für feste Raumzeitpunkte  $x$  &  $y$  enthalten. Im zweidimensionalen Beispiel sind diese Untermatrizen mit der Basis  $\{\mathbb{1}_2 \pm \sigma_i\}$ , die die PAULI-Matrizen  $\sigma_i$ ,  $i = 1, 2$  enthält, dicht besetzt. In vier Dimensionen vergrößert sich der Spinorraum auf  $\mu = 1, 2, 3, 4$  und die Basis  $\{\mathbb{1}_4 \pm \gamma_\mu\}$  mit den Gamma-Matrizen (s. App. A) enthält 50% Nullen. Um die häufige Multiplikation der DIRAC-Matrix mit einem Vektor effektiv auszuführen, gehen wir folgendermaßen vor: Im sehr dünnbesetzten Indexbereich der Raumzeitpunkte iterieren wir lediglich über die nichtverschwindenden internen Untermatrizen. Auf diesen Unterblöcken nutzen wir eine BLAS-Routine zur schnellen Matrix-Vektor-Multiplikation. Alternativ wäre eine explizite Ausnutzung der Struktur der Gamma-Matrizen sinnvoll. Durch die periodischen Randbedingungen entstehen die Matrix-Einträge, die sich oben rechts bzw. unten links in der Matrix befinden. Durch eine Präkonditionierung werden die Matrixeinträge des in Abb. 13(a) dargestellten WILSON-Operators neu angeordnet. In Abb. 13(b) ist die Verteilung der Einträge für die *even-odd*-präkonditionierte Matrix

$$D = \begin{pmatrix} D_{ee} & D_{eo} \\ D_{oe} & D_{oo} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

mit  $512 \times 512$  Unterblöcken gezeigt. Sowohl die *even-even*- als auch die *odd-odd*-Untermatrix enthalten nur die trivial Selbstwechselwirkung  $D_{ee} = D_{oo} = \mathbb{1}_{512}$ . Dadurch kann die Berechnung der Quark-Determinanten vorteilhaft faktorisiert werden. Zudem verbessert sich auf diese Weise die Konditionszahl der Matrix, wodurch weniger CG-Iteration benötigt werden und die Kraftberechnung beschleunigt wird. Die Bandstruktur der Untermatrizen  $D_{eo}$  und  $D_{oe}$  gleicht der ursprünglichen Form ohne Präkonditionierung, weil auch dort gerade Gitterpunkte neben ungeraden Gitterpunkten liegen.

Auf eine andere Weise teilen wir die Gitterstruktur bei der rot-schwarz-Präkonditionierung auf, die wir in s. Kap. 3.6.2 eingeführt haben. Hierdurch unterscheidet sich das *Nonzero*-Muster deutlicher von der unpräkonditionierten Form, da nicht gerade von ungerade sondern rot von schwarz getrennt wird. In Abb. 13(c) ist die Matrix

$$D = \begin{pmatrix} D_{rr} & D_{rb} \\ D_{br} & D_{bb} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

mit Farbblöcken der Größe  $2^2$  dargestellt. Durch die kleine Blockgröße besitzen die Gitterpunkte viele Nachbarn der anderen Farben, weshalb die Untermatrizen  $D_{rb}$  und  $D_{br}$  ähnlich voll sind wie  $D_{rr}$  und  $D_{bb}$ . Auf dem Diagonalband lassen sich  $\left(\frac{\dim(\Lambda)}{\dim(\text{Block})}\right)^2 = \left(\frac{8}{2}\right)^2 = 16$  Unterblöcke erkennen. Wählen wir hingegen wie in Abb. 13(d) Farbblöcke der Größe  $4^2$ , so ist die Hauptdiagonale stärker besetzt als die Untermatrizen  $D_{rb}$  und  $D_{br}$ . Hier erkennen wir zudem auf dem Diagonalband  $\left(\frac{8}{4}\right)^2 = 4$  Unterblöcke.

Wenn wir den *Halo* ausschalten, werden die langen Moden abgeschnitten, wodurch wir lediglich eine Näherung erhalten. Aufgrund der geringeren Kommunikation zwischen den Prozessen erhalten wir

<sup>[7]</sup>Mit wachsendem Gittervolumen fällt dieser Anteil deutlich unter 1%.

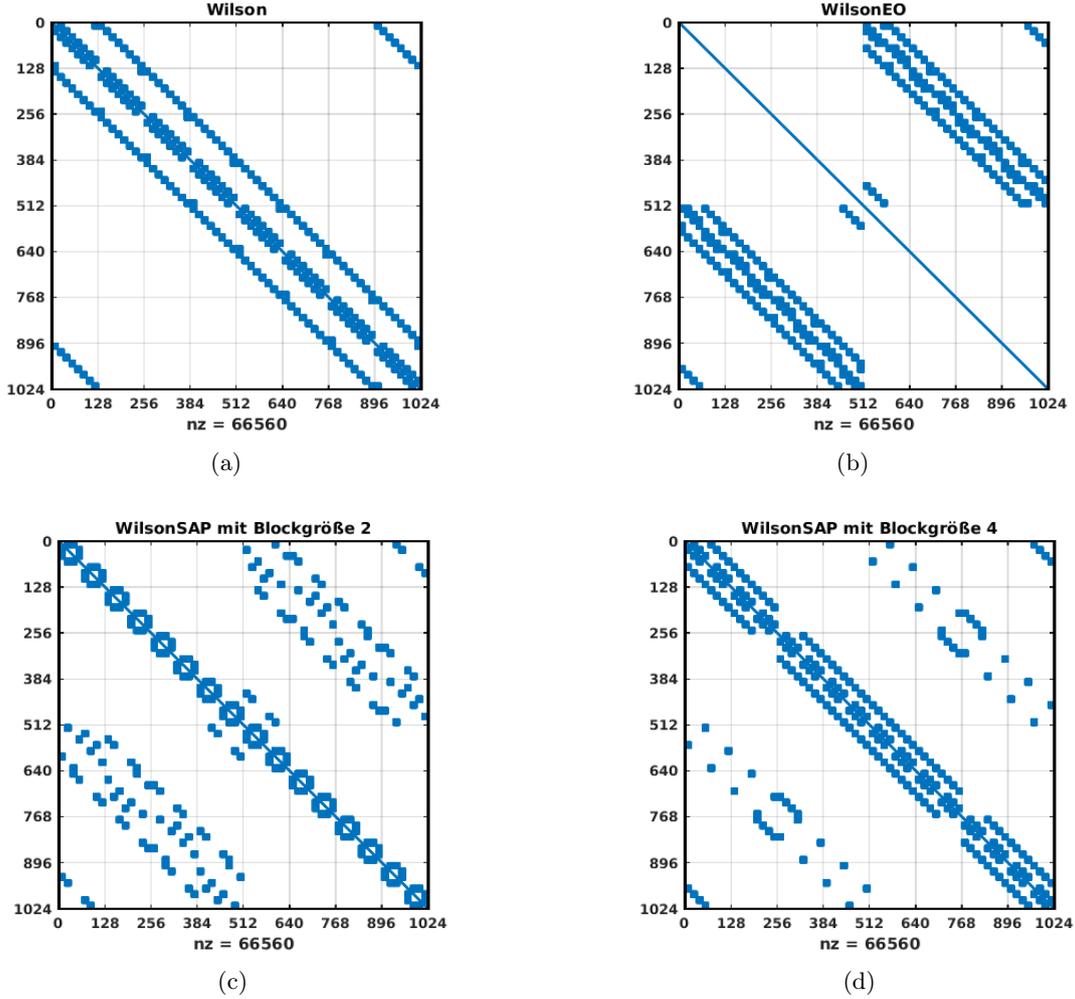


Abb. 13: Struktur des DIRAC-Operators auf einem  $8 \times 8$ -Gitter: (a) ohne Präkonditionierung, (b) mit Gerade-Ungerade-Präkonditionierung, (c) Rot-Schwarz-Präkonditionierung mit Blockgröße  $2^2$ , (d) Rot-Schwarz-Präkonditionierung mit Blockgröße  $4^4$ . Alle Operatoren enthalten  $nz = 66560$  *Nonzero*-Einträge.

eine kürzere Laufzeit. Allerdings ist diese Näherung in der Kraftberechnung zu grob, wodurch wir 0% Akzeptanz erhalten. Bei Messungen lohnt sich der Verzicht auf den *Halo* ebenfalls nicht, weil die Kommunikation meist nur einen kleinen Teil der Laufzeit ausmacht.

Durch die Rot-Schwarz-Präkonditionierung verbessert sich die Konditionszahl der DIRAC-Matrix nicht. Im Gegenteil wachsen die größten Eigenwerte in der Nähe des kritischen Punktes soweit, dass die Eigenwerte nicht mehr in dem Intervall der rationalen Approximation liegen. Um zu verhindern, dass in Abhängigkeit des *Hopping*-Parameters  $\kappa$  die rationale Approximation angepasst werden muss, haben wir die DIRAC-Matrix mit dem Faktor  $\frac{1}{(1+\kappa)^2}$  reskaliert. Diese Freiheit ist dadurch gegeben, dass sich jeder Faktor in der Zustandssumme wieder herauskürzt. Bisher konnte die Rot-Schwarz-Präkonditionierung keine Verbesserung erzielen. Die damit erreichten Iterationszahlen sind auf dem Niveau des unmodifizierten DIRAC-Operators. Mit der Gerade-Ungerade-Präkonditionierung erreichen wir die schnellste Laufzeit. Dies ist zu erwarten, da wir bei dieser Methode die kleinste Konditionszahl erzielen. Daher verwenden wir im Folgenden die Gerade-Ungerade-Präkonditionierung.

## 4.2. Simulationsparameter

Zur Untersuchung der HMC-Parameter wird die Trajektorienlänge  $\tau$ , die Anzahl der Intervalle  $N$  und die Ordnung des Integrators variiert. Dazu haben wir verschiedene Simulationen auf einem  $8^3 \times 16$ -Gitter mit dem *Hopping*-Parameter  $\kappa = 0,162$  durchgeführt. Durch die Nähe zum kritischen Punkt erhoffen wir uns deutliche Unterschiede zwischen den verschiedenen Parametern. Die Laufzeit ist durch die Matrix-Vektor-Multiplikation dominiert und findet größtenteils im CG-Löser statt. Um Schwankungen der Laufzeit durch unterschiedliche Prozessoren und deren Auslastung zu eliminieren, vergleichen wir direkt die Anzahl der CG-Iterationen. Eine Erhöhung der Schritte  $N$  von 8 auf 12 führt zu etwa 30% mehr CG-Iterationen und eine weitere Erhöhung von 12 auf 16 nochmals um rund 30%. Eine gute Akzeptanzrate liegt bei 90-95%, denn sie sollte nicht zu hoch liegen, sodass sichergestellt ist, dass sich die Trajektorie ausreichend durch den Phasenraum bewegt. Über die Schrittzahl  $N$  und Trajektorienlänge  $\tau$  kann die Akzeptanzrate beeinflusst werden. Im Prinzip wären lange Trajektorien gut, weil damit der Phasenraum schneller durchlaufen wird. Durch eine geringe Akzeptanz bleiben wir jedoch im Phasenraum hängen oder bewegen uns nur langsam darin fort. Nach unserer Erfahrung reagiert die Rechenzeit und Autokorrelationen nicht besonders sensibel auf Veränderungen der HMC-Parameter. Deshalb fassen wir in Tab. 1 als Resultat unsere Standardparameter zusammen. Wir integrieren wie angegeben die Fermionen und Eichfelder auf verschiedenen Zeitskalen mit zwei unterschiedlichen Integratoren. Bei den Fermionen kommt der SEXTON-WEINGARTEN-Integrator zum Einsatz, wohingegen für die einfacher zu berechnenden Eichfelder ein Integrator vierter Ordnung verwendet wird. Weiterführendes dazu ist in App. B.4 und in [81] zu finden. In den Tab. 2 & 3 sind darüber hinaus die wichtigsten Parameter für die Fermionen sowie die Messung zusammengestellt.

Tab. 1: Übersicht der HMC-Parameter

<i>Sweeps</i> pro Konfiguration	1
Trajektorienlänge $\tau$	0,6
Schrittweite $\delta\tau = \tau/N$ für Fermionen	0,05
Schrittweite $\delta\tau$ für Eichfelder	0,025
Ordnung des Integrators für Fermionen	verbesserte $\mathcal{O}(\delta\tau^2)$ nach Gl. (B.22) mit 2 Kraftanwendungen pro <i>Update</i>
Ordnung des Integrators für Eichfelder	$\mathcal{O}(\delta\tau^4)$ nach Gl. (B.23) mit 4 Kraftanwendungen pro <i>Update</i>

Tab. 2: Übersicht der Parameter zur Behandlung der Fermionen

Pseudofermionen	1
Genauigkeit des CG-Lösers für $r_{\text{pf}}$ & $r_{\text{Akzep}}$	$1 \cdot 10^{-16}$
Genauigkeit des CG-Lösers für $r_{\text{MD}}$	$1 \cdot 10^{-2}$
stochastische Schätzer	20
Genauigkeit der stochastischen Schätzer	$1 \cdot 10^{-8}$
Punktquellen	1
Genauigkeit der Punktquelle	$1 \cdot 10^{-8}$

Tab. 3: Übersicht der wichtigen Parameter bei der Messung

Thermalisierung	20 Konfigurationen
Dekorrelationsschritte pro Konfiguration	5
<i>Bin</i> -Größe	10

### 4.3. Festlegung der Kopplung $\beta$ und des *Hopping*-Parameters $\kappa$

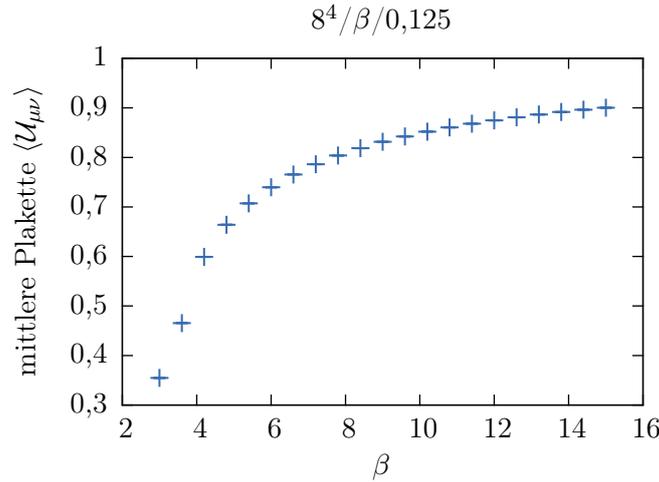


Abb. 14: Um die Kopplung  $\beta$  zu bestimmen, haben wir die mittlere Plakette in Abhängigkeit von  $\beta$  aufgetragen. Die Fehlerbalken sind so klein, dass sie innerhalb der Linienbreite liegen.

In der  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie sind die Gluinomasse  $m_g$  und die Kopplung  $g$  die beiden einzigen freien Parameter. Zu Beginn legen wir die physikalische Kopplung  $g$  durch den Parameter

$$\beta = \frac{2N_c}{g^2} \quad (4.3)$$

fest. Zur Übersicht haben wir mit einem lokalen HMC-Algorithmus reine  $SU(3)$ -Eichtheorie simuliert und dabei die Kopplung  $\beta$  variiert. In Abb. 14 ist in Abhängigkeit der Kopplung die gemittelte Plakette aufgetragen. Mit dieser Größe können wir die interne Energie der statistischen Zustandssumme abschätzen [68]. Basierend auf unserer Erfahrungen mit reinen Eichtheorien und Simulationen zu  $SU(2)$ , wo  $\langle \mathcal{U}_{\mu\nu} \rangle = 0,6 \dots 0,8$  gute Resultate liefert, haben wir uns für  $\beta = 5,4$  entschieden. Einerseits sollte die zu  $\beta$  antiproportionale Gitterkonstante  $a$  klein sein, um möglichst nahe am Kontinuum zu simulieren. Je kleiner der Gitterabstand  $a$  ist desto weniger tragen die Diskretisierungsfehler bei. Durch die WILSON-Eichwirkung aus Kap. 3.3.1 entstehen Fehler der Ordnung  $\mathcal{O}(a^2)$ . Bei Simulationen mit Fermionen unter Verwendung des WILSON-DIRAC-Operator aus Kap. 3.3.2 dominieren jedoch seine  $\mathcal{O}(a)$ -Fehler. Mit der SYMANZIK-Verbesserung aus App. B.5 können die Beiträge des Fermion-Operators auf  $\mathcal{O}(a^2)$  reduziert werden. Andererseits wird durch ein zu kleines  $a$  bzw. ein zu großes  $\beta$  das Gittervolumen sehr klein. In der Folge können leichte Teilchen durch Volumeneffekte nicht korrekt behandelt werden (vgl. Kap. 3.4). In Kap. 4.6 werden wir sehen, dass die Wahl  $\beta = 5,4$  zu einem relativ kleinen Gitter gehört.

Bei endlichen Gitterabständen erhalten die Gluinos durch die explizite chirale Symmetriebrechung eine unphysikalische Masse. Damit sie im Kontinuumslimit wie gewünscht masselos werden, muss der *Hopping*-Parameter

$$\kappa = \frac{1}{2(m+d)} \quad (4.4)$$

für jede Kopplung  $\beta$  so eingestellt werden, dass dieser Effekt kompensiert wird. Bei endlichem Gitterabstand suchen wir dazu das  $\kappa$ , bei dem das adjungierte Pion möglichst leicht ist,  $m_{a-\pi} \propto m_g$ . An diesem Punkt wird im Kontinuumslimit die chirale Symmetrie wiederhergestellt. Wie wir in Kap. 3.8 begründet haben, wird durch dieses *Feintuning* auch die Supersymmetrie im Kontinuum sichergestellt.

Um den kritischen *Hopping*-Parameter  $\kappa_c$  zu bestimmen, messen wir die Masse des adjungierten Pions  $m_{a-\pi}$  in Abhängigkeit von  $\kappa$  und suchen das Minimum. Für Mesonen ist der Korrelator

$$C(t < \frac{N_t}{2}) = \pm C(N_t - t) \quad (4.5)$$

symmetrisch, wenn der Paritätspartner dieselbe Masse besitzt. Darüber hinaus können im Korrelator Beiträge angeregter Zustände auftreten, sodass wir die folgenden Fit-Funktionen wählen:

$$C_0(t) = a_0 \cdot \cosh((N_t/2 - t)m_0), \quad \text{„Cosh“-Fit,} \quad (4.6)$$

$$C_1(t) = a_0 \cdot \cosh((N_t/2 - t)m_0) + a_1 \cdot \cosh((N_t/2 - t)m_1), \quad \text{„2Cosh“-Fit.} \quad (4.7)$$

In Abb. 15(a) stellen wir die beiden Fits für  $\frac{\beta}{N_c} = 1,8$  dar. Dort ist zu erkennen, dass der „2Cosh“-Fit den Korrelator genauer beschreiben kann, indem er durch seine zusätzliche freie Parameter gegenüber dem „Cosh“-Fit den angeregten Zustand besser berücksichtigt. Bei allen folgenden Korrelatoren werden wir deshalb nur noch den besseren „2Cosh“-Fit abbilden.

In Abb. 15(b) ist die effektive Masse

$$m_{\text{eff}}(t) = \ln \left( \frac{C(t)}{C(t+1)} \right) \quad (4.8)$$

dargestellt. Im Bereich  $0 \ll t \ll \frac{N_t}{2}$  kann die Masse des adjungierten Pions  $a-\pi \approx \pm 0,45$  direkt abgelesen werden. In Abb. (c) ist deutlich der Einfluss des endlichen Volumens zu erkennen. Während auf dem  $8^4$ -Gitter die kleinste gemessene Pionmasse bei rund 0,6 liegt, erzielen wir mit dem  $8^3 \times 16$  eine minimale Masse von etwa 0,2. In dem kleineren Volumen steht dem leichtesten Zustand nicht genügend Platz zur Verfügung und infolgedessen wird seine Masse zu hoch gemessen. Sobald das Gitter in Zeitrichtung mindestens 16 Punkte enthält, scheinen die Volumeneffekte beseitigt zu sein, denn im Rahmen der statistischen Unsicherheit stimmen die Masse des adjungierten Pions auf dem  $8^3 \times 16$ -Gitter und dem  $16^3 \times 32$ -Gitter überein. Somit ist das  $16^3 \times 32$ -Gitter ausreichend für unsere Simulationen. Wenn das Pion als leichtestes Teilchen auf das Gitter passt, dann gilt dies auch für alle schwereren Teilchen mit einer kleineren COMPTON-Wellenlänge, solange diese größer als der Gitterabstand bleibt. Aus dem linearen Fit von Abb. 15(d) können wir den kritischen *Hopping*-Parameter  $\kappa_c \approx \frac{1}{2(-1,01+4)} = 0,167$  des  $8^3 \times 16$ -Gitters bei  $\beta = 5,4$  ablesen.

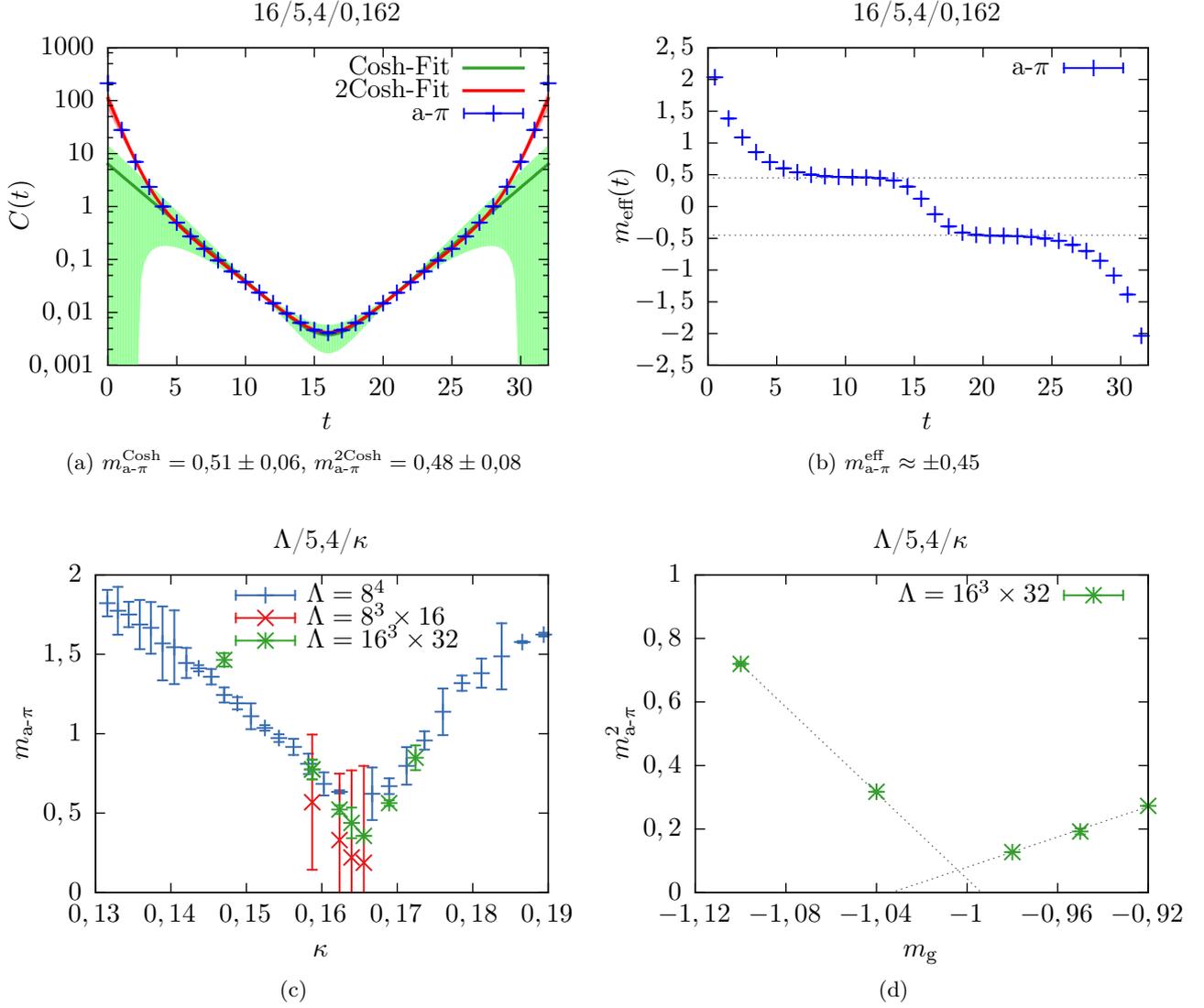


Abb. 15: Massenbestimmung des adjungierten Pions: (a) Korrelator inklusive des „Cosh“- und des „2Cosh“-Fits (Fehlerbalken innerhalb Linienbreite), (b) effektive Masse aus abgelesenem Plateau (Fehlerbalken innerhalb Linienbreite), (c) Pion-Masse aus „2Cosh“-Fits der Korrelatoren auf verschiedenen Gittergrößen (Fehlerbalken vermutlich überschätzt in Relation zu guten Fits wie in (a)), (d) lineare Extrapolation  $m_g \sim m_{a-\pi}^2$  zum kritischen Punkt nach Gl. (3.67).

Aufgrund der  $\gamma_5$ -Symmetrie ist  $\bar{\psi}\not{D}\psi$  unter der chiralen Symmetrie aus Gl. (2.33) invariant. Hingegen sind weder der WILSON-Term noch der Massenterm invariant und wir müssen die Masse  $m_g$  so feintunen, sodass sich im Kontinuumsimes die beiden symmetriebrechenden Terme kompensieren. Das chirale Kondensat lässt sich auf dem Gitter relativ einfach messen, wodurch es auch mit wenig Konfigurationen nur einen kleinen statistischen Fehler besitzt. In Abb. 16(a) sind Messwerte von einigen Simulationen dargestellt. Darin ist zu erkennen, dass das chirale Kondensat keine Volumenabhängigkeit besitzt. Zudem tritt am kritischen Punkt  $\kappa_c \approx 0,163$  ein Knick auf (vgl. Kap. 4.3). Dadurch erkennen wir eine Diskrepanz zum kritischen  $\kappa_c \approx 0,167$  aus der Pion-Extrapolation, die bei allen Kopplungen  $\beta$  besteht (vgl. Abb. 18) und noch weiter untersucht werden muss. Bei beiden Methoden wären weitere Datenpunkte hilfreich, um die Differenz zu studieren. Im Folgenden verwenden wir  $\kappa_c = 0,167$ , weil die

Position des Knicks im chiralen Kondensat nicht so genau ablesbar ist. Deutlich mehr Statistik erfordert die chirale Suszeptibilität, weshalb ihren Kurvenverlauf noch nicht zur Bestimmung des kritischen Punktes heranziehen können. Wie Abb. 16(b) zeigt, kann auch aus 100 Konfigurationen im Rahmen der großen Fehlerbalken keine Schluss gezogen werden. Auch mit Hilfe der drei Datenpunkte, die mit Hilfe von 600 Konfigurationen entstanden, ist kein eindeutiger Kurvenverlauf zu erkennen.

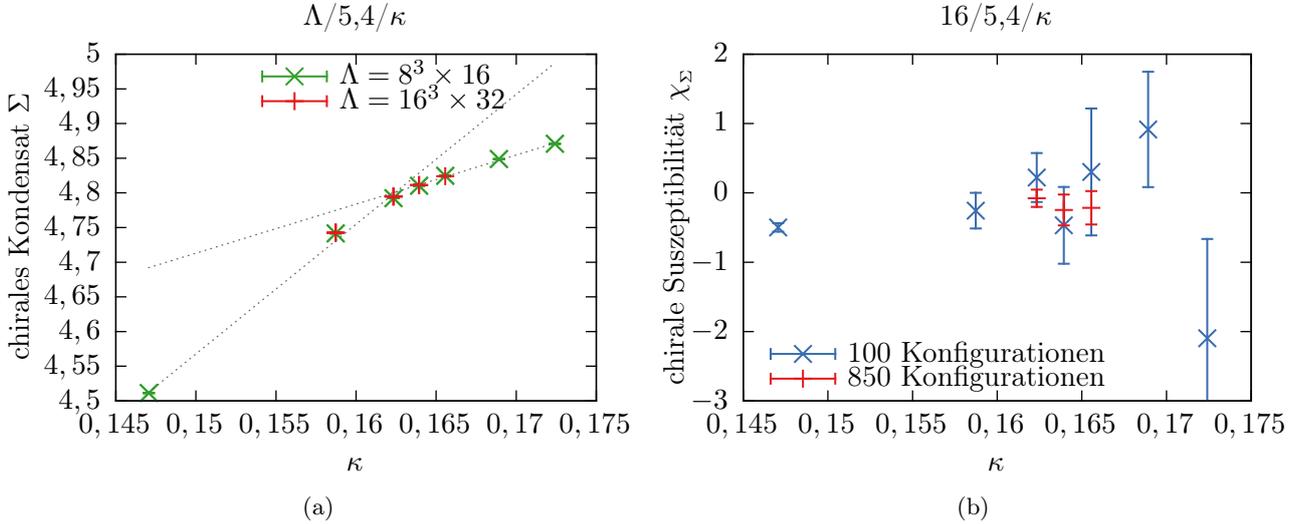


Abb. 16: (a) Chirales Kondensat in Abhängigkeit des *Hopping*-Parameters  $\kappa$  auf zwei verschiedenen Gittergrößen und (b) die dazugehörige Suszeptibilität bei unterschiedlicher Konfigurationsanzahl auf dem  $16^3 \times 32$ -Gitter.

Bei der Suche nach dem kritischen  $\kappa_c$  finden wir den physikalischen Punkt, der in der Numerik aufgrund von kleinen Eigenwerten zu einer hohen Konditionszahl führt. Demzufolge erwarten wir bei dem kritischen  $\kappa_c$  ein Maximum, das zu beiden Seiten hin schnell abfällt. Diese Beobachtung darf keinesfalls zur Suche nach dem kritischen *Hopping*-Parameter genutzt werden. Nachdem  $\kappa_c$  durch Messung des adjungierten Pions oder des chiralen Kondensats bestimmt wurde, kann die Numerik erfahrungsgemäß als Bestätigung für den kritischen Punkt angesehen werden. In Abb. 17(a) haben wir die Iterationszahlen des CG-Lösers dargestellt. In den verschiedenen Farben sind die Beiträge der drei Anwendungsgebiete (bei der Berechnung der Wirkung, der Kraft und der Pseudofermionen) aufgeschlüsselt. Ihr relativer Anteil zueinander bleibt über den untersuchten Bereich des *Hopping*-Parameters konstant, s. Abb. 17(a). Obwohl wir bei der Kraftberechnung eine geringere Präzision verlangen und somit der CG-Löser bereits nach wenigen Schritten konvergiert, finden dennoch rund 80% der Iterationen bei der oft stattfindenden Kraftberechnung statt. Da in jedem Iterationsschritt die DIRAC-Matrix angewendet wird, korrespondiert die Iterationszahl mit der benötigten Rechenzeit und die Kraftberechnung bildet den relevanten Anteil in der Simulation. Als Übersicht ist in Abb. 17(b) die Rechenzeit pro Konfigurationen beim Einsatz von 1024 Prozessoren dargestellt. Erwartungsgemäß zeigt auch dieser Kurvenverlauf am kritischen Punkt ein Maximum.

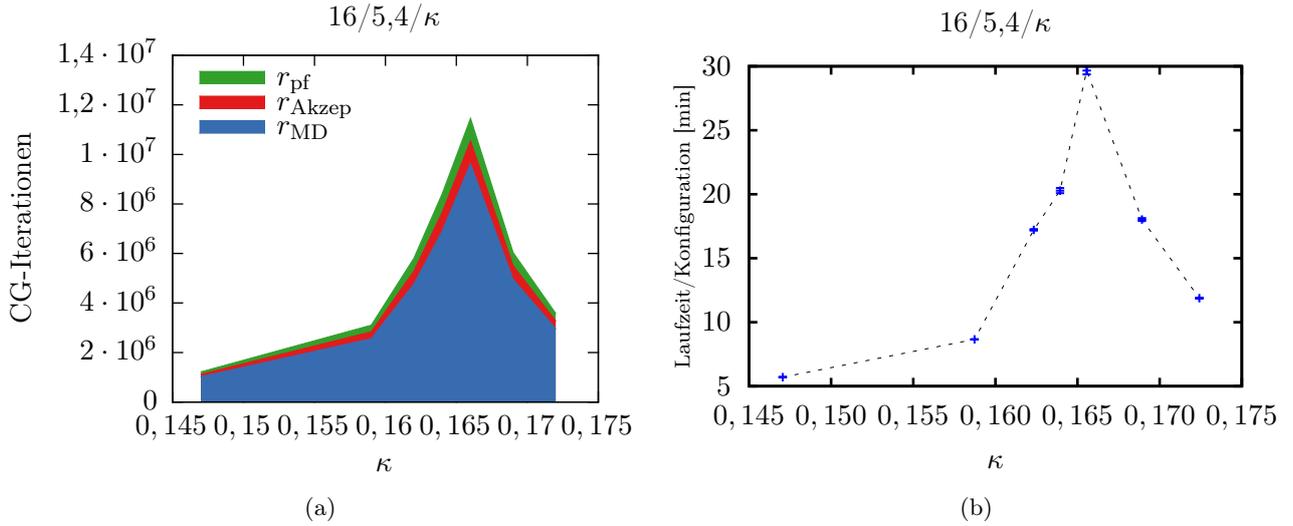


Abb. 17: (a) Absolute CG-Iterationen und (b) Rechenzeit in Abhängigkeit des *Hopping*-Parameters  $\kappa$ . Im gesamten Bereich bleiben die relativen Anteile zwischen den Berechnungen der Pseudofermionen mit  $r_{\text{pf}}$  ( $\approx 10\%$ ), der Wirkung im Akzeptanzschritt mit  $r_{\text{Akzep}}$  ( $\approx 10\%$ ) und der Kraft in der Molekulardynamik mit  $r_{\text{MD}}$  ( $\approx 80\%$ ) unverändert.

Mit demselben Vorgehen wie zu Beginn von Kap. 4.3 gehen wir durch verschiedene Kopplungen  $\beta$ . Für jedes gewählte  $\beta$  messen wir die Masse des adjungierten Pions  $a\text{-}\pi$ , die beim kritischen *Hopping*-Parameter  $\kappa_c$  ein Minimum aufweist. Als Resultat bekommen wir aus den Minima die in Abb. 18 dargestellte kritische Linie. Im Limes schwacher Kopplung läuft der *Hopping*-Parameter gegen  $\frac{1}{8}$  und im Grenzwert starker Kopplung geht  $\kappa \rightarrow \frac{1}{4}$  [69]. Für  $\beta = 3,6 - 4,2$  stieg die benötigte Rechenzeit an und bei noch kleineren Kopplungen  $\beta$  konnten wir keine aussagekräftige Daten gewinnen, da bei unveränderten HMC-Parametern die Akzeptanzrate sehr schlecht wurde.

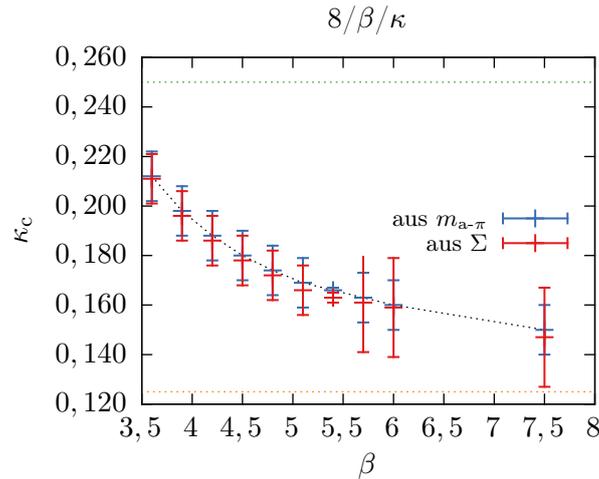


Abb. 18: Kritische Linie: Für verschiedene Kopplungen  $\beta$  wurde der kritische *Hopping*-Parameter bestimmt und als Funktion von  $\beta$  aufgetragen. Die farbigen Linien kennzeichnen die im Text erwähnten Schranken.

#### 4.4. Smearing-Test

Um das Signal-Rausch-Verhältnis der schwierigen Observablen zu verbessern haben wir den Einsatz von *Stout-Smearing* getestet. Durch *Smearing* werden unerwünschte Zustände und Anregungen unterdrückt. Beim *Stout-Smearing* werden die Links in jedem Schritt durch

$$\mathcal{U}_\mu(x) \mapsto \mathcal{U}'_\mu(x) = e^{iB_\mu(x)}\mathcal{U}_\mu(x) \quad (4.9)$$

verschmiert [70]. Die Matrix

$$B_\mu(x) = \frac{i}{2} \left( \Omega_\mu^\dagger(x) - \Omega_\mu(x) \right) - \frac{i}{2N_c} \text{tr} \left( \Omega_\mu^\dagger(x) - \Omega_\mu(x) \right) \quad (4.10)$$

ist hermitesch und spurlos, sodass  $e^{iB_\mu(x)} \in SU(N_c)$  und  $\mathcal{U}'_\mu(x) \in SU(N_c)$  gewährleistet ist. Unter Verwendung des *Staples*

$$\tilde{W}_\mu(x) = \sum_{\substack{\nu=0 \\ \nu \neq \mu}}^{d-1} \rho_{\mu\nu} \left( \mathcal{U}_{x+\mu,\nu} \mathcal{U}_{x+\nu,\mu}^\dagger \mathcal{U}_{x,\nu}^\dagger + \mathcal{U}_{x+\mu-\nu,\nu}^\dagger \mathcal{U}_{x-\nu,\mu}^\dagger \mathcal{U}_{x-\nu,\nu} \right) \quad (4.11)$$

mit den Gewichten  $\rho_{mn} = \rho$  und  $\rho_{4\mu} = \rho_{\mu 4} = 0$  erhalten wir

$$\Omega_\mu(x) = \tilde{W}_{x,\mu} \mathcal{U}'_\mu(x). \quad (4.12)$$

Das *Smearing* betrifft somit nur die räumlichen Richtungen der Links. Mit Hilfe der Plakette haben wir nach geeigneten *Smearing*-Parametern gesucht. Gute Parameter führen zu einer besseren Übereinstimmung des Gitteroperators mit dem zu messenden Zustand. Bei einem erfolgreichen *Smearing* verbessert sich die Messung immer weiter bis zu einem optimalen Punkt, an dem wir den Zustand am besten approximieren. Durch weitere *Smearing*-Schritte verschlechtert sich anschließend das Signal wieder. Diese Beobachtung kann anhand der Plakette einfach untersucht werden, wie in Abb. 19 für den geeigneten *Smearing*-Parameter  $\rho = 0,13$  dargestellt. Anhand der Daten stellen wir fest, dass dies bis zu  $n = 60$  Schritten eine Verbesserung bewirkt. Durch weitere *Smearing*-Iterationen verschlechtert sich anschließend das Resultat. Für die Praxis stellt  $n \approx 20$  einen effektiven Kompromiss zwischen Laufzeit und Güte dar.

#### 4.5. Massenbestimmung

In Tabelle 4 listen wir diejenigen Simulationen auf, aus denen wir die folgenden Resultate ermittelt haben. Dazu gehören die beiden Gittergrößen  $8^3 \times 16$  und  $16^3 \times 32$ . Auf dem kleineren Gitter haben wir 100 stochastische Schätzer und 4 Punktquellen verwendet. Beim größeren Gitter haben wir uns auf 20 stochastische Schätzer und eine Punktquelle beschränkt, weil sowohl der Rechen- als auch der Speicheraufwand proportional zum Gittervolumen wächst. Für beide Gitter haben wir in Zeitrichtung doppelt so viele Gitterpunkte wie in den Raumrichtungen gewählt, damit wir für die Korrelationsfunktionen ein großes Zeitintervall zur Verfügung haben. Wir werden in den folgenden Abschnitten sehen,

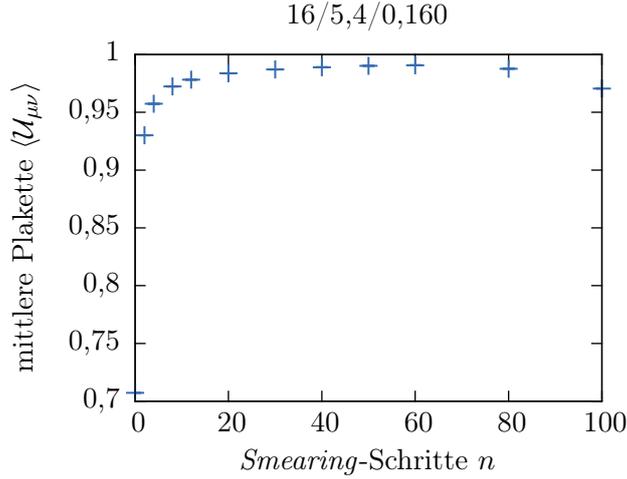


Abb. 19: Mittlere Plakette mit *Stout-Smearing* unter Variation der *Smearing*-Schritte  $n$ . Die Fehlerbalken liegen innerhalb der Linienbreite.

dass mit den bisher erzeugten Daten auf dem  $16^3 \times 32$ -Gitter durch das zu schlechte Signal-Rausch-Verhältnis keine Massen bestimmen können. Die Daten des  $8^3 \times 16$ -Gitters besitzen ein deutlicheres Signal und liefern erste Abschätzungen der Teilchenmassen. Mangels Vergleich können wir die Effekte des endlichen Volumens noch nicht abschätzen.

Tab. 4: Übersicht der Simulationen auf dem  $16^3 \times 32$ -Gitter.

Kürzel	Gittergröße	$\beta$	$\kappa$	Konfigurationen	Stochastische Schätzer	Punktquellen
16/5,4/0,147	$16^3 \times 32$	5,4	0,147	100		
16/5,4/0,159	$16^3 \times 32$	5,4	0,159	100		
16/5,4/0,162	$16^3 \times 32$	5,4	0,162	850		
16/5,4/0,164	$16^3 \times 32$	5,4	0,164	600	20	1
16/5,4/0,166	$16^3 \times 32$	5,4	0,166	580		
16/5,4/0,169	$16^3 \times 32$	5,4	0,169	100		
16/5,4/0,172	$16^3 \times 32$	5,4	0,172	100		
8/5,4/0,159	$8^3 \times 16$	5,4	0,159	500		
8/5,4/0,162	$8^3 \times 16$	5,4	0,162	500		
8/5,4/0,164	$8^3 \times 16$	5,4	0,164	490	100	4
8/5,4/0,166	$8^3 \times 16$	5,4	0,166	460		

#### 4.5.1. Mesonen

Zur Klasse der adjungierten Mesonen gehören das  $a$ - $\eta'$  und das  $a$ - $f_0$ . Ihre jeweiligen verbundenen Anteile heißen  $a$ - $\pi$  und  $a$ - $a_0$ . Auf das adjungierte Pion sind wir bereits bei der Bestimmung des kritischen *Hopping*-Parameters  $\kappa_c$  eingegangen. Seine Masse ergibt in der Nähe des kritischen Punktes vermutlich eine untere Schranke für die Massen aller anderen Zustände. Zuerst stellen wir die Resultate zum  $a$ - $\eta'$  vor, das mit moderatem Aufwand messbar ist. Anschließend behandeln wir das  $a$ - $f_0$ -Meson, für das wir

eine größere Statistik benötigen. In den folgenden Abbildungen ist der Korrelator jeweils so normiert, dass  $C(t = 4) = 1$  ist.

Nach dem adjungierten Pion ist das  $a\text{-}\eta'$  das am nächst einfachsten zu messende Teilchen. In Abb. 20 vergleichen wir die Korrelatoren des  $a\text{-}\eta'$ -Mesons inkl. Fits für verschiedene Gittergrößen, Konfigurationszahlen und stochastische Schätzer. Abb. 20(a) dient hierfür als Referenz. Eine Erhöhung der stochastischen Schätzer von 20 auf 200 ist in Abb. 20(b) dargestellt und führt zu einer deutlichen Verbesserung der statistischen Unsicherheit. Beim Wechsel der Gittergröße von  $8^3 \times 16$  zu  $16^3 \times 32$  in Abb. 20(c) wird der Korrelator bei derselben Statistik deutlich verrauschter. Erst durch weitere Konfigurationen wird das Signal deutlicher wie in Abb. 20(d). Im Vergleich zwischen Erhöhung der Konfigurationsanzahl und der stochastischen Schätzer erkennen wir, dass die Signalqualität durch mehr Konfigurationen besser wird und  $\mathcal{O}(100)$  stochastische Schätzer für ein deutliches Signal erforderlich sind.

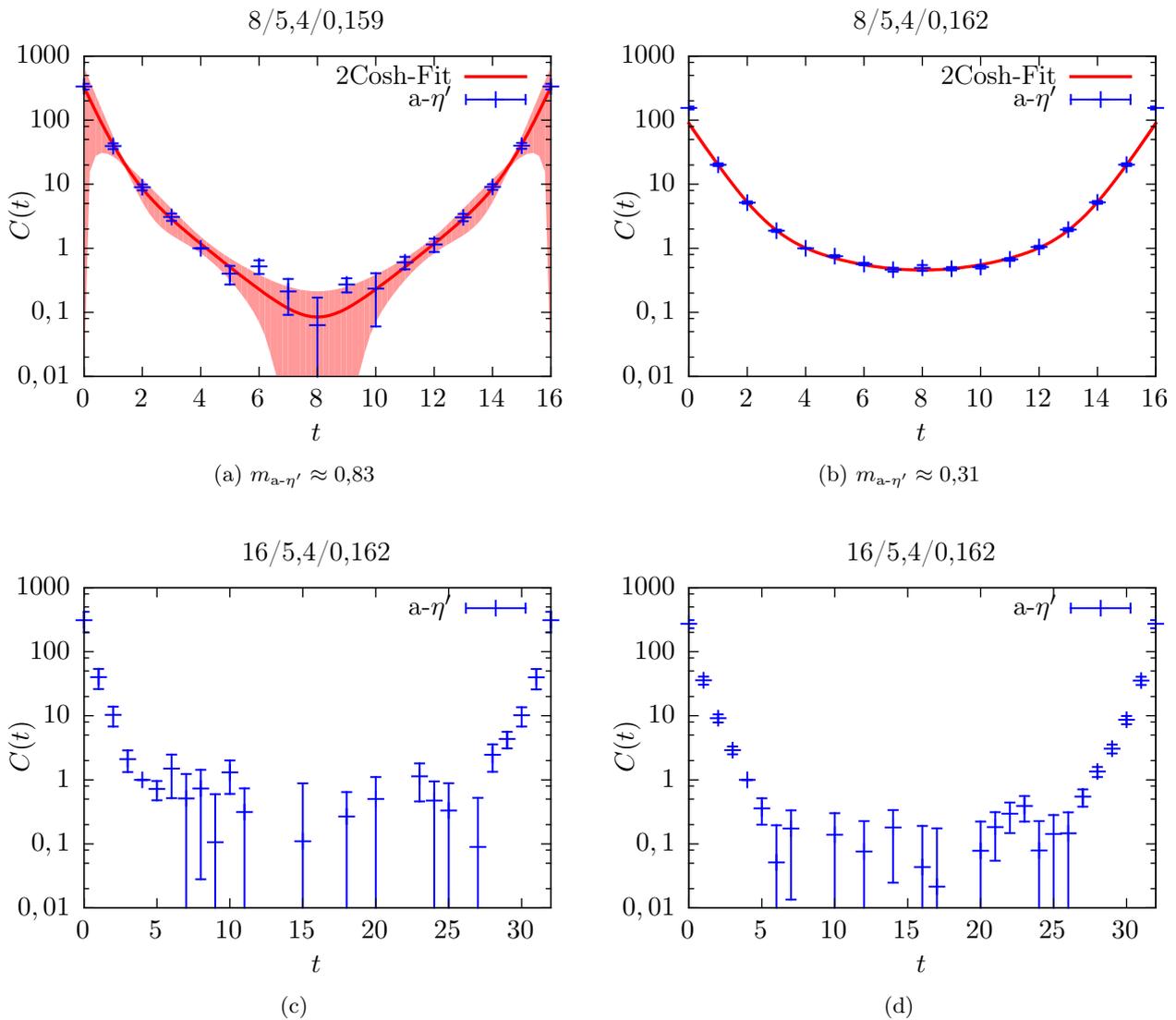


Abb. 20:  $a\text{-}\eta'$ -Korrelatoren auf einem  $8^3 \times 16$ -Gitter mit (a) 20 stochastischen Schätzern auf 100 Konfigurationen, (b) 200 stochastischen Schätzern auf 100 Konfigurationen sowie auf einem  $16^3 \times 32$ -Gitter mit (c) 20 stochastischen Schätzern auf 100 Konfigurationen, (d) 20 stochastischen Schätzern auf 850 Konfigurationen.

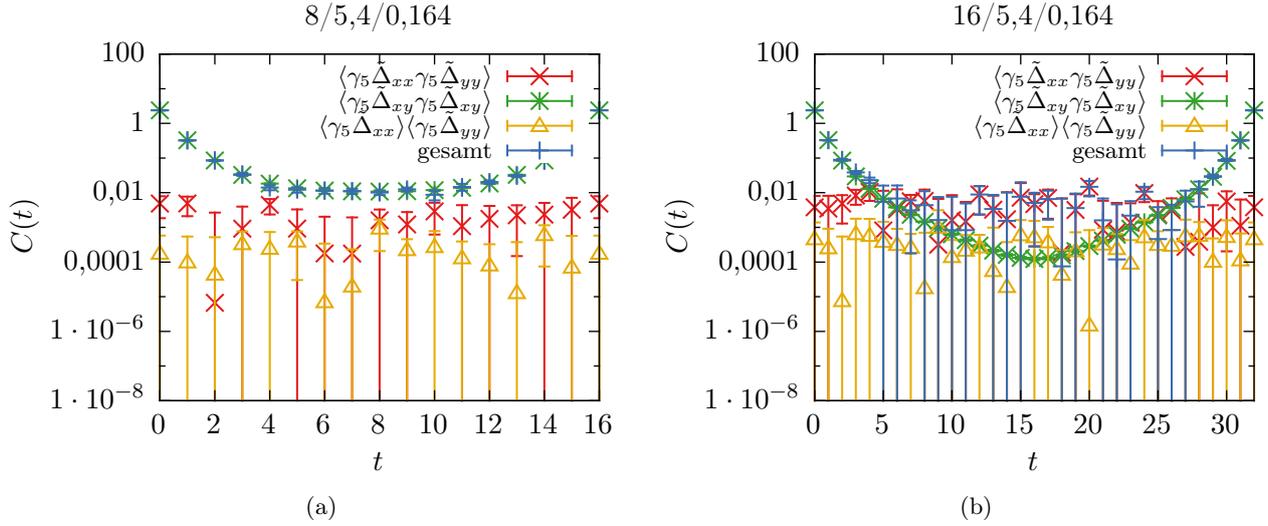


Abb. 21: Verbundener Anteil  $\langle \gamma_5 \tilde{\Delta}_{xy} \gamma_5 \tilde{\Delta}_{xy} \rangle$  und unverbundene Anteile  $\langle \gamma_5 \tilde{\Delta}_{xx} \gamma_5 \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  &  $\langle \gamma_5 \tilde{\Delta}_{xx} \rangle \langle \gamma_5 \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  des  $a\eta'$ -Korrelators mit 20 stochastischen Schätzern bei  $\kappa = 0,164$  mit 100 Konfigurationen auf (a) dem  $8^3 \times 16$ -Gitter und (b) dem  $16^3 \times 32$ -Gitter.

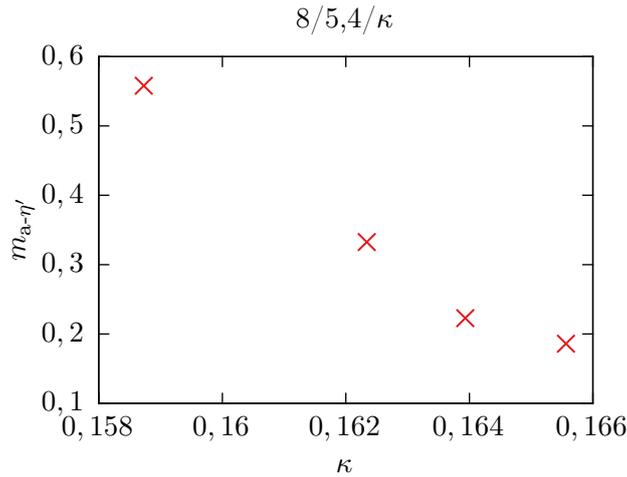


Abb. 22: Masse des adjungierten  $\eta'$ -Mesons in Abhängigkeit des *Hopping*-Parameters  $\kappa$  (Darstellung ohne Fehlerbalken).

In Abb. 21 sind die Korrelatoren nach ihren verbundenen und unverbundenen Beiträgen aufgeteilt. Erwartungsgemäß ist der verbundene Anteil, der dem  $a\pi$  entspricht, nur mit kleinen Unsicherheiten behaftet. Auf dem  $8^3 \times 16$ -Gitter sind die unverbundenen Beiträge  $\langle \tilde{\Delta}_{xx} \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  und die Vakuumbeiträge  $\langle \tilde{\Delta}_{xx} \rangle \langle \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  etwa zwei Größenordnungen kleiner, sodass sie trotz ihrer großen relativen Fehler zum gesamten Korrelator kaum beitragen, s. Abb. 21(a). Auf dem  $16^3 \times 32$ -Gitter besitzen die unverbundenen Anteile einen größeren Einfluss wie in Abb. 21(b) zu sehen ist. Die Ursache beruht wahrscheinlich auf der statistischen Grenze der 20 stochastischen Schätzer, deren Beitrag nicht weiter sinkt. Sowohl im rot dargestellten Beitrag  $\langle \gamma_5 \tilde{\Delta}_{xx} \gamma_5 \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  als auch im gelb dargestellten Beitrag  $\langle \gamma_5 \tilde{\Delta}_{xx} \rangle \langle \gamma_5 \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  ist das Produkt der beiden Faktoren statistisch nicht unabhängig, wodurch der beobachtete systematische

Fehler entsteht. In Abb. 21(b) ist die Auswirkung auf den gesamten Korrelator größer als in Abb. 21(a), weil der grün dargestellte verbundene Beitrag  $\langle \gamma_5 \tilde{\Delta}_{xy} \gamma_5 \tilde{\Delta}_{xy} \rangle$  kleinere Werte annimmt.

Aus den Simulationen des  $8^3 \times 16$ -Gitters mit hoher Statistik haben wir Masse  $m_{a-\eta'}$  für vier verschiedene *Hopping*-Parameter  $\kappa$  gemessen und in Abb. 22 aufgetragen. In der Nähe des kritischen Punktes beträgt die Masse etwa  $m_{a-\eta'} = 0,20 \pm 0,05$ .

Das  $a-f_0$ -Meson ist neben dem  $a-\eta'$ -Meson das zweite bosonische Teilchen im Multiplett von VENEZIANO und YANKIELOWICZ. Erst durch die Simulationen auf dem  $8^3 \times 16$ -Gitter mit 500 Konfigurationen, 100 stochastischen Schätzern und 4 Punktquellen konnten wir sein Signal im Rauschen auflösen. In Abb. 23(a) ist die Korrelationsfunktion bei  $\kappa = 0,162$  dargestellt, wobei mit diesen Daten noch kein zuverlässiger Fit durchführbar ist. Betrachten wir Abb. 23(b) mit den einzelnen Beiträgen, sehen wir ein hervorragendes Signal beim verbundenen Anteil. Folglich stammen die statistischen Fluktuationen ausschließlich von den unverbundenen Anteilen. Damit wir die Masse des  $a-f_0$ -Mesons zuverlässig extrahieren können benötigen wir weitere Konfigurationen und mehr stochastische Schätzer.

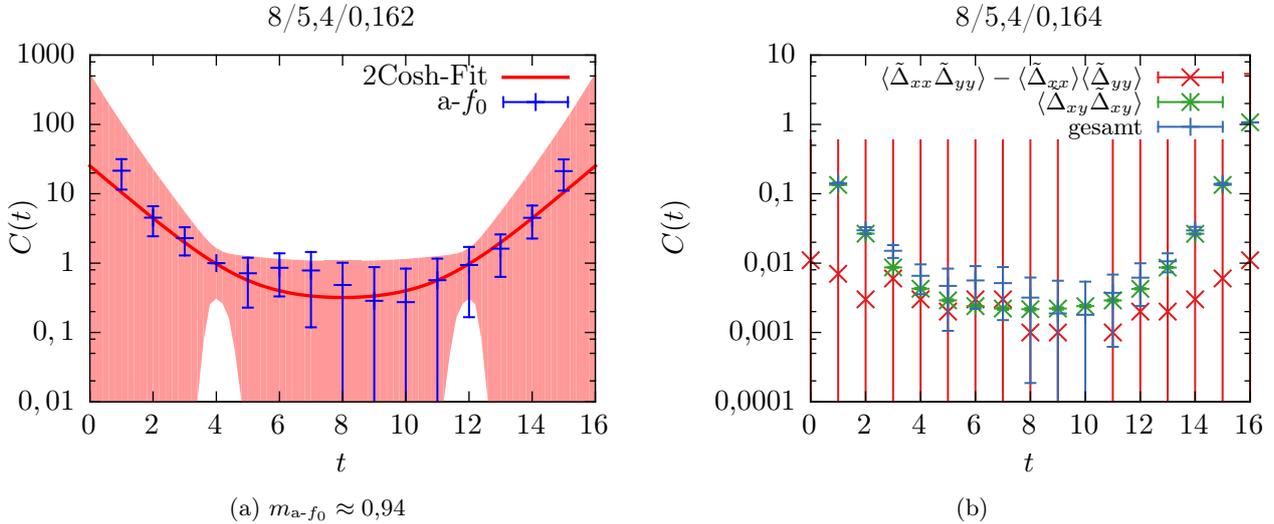


Abb. 23: Daten des  $a-f_0$ -Meson: (a) Korrelator  $C(t)$  für  $\kappa = 0,162$  und (b) verbundener Anteil  $\langle \tilde{\Delta}_{xy} \tilde{\Delta}_{xy} \rangle$  und Differenz der unverbundenen Anteile  $\langle \tilde{\Delta}_{xx} \tilde{\Delta}_{yy} \rangle - \langle \tilde{\Delta}_{xx} \rangle \langle \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  des  $a-f_0$ -Korrelators mit 100 stochastischen Schätzern bei  $\kappa = 0,162$  mit 500 Konfigurationen. Der verbundener Anteil entspricht dem  $a-a_0$ -Meson mit der Masse  $m_{a-a_0} \approx 0,28$ . Die unverbundenen Anteile  $\langle \tilde{\Delta}_{xx} \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  und  $\langle \tilde{\Delta}_{xx} \rangle \langle \tilde{\Delta}_{yy} \rangle$  besitzen beide sehr große Werte  $\mathcal{O}(10\,000)$ , die sich weitgehend kompensieren.

#### 4.5.2. Gluino-Gluebälle

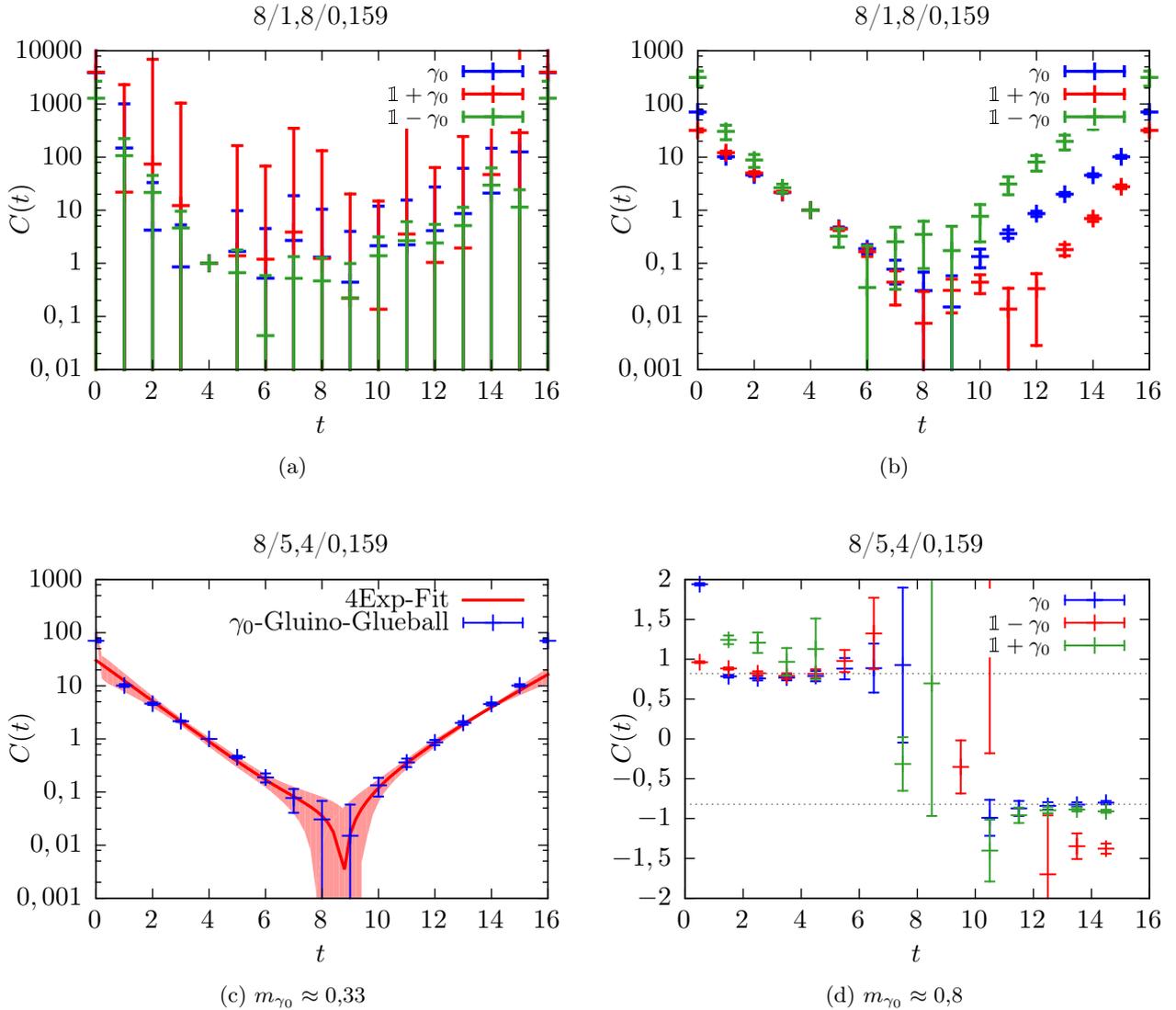


Abb. 24: Resultate der Gluino-Gluebälle: In (a) ist der Betrag der ungeschmierten Korrelatoren der drei Projektoren  $\gamma_0$ ,  $\mathbb{1} - \gamma_0$  und  $\mathbb{1} + \gamma_0$  abgebildet. Im Vergleich dazu zeigt (b) dieselben Korrelatoren mit 100 *Smearing*-Schritten. Den besten Fit das  $\gamma_0$ -Gluino-Glueballs beruhend auf Daten mit 100 *Smearing*-Schritten zeigt (c). In (d) die lokale Masse der geschmierten Daten zu sehen.

Zur Untersuchung der Gluino-Gluebälle haben wir drei verschiedene Operatoren getestet, die im DIRAC-Raum die Matrizen  $\gamma_0$ ,  $\mathbb{1} - \gamma_0$  und  $\mathbb{1} + \gamma_0$  enthalten. Wir erwarten, dass der Letztgenannte den Gluino-Gluebällen aus unseren Multipletts entspricht [17]. Die beiden Gluino-Gluebälle sind unserer Erfahrung nach schwierig zu messen. Selbst mit 500 Konfigurationen, 100 stochastischen Schätzern und 4 Punktquelle sind die Korrelatoren stark verrauscht, wodurch die Fits und Massen mit einer großen Unsicherheit behaftet sind. Durch den Einsatz von *Stout-Smearing* erzielten wir eine Verbesserung in der Signalqualität die Korrelatoren. Zur Darstellung der antisymmetrischen Gluino-Glueball-Korrelatoren

nehmen wir den Betrag und als Fit-Funktionen verwenden wir Linearkombinationen aus Exponentialfunktionen. Um die Antisymmetrie und angeregte Zustände zuverlässig zu fitten, verwenden wir den „4Exp“-Fit

$$C_4(t) = a_0 \cdot e^{-((N_t/2-t)m_0)} + a_1 \cdot e^{-((N_t/2-t)m_1)} + a_2 \cdot e^{-((N_t/2-t)m_2)} + a_3 \cdot e^{-((N_t/2-t)m_3)}. \quad (4.13)$$

In den Abbildung zeigen wir die Resultate jeweils ohne und mit 100 *Smearing*-Schritte. Für den *Hopping*-Parameter  $\kappa = 0,159$  sind in Abb. 24(a) die Beträge der drei verschiedenen Korrelatoren verglichen. Mit 100 *Smearing*-Schritten ergibt sich Abb. 24(c), worin die Symmetrie des  $\gamma_0$ -Gluino-Glueballs zu erkennen ist. Demgegenüber ist das Minimum der beiden Projektionen  $\mathbb{1} - \gamma_0$  und  $\mathbb{1} + \gamma_0$  nach links bzw. rechts verschoben. Außerdem ist in Abb. 24(c) der Fit des  $\gamma_0$ -Gluino-Glueballs dargestellt. Bei den beiden anderen Projektionen ist das Signal-Rausch-Verhältnis zu schlecht um die Daten zu fitten. Um die Masse der Zustände abzuschätzen haben wir in Abb. 24(d) die lokale Masse aufgetragen. Im Rahmen der fluktuierenden Daten lesen wir die Massen als  $m_{\tilde{g}\tilde{g}} \approx 0,8$  ab. In weiteren Untersuchungen wollen wir weitere *Smearing*-Techniken zur Verbesserung der Signalqualität ausprobieren. Gängige Methoden sind das *Stout-Smearing* für die Eichlinks und *JACOBI-Smearing* für die Punktquellen [71]. In unseren Daten sind die Eichfelder für das Rauschen verantwortlich, weshalb wir von geschmierten Punktquellen keine deutlichen Verbesserungen erwarten.

### 4.5.3. Gluebälle

In der QCD sind Gluebälle seit langem für ihr schlechtes Signal-Rausch-Verhältnis bekannt. Auf dem kleinen Gitter mit 100 stochastischen Schätzern haben wir versucht den  $0^{++}$ -Glueball in der  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie zu messen. Auch diese Messgröße profitiert stark durch das *Stout-Smearing* wie der Vergleich zwischen Abb. 25(a) ohne, Abb. 25(b) mit 20 und Abb. 25(c) mit 100 Schritten verdeutlicht. Durch einen „2Cosh“-Fit an den symmetrischen Korrelator können wir die Masse des Glueballs nahe des kritischen Punktes bei  $\kappa = 0,166$  auf  $m_{0^{++}} \approx 0,23$  abschätzen. Aus der lokalen Masse können wir den ähnlichen Wert  $m_{0^{++}} \approx 0,22$  ablesen, s. Abb. 25(d). Für zuverlässige Werte, wird jedoch ein größeres Gitter benötigt, auf dem die effektive Masse bei  $0 < t < \frac{N_t}{2}$  ein deutliches Plateau bildet. Die vorgestellten Werte wurden unter Verwendung des einfachen Glueball-Operators  $O_{++}(x) = \text{tr } \mathcal{U}_{12}(x)$  mit gewöhnlicher Plakette in x-y-Richtung gemessen. Für zukünftige Messungen möchten wir den Überlapp des Operators mit dem Zustand verbessern, indem wir weitere WILSON-Schleifen in allen räumlichen Richtungen und mit größerem Umfang hinzufügen. Außerdem ist die Untersuchung des  $0^{-+}$ -Glueballs geplant, für den WILSON-Schleifen mit negativer Parität erforderlich sind [72].

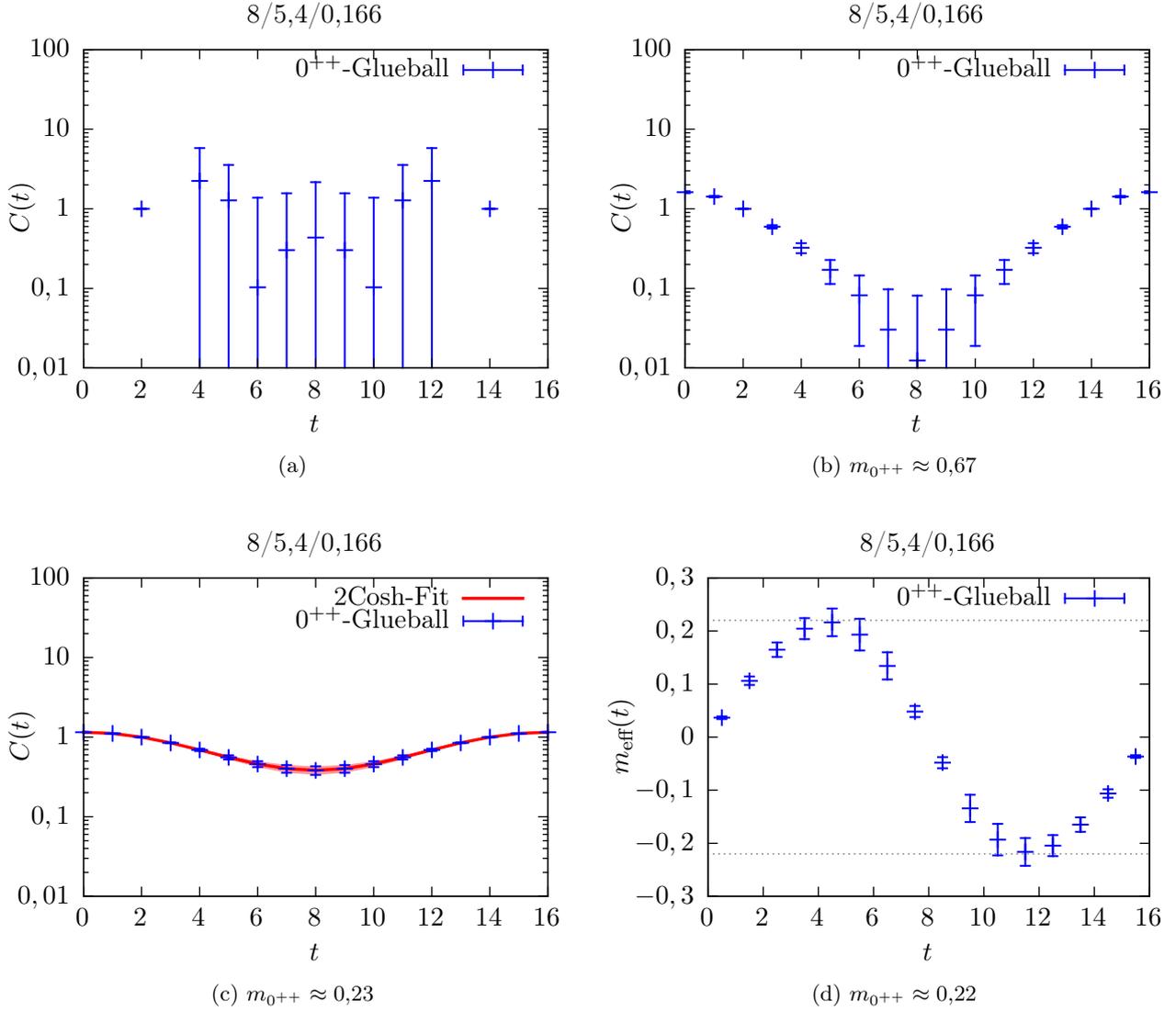


Abb. 25: Resultate für den  $0^{++}$ -Glueball: Korrelator (a) ohne *Smearing*, (b) mit 20 und (c) 100 *Smearing*-Schritten der Stärke  $\rho = 0,1$ . In (d) ist die dazugehörige lokale Masse mit 100 *Smearing*-Schritten-Schritten abgebildet.

#### 4.6. Setzen der physikalischen Skala

Bei Gittersimulationen können wir nur dimensionslose Größen messen und in Einheiten der Gitterkonstanten  $a$  ausdrücken. Kennen wir den Gitterabstand  $a$ , so können wir Bezug zu reellen Größen herstellen. Um den Gitterabstand zu bestimmen, muss bei einer Referenzskala der Zusammenhang zu einer dimensionsbehafteten Größe hergestellt werden. Hierfür untersuchen wir in der fundamentalen Darstellung ein statisches Quark-Antiquark-Paar mit der String-Spannung

$$\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{V_{\text{q}\bar{\text{q}}}(R)}{R}. \quad (4.14)$$

Gemäß dieser Gleichung wächst das Potenzial  $V(R)$  linear in  $R$ , wobei  $\sigma$  die konstante Kraft zwischen den beiden Partnern beschreibt. Auf dem Gitter betrachten wir hierfür die WILSON-Schleife  $\mathcal{W}(R, T)$ ,

die das Produkt von Eichfeldern  $\mathcal{U}_\mu(x)$  entlang des rechteckigen Pfades mit zeitlicher Ausdehnung  $T$  und räumlicher Länge  $R$  ist,

$$V_{\text{q}\bar{\text{q}}}(R) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\ln \mathcal{W}(R, T)}{T}. \quad (4.15)$$

Zur Auswertung der Messwerte definieren wir

$$V(R, T) \equiv \ln \frac{\langle \mathcal{W}(R, T) \rangle}{\langle \mathcal{W}(R, T+1) \rangle} \quad (4.16)$$

und fitten an den Ansatz

$$V(R, T) = V(R) + \frac{c}{T}. \quad (4.17)$$

Für  $T \rightarrow \infty$  kennen wir somit das Potenzial  $V(R)$ , dessen Verlauf wir in Analogie zur QCD als Cornell-Potenzial

$$V(R) = V_0 + \sigma R - \frac{e}{R} \quad (4.18)$$

ansetzen [73]. Damit entspricht es den Beobachtungen, dass sich das Quark-Antiquark-Potenzial bei kleinen Abständen (durch die Wechselwirkung mittels Austausch eines Gluons) wie das COULOMB-Potenzial

$$V(R) \approx V_0 - \frac{e}{R} \quad (4.19)$$

verhält und bei großen Distanzen durch die starke Wechselwirkung

$$V(R) \approx V_0 + \sigma R \quad (4.20)$$

linear ansteigt. In der  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie erwarten wir wie in der QCD *Confinement* und asymptotische Freiheit. Deshalb adaptieren wir diesen Ansatz, indem wir die Gln. (4.17) & (4.18) kombinieren und den einfachen Fit

$$V(R, T) = V_0 + \sigma R - \frac{e}{R} + \frac{c}{T} \quad (4.21)$$

durchführen. In Abb. 26(a) sind die gemessenen WILSON-Schleifen dargestellt. Daraus berechnen wir mit Gl. (4.15) das Potenzial, s. Abb. 26(b). Dort ist deutlich der lineare Anstieg für  $R \geq 4$  zu erkennen, wodurch wir eine Bestätigung erhalten, dass die  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie in  $d = 4$  Dimensionen *Confinement* enthält. Wie wir in Kap. 4.7 untersuchen führt eine Temperatur  $T > T_c$  zur Phase mit *Deconfinement*. Mit Hilfe des Potenzials bestimmen wir den SOMMER-Parameter  $R_0$ , mit dem wir der Gitterkonstante  $a$  eine physikalische Länge zuordnen können, wenn wir eine experimentell gemessene Größe als Referenz haben [74]. Dazu betrachtet man in der QCD die Kraft  $F(R)$  zwischen zwei statischen Quarks

$$R^2 F(R) \Big|_{R=R(c)} = c. \quad (4.22)$$

Typischerweise wird  $c = 1,65$  und  $R(1,65) \equiv R_0 \approx 0,5 \text{ fm}$  gewählt, weil dieser Wert experimentell gut messbar ist. Zum besseren Vergleich mit der QCD treffen wir in der  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie dieselbe Wahl. Es ist zu beachten, dass die physikalische Gittergröße, die wir hier in der SYM-Theorie bestimmen, lediglich eine Abschätzung darstellt. Mangels experimenteller Messwerte fehlt jedoch ein direkter Bezug zur realen Welt. Dennoch ist die Abschätzung hilfreich, um bspw. Vergleiche mit der Gitter-QCD ziehen

zu können. Aus Gl. (4.22) in der Form

$$R^2 \frac{dV}{dR} \Big|_{R=R_0} = 1,65 \quad (4.23)$$

folgt mit unseren Fit-Parametern die SOMMER-Skala

$$R_0 = \sqrt{\frac{1,65 - e}{\sigma}} \quad (4.24)$$

in Einheiten der Gitterkonstanten  $a$ .

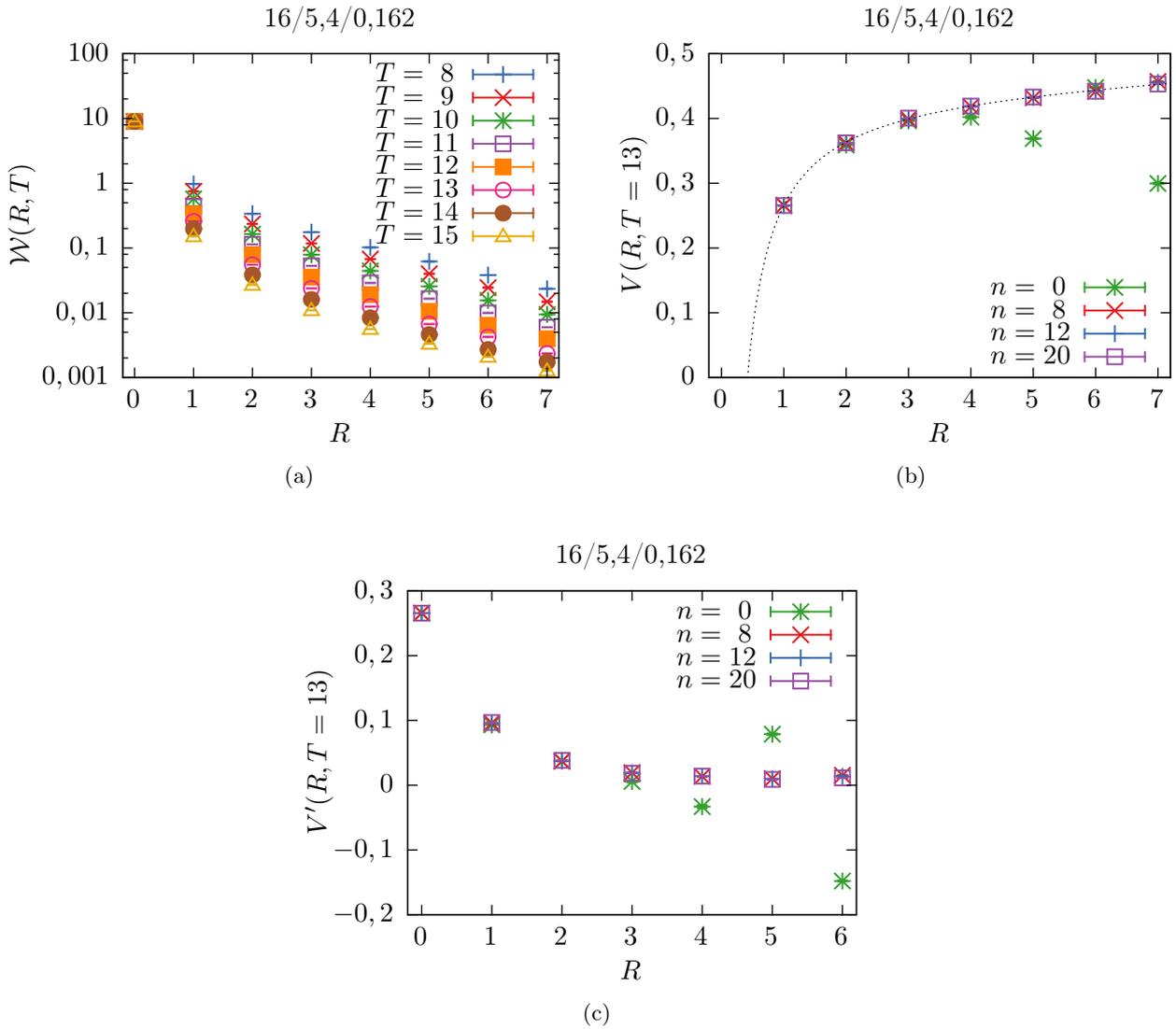


Abb. 26: (a) Gemessene WILSON-Schleifen und daraus extrahierte (b) Potenzial inklusive Fit und (c) String-Spannung. In den Diagrammen (b) & (c) sind die Werte für verschiedene *Smea-ring*-Schritte über dem Abstand  $R$  aufgetragen. Die Daten stammen aus 425 Konfigurationen bei  $\beta = 5,4$  &  $\kappa = 0,162$  und auf Fehlerbalken wird hier verzichtet.

Tab. 5: Übersicht der gemessenen SOMMER-Parameter und der Gitterabstände  $a$ .

$T$	8	9	10	11	12	13	14
$R [a]$	17,128	17,701	18,011	18,068	18,032	18,27	19,387
$a [\text{fm}]$	0,029	0,028	0,028	0,028	0,028	0,027	0,026

In Plot 26(b) ist das Potenzial und in 26(c) die String-Spannung abgebildet. Schon wenige Schritte *Stout-Smearing* verbessert die Daten in beiden Fällen signifikant. Fitten wir den Datensatz mit  $T = 14$  an Gl. (4.21), so erhalten wir

$$V_0 = 0,226 \pm 0,005, \quad \sigma = 0,0039 \pm 0,0007,$$

$$e = 0,189 \pm 0,005, \quad c = 3,1572 \pm 0,0003$$

und mit Gl. (4.24) den SOMMER-Parameter  $R_0 \approx 19,387$  sowie die Gitterkonstante  $a \approx 0,026$  fm. In Tabelle 5 sind die Ergebnisse für alle gemessenen Zeiten  $T$  zusammengefasst. Die Werte aus der Mitte des Gitters  $10 \leq T \leq 12$  stimmen miteinander überein und enthalten vermutlich die geringste Fehler. Folglich ist unser 16-er Gitter etwa 0,45 fm groß. Obwohl wir in Kap. 3.4 argumentiert haben, dass in der SYM-Theorie die Effekte des endlichen Volumens kleiner ausfallen als in der QCD, ist unser Gitter bisher etwas klein. Deshalb sollten die Volumeneffekte detaillierter untersucht und ein größeres Gitter in Erwägung gezogen werden. Dazu können wir entweder die Anzahl der Gitterpunkte  $N_s$  &  $N_t$  erhöhen oder die Gitterkonstante  $a$  durch eine kleinere Kopplung  $\beta$  vergrößern. Direkt aus der String-Spannung  $\sigma \approx \frac{dV}{dR} = 0,008$  erhalten wir hingegen eine kleinere Distanz  $R_0 \approx 14,361a$  bzw. einen größeren Gitterabstand  $a \approx 0,035$  fm. Bei dieser zweiten Variante ist der systematische Fehler vermutlich größer als beim Fit: Einerseits trägt die numerische Differenziation in der Berechnung der String-Spannung bei und andererseits ist das Plateau nicht besonders stark ausgeprägt, wie Abb. 26(c) verdeutlicht. Unabhängig vom Vorgehen kann durch das *Smearing* ein Fehlerbeitrag hinzukommen. Anstatt der WILSON-Schleifen  $\mathcal{W}(\mathcal{R}, \mathcal{T})$  lässt sich das Potenzial auch aus dem POLYAKOV-Schleifen-Korrelator

$$\left\langle P(\vec{x})P(\vec{y})^\dagger \right\rangle = e^{-aN_t F_{q\bar{q}}(a|\vec{x}-\vec{y}|)} \quad (4.25)$$

ermitteln. Mit unserer Statistik waren die Daten jedoch zu verrauscht, sodass wir keine Auswertung mit ihnen durchführen konnten. Alternativ kann statt der SOMMER-Skala auch die WILSON-Fluss-Skala  $w_0$  zur Bestimmung des Gitterabstands herangezogen werden [75]. Diese Methode ist nicht so sehr von systematischen Fehlern betroffen, jedoch ist sie aufwendiger, weil dazu eine partielle Differentialgleichung gelöst werden muss.

## 4.7. Endliche Temperatur

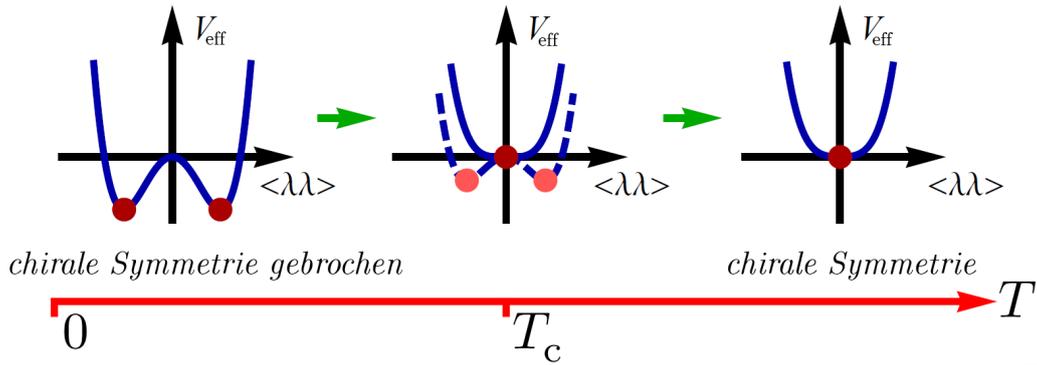


Abb. 27: Bei  $T = 0$  ist die chirale Symmetrie gebrochen und es liegt ein Phasenübergang erster Ordnung bei  $m_g = 0$  vor. Bei einer kritischen Temperatur  $T_c$ , deren Zusammenhang zur kritischen Temperatur des *Confinement-Deconfinement*-Übergangs ungeklärt ist, wird die chirale Symmetrie wiederhergestellt. Ab diesem Punkt besitzt das effektive Potenzial  $V_{\text{eff}}$  ein eindeutiges Minimum. Mit numerischen Simulationen kann die unbekannte Temperatur des Phasenübergangs untersucht werden. [17]

Bei endlicher Temperatur wird die Supersymmetrie durch das unterschiedliche Verhalten der Bosonen und Fermionen explizit gebrochen. In der thermischen Zustandssumme treten Bosonen mit periodischen Randbedingungen auf, wohingegen Fermionen antiperiodischen Randbedingungen genügen. Als Ordnungsparameter für den *Confinement-Deconfinement*-Phasenübergang dient der Erwartungswert der POLYAKOV-Schleife. Im Gegensatz zur QCD tritt durch die Supersymmetrie kein *Crossover* auf und der Phasenübergang kann auch mit dynamischen Gluinos untersucht werden [17]. Darüber hinaus tritt bei endlicher Temperatur der chirale Phasenübergang auf, der bei endlicher Gluinomasse jedoch zu einem *Crossover* wird [76]. Wie in Abb. 27 visualisiert, ist die chirale Symmetrie bei  $T = 0$  gebrochen und wird erst ab einer unbekanntem Temperatur wiederhergestellt. Für den chiralen Phasenübergang kann das chirale Kondensat als Ordnungsparameter genutzt werden. Anhand einer numerischen Untersuchung mit der Eichgruppe  $SU(2)$  zeigte sich eine grobe Übereinstimmung der kritischen Temperaturen für die beiden Phasenübergänge, s. Szenario (a) in Abb. 28 [76].

Wir haben auf einem  $12^3 \times 4$ -Gitter endliche Temperaturen simuliert, die wir bei festgehaltenem  $\kappa = 0,152$  durch Variation der Kopplung  $\beta$  verändert haben. In Abb. 29(a) ist das unrenormierte chirale Kondensat dargestellt, das bei  $\beta \approx 3,9$  einen Knick aufweist. Diese Simulation mit  $\kappa = 0,152$  ist weit vom kritischen Punkt  $\kappa_c \approx 0,167$  entfernt, wodurch die chirale Symmetrie ziemlich stark explizit gebrochen sein könnte und der chirale Phasenübergang nur schwach ausgeprägt wäre. Demgegenüber ist der *Confinement-Deconfinement*-Phasenübergang in unseren Daten einfacher zu identifizieren. Anhand des sehr deutlichen Sprungs im Mittelwert der POLYAKOV-Schleife bei  $\beta \approx 3,9$  erwarten wir dort diesen Phasenübergang, s. Abb. 29(a). Somit stimmen unsere Resultate mit der Literatur überein, dass der chirale Phasenübergang und der *Confinement-Deconfinement*-Phasenübergang bei derselben kritischen Temperatur stattfinden.

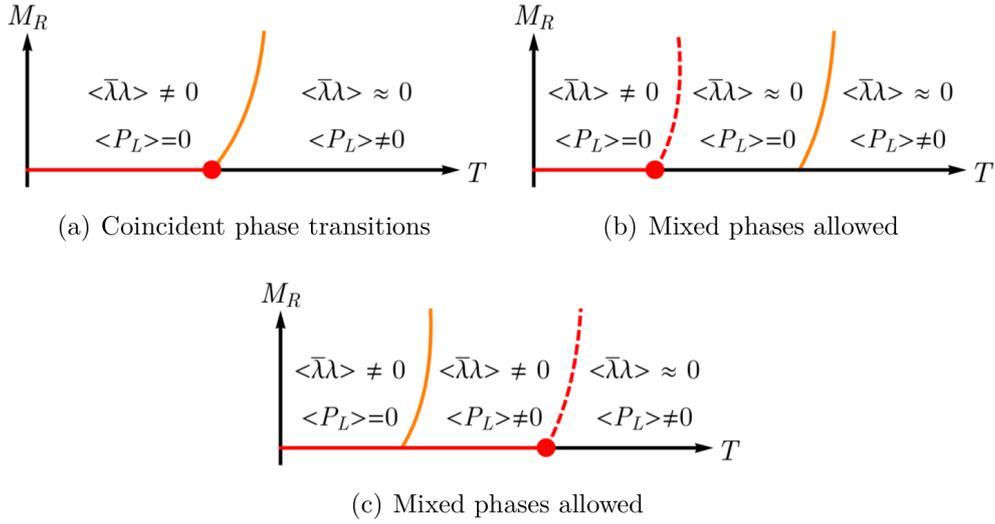


Abb. 28: Drei Möglichkeiten, wie das Phasendiagramm aussehen könnte: (a) chiraler Phasenübergang und *Deconfinement*-Übergang stimmen überein, (b) es existiert eine Phase mit *Confinement* und wiederhergestellter chiraler Symmetrie oder (c) es existiert eine Phase mit *Deconfinement* und gebrochener chiraler Symmetrie. Die rote Linie kennzeichnet den chiralen Phasenübergang erster Ordnung zwischen  $\langle \bar{\lambda}\lambda \rangle > 0$  bei renormierter Gluinomasse  $M_R > 0$  und  $\langle \bar{\lambda}\lambda \rangle < 0$  bei  $M_R < 0$ . Der rote Punkt weist auf den kritischen Endpunkt zweiter Ordnung hin und mit der gestrichelten Linie deuten wir den *Crossover* bei endlicher Gluinomasse  $M_R > 0$  (weicher Susy-Brechung) hin. Durch die orangene Linie stellt den *Deconfinement*-Übergang dar. [76]

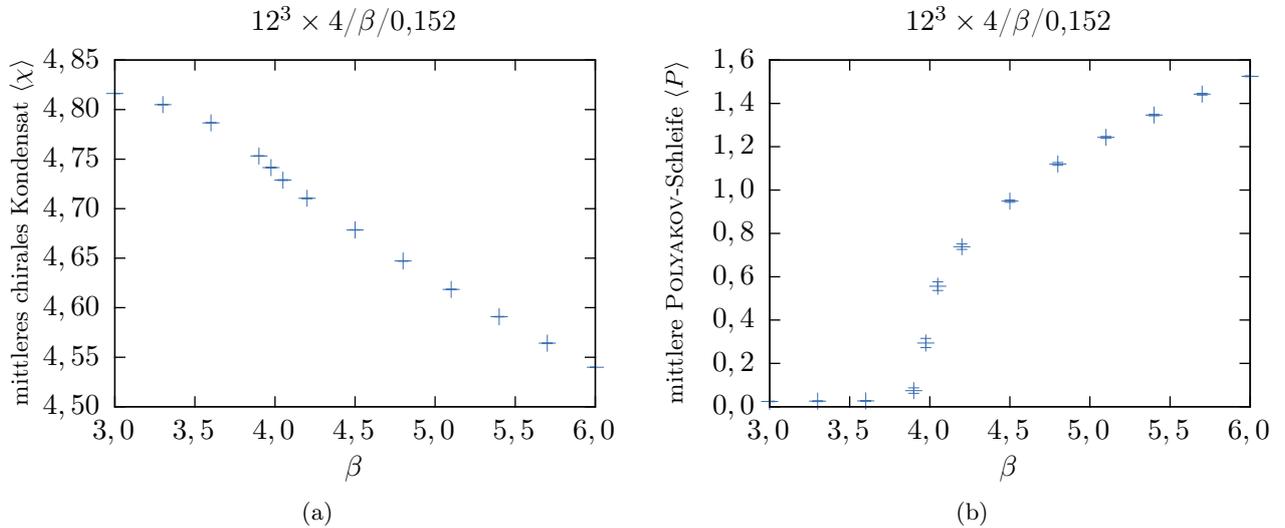


Abb. 29: Resultate für endliche Temperatur auf einem  $12^3 \times 4$ -Gitter bei  $\kappa = 0,152$ : (a) chirales Kondensat und (b) POLYAKOV-Schleife.

## 5. Schluss

Im Rahmen dieser Arbeit wurden wichtige Voruntersuchungen zur numerischen Simulation der  $\mathcal{N} = 1$  Super-YANG-MILLS-Theorie (SYM) in vier Dimensionen mit  $SU(3)$ -Eichgruppe durchgeführt. Dabei haben wir einen großen Wert auf die Erarbeitung und umfassende Darstellung der physikalischen wie auch numerischen Grundlagen gelegt. Im Anschluss wurden unsere vielseitigen Resultate präsentiert. Zuerst haben wir den WILSON-DIRAC-Operator untersucht und gezeigt, dass die Gerade-Ungerade-Präkonditionierung die Konditionszahl der DIRAC-Matrix um etwa den Faktor zwei verbessert. Aus diesem Grund ist diese Präkonditionierung zur Konvergenz-Beschleunigung des konjugierten Gradientenverfahrens so erfolgreich. Außerdem haben wir auf einem kleinen Gitter die Eigenwerte des DIRAC-Operators exakt berechnet und beobachtet wie das Spektrum thermalisiert. Dadurch konnten wir einen Zusammenhang zur Thermalisierung der Plakette und des chiralen Kondensats entdecken. Darüber hinaus gelang uns mit den ermittelten Eigenwerte eine exakte Berechnung des chiralen Kondensats und eine Bestätigung für das mit Hilfe von stochastischen Schätzern gemessene chirale Kondensat. Zudem haben wir die HMC-Parameter und die rationale Approximation an unsere Bedürfnisse angepasst. Erstmals haben wir die Rot-Schwarz-Präkonditionierung implementiert, ihren Einsatz getestet und die Matrixstrukturen verschiedener Präkonditionierungen verglichen. Gegenüber der Gerade-Ungerade-Präkonditionierung konnten wir mit der Rot-Schwarz-Präkonditionierung bisher keine Vorteile erzielen. Mögliche Weiterentwicklungen werden wir am Ende dieses Kapitels vorstellen.

Nachdem diese Grundlagen gelegt wurden, haben wir die Abhängigkeit der  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie von der Kopplung  $\beta = \frac{2N_c}{g^2}$  und dem sogenannten *Hopping*-Parameter  $\kappa = \frac{1}{2(m+d)}$  untersucht. Obwohl die meisten Simulationen bei  $\beta = 5,4$  durchgeführt wurden, haben wir den kritischen *Hopping*-Parameter  $\kappa_c$  für verschiedene Kopplungen durch *Feintuning* bestimmt. Dafür haben wir zwei verschiedene Methoden verwendet: Einerseits haben wir den kritischen Punkt durch das Minimum der Masse des adjungierten Pions bestimmt und andererseits diente der Knick im chiralen Kondensat als Signal. In Tab. 6 sind die gefundenen Werte zusammengefasst.

Tab. 6: Übersicht über den kritischen *Hopping*-Parameter  $\kappa_c$  für verschiedene Kopplungen  $\beta$ . Die Fehler sind wie in Abb. 18 dargestellt meist  $\pm 0,01$  mit Ausnahme der genau untersuchten Kopplung  $\beta = 5,4$ .

$\beta$	3,6	3,9	4,2	4,5	4,8	5,1	5,4	5,7	6,0	7,5
$\kappa_c^{a-\pi}$	0,212	0,198	0,188	0,180	0,174	0,169	0,166	0,163	0,160	0,150
$\kappa_c^\Sigma$	0,211	0,196	0,186	0,178	0,172	0,166	0,163	0,161	0,159	0,147

Daneben haben wir erste Massen für die Teilchen des VENEZIANO-YANKIELOWICZ- und FARRAR-GABADADZE-SHWETZ-Multipletts gemessen. Das Erstgenannte enthält die mesonartigen Gluinobälle  $a-\eta'$  und  $a-f_0$ , deren Korrelatoren wir getrennt nach verbundenen und unverbundenen Beiträgen untersucht haben. Aus den Fits können wir die Massen  $m_{a-\eta'} \approx 0,20 \pm 0,05$  &  $m_{a-f_0} \approx 0,25 \pm 0,15$  in der Nähe des kritischen Punktes abschätzen. Bei den majoranawertigen Gluino-Gluebällen haben wir zur Verbesserung der Signalqualität erfolgreich *Stout-Smearing* eingesetzt. Aus der effektiven Masse können wir mit den bisherigen Daten  $m_{g\tilde{g}} \approx 0,8 \pm 0,3$  eingrenzen. Auch die bosonischen Gluebälle

sind stark verrauscht und profitieren vom *Smearing*. In der Nähe des kritischen Punktes haben wir für den Glueball mit positiver Parität die Masse  $m_{0^{++}} \approx 0,23 \pm 0,05$  gemessen. Für eine umfangreichere Massenspektroskopie benötigen wir weitere Daten, um die statistischen Fehler zu reduzieren und anschließend den chiralen Grenzwert, den thermodynamischen Grenzwert und den Kontinuumslices zu bilden. Damit erwarten wir die Massenentartung der beiden Supermultipletts wiederzufinden.

Ferner haben wir die physikalische Skala unseres Gitters auf zwei unterschiedliche Arten ermittelt. In der ersten Methode haben wir aus WILSON-Schleifen das Potenzial eines fundamentalen Quark-Antiquark-Paares bestimmt und dieses an ein Cornell-Potenzial gefittet. Daraus erhielten wir eine Gitterkonstante von etwa 0,028 fm. Bei der zweiten Methode nutzten wir die numerische Ableitung des gemessenen Potenzials, um direkt aus der String-Spannung die mittlere Distanz zwischen den Partnern zu bestimmen. Auf diese Weise bekamen wir eine größere Gitterkonstante  $a \approx 0,035$  fm heraus. Bei einer Gittergröße von 16 Gitterpunkten entspricht dies etwa der Kantenlänge 0,56 fm. Folglich ist unsere Gitterkonstante relativ fein und das Gittervolumen fällt eher klein aus. Größere Gitter als  $16^3 \times 32$  können wir jedoch mit der vorhandenen Rechenzeit aktuell nicht simulieren, sodass wir das Gittervolumen nur über die Kopplung  $\beta$  anpassen können.

Letztlich haben wir Erkenntnisse über die Effekte bei endlicher Temperatur gewonnen. Im Rahmen unserer Resultate stimmt der *Confinement-Deconfinement*-Phasenübergang mit der kritischen Temperatur, bei der die chirale Symmetrie wiederhergestellt wird, überein. Eine umfangreichere Messung näher am kritischen Punkt wäre interessant, um genauere Schlussfolgerungen ziehen zu können.

Abschließend werfen wir einen Blick auf interessante Themen für fortführende Untersuchungen. Nachdem wir durch die Voruntersuchungen eine Vorstellung von der Theorie, ihren Eigenschaften und Herausforderungen gewonnen haben, sind ein tieferes Verständnis der physikalischen Mechanismen und detailliertere Daten unser Ziel. Auf dem Weg dahin sind weitere Verbesserungen der Methodik notwendig, zu denen drei Aspekte gehören. Als Erstes wollen wir die Gitterwirkungen verbessern, um bei endlichen Gitterabständen näher am Kontinuum mit geringeren Diskretisierungseffekten und besseren Symmetrie-Eigenschaften (insbesondere geringere Supersymmetrie-Brechung) zu simulieren. Dafür ist die SYMANZIK-Verbesserung des WILSON-DIRAC-Operators durch den sogenannten *Clover*-Term (s. App. B.5) ein wichtiger Schritt, mit dem wir die Diskretisierungseffekte der Ordnung  $\mathcal{O}(a)$  auf  $\mathcal{O}(a^2)$  reduzieren können. Daneben möchten wir den Einsatz von geschmierten Eichlinks in der Wirkung testen. Als Zweites ist eine weitere algorithmische Verbesserung geplant. Eine interessante Möglichkeit könnte die Kombination der Rot-Schwarz-Präkonditionierung mit einer zusätzlichen Gerade-Ungerade-Präkonditionierung auf den roten und schwarzen Unterblöcken darstellen. Außerdem gehörte die Implementierung der Rot-Schwarz-Präkonditionierung (s. Kap. 3.6.2) zu einer umfassenderen Idee, die wir weiter verfolgen möchten. Dazu gehört die Implementierung der SAP-Methode (s. App. B.8) zur Matrixinversion, mit der das Spektrum mittlerer und großer Eigenwerte gut approximiert wird. Dieser Baustein gehört zur Multigrid-Methode (s. Kap. B.9), bei der die SAP-Methode als *Smoother* eingesetzt wird, um die hohen Moden zu dämpfen. Unser Wunsch ist die Multigrid-Methode, die im HMC-Algorithmus erfolgreich als Präkonditionierung eingesetzt wird, auch im RHMC-Algorithmus gewinnbringend zu nutzen. Als Drittes scheint eine Beschleunigung der Simulationen abgesehen von der Methodik durch Optimierung des Codes für die Rechnerarchitektur notwendig zu sein. Dazu gehört sowohl eine effiziente Parallelisierung als auch Vektorisierung und weitere Optimierung.

## A. Konventionen

In diesem Kapitel fassen wir die gewählten Konventionen zusammen. Zuerst stellen wir die typische Variablenbenennungen vor. Griechische Raumzeit-Indizes laufen über  $\mu, \nu, \dots = 0, 1, \dots, d-1$ . Die lateinischen Indizes laufen hingegen nur über die Raumdimensionen  $i, j, k, \dots = 1, 2, \dots, d-1$ . Buchstaben vom Anfang des Alphabets  $a, b, \dots$  dienen meist zur Indizierung der Farbfreiheitsgrade und  $f$  gehört i. d. R. zum *Flavor*. DIRAC-Spinoren haben die Dimension  $2^{\lfloor d/2 \rfloor}$  und ihre Komponenten werden mit griechischen Indizes  $\alpha, \beta, \dots$  bezeichnet. Gewöhnlich konzentrieren wir uns im Rahmen dieser Arbeit auf  $d = 4$  Raumzeitdimensionen. Mit den  $2^{\lfloor d/2 \rfloor} \times 2^{\lfloor d/2 \rfloor}$ -dimensionalen DIRAC-Matrizen lautet die CLIFFORD-Algebra

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1). \quad (\text{A.1})$$

Die DIRAC-Matrix mit Zeitindex ist hermitesch  $\gamma_0^\dagger = \gamma_0$  und diejenigen mit räumlichen Indizes antihermitesch  $\gamma_i^\dagger = -\gamma_i$ , sodass  $\gamma_0\gamma_\mu\gamma_0 = \gamma_\mu^\dagger$ . Die Matrix  $\gamma_5^\dagger = \gamma_5 = -i\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3$  ist ebenfalls hermitesch und antikommutiert mit allen anderen Gamma-Matrizen,  $\{\gamma_5, \gamma_\mu\} = 0$ . Die Quadrate der Matrizen lauten  $\gamma_0^2 = \mathbb{1}$ ,  $\gamma_i^2 = -\mathbb{1}$  und  $\gamma_5^2 = \mathbb{1}$ . Darüber hinaus definieren wir  $\Sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{4}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$  und den dirac-konjugierten Spinor  $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$ . Die Ladungskonjugationsmatrix  $\mathcal{C} = i\gamma_2\gamma_0$  erfüllt die Eigenschaften

$$\mathcal{C}\gamma_\mu^T\mathcal{C}^{-1} = -\gamma_\mu, \quad \mathcal{C}^T = -\mathcal{C}, \quad \mathcal{C}^{-1} = \mathcal{C}^\dagger, \quad \mathcal{C}\gamma_5^T\mathcal{C}^{-1} = \gamma_5 \quad (\text{A.2})$$

und wirke folgendermaßen auf DIRAC-Spinoren

$$\psi^c = \mathcal{C}\bar{\psi}^T = \mathcal{C}\gamma_0^T\psi^*, \quad \bar{\psi}^c = -\psi^T\mathcal{C}^{-1}. \quad (\text{A.3})$$

MAJORANA-Spinoren existieren in  $d \bmod 8 = \{1, 2, 3, 4, 8\}$  Dimensionen und zeichnen sich durch  $\psi = \psi^c$  aus. Physikalisch betrachtet bedeutet dies, dass ein MAJORANA-Fermion sein eigenes Antiteilchen ist. Die Euklidischen DIRAC-Matrizen in der chiralen Darstellung sind

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Abschließend stellen wir die Generatoren der LIE-Gruppe  $SU(3)$  vor. Sie entsprechen bis auf den Vorfaktor  $\frac{1}{2}$  den hermiteschen und spurlosen GELL-MANN-Matrizen, sind gemäß  $(T^a, T_b) = \text{tr}(T^a T_b) = \delta_b^a$

normalisiert und lauten

$$\begin{aligned}
T^1 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & T^2 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & T^3 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & T^4 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
T^5 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & T^6 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & T^7 &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & T^8 &= \frac{1}{2\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

## B. Ergänzungen zu den numerischen Methoden

In diesem Anhang diskutieren wir einige numerische Aspekte, die für die Grundlagen nicht direkt benötigt werden und dennoch in einer umfassenden Darstellung nicht fehlen sollten. Dazu gehören die MARKOV-Ketten, *Detailed Balance*-Bedingung, Fermiondoppler, Kraftberechnung, Integration der Molekulardynamik, SYMANZIK-Verbesserung des WILSON-DIRAC-Operators, *Binning*-Methode und *Jackknife*-Analyse. Außerdem stellen wir die im Ausblick erwähnte SAP-Methode und das Multigrid-Verfahren kurz vor. Für diesem Anhang wurden vorwiegend die Quellen [14, 36, 37] genutzt.

### B.1. Markov-Ketten und *Detailed Balance*

Wir betrachten ein System mit einer Menge von Konfigurationen  $\{x \in \mathbb{R}^n\}$ . Die dazugehörige Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P(x)$  erfüllt

$$P(x) \geq 0, \quad \int d^n x P(x) = 1. \quad (\text{B.1})$$

Eine MARKOV-Kette beschreibt einen stochastischen Prozess, dessen zukünftiges Verhalten lediglich vom momentanen Zustand  $x$  abhängt. Pro Zeitschritt wird sie durch die Übergangswahrscheinlichkeit  $W(x, x') = W(x \rightarrow x')$  mit den Eigenschaften

$$W(x, x') \geq 0, \quad \int d^n x' W(x, x') = 1 \quad (\text{B.2})$$

charakterisiert. In der stochastischen Matrix  $W$  mit den Einträgen  $W(x, x')$  sind alle relevanten Informationen des stochastischen Systems gebündelt,

$$P(x') = \int d^n x P(x) W(x, x'). \quad (\text{B.3})$$

Eine Gleichgewichtsverteilung  $\mathfrak{P}(x)$  sollte unter mikroskopischer Zeitumkehr invariant sein und muss folglich der *Detailed Balance*-Bedingung

$$\mathfrak{P}(x) W(x, x') = \mathfrak{P}(x') W(x', x) \quad (\text{B.4})$$

genügen. Diese Zusatzbedingung an den MARKOV-Prozess impliziert die Fixpunkt Gleichung<sup>[8]</sup>

$$\mathfrak{P}(x) = \int d^n x' \mathfrak{P}(x') W(x, x'). \quad (\text{B.5})$$

Sowohl der METROPOLIS- als auch der HMC- und der RHMC-Algorithmus aus den Kap. 3.2.1-3.2.3 erfüllen die *Detailed Balance*-Bedingung.

## B.2. Doppler-Problem

Zur Diskretisierung der Fermionen setzen wir die Spinoren  $\psi(x)$ ,  $\bar{\psi}(x)$  auf die Gitterplätze  $\vec{x} = a\vec{n}$ . In der diskreten Ableitung

$$\partial_\mu \psi(x) = \frac{\mathcal{U}_\mu(x)\psi(x+\mu) - \mathcal{U}_{-\mu}(x)\psi(x-\mu)}{2a} \quad (\text{B.6})$$

sind Eichtransporter enthalten, um die Eichinvarianz von  $\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\partial_\mu\psi(x)$  zu gewährleisten. Damit erhalten wir für einen *Flavor* die naive fermionische Wirkung

$$S_f^{\text{naiv}}[\psi(x), \bar{\psi}(x), \mathcal{U}(x)] = a^4 \sum_{x,y \in \Lambda} \bar{\psi}_{\alpha a}(x) [D^{\text{naiv}}(x, y)]_{\alpha\beta}^{ab} \psi_{\beta b}(y) \quad (\text{B.7})$$

mit dem naiven DIRAC-Operator

$$[D^{\text{naiv}}(x, y)]_{\alpha\beta}^{ab} = \sum_{\mu=0}^3 [\gamma^\mu]_{\alpha\beta} \frac{[\mathcal{U}_\mu(x)]^{ab} \delta_{x+\mu, y} - [\mathcal{U}_{-\mu}(x)]^{ab} \delta_{x-\mu, y}}{2a} + m\delta_{\alpha\beta}\delta_{ab}\delta_{xy}, \quad (\text{B.8})$$

wobei die Indizes  $\alpha, \beta$  über die Spinorkomponenten und  $a, b$  über die Farben laufen. Jedoch beschreibt die naive Wirkung zu viele Fermionen – bekannt unter dem Namen „Doppler-Problem“. Um dies zu erkennen setzen wir in Gl. (B.8) alle Eichlinks  $\mathcal{U}_\mu(x) \equiv \mathbb{1}$ , führen eine FOURIER-Transformation durch und bilden anschließend die Inverse, wodurch wir den freien Quarkpropagator

$$\tilde{D}_0^{-1}(p) = \frac{m\mathbb{1} - \frac{i}{a} \sum \lim_\mu \gamma^\mu \sin(p_\mu a)}{m^2 + \frac{1}{a^2} \sum_\mu \sin^2(p_\mu a)} \quad (\text{B.9})$$

erhalten. Während der masselose Kontinuums-Quarkpropagator

$$\tilde{D}_{0,\text{kont.}}^{-1}(p) = -\frac{i}{p^2} \sum_\mu \gamma^\mu p_\mu \quad (\text{B.10})$$

nur einen einzigen Pol bei  $p = (0, 0, 0, 0)$  aufweist, besitzt der Gitter-Quarkpropagator aus Gl. (B.9) für  $m=0$  insgesamt 16 Polstellen und beschreibt dadurch zu viele Fermionen. Eine Lösung des Problems nach WILSON ist der Gitter-Quarkpropagator

$$\tilde{D}_{0,\text{W}}(p) = \tilde{D}_0(p) + \mathbb{1}a^{-1} \sum_\mu \left(1 - \cos(p_\mu a)\right). \quad (\text{B.11})$$

<sup>[8]</sup>Zu beachten ist das fehlende *Prime* auf der linken Seite von Gl. (B.5) im Gegensatz zu Gl. (B.3).

Der zweite Summand verschwindet für  $p = 0$  und trägt somit nicht zum Kontinuumslimit bei. Jedoch führt jeder unerwünschte Impuls  $p_\mu = \frac{\pi}{a}$  zu dem Zusatzbeitrag  $\frac{2}{a}$ , wodurch diese Fermionen im Kontinuumslimit  $a \rightarrow 0$  aufgrund ihrer Masse  $m \rightarrow \infty$  von der Theorie entkoppeln. Das NIELSEN-NINOMIYA-Theorem besagt, dass die chirale Symmetrie nicht zugleich mit der Lokalität vereinbar ist, wenn keine zusätzliche Fermionen (die Doppler) eingeführt werden. In der zuvor dargestellten Weise durch Beseitigung der unphysikalischen Doppler mittels WILSON-Massenterm verlieren wir die chirale Symmetrie bei endlichen Gitterabständen.

### B.3. Kraftberechnung in der fundamentalen Darstellung

Anhand der nicht-abelschen Eichgruppe  $SU(3)$  stellen wir die Kraftberechnung in der fundamentalen Darstellung vor. Dazu müssen wir die Linkvariablen

$$\mathcal{U} = e^{i \sum_{a=1}^8 \omega^{(a)} T_a} \quad (\text{B.12})$$

ableiten. Ableitungen leben immer im Tangentialraum der Mannigfaltigkeit, d. h. zu jedem Link  $\mathcal{U}_\mu(x)$  gehört der algebrawertige Impuls  $\mathcal{P}_\mu(x)$ . Die Ableitung einer Funktion  $f(\mathcal{U})$  eines LIE-Gruppenelementes in die LIE-Algebra-richtung  $T_a$  sei definiert als

$$\nabla^{(a)} f(\mathcal{U}) \equiv \frac{\partial f(\mathcal{U})}{\partial \omega^{(a)}} = \frac{\partial}{\partial \omega} f(e^{i\omega T_a} \mathcal{U}) \Big|_{\omega=0}. \quad (\text{B.13})$$

Damit wird die HMC-Kraft für die bosonische Wirkung aus Gl. (3.18)

$$F[\mathcal{U}, \phi] = \sum_{a=1}^8 T_a \nabla^{(a)} \left( S_G[\mathcal{U}] + \phi_i^\dagger M^{-1} \phi_i \right) \quad (\text{B.14})$$

ebenfalls algebrawertig. Für den ersten Summanden erhalten wir mit  $S_G[\mathcal{U}] = \beta \sum_{\square} (1 - \frac{1}{3} \text{Re tr } U_{\square})$  aus Gl. (3.24) die Ableitung

$$F_{G,\mu}^a(x) = \frac{\partial S_G[e^{i\omega T_a} \mathcal{U}_\mu(x)]}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} = -\frac{\beta}{3} \text{Re tr } (iT^a \mathcal{U}_\mu(x) \mathcal{W}_\mu(x)), \quad (\text{B.15})$$

die den *Staple*  $\mathcal{W}_\mu(x)$  enthält. Aufwendiger ist der zweite Summand mit den Pseudofermionen

$$F_{\text{pf},\mu}^a(x) = \partial_{x_\mu}^a \left( \phi_i^\dagger M^{-1} \phi_i \right) = -\phi_i^\dagger M^{-1} (\partial_{x_\mu}^a M) M^{-1} \phi_i, \quad (\text{B.16})$$

bei dem wir  $\partial_{x_\mu}^a M$  berechnen müssen. Aus der  $\gamma_5$ -Hermizität  $D^\dagger = \gamma_5 D \gamma_5$  folgt

$$M' = (D^\dagger D)' = (\gamma_5 D \gamma_5 D)' = [(\gamma_5 D)^2]' = 2(\gamma_5 D) (\gamma_5 D)' = 2\gamma_5 D \gamma_5 D' = 2D^\dagger D'. \quad (\text{B.17})$$

Somit erhalten wir

$$F_{\text{pf},\mu}^a(x) = -2\chi_i^\dagger \left( D^\dagger (\partial_{x_\mu}^a D) \right) \chi_i, \quad (\text{B.18})$$

wobei  $\chi_i \equiv M^{-1} \phi_i$  die Inversion der Matrix  $M$  erfordert. In jedem Zeitschritt des Integrators wird diese Inverse benötigt, wodurch die Kraftberechnung einen großen Anteil an der Gesamtlaufzeit benötigt.

## B.4. Integration der Molekulardynamik

Damit die *Detailed Balance*-Bedingung des (R)HMC-Algorithmus erfüllt ist, muss die numerische Integration zeitreversibel und energieerhaltend sein (vgl. App. B.1). Der einfachste symplektische Algorithmus ist der sogenannte *leap-frog*-Integrator (LF, engl. für Bocksprung) mit der Ordnung  $\mathcal{O}(\delta\tau^2)$  [78]. Wir definieren die Zeitentwicklungsoperatoren  $T_{\mathcal{P}}$  &  $T_{\mathcal{U}}$  für die Impulse

$$\mathcal{P}_i(\tau + \delta\tau) = T_{\mathcal{P}}(\delta\tau) \mathcal{P}_i(\tau) = \mathcal{P}_i(\tau) + \delta\tau \dot{\mathcal{P}}_i(\tau) \quad (\text{B.19})$$

und die Eichfelder

$$\mathcal{U}_i(\tau + \delta\tau) = T_{\mathcal{U}}(\delta\tau) \mathcal{U}_i(\tau) = e^{i\delta\tau \mathcal{P}_i(\tau + \frac{\delta\tau}{2})} \mathcal{U}_i(\tau). \quad (\text{B.20})$$

Damit können wir einen *leap-frog*-Schritt der Länge  $\delta\tau$  schreiben als

$$T_{\text{LF}}(\delta\tau) = T_{\mathcal{P}}\left(\frac{\delta\tau}{2}\right) T_{\mathcal{U}}(\delta\tau) T_{\mathcal{P}}\left(\frac{\delta\tau}{2}\right) \quad (\text{B.21})$$

und die Integration von  $\tau = 0$  bis  $\tau = t_{\text{HMC}}$  folgendermaßen ausdrücken,

$$T(0, t_{\text{HMC}}, \delta\tau) = [T_{\text{LF}}(\delta\tau)]^{\frac{t_{\text{HMC}}}{\delta\tau}} = T_{\mathcal{P}}\left(\frac{\delta\tau}{2}\right) T_{\mathcal{U}}(\delta\tau) T_{\mathcal{P}}(\delta\tau) \dots T_{\mathcal{U}}(\delta\tau) T_{\mathcal{P}}(\delta\tau) T_{\mathcal{U}}(\delta\tau) T_{\mathcal{P}}\left(\frac{\delta\tau}{2}\right).$$

Theorien mit Fermionen benötigen in der Regel Integratoren höherer Ordnung. Von SEXTON und WEINGARTEN stammt ein verbesserter Integrator zweiter Ordnung [79],

$$T_{\text{SW}}(\delta\tau) = T_{\mathcal{P}}\left(\frac{\delta\tau}{6}\right) T_{\mathcal{U}}\left(\frac{\delta\tau}{2}\right) T_{\mathcal{P}}\left(\frac{2\delta\tau}{3}\right) T_{\mathcal{U}}\left(\frac{\delta\tau}{2}\right) T_{\mathcal{P}}\left(\frac{\delta\tau}{6}\right). \quad (\text{B.22})$$

In [80] wurde ein Integrator vierter Ordnung mit den den Koeffizienten  $\rho = 0,178\,617\,895\,844\,809\,1$  und  $\lambda = 0,712\,341\,831\,062\,605\,6$  sowie  $\theta = -0,066\,264\,582\,669\,818\,43$  vorgestellt,

$$\begin{aligned} T_4(\delta\tau) = & T_{\mathcal{P}}(\rho\delta\tau) T_{\mathcal{U}}(\lambda\delta\tau) T_{\mathcal{P}}(\theta\delta\tau) T_{\mathcal{U}}\left((1-2\lambda)\frac{\delta\tau}{2}\right) T_{\mathcal{P}}\left((1-2(\theta+\rho))\delta\tau\right) T_{\mathcal{U}}\left((1-2\lambda)\frac{\delta\tau}{2}\right) \\ & \cdot T_{\mathcal{P}}(\theta\delta\tau) T_{\mathcal{U}}(\lambda\delta\tau) T_{\mathcal{P}}(\rho\delta\tau). \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

In unseren Simulationen nutzen wir meist eine Kombination aus SEXTON-WEINGARTEN für die Eichfelder und dem Integrator vierter Ordnung für die Fermionen. Darüber hinaus bietet die Integration mit mehreren Zeitskalen eine Verbesserung [81], insbesondere wenn Teile der Wirkung große Beiträge zu der HMC-Kraft besitzen und zugleich schnell zu berechnen sind. Typischerweise trifft dies auf die bosonischen Wirkung zu.

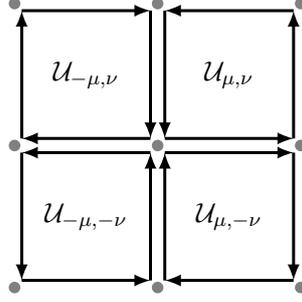


Abb. 30: Die *Clover*-Plakette wie dargestellt aus vier Plaketten gebildet.

## B.5. Symanzik-Verbesserung des Wilson-Dirac-Operators

Mit Hilfe einer SYMANZIK-Verbesserung können wir die dominierenden  $\mathcal{O}(a)$  Diskretisierungsfehler der fermionischen Wirkung von Gl. (3.25) eliminieren. Dazu addieren wir den irrelevanten Operator

$$-c_{\text{sw}} \frac{a}{4} \bar{\lambda}(x) \Sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \lambda(x) \quad (\text{B.24})$$

hinzu. Dem in Abb. 30 dargestellten lokalen Operator

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu} &= \frac{1}{4} \left( \mathcal{U}_{\mu,\nu}(x) + \mathcal{U}_{\nu,-\mu}(x) + \mathcal{U}_{-\mu,-\nu}(x) + \mathcal{U}_{-\nu,\mu}(x) \right) \\ &= \frac{1}{4} \left( \mathcal{U}_{\mu}(x) \mathcal{U}_{\nu}(x + \mu) \mathcal{U}_{\mu}^{\dagger}(x + \nu) \mathcal{U}_{\nu}^{\dagger}(x) + \mathcal{U}_{\nu}^{\dagger}(x - \nu) \mathcal{U}_{\mu}(x - \nu) \mathcal{U}_{\nu}(x - \nu + \mu) \mathcal{U}_{\mu}^{\dagger}(x) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{U}_{\nu}(x) \mathcal{U}_{\mu}^{\dagger}(x + \nu - \mu) \mathcal{U}_{\nu}^{\dagger}(x - \mu) \mathcal{U}_{\mu}(x - \mu) + \mathcal{U}_{\mu}^{\dagger}(x - \mu) \mathcal{U}_{\nu}^{\dagger}(x - \nu - \mu) \mathcal{U}_{\mu}(x - \nu - \mu) \mathcal{U}_{\nu}(x - \nu) \right) \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

gab man aufgrund seiner Form den Namen „*Clover*-Term“ (engl., Kleeblatt). Damit die  $\mathcal{O}(a)$  Gitterartefakte von allen *on-shell*-Observablen, wie bspw. den in dieser Arbeit betrachteten Massen, verschwinden, muss der SHEIKHOESLAMI-WOHLERT-Koeffizient  $c_{\text{sw}}$  entsprechend gewählt werden [82–84]. In Referenz [85] wurde dieser Koeffizient für  $\mathcal{N} = 1$  SYM-Theorie mit Störungstheorie bis zur Ordnung  $\mathcal{O}(g^2)$  in der Kopplungskonstanten  $g$  berechnet:

$$c_{\text{sw}} = 1 + ((0,16764 \pm 0,00003) C + (0,01503 \pm 0,00003) N_c) g^2 + \mathcal{O}(g^4). \quad (\text{B.26})$$

Für Fermionen in der fundamentalen Darstellung ist die quadratische CASIMIR-Invariante  $C^{\text{fund}} = \frac{N_c^2 - 1}{2N_c}$  und im Falle von adjungierten Fermionen  $C^{\text{adj}} = N_c$ . Unser verbesserter WILSON-DIRAC-Operator

$$D_{\text{W}}\psi(x) = \psi(x) - \kappa \sum_{\mu=0}^3 \left( (\mathbb{1} - \gamma_{\mu}) \mathcal{U}_{\mu}(x) \psi(x + \mu) + (\mathbb{1} + \gamma_{\mu}) \mathcal{U}_{\mu}^{\dagger}(x - \mu) \psi(x - \mu) \right) + c_{\text{sw}} \frac{\kappa}{4} \sum_{\mu=0}^3 \sum_{\substack{\nu=0 \\ \nu \neq \mu}}^3 \Sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \psi(x) \quad (\text{B.27})$$

hat mit dem richtigen Koeffizienten  $c_{\text{sw}}$  nur noch  $\mathcal{O}(a^2)$  Diskretisierungsfehler. Unsere Simulationsergebnisse aus dieser Arbeit beinhalten noch keinen *Clover*-Term.

## B.6. Binning-Methode

Um die Autokorrelationszeit der Daten abzuschätzen und zu verringern, kann die *Binning*-Methode genutzt werden. Dabei teilen wir die  $N$  Daten in Blöcke der Größe  $K$  auf. Anschließend wird für jeden Block der Mittelwert berechnet und als neue Zufallsvariable behandelt. Wenn die ursprünglichen Daten unkorreliert sind, sollten die Varianz dieser neuen Zufallszahlen wie  $\frac{1}{K}$  abfallen. Wird  $K$  groß genug gewählt, so kann man die resultierenden Blockvariablen als unkorreliert betrachten. Auf den so zusammengefassten Messungen kann schließlich eine *Jackknife*-Analyse durchgeführt werden.

## B.7. Jackknife-Fehleranalyse

Eine gängige Standard-Methoden zur Fehlerabschätzung korrelierter Observablen ist die *Jackknife*-Methode. Ihre Notwendigkeit beruht darauf, dass eine Fehlerabschätzung durch Fehlerfortpflanzung in der Praxis oft unmöglich ist. Ein wichtiger Vorteil dieser Methode ist ihre Anwendbarkeit auf gefittete Daten, auf die wir bspw. bei der Massenbestimmung aus den Korrelatoren stoßen. Der Ausgangspunkt ist eine Gesamtheit von  $N$  Daten und eine Observable  $O$ . Mit den vorliegenden Daten werden  $N$  Untermengen der Mächtigkeit  $N-1$  gebildet, wobei der  $i$ ten Untermenge das  $i$ te Datum fehlt. Im Anschluss wird die Observable  $O$  auf der ursprünglichen Menge und auf den  $N$  Untermengen ausgewertet. Die Resultate bezeichnen wir mit  $\hat{O}$  bzw.  $O_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Aus der Varianz

$$\sigma_{\hat{O}}^2 = \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - \hat{O})^2 \quad (\text{B.28})$$

erhalten wir das Ergebnis  $\langle O \rangle = \hat{O} \pm \sigma_{\hat{O}}$  inklusive Fehlerabschätzung. Für verzerrte Daten kann mit

$$\tilde{O} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i \quad (\text{B.29})$$

der verbesserte Schätzwert  $\langle O \rangle = \hat{O} - (N-1)(\tilde{O} - \hat{O})$  berechnet werden.

## B.8. SAP-Methode

Da der DIRAC-Operator nur Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn enthält, werden für die SCHWARZ-Methode nur 2 Farben benötigt. Im Kontext der Gitter-QCD wird diese Methode häufig *SCHWARZ Alternating Procedure* (SAP) genannt [61]. Ein Update des Blocks  $\Lambda$  zur Lösung von  $\mathbf{D}x = b$  ist durch

$$z' = z + D_{\Lambda}^{-1}(b - Dz) \quad (\text{B.30})$$

gegeben. Die darin auftretende Inversion des lokalen DIRAC-Operators wird mit wenigen *minimal residual* Schritten approximiert. Dies ist ausreichend, da einerseits  $D_{\Lambda}$  eine gute Konditionszahl besitzt und andererseits die Genauigkeit der aktuellen Näherungslösung  $z$  bereits begrenzt ist. Jedoch wird die SAP-Methode dadurch ein nicht-stationärer iterativer Prozess und folglich muss eine flexible KRYLOV-Raum-Methode gewählt werden [59]. Mit der SAP-Methode wird ein großer Teil des Spektrums,

genauer gesagt alle mittleren & großen Eigenwerte, gut approximiert. Die Eigenschaft, dass durch die inverse Blocklänge die tiefen Moden abgeschnitten werden, nutzt die Multigrid-Methode geschickt aus (s. Kap.B.9). In Algorithmus 4 ist die SAP-Methode zusammengefasst.

---

**Algorithmus 4** : SCHWARZ *Alternating Procedure*

---

**Input** : Anfangsschätzung  $z$ , rechte Seite  $b$

**Output** : Näherungslösung  $z$

```

1 for  $c = \{rot, schwarz\}$  do
2    $r = b - Dz$ 
3   for alle  $i \in \{1, \dots, N_{block}\}$  mit  $Farbe(i) = c$  do
4      $z = z + D_{\Lambda}^{-1}r$ 

```

---

## B.9. Multigrid-Methode

Zur Lösung der DIRAC-Gleichung  $Du = f$  nutzen wir einen Prädiktionierer  $M$ , der  $M^{-1} \approx D^{-1}$  approximiert. Gemäß  $DM^{-1}Mu = DM^{-1}v = f$  können wir mit der prädiktionierten Matrix  $DM^{-1}$  zuerst nach  $v$  lösen und erhalten anschließend daraus  $u = M^{-1}v$ . Die Multigrid-Methode dient als Prädiktionierung und besteht aus zwei Teilen, die im Wechsel angewandt werden: eine *coarse-grid correction*, die die Beiträge der tiefen Moden approximativ behandelt und ein *domain decomposition Smoother*, der die hohen Moden näherungsweise berechnet [86]. Wie bei der Rot-Schwarz-Prädiktionierung wird das Gitter in Unterblöcke unterteilt. Die Effektivität dieser Methode beruht auf der sogenannten „lokalen Kohärenz“. Unter dem Begriff versteht man das Phänomen, dass Eigenvektoren von  $D$ , die zu kleinen Eigenwerten gehören, dazu neigen auf vielen Gitterblöcken übereinzustimmen. Dadurch können viele Eigenvektoren mit kleinen Eigenwerten durch wenige Eigenvektoren approximiert werden [87]. Die *coarse-grid correction* projiziert den aktuelle Iterationsvektor zuerst auf ein gröberes Gitter, wobei die tiefen Moden des DIRAC-Operators näherungsweise erhalten bleiben. Auf dem groben Gitter wird anschließend die DIRAC-Gleichung in näherungsweise gelöst und das Ergebnis zurück auf das feine Gitter projiziert [86]. Um die hohen Moden zu approximieren, wird anschließend die SAP-Methode aus Kap. B.8 verwendet.

## C. Literaturverzeichnis

- [1] G. Curci und G. Veneziano. „Supersymmetry and the Lattice: A Reconciliation?“ In: *Nucl. Phys.* B292 (1987), S. 555–572. DOI: 10.1016/0550-3213(87)90660-2.
- [2] W. Heisenberg. „A quantum-theoretical reinterpretation of kinematic and mechanical relations“. In: *Z. Phys.* 33 (1925), S. 879–893. DOI: 10.1007/BF01328377.
- [3] E. Schrödinger. „Quantisierung als Eigenwertproblem“. In: *Ann. Phys.* 384.4 (1926), S. 361–376. ISSN: 00033804. DOI: 10.1002/andp.19263840404. URL: <http://dx.doi.org/10.1002/andp.19263840404>.
- [4] P. A. M. Dirac. „The quantum theory of the electron“. In: *Proc. Roy. Soc. Lond.* A117 (1928), S. 610–624. DOI: 10.1098/rspa.1928.0023.
- [5] J. S. Schwinger. „On Quantum electrodynamics and the magnetic moment of the electron“. In: *Phys. Rev.* 73 (1948), S. 416–417. DOI: 10.1103/PhysRev.73.416.
- [6] R. P. Feynman. „Space-time approach to nonrelativistic quantum mechanics“. In: *Rev. Mod. Phys.* 20 (1948), S. 367–387. DOI: 10.1103/RevModPhys.20.367.
- [7] P. Bechtle, T. Plehn und C. Sander. „Supersymmetry“. In: *The Large Hadron Collider: Harvest of Run 1*. Hrsg. von T. Schörner-Sadenius. 2015, S. 421–462. DOI: 10.1007/978-3-319-15001-7\_10. arXiv: 1506.03091 [hep-ex]. URL: <http://inspirehep.net/record/1375491/files/arXiv:1506.03091.pdf>.
- [8] R. Haag, J. T. Lopuszanski und M. Sohnius. „All Possible Generators of Supersymmetries of the  $s$  Matrix“. In: *Nucl. Phys.* B88 (1975), S. 257. DOI: 10.1016/0550-3213(75)90279-5.
- [9] K. G. Wilson. „Confinement of Quarks“. In: *Phys. Rev.* D10 (1974). [45(1974)], S. 2445–2459. DOI: 10.1103/PhysRevD.10.2445.
- [10] M. Creutz. *Quarks, Gluons and Lattices*. Cambridge monographs on mathematical physics. Cambridge University Press, 1986. ISBN: 9780521315357.
- [11] G. Veneziano und S. Yankielowicz. „An effective lagrangian for the pure  $N = 1$  supersymmetric Yang-Mills theory“. In: *Physics Letters B* 113.3 (1982), S. 231–236. ISSN: 0370-2693. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0370-2693\(82\)90828-0](http://dx.doi.org/10.1016/0370-2693(82)90828-0). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269382908280>.
- [12] G. R. Farrar, G. Gabadadze und M. Schwetz. „On the effective action of  $N=1$  supersymmetric Yang-Mills theory“. In: *Phys. Rev.* D58 (1998), S. 015009. DOI: 10.1103/PhysRevD.58.015009. arXiv: hep-th/9711166 [hep-th].
- [13] G. Bergner und S. Catterall. „Supersymmetry on the lattice“. In: *Int. J. Mod. Phys.* A31.22 (2016), S. 1643005. DOI: 10.1142/S0217751X16430053. arXiv: 1603.04478 [hep-lat].
- [14] A. Wipf. *Statistical approach to quantum field theory*. Bd. 864. Springer Berlin Heidelberg, 2013. DOI: 10.1007/978-3-642-33105-3.
- [15] A. Wipf. „Introduction to Supersymmetry. Lecture Notes“. Version 4. In: (2016). [<http://www.tpi.uni-jena.de/qfphysics/homepage/wipf/lectures/susy/susyhead.pdf>, accessed 18.10.2016].

- [16] M. F. Sohnius. „Introducing Supersymmetry“. In: *Phys. Rept.* 128 (1985), S. 39–204. DOI: 10.1016/0370-1573(85)90023-7.
- [17] S. Piemonte. „N=1 supersymmetric Yang-Mills theory on the lattice“. Dissertation. Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2015.
- [18] G. Bergner u. a. „Numerical Simulation of Supersymmetric Yang-Mills Theory“. In: *Proceedings, 7th NIC Symposium 2014*, S. 169–176. URL: [http://inspirehep.net/record/1300202/files/C14-02-12.1\\_1300202.pdf](http://inspirehep.net/record/1300202/files/C14-02-12.1_1300202.pdf).
- [19] G. Bergner u. a. „Supermultiplets of the  $\mathcal{N} = 1$  supersymmetric Yang-Mills theory in the continuum limit“. In: *PoS LATTICE2015* (2016), S. 240. arXiv: 1510.08795 [hep-lat].
- [20] S. Coleman und J. Mandula. „All Possible Symmetries of the  $S$  Matrix“. In: *Phys. Rev.* 159 (5 1967), S. 1251–1256. DOI: 10.1103/PhysRev.159.1251. URL: <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.159.1251>.
- [21] Yu. A. Golfand und E. P. Likhtman. „Extension of the Algebra of Poincare Group Generators and Violation of p Invariance“. In: *JETP Lett.* 13 (1971). [Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz.13,452(1971)], S. 323–326.
- [22] L. O’Raifeartaigh. „Mass differences and Lie Algebras of Finite Order“. In: *Phys. Rev. Lett.* 14.14 (1965), S. 575. DOI: 10.1103/PhysRevLett.14.575.
- [23] S. Weinberg. „The Cosmological Constant Problem“. In: *Rev. Mod. Phys.* 61 (1989), S. 1–23. DOI: 10.1103/RevModPhys.61.1.
- [24] P. A. R. Ade u. a. „Planck 2015 results. XIII. Cosmological parameters“. In: *Astron. Astrophys.* 594 (2016), A13. DOI: 10.1051/0004-6361/201525830. arXiv: 1502.01589 [astro-ph.CO].
- [25] E. Witten. „Constraints on Supersymmetry Breaking“. In: *Nucl. Phys.* B202 (1982), S. 253. DOI: 10.1016/0550-3213(82)90071-2.
- [26] N. Seiberg. „Naturalness versus supersymmetric nonrenormalization theorems“. In: *Phys. Lett.* B318 (1993), S. 469–475. DOI: 10.1016/0370-2693(93)91541-T. arXiv: hep-ph/9309335 [hep-ph].
- [27] V. A. Novikov u. a. „Exact Gell-Mann-Low Function of Supersymmetric Yang-Mills Theories from Instanton Calculus“. In: *Nucl. Phys.* B229 (1983), S. 381–393. DOI: 10.1016/0550-3213(83)90338-3.
- [28] A. Armoni, M. Shifman und G. Veneziano. „SUSY relics in one flavor QCD from a new  $1/N$  expansion“. In: *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), S. 191601. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.191601. arXiv: hep-th/0307097 [hep-th].
- [29] A. Armoni, M. Shifman und G. Veneziano. „From Super-Yang-Mills theory to QCD: Planar equivalence and its implications“. In: *Shifman, M. (ed.) et al.: From fields to strings, vol. 1 353-444* (2004). arXiv: hep-th/0403071 [hep-th]. URL: <http://weplib.cern.ch/abstract?CERN-PH-TH-2004-022>.
- [30] J. S. Schwinger. „The Theory of quantized fields. 1.“ In: *Phys. Rev.* 82 (1951), S. 914–927. DOI: 10.1103/PhysRev.82.914.

- [31] G. Lüders. „On the Equivalence of Invariance under Time Reversal and under Particle-Antiparticle Conjugation for Relativistic Field Theories“. In: *Kong. Dan. Vid. Sel. Mat. Fys. Med.* 28N5 (1954), S. 1–17.
- [32] R. Kirchner u. a. „Evidence for discrete chiral symmetry breaking in  $N=1$  supersymmetric Yang-Mills theory“. In: *Phys. Lett.* B446 (1999), S. 209–215. DOI: 10.1016/S0370-2693(98)01523-8. arXiv: hep-lat/9810062 [hep-lat].
- [33] G. R. Farrar, G. Gabadadze und M. Schwetz. „The spectrum of softly broken  $N=1$  supersymmetric Yang-Mills theory“. In: *Phys. Rev.* D60 (1999), S. 035002. DOI: 10.1103/PhysRevD.60.035002. arXiv: hep-th/9806204 [hep-th].
- [34] A. Feo, P. Merlatti und F. Sannino. „Information on the super Yang-Mills spectrum“. In: *Phys. Rev.* D70 (2004), S. 096004. DOI: 10.1103/PhysRevD.70.096004. arXiv: hep-th/0408214 [hep-th].
- [35] D. Sandbrink. „Numerische Bestimmung von Quarkpotential, Glueball-Massen und Phasenstruktur in der  $N=1$  supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie“. Dissertation. Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2014.
- [36] C. Gattringer und C. B. Lang. *Quantum chromodynamics on the lattice*. Bd. 788. Springer Berlin Heidelberg, 2010, S. 1–343. DOI: 10.1007/978-3-642-01850-3.
- [37] B. Wellegehausen. „Phase diagrams of exceptional and supersymmetric lattice gauge theories“. Dissertation. Friedrich-Schiller-Universität Jena, 2012.
- [38] A. Ferling. „Numerische Methoden zur Erforschung einer  $N=1$  Super Yang-Mills-Theorie mit  $SU(2)_c$  und  $SU(3)_c$  Wilson Fermionen“. Dissertation. Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2009.
- [39] G. Bergner u. a. „The light bound states of supersymmetric  $SU(2)$  Yang-Mills theory“. In: *JHEP* 03 (2016), S. 080. DOI: 10.1007/JHEP03(2016)080. arXiv: 1512.07014 [hep-lat].
- [40] S. Duane u. a. „Hybrid Monte Carlo“. In: *Phys. Lett.* B195 (1987), S. 216–222. DOI: 10.1016/0370-2693(87)91197-X.
- [41] A. D. Kennedy, I. Horvath und S. Sint. „A new exact method for dynamical fermion computations with nonlocal actions“. In: *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* 73 (1999), S. 834–836. DOI: 10.1016/S0920-5632(99)85217-7. arXiv: hep-lat/9809092 [hep-lat].
- [42] M. Troyer und U.-J. Wiese. „Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum Monte Carlo simulations“. In: *Phys. Rev. Lett.* 94 (2005), S. 170201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.94.170201. arXiv: cond-mat/0408370 [cond-mat].
- [43] D. H. Weingarten und D. N. Petcher. „Monte Carlo Integration for Lattice Gauge Theories with Fermions“. In: *Phys. Lett.* B99 (1981), S. 333–338. DOI: 10.1016/0370-2693(81)90112-X.
- [44] E. Y. Remez. „Sur le calcul effectif des polynômes d’approximation de Tschebyscheff“. In: *C. P. Paris* (1934), S. 337–340.

- [45] W. Fraser. „A Survey of Methods of Computing Minimax and Near-Minimax Polynomial Approximations for Functions of a Single Independent Variable“. In: *J. ACM* 12.3 (1965), S. 295–314. ISSN: 0004-5411. DOI: 10.1145/321281.321282. URL: <http://doi.acm.org/10.1145/321281.321282>.
- [46] M. A. Clark und A. D. Kennedy. „Accelerating fermionic molecular dynamics“. In: *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* 140 (2005). [838(2004)], S. 838–840. DOI: 10.1016/j.nuclphysbps.2004.11.244. arXiv: hep-lat/0409134 [hep-lat].
- [47] A. D. Kennedy. „Algorithms for dynamical fermions“. In: (2006). arXiv: hep-lat/0607038 [hep-lat].
- [48] K. Symanzik. „Continuum Limit and Improved Action in Lattice Theories. 1. Principles and  $\phi^4$  Theory“. In: *Nucl. Phys.* B226 (1983), S. 187–204. DOI: 10.1016/0550-3213(83)90468-6.
- [49] K. Symanzik. „Continuum Limit and Improved Action in Lattice Theories. 2.  $O(N)$  Nonlinear Sigma Model in Perturbation Theory“. In: *Nucl. Phys.* B226 (1983), S. 205–227. DOI: 10.1016/0550-3213(83)90469-8.
- [50] P. H. Dondi und H. Nicolai. „Lattice Supersymmetry“. In: *Nuovo Cim.* A41 (1977), S. 1. DOI: 10.1007/BF02730448.
- [51] M. Kato, M. Sakamoto und H. So. „Taming the Leibniz Rule on the Lattice“. In: *JHEP* 05 (2008), S. 057. DOI: 10.1088/1126-6708/2008/05/057. arXiv: 0803.3121 [hep-lat].
- [52] G. Bergner. „Complete supersymmetry on the lattice and a No-Go theorem“. In: *JHEP* 01 (2010), S. 024. DOI: 10.1007/JHEP01(2010)024. arXiv: 0909.4791 [hep-lat].
- [53] H. B. Nielsen und M. Ninomiya. „No Go Theorem for Regularizing Chiral Fermions“. In: *Phys. Lett.* B105 (1981), S. 219–223. DOI: 10.1016/0370-2693(81)91026-1.
- [54] G. Bergner u. a. „Towards the spectrum of low-lying particles in supersymmetric Yang-Mills theory“. In: *JHEP* 11 (2013), S. 061. DOI: 10.1007/JHEP11(2013)061. arXiv: 1304.2168 [hep-lat].
- [55] G. Bergner u. a. „The gluino-gluon particle and finite size effects in supersymmetric Yang-Mills theory“. In: *JHEP* 09 (2012), S. 108. DOI: 10.1007/JHEP09(2012)108. arXiv: 1206.2341 [hep-lat].
- [56] P. H. Ginsparg und K. G. Wilson. „A Remnant of Chiral Symmetry on the Lattice“. In: *Phys. Rev.* D25 (1982), S. 2649. DOI: 10.1103/PhysRevD.25.2649.
- [57] G. Bergner u. a. „First studies of the phase diagram of  $N=1$  supersymmetric Yang-Mills theory“. In: *PoS LATTICE2014* (2014), S. 262. arXiv: 1501.02746 [hep-lat].
- [58] B. Jegerlehner. „Krylov space solvers for shifted linear systems“. In: *ArXiv High Energy Physics - Lattice e-prints* (1996). arXiv: hep-lat/9612014 [hep-lat].
- [59] M. Lüscher. „Schwarz-preconditioned HMC algorithm for two-flavour lattice QCD“. In: *Comput. Phys. Commun.* 165 (2005), S. 199–220. DOI: 10.1016/j.cpc.2004.10.004. arXiv: hep-lat/0409106 [hep-lat].
- [60] H. A. Schwarz. *Gesammelte mathematische Abhandlungen*. Bd. 2. Berlin: Springer Verlag, 1890.

- [61] M. Lüscher. „Solution of the Dirac equation in lattice QCD using a domain decomposition method“. In: *Comput. Phys. Commun.* 156 (2004), S. 209–220. DOI: 10.1016/S0010-4655(03)00486-7. arXiv: hep-lat/0310048 [hep-lat].
- [62] S.-J. Dong und K.-F. Liu. „Stochastic estimation with Z(2) noise“. In: *Phys. Lett.* B328 (1994), S. 130–136. DOI: 10.1016/0370-2693(94)90440-5. arXiv: hep-lat/9308015 [hep-lat].
- [63] K. Bitar u. a. „The QCD Finite Temperature Transition and Hybrid Monte Carlo“. In: *Nucl. Phys.* B313 (1989), S. 348–376. DOI: 10.1016/0550-3213(89)90323-4.
- [64] B. Berg und A. Billoire. „Glueball Spectroscopy in Four-Dimensional SU(3) Lattice Gauge Theory. 1.“ In: *Nucl. Phys.* B221 (1983), S. 109–140. DOI: 10.1016/0550-3213(83)90620-X.
- [65] M. Albanese u. a. „Glueball Masses and String Tension in Lattice QCD“. In: *Phys. Lett.* B192 (1987), S. 163–169. DOI: 10.1016/0370-2693(87)91160-9.
- [66] F. Farchioni u. a. „Hadron masses in QCD with one quark flavour“. In: *Eur. Phys. J.* C52 (2007), S. 305–314. DOI: 10.1140/epjc/s10052-007-0394-4. arXiv: 0706.1131 [hep-lat].
- [67] G. Münster und H. Stüwe. „The mass of the adjoint pion in  $\mathcal{N} = 1$  supersymmetric Yang-Mills theory“. In: *JHEP* 05 (2014), S. 034. DOI: 10.1007/JHEP05(2014)034. arXiv: 1402.6616 [hep-th].
- [68] M. Creutz. „Monte Carlo Study of Quantized SU(2) Gauge Theory“. In: *Phys. Rev.* D21 (1980), S. 2308–2315. DOI: 10.1103/PhysRevD.21.2308.
- [69] N. Kawamoto. „Towards the Phase Structure of Euclidean Lattice Gauge Theories with Fermions“. In: *Nucl. Phys.* B190 (1981), S. 617–669. DOI: 10.1016/0550-3213(81)90450-8.
- [70] C. Morningstar und M. J. Peardon. „Analytic smearing of SU(3) link variables in lattice QCD“. In: *Phys. Rev.* D69 (2004), S. 054501. DOI: 10.1103/PhysRevD.69.054501. arXiv: hep-lat/0311018 [hep-lat].
- [71] R. Peetz. „Spectrum of N=1 Super Yang Mills Theory on the Lattice with a Light Gluino“. Dissertation. Westfälischen Wilhelms-Universität Münster, 2003.
- [72] C. J. Morningstar und M. J. Peardon. „The Glueball spectrum from an anisotropic lattice study“. In: *Phys. Rev.* D60 (1999), S. 034509. DOI: 10.1103/PhysRevD.60.034509. arXiv: hep-lat/9901004 [hep-lat].
- [73] E. Eichten u. a. „Charmonium: The Model“. In: *Phys. Rev.* D17 (1978). [Erratum: *Phys. Rev.* D21,313(1980)], S. 3090. DOI: 10.1103/PhysRevD.17.3090, 10.1103/PhysRevD.21.313.
- [74] R. Sommer. „A New way to set the energy scale in lattice gauge theories and its applications to the static force and alpha-s in SU(2) Yang-Mills theory“. In: *Nucl. Phys.* B411 (1994), S. 839–854. DOI: 10.1016/0550-3213(94)90473-1. arXiv: hep-lat/9310022 [hep-lat].
- [75] S. Borsanyi u. a. „High-precision scale setting in lattice QCD“. In: *JHEP* 09 (2012), S. 010. DOI: 10.1007/JHEP09(2012)010. arXiv: 1203.4469 [hep-lat].
- [76] G. Bergner u. a. „Phase structure of the  $\mathcal{N} = 1$  supersymmetric Yang-Mills theory at finite temperature“. In: *JHEP* 11 (2014), S. 049. DOI: 10.1007/JHEP11(2014)049. arXiv: 1405.3180 [hep-lat].

- [77] G. P. Lepage und P. B. Mackenzie. „On the viability of lattice perturbation theory“. In: *Phys. Rev. D* 48 (1993), S. 2250–2264. DOI: 10.1103/PhysRevD.48.2250. arXiv: hep-lat/9209022 [hep-lat].
- [78] R. D. Ruth. „A Canonical Integration Technique“. In: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 30 (4 Aug. 1983), S. 2669–2671.
- [79] J. C. Sexton und D. H. Weingarten. „Hamiltonian evolution for the hybrid Monte Carlo algorithm“. In: *Nucl. Phys.* B380 (1992), S. 665–677. DOI: 10.1016/0550-3213(92)90263-B.
- [80] T. Takaishi und P. de Forcrand. „Testing and tuning new symplectic integrators for hybrid Monte Carlo algorithm in lattice QCD“. In: *Phys. Rev.* E73 (2006), S. 036706. DOI: 10.1103/PhysRevE.73.036706. arXiv: hep-lat/0505020 [hep-lat].
- [81] C. Urbach u. a. „HMC algorithm with multiple time scale integration and mass preconditioning“. In: *Comput. Phys. Commun.* 174 (2006), S. 87–98. DOI: 10.1016/j.cpc.2005.08.006. arXiv: hep-lat/0506011 [hep-lat].
- [82] M. Luscher und P. Weisz. „On-Shell Improved Lattice Gauge Theories“. In: *Commun. Math. Phys.* 97 (1985). [Erratum: *Commun. Math. Phys.* 98,433(1985)], S. 59. DOI: 10.1007/BF01206178.
- [83] B. Sheikholeslami und R. Wohlert. „Improved Continuum Limit Lattice Action for QCD with Wilson Fermions“. In: *Nucl. Phys.* B259 (1985), S. 572. DOI: 10.1016/0550-3213(85)90002-1.
- [84] R. Wohlert. „Improved continuum limit lattice action for quarks“. In: (1987).
- [85] S. Musberg, G. Münster und S. Piemonte. „Perturbative calculation of the clover term for Wilson fermions in any representation of the gauge group  $SU(N)$ “. In: *JHEP* 05 (2013), S. 143. DOI: 10.1007/JHEP05(2013)143. arXiv: 1304.5741 [hep-lat].
- [86] A. Frommer u. a. „Adaptive Aggregation Based Domain Decomposition Multigrid for the Lattice Wilson Dirac Operator“. In: *SIAM J. Sci. Comput.* 36 (2014), A1581–A1608. DOI: 10.1137/130919507. arXiv: 1303.1377 [hep-lat].
- [87] A. Frommer u. a. „An adaptive aggregation based domain decomposition multilevel method for the lattice wilson dirac operator: multilevel results“. In: (2013). arXiv: 1307.6101 [hep-lat].

## Danksagung

Als Erstes gilt mein Dank Prof. Wipf für die Bereitstellung dieser interessanten Masterarbeit sowie deren Betreuung. Bei meinem Zweitgutachter André möchte ich mich für die gute Betreuung und die viele Ratschläge bedanken. Ohne Dich, Björn, wäre diese Arbeit so nicht machbar gewesen. Zum einen hast Du mir Deinen Quellcode zur Verfügung gestellt und zum anderen hast Du mir bei vielen Fragen weitergeholfen. Meinen beiden weiteren Bürokollegen Daniel & Daniel danke ich für das gesamte Jahr und die lehrreichen Diskussionen. Mein abschließender Dank geht an die Korrekturleser Markus, Pascal und Sebastian. Außerdem bedanke mich für die bereitgestellten Rechenzeiten auf den Compute-Servern des TPIs und dem Omega-Cluster. Speziell der Super-MUC ist ein super Partner für Supersymmetrie-Simulationen. Ohne einen großen Super-Computer sind Simulationen mit relevanten Parametern unmöglich.



## Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Abschlussarbeit selbstständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln und Quellen verfasst habe.

Ich erkläre ausdrücklich, dass ich sämtliche in der Arbeit verwendeten fremden Quellen, auch aus dem Internet, als solche kenntlich gemacht habe. Insbesondere bestätige ich, dass ich ausnahmslos sowohl bei wörtlich übernommenen Aussagen bzw. unverändert übernommenen Tabellen, Grafiken u. Ä. (Zitaten) als auch bei in eigenen Worten wiedergegebenen Aussagen bzw. von mir abgewandelten Tabellen, Grafiken u. Ä. anderer Autorinnen und Autoren (indirektes Zitieren) die Quelle angegeben habe. Die Arbeit wurde in gleicher oder ähnlicher Form bisher bei keiner anderen Institution eingereicht.

Jena, den 01.11.2016

\_\_\_\_\_