Das Vorzeichenproblem im massiven Schwingermodell mit Kogut-Susskind Fermionen

UNIVERSITÄT BIELEFELD

Kathrin Dotter-Welscher

supervised by Dr.Wolfgang Unger

23. Juli 2021

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation			1
2	Gru	ndlage	en	2
	2.1	Schwir	nger Modell im Kontinuum	2
	2.2	(Komt	oakte) QED auf dem Gitter in 2 Dimensionen	4
		2.2.1	Wilson (Plaquette) Eichwirkung	$\overline{5}$
		222	Fermionen Wirkung (Verdopplungsproblem)	6
		223	Kogut-Susskind Fermionen	7
	2.3	Duale	Darstellung des Schwinger Modells	8
		231	Motivation	8
		$\frac{2.3.2}{2.3.2}$	Charakterentwicklung der Eichwirkung	8
		2.3.2	Entwicklung der fermionischen Wirkung	ğ
		2.3.0	Grassmann-und Eichintegration	g
		2.3.1	Taylorentwicklung und Trunkierung	11
	2.4	Evakte	Nummerierung	11
	2.1	2 4 1	Charakterentwicklung	12
		2.4.2	trunkierte Taylorentwicklung	$12 \\ 12$
3	Algorithmen			13
	3.1	Observ	vablen	13
	3.2	3.2 Vorzeichenproblem		13
	3.3	Update	pdate Strategien	
		3.3.1	Worm-Update	13
		3.3.2	Plaquette Update	14
		3.3.3	Detailliertes Gleichgewicht	15
Λ	Auswertung			
-	4.1 Numerischer Verøleich zwischen der trunkierten Taylorentwicklung			10
	1.1	und de	er Charakterentwicklung und dessen Vorzeichenproblem	16
5	Z 115	ammer	afassung und Ausplick	18
5	2 asammentassung und Auspher			10
6	Appendix 6.1. Bestimmung des Mafes			20
	0.1	Bestim	mung des masses	20

1 Motivation

Die Quantenchromodynmaik (QCD) gehört zu den Quantenfeldtheorien (QFT) und beschreibt die starke Wechselwirkung. Sie setzt sich mit den Wechselwirkungen von Quarks und Gluonen auseinander die als Bausteine der Atome betrachtet werden.

Die Quarks besitzen unterschiedliche intrinsische Eigenschaften. Zum einen tragen sie eine elektrische Ladung und eine Farbladung. Zum anderen besitzen sie eine Masse und einen Spin.

Des Weiteren gibt es bisher insgesamt sechs Arten von Quarks, die als Flavours bezeichnet werden: Up-, Down-, Strange-, Charm-, Bottom- und Top-Quark und ihre jeweiligen Antiquarks, die die entgegengesetzte elektrische Ladung tragen.

Auch die Gluonen tragen eine Farbladung und fungieren zudem als "Klebstoff"der Quarks. Die Wechselwirkung der Gluonen bewirkt, dass die Anziehungskraft zwischen den Quarks auch bei großen Entfernungen erhalten bleibt. Dadurch kommen Quarks in der Natur nur in gebundenen Zustände, den Hadronen, vor.

Die Kopplungsstärke hängt hierbei von den vorherrschenden Energien ab. Bei <mark>tiefen</mark> Energien, nimmt die Kopplungsstärke zwischen den Quarks zu. Dies ist als Confinement bekannt. Bei hohen Energien nimmt die Stärke der Wechselwirkungen zwischen den Quarks ab. Sie zeigen das Verhalten freier Teilchen und das Phänomen wird Asymptotische Freiheit bezeichnet.

Die dabei vorherrschende Kopplungskonstante α_s stellt bei niedrigen Energien kein kleiner Parameter dar. Sodass die Bindungszustände von Quarks und Gluonen nicht über Störungstheorien berechnet werden können. Diesem Problem widmete sich 1974 der Physiker Kenneth Wilson. Er führte die Gittertheorie ein, deren Kontinuumslimes einer euklisischen Version der QCD entsprach. Dadurch wurde es möglich die Berechnungen für niedrige Energien, mittels Simulationen durch Monte-Carlo Methoden, durchzuführen.

Dabei existieren die Quantenfelder der Quarks und Gluonen nicht mehr in der Raumzeit, sondern nur noch auf Gitterpunkten, bzw.<u>G</u>itterlinien.

Innerhalb weniger Jahre kam es zu rasanten Entwicklung und die Monte-Carlo-Simulation wurden neben der Störungstheorie zu einer der wichtigsten Hilfsmittel in der Hochenergiephysik. Des Weiteren erlaubt die Gitterformulierung einen anderen Zugang zu vielen beobachtbaren Größen, wie das Massenspektrum oder das $q\bar{q}$ -Potenzial.

Seit ein paar Jahren liegt der Fokus auf Berechnungen bei endlicher Dichte, da es hier zu einem Vorzeichenproblem kommt. Dies liegt daran, dass einige Theorien eine komplexe Wirkung aufweisen, wenn sie mit einem chemischen Potential oder einem topologischen Term in Verbindung stehen. Dadurch besitzt der Boltzmannfaktor $\exp(-S)$ im Pfadintegral eine komplexe Phase und kann somit nicht als Wahrscheinlichkeitsgewichtung in Monte Carlo Simulationen eingesetzt werden. Um das Vorzeichenproblem zu mildern, gibt es einige Lösungsansätze, unter Anderem, eine Neuformulierung der Variablen durch sogenannte duale Variablen.

Um ein besseres Verständnis des Vorzeichenproblems zu erhalten, bedient man sich dem zweidimensionalen Schwingermodell aus der QED. Dieses Modell ist von besonderer Bedeutung, da es dieselben Eigenschaften wie die QCD verkörpert und somit gut auf die Gittertheorie übertragbar ist.

In dieser Masterarbeit dreht sich alles um das Vorzeichenproblem im Schwingermodell mit Kogut-Susskind Fermionen. Hierbei wird unter Anderem die Frage geklärt, welche dualen Variablen dabei eine Rolle spielen und inwieweit, das Vorzeichenproblem zum tragen kommt.

Dabei werden alle Darstellungen und Berechnungen in 2-Dimensionen betrachtet.

2 Grundlagen

2.1 Schwinger Modell im Kontinuum

Das Schwinger Modell im Kontinuum, wurde in den 1960'igern von dem amerikanischen Physiker Julian Seymour Schwinger veröffentlich. Es dient nicht nur als Beispielmodell für komplexe Systeme, wie die Quantenchromodynamik (QCD), sondern ist auch exakt lösbar.

Um die Zustandssumme des Schwinger Modells zu erhalten, wird zunächst die Lagrange-Dichte der Quantenelektrodynamik (QED) definiert [2]. Sie besteht aus einem elektromagnetische Feld (Vakuum), dem Dirac-Feld und der Wechselwirkung der beiden.

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + i \overline{\psi} \gamma^{\mu} \left(\partial_{\mu} - i e A_{\mu} \right) \psi \tag{1}$$

Der erste Term gibt den elektromagnetischen Anteil, die Photonen, wieder und setzt sich aus den Feldstärke-Tensoren $F_{\mu\nu} = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu}$ zusammen. Der zweite Teil der Gleichung beschreibt das Dirac-Feld, bzw. den Fermionenanteil und die Wechselwirkung der masselosen geladenen Fermionen mit einem abelschen Eichfeld A_{μ} . Die elektrische Ladung der Fermionen ist mit *e* gegeben. Die Zustandsfunktion Z dieses Systems ist gegeben durch

$$Z = \int DA_{\mu} D\overline{\psi} D\psi e^{-S_E^{(Tot)}}$$
⁽²⁾

mit der <mark>euklidischen Wirkung</mark>

$$S_E^{Tot} = \int d^2 x_E \left[\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + i \overline{\psi} \gamma_\mu \left(\partial_\mu - i e A_\mu\right) \psi\right]. \tag{3}$$

Durch anwenden der Landau Eichbedingung $\partial_{\mu}A_{\mu} = 0$ mit $A_{\mu} = \partial_{\mu}\sigma + \epsilon_{\mu\nu}\partial_{\nu}\eta$ lässt sich die Lagrange Dichte umschreiben, sodass sich der fermionische Anteil zu

$$\mathcal{L} = i\overline{\psi}\gamma_{\mu}(\partial_{\mu} - ieA_{\mu})\psi \tag{4}$$

$$=i\overline{\psi}\gamma_{\mu}(\partial_{\mu}-ie\epsilon_{\mu\nu}\partial^{\nu}\eta)\psi\tag{5}$$

$$=i\overline{\psi}\gamma_{\mu}(\partial_{\mu}-ie\gamma_{5}\partial_{\mu}\eta)\psi\tag{6}$$

ändert. Hierbei entspricht $\eta^{\mu\nu} = (+, -)$ dem metrischen Tensor von Rang 2 und damit die Eichbedingung gültig ist, muss gelten, dass $\sigma = 0$ ist, wobei $\underline{\sigma_{\mu\nu}} = \frac{1}{2} [\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}]$ gilt. Führt man zusätzlich eine lokale chirale Transformation durch,

$$\psi(x) = e^{ie\gamma_5\alpha(x)}\psi'(x), \qquad \overline{\psi}(x) = \overline{\psi}'(x)e^{ie\gamma_5\alpha(x)}$$
(7)

kommt es, um Forminvarianz zu gewährleisten, zu einer lokalen Phasenänderung von $e^{ie\gamma_5\alpha(x)}$ und die Lagrange Dichte nimmt die Form

$$\mathcal{L} = i\overline{\psi}'\gamma^{\mu} \left(\partial_{\mu} + ie\gamma_{5}\partial_{\mu}\alpha(x) - ie\gamma_{5}\partial_{\mu}\eta\right)\psi' \tag{8}$$

an.

Wenn der Parameter $\alpha(x) = \eta(x)$ ist, entkoppeln die Fermionen voneinander und die Theorie scheint aus freien Photonen und freien masselosen Fermionen zu bestehen.

Die nächsten Schritten, beruhen auf der Annahme, dass eine endliche Transformation $\alpha(x)$, durch N sukzessive infinitesimale Transformation mit dem Parameter $\epsilon(x)$ gegeben ist

$$\lim_{\epsilon \to 0, N \to \infty} N\epsilon(x) = \alpha(x).$$
(9)

Durch eine Weitere infinitesimale chirale Transformation der Fermionenfelder

$$\psi(x) = \psi'(x) + ie\gamma_5 \epsilon(x)\psi'(x), \qquad \overline{\psi}(x) = \overline{\psi}'(x) + ie\epsilon(x)\overline{\psi}'(x)\gamma_5 \tag{10}$$

ändert sich die Lagrange-Dichte zu

$$\mathcal{L} = i\overline{\psi}\gamma^{\mu}\left(\partial_{\mu} + ie\gamma_{5}\partial_{\mu}\left(n\epsilon(x)\right) - ie\gamma_{5}\partial_{\mu}\eta\right)\psi\tag{11}$$

Des Weiteren können die Grassmanvariablen ψ und $\overline{\psi}$, auf Basis der Eigenfunktionen¹, entwickeln werden, wobei die $\phi's$ Eigenzustände der Dirac-Operatoren entsprechen.

$$\psi(x) = \sum_{m} a_m \phi_m(x), \qquad \overline{\psi}(x) = \sum_{m} b_m \phi_m^{\dagger}(x)$$
(12)

Damit ergibt sich für das Maß

$$D\overline{\psi}D\psi = \prod_{m} db_{m}da_{m} \tag{13}$$

Unter der chiralen Transformation

$$da_m \to da'_m = (\det c_{ml})^{-1} da_m \tag{14}$$

ändert sich die fermionische Integrationsmaßnahme und trägt einen nichttrivialen Beitrag bei

$$D\overline{\psi}D\psi \to (\det c_{ml})^{-2} D\overline{\psi}D\psi$$
 (15)

 mit

det
$$c_{ml} = \det\left(\delta_{ml} - ie\int d^2 x_E \,\epsilon(x)\phi_m^{\dagger}\gamma_5\phi_l\right)$$
 (16)

$$= \exp\left(\operatorname{Tr}\,\ln\left(\delta_{ml} - ie\int d^2 x_E\,\epsilon(x)\phi_m^{\dagger}\gamma_5\phi_l\right)\right) \tag{17}$$

$$= \exp\left(-ie\sum_{m}\int d^2x_E \,\epsilon(x)\phi_m^{\dagger}(x)\gamma_5\phi_m\right) \tag{18}$$

$$= \exp\left(\frac{e^2}{2\pi} \int d^2 x_E \,\epsilon(x) \partial_\mu \partial^\mu \left(n\epsilon - \eta\right)\right) \tag{19}$$

Durch die Annahme, dass Ninfinitesimalen Transformation durchgeführt wurden, ergibt sich für das Maß

$$D\overline{\psi}D\psi = \prod_{n=0}^{N} \left(1 + \frac{e^2}{\pi} \int d^2 x_E \,\epsilon(x) \partial_\mu \partial^\mu \left(n\epsilon - \eta\right)\right) D\overline{\psi}' D\psi'. \tag{20}$$

Unter dem Aspekt, dass

$$x = \prod_{n=0}^{N} \left(1 + a\epsilon + nb\epsilon^2 \right) \quad \text{und} \quad \ln x = \sum_{n=0}^{N} \ln \left(1 + a\epsilon + nb\epsilon^2 \right) = \sum \left(a\epsilon + nb\epsilon^2 \right) = aN\epsilon + \frac{b}{2}N(N+1)\epsilon^2$$
(21)

mit $\epsilon \to 0,\, N \to \infty,\, N \epsilon = \alpha$, ändert sich das Integrationsmaß zu

$$D\overline{\psi}D\psi = \exp\left(\frac{e^2}{\pi}\int d^2x_E\,\alpha(x)\partial_\mu\partial_\mu\left(\frac{1}{2}\alpha(x) - \eta\right)\right)D\overline{\psi}'D\psi'.$$
(22)

Als letzten Schritt wird $\alpha(x)=\eta$ gesetzt

 $^{^1\}mathrm{Die}$ Herleitung ist in Anhang Azu finden

$$D\overline{\psi}D\psi = \exp\left(-\frac{e^2}{2\pi}\int d^2x_E A_\mu(x)A_\mu(x)\right)D\overline{\psi}'D\psi'.$$
(23)

Nach Weiteren infinitesimalen Transformationen nimmt das Maß die Form

$$D\overline{\psi}D\psi = \exp\left(\frac{e^2}{\pi}\int d^2x_E\,\alpha(x)\partial_\mu\partial_\mu\left(\frac{1}{2}\alpha(x) - \eta\right)\right)D\overline{\psi}'D\psi' \tag{24}$$

an.

Für die effektive Zustandssumme ergibt sich dann

$$Z = \int DA_{\mu} D\overline{\psi}' D\psi' e^{-S_{eff}}$$
⁽²⁵⁾

 mit

$$S_{eff} = \int d^2 x_E \left[\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \frac{e^2}{2\pi} A_\mu A_\mu + i\overline{\psi}' \gamma_\mu \partial_\mu \psi' \right].$$
(26)

Die Photonen werden massiv und die Fermionen entkoppeln komplett vom Spektrum.

2.2 (Kompakte) QED auf dem Gitter in 2 Dimensionen

Die Gittereichtheorie gehört zu den wenigen Möglichkeiten, nicht-störungstheoretische Berechnungen in Quantenfeldtheorien anzustellen. Sie ist durch die Angabe ihres Wirkungsfunktional S vollständig definiert.

Ausgehend von der Lagrangedichte der QED Gl. (1) kann die Wirkung $S = \int dt dx \mathcal{L}$ (durch eine Wick-Rotation) in eine Euklidische Wirkung [11] überführt werden. Dadurch ist es möglich, dass die Wirkung $S^{(E)} = S_G^{(E)} + S_F^{(E)}$ in einen Eichanteil $(S_G^{(E)})$ und einen fermionischen Anteil $(S_F^{(E)})$ separiert werden kann [6]:

$$S_G^{(E)}[A] = \frac{1}{4} \int d^2 x F_{\mu\nu}(x) F^{\mu\nu}(x)$$
(27)

$$S_F^{(E)}[\psi,\overline{\psi},A] = \int d^2x \overline{\psi}(x) \left(\underline{\gamma^{\mu} D_{\mu}} + m\right) \psi(x).$$
⁽²⁸⁾

Beide Wirkungen können, dann auf einem 2-Dimensionalen-Gitter mit

$$\Lambda = \{x = (x_1, x_2) | x_1 = 0, 1, ..., N - 1; x_2 = 0, 1, ..., N_{\tau} - 1\}$$
(29)

diskretisiert werden. Der Vektor $x \in \Lambda$ bezeichnet die Punkte im Euklidischen Raum, die durch den Gitterabstand *a* separiert werden. Hierzu ist es nötig, sogenannte Linkvariablen $U_{x,\mu}$ einzuführen, die Eichbosonen (hier: Photonen), welche benachbarte Gitterpunkte x und $x + \hat{\mu}a$ verbinden. Im Sinne der Differentialgeometrie können die Links als endliche Paralleltransporte aufgefasst werden. Diese sind über die Linkwinkel $\Phi_{\mu}(x)$

$$U_{\mu}(x) = e^{i\Phi_{\mu}(x)}, \Phi_{\mu}(x) \epsilon[-\pi, \pi]$$
(30)

gegeben. Mittels des pfadgeordneten Integrals, kann der Link als

$$U_{\mu}(x) = U(x, x + a\hat{\mu}) = \mathcal{P}\exp\left(ie\int_{x_x}^{x_{x+a\hat{\mu}}} dx^{\nu}A_{\nu}(x)\right) \simeq \exp\left(ieaA_{\mu}(x)\right)$$
(31)

ausgedrückt werden.

2.2.1 Wilson (Plaquette) Eichwirkung



Abb. 1: Vier Link-Variablen die eine Plaquette bilden

Im Folgenden wird nun eine mögliche Diskretisierung der Kontinuumswirkung der QED auf dem Gitter konstruiert. Ein Produkt von Links, entlang einer rechteckigen Kontur auf dem Gitter, wird Wilson Schleife genannt, dabei beschreibt die kleinstmögliche Schleife, die sogenannte Plaquette. In Abbildung 1 ist diese graphisch dargestellt, dabei wird das Produkt von vier Linkvariablen folgendermaßen definiert:

$$U_{\mu\nu}(x) = U_{\mu}(x)U_{\nu}(x+\hat{\mu})U_{\mu}(x+\hat{\nu})^{\dagger}U_{\nu}(x)^{\dagger}$$
(32)

Nun wird der Ausdruck aus (31) in (32) eingesetzt und man erhält:

$$U_{\mu\nu}(x) = \exp(iea^2 F_{\mu\nu}(x)), \tag{33}$$

wobei hier $F_{\mu\nu}(x)$ den diskretisierten Kontiunuums Feldstärkentensor beschreibt:

$$F_{\mu\nu}(x) = \frac{1}{a} [(A_{\nu}(x+\hat{\mu}) - A_{\nu}(x)) - (A_{\mu}(x+\hat{\nu}) - A_{\mu}(x))]$$
(34)

Da $U_{\mu\nu}$ im allgemeinen eine unitäre Matrix ist, d.h. $U_{\mu\nu} = \exp(iT)$ mit der hermiteschen Matrix $T = ga^2 F_{\mu\nu} + \mathcal{O}(a^3)$, gilt immer $U_{\mu\nu}(x)U^{\dagger}_{\mu\nu}(x) = 2 - T^2 + \dots$ Somit hat die Größe $U_{\mu\nu}$ eine Verbindung zur Eichwirkung (28) und aus (33) folgt für kleine Gitterabstände

$$\frac{1}{e^2} \sum_{x} \sum_{\mu,\nu,\mu<\nu} \left[1 - \frac{1}{2} (U_{\mu\nu}(x) + U^{\dagger}_{\mu\nu}(x))\right] \approx \frac{1}{4} \sum_{x,\mu,\nu} a^2 F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x)$$
(35)

Die Gitterwirkung kann jetzt in kompakter Form über die Plaquette Variablen ausgedrückt werden, die nichts anderes sind, als Produkte der Linkvariablen um eine Plaquette P,

$$S_G[U] = \beta \sum_P [1 - \frac{1}{2}(U_P + U_P^{\dagger})], \qquad (36)$$

mit $\beta = \frac{1}{e^2}$ der inversen Kopplung. Dabei entspricht $[U_P + U_P^{\dagger}] = e^{i(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4)} e^{-i(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4)} = 2\cos(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4).$

2.2.2 Fermionen Wirkung (Verdopplungsproblem)

Im Kontinuum ist die Wirkung S_F^0 für freie Fermionen gegeben als

$$S_F^0[\Psi,\overline{\Psi}] = \int d^2x \overline{\Psi}(x) (\gamma_\mu \partial_\mu + m) \Psi(x)$$
(37)

Um die Wirkung auf dem Gitter anzuwenden, muss das Integral über die Raumzeit diskretisiert werden [11]. Dasselbe gilt für die partielle Ableitung.

$$\partial_{\mu}\Psi(x) \longrightarrow \frac{1}{2a}(\Psi(x+\widehat{\mu}) - \Psi(x-\widehat{\mu}))$$
 (38)

$$S_F^0[\Psi,\overline{\Psi}] = a^2 \sum_{x \in \Lambda} \overline{\Psi}(x) \left(\sum_{\mu=1}^2 \gamma_\mu \frac{\Psi(x+\widehat{\mu}) - \Psi(x-\widehat{\mu})}{2a} + m\Psi(x)\right)$$
(39)

Für den freien Fall ist es einfacher im Impulsraum zu agieren, so dass die Wirkung hier mittels dem Dirac-Operator D(x|m) zu

$$S_F^0[\Psi,\overline{\Psi}] = a^2 \sum_{x,m\in\Lambda} \overline{\Psi}(x)_{\alpha,a} D(x|m)_{\alpha\beta,ab} \Psi(m)_{\beta,b}$$
(40)

umgeschrieben werden kann, mit

$$D(x|m)_{\alpha\beta,ab} = \sum_{\mu=1}^{2} (\gamma_{\mu})_{\alpha\beta} \frac{\delta_{x+\widehat{\mu},m} - \delta_{x-\widehat{\mu},m}}{2a} + m\delta_{\alpha\beta}\delta_{ab}\delta_{xm}$$
(41)

Um zum Impulsraum zu wechseln, muss eine Fourier Transformation durchgeführt werden

$$\widetilde{D}(p|q) = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x,m\in\Lambda} e^{-ipxa} D(x|m) e^{iqma}$$

$$= \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x\in\Lambda} e^{-i(p-q)xa} (\sum_{\mu=1}^{2} \gamma_{\mu} \frac{e^{iq_{\mu}a} - e^{-iq_{\mu}a}}{2a} + m\mathbf{1})$$

$$= \delta(p-q)\widetilde{D}(p)$$
(42)

Dabei entspricht $\widetilde{D}(p)$

$$\widetilde{D}(p) = m\mathbf{1} + \frac{i}{a} \sum_{\mu=1}^{2} \gamma_{\mu} sin(p_{\mu}a)$$
(43)

Im nächsten Schritt wird die 2 × 2-Matrix $\widetilde{D}(p)$ invertiert und der Gitterabstand a minimiert.

$$\widetilde{D}^{-1}(p) = \frac{m\mathbf{1} - ia^{-1}\sum_{\mu}\gamma_{\mu}sin(p_{\mu}a)}{m^2 + a^{-2}\sum_{\mu}sin^2(p_{\mu}a)}$$
(44)

$$\widetilde{D}^{-1}(p) = \frac{-ia^{-1}\sum_{\mu}\gamma_{\mu}sin(p_{\mu}a)}{a^{-2}\sum_{\mu}sin^{2}(p_{\mu}a)} \xrightarrow{a \to 0} \frac{-i\sum_{\mu}\gamma_{\mu}p_{\mu}}{p^{2}}$$
(45)

Die Inverse hat die Gestalt eines Quark-Propagator und unterscheidet sich zum Kontinuumspropagator $\widetilde{D}(p) = (i\not p + m)^{-1}$, dadurch, dass die Sinusfunktion bei $p_{\mu} = \frac{\pi}{2a}$ nicht verschwindet. Dadurch entstehen 2² Pole. Die Nullstellen werden mit Fermionen assoziiert, so dass je Raumdimension eine Verdopplung der fermionischen Freiheitsgrade gegenüber der Kontinuumstheorie erhalten. Dieses Problem wird als Verdopplungsproblem bezeichnet.

Im nächsten Abschnitt wird dieses Problem mittels Kogut-Susskind Fermionen gelöst.

2.2.3 Kogut-Susskind Fermionen

Als möglichen Lösungsansatz für das Verdopplungs Problem gelten die Kogut-Susskind Fermionen, benannt nach John Kogut und Leonard Susskind. Sie sind auch bekannt unter den Namen 'staggered Fermions'und erhalten einen Teil der chiralen Symmetrie. Um das Verdopplungs Problem zu beheben, wird die Anzahl der Freiheitsgrade pro Gitterpunkt von vier auf zwei reduziert, sodass aus den vier Freiheitsgraden an den Vertizes jedes unitären Hyperkubus zwei fermionische Felder erhalten werden(da hier die Farb-Freiheitsgrade nicht von interesse sind, können diese vernachlässigt werden).

Dies geschieht durch eine Transformation der Wirkung aus (39) über lokalen/Grassmann Variabeln [12].

$$\widehat{\psi}(x) = T(x)\chi(x), \quad \overline{\widehat{\psi}}(x) = \overline{\chi}(x)T^{\dagger}(x)$$
(46)

wobei χ bzw. $\overline{\chi}$ die Grassmann-wertigen Felder, ohne Dirac Struktur, beschreiben und T(x) eine unitäre (2 × 2)-Matrix.

$$T(x) = \gamma_0^{x_0} \gamma_1^{x_1} \tag{47}$$

Durch Diagonalisierung der Matrix erhalten wir $T^{\dagger}(x)\gamma_{\mu}T(x+\hat{\mu}) = \eta_{\mu}(x)\mathbf{1}$, wobei $\eta_{\mu}(x)$, den Kogut-Susskind-Phasen, den 'staggered phases', entsprechen. Diese haben die folgenden Charakteristika

$$\begin{cases} \eta_{\mu}(x) = (-1)^{\sum_{\nu < \mu} x_{\nu}}, \ \mu = \mathbf{0}, 1\\ \eta_{\mathbf{0}}(x) = 1 \end{cases}$$
(48)

Mit diesen Eigenschaften ergibt sich eine Wirkung, bei dem jedes Feld nur eine Komponente pro Gitterpunkt besitzt mit doppelten Gitterabstand a.

$$S_F[\chi,\overline{\chi}] = a^2 \sum_{x \in \Lambda} \overline{\chi}(x) \left(\sum_{\mu=1}^2 \eta_\mu(x) \frac{\chi(x+\widehat{\mu}) - \chi(x-\widehat{\mu})}{2a} + m\chi(x) \right)$$
(49)

Fordert man zusätzlich eine lokale Eichinvarianz so muss die Differenz in Gl.(49) durch eine kovariante Ableitung auf dem Gitter ersetzt werden. Dadurch ist nun die Kogut-Susskind-Wirkung unter Eichtransformationen invariant und lautet:

$$S_F[\chi,\overline{\chi},U] = a^2 \sum_{x \in \Lambda} \overline{\chi}(x) \left(\sum_{\mu=1}^2 \eta_\mu(x) U_\mu(x) \chi(x+\widehat{\mu}) - U_\mu(x-\widehat{\mu}) \chi(x-\widehat{\mu}) + 2am\chi(x) \right)$$
(50)

Somit ergibt sich eine Wirkung, in der jedes Fermionenfeld nur eine Komponente pro Gitterpunkt enthält und die Linkvariablen jeweils zwei Gitterpunkte verbinden.

2.3 Duale Darstellung des Schwinger Modells

2.3.1 Motivation

Duale Darstellungen von Gittereichtheorien werden typischerweise benutzt, um Vorzeichenprobleme in der ursprünglichen Formulierung zu reduzieren oder zu lösen.

Insbesondere das Vorzeichenproblem der QCD bei endlicher Dichte sind neue Methoden nötig, und duale Darstellungen vielversprechend.

Die Idee von dualen Darstellungen sind zum einen ursprüngliche Variablen auszuintegrieren und durch duale Variablen zu ersetzen. Damit lässt sich das Vorzeichen milder machen.

Das Schwinger-Modell für $N_f = 1$ hat zwar kein Vorzeichenproblem in der ursprünglichen Formulierung (Kap.2.1), da die Abhängigkeit eines chemischen Potentials entfällt (Gaußscher Satz).

Allerdings ist es ein hervorragendes Modell, um Vorzeichenproblemen in dualen Darstellungen zu verstehen, die durch Eichkorrekturen zustande kommen. Im Folgenden werden die dualen Variablen, bestehend aus Elektron-Schleifen, Monomere, Dimere (Elektron-Positron Paare) und Plaquettebesetzungszahlen, diskutiert. Diese gehorchen Bedingungen, die aus der Eich-und Grassmannintegration hervorgehen.

Des Weiteren wird sich zeigen, dass es in Bezug auf das Vorzeichenproblem eine ausgeprägte Massenabhängigkeit gibt (Kap. 4).

2.3.2 Charakterentwicklung der Eichwirkung

Ausgehend von 2.2.1 (36), kann das Gewicht der Eichwirkung über das Produkt der Plaquetten ausgedrückt werden.

Dies geschieht über die Charakterentwicklung. Damit lässt sich $\exp(\beta U_P)$ durch Charaktere und Charakterkoeffizienten darstellen.

$$\exp(\beta U_P) = \sum_r \chi_r[U_P] u_r(\beta) \stackrel{U(1)}{=} \sum_n \chi_n(U_P) u_n(\beta)$$
(51)

Da die irreduziblen Darstellungen der U(1) durch ganze Zahlen n gegeben sind, gilt hier, dass χ_r durch χ_n klassifiziert ist. $\chi_n = \exp(in\varphi)$ stellt den Charakter und u_p den Charakterkoeffizient dar. Dadurch kann die Wirkung als Produkt der Plaquetten ausgedrückt werden

$$\exp(-S_G[U]) = \prod_P \exp\left(\beta \frac{U_P + U_P^{-1}}{2}\right)$$
(52)

Aus der rechten Seite der Gleichung kann man den Charakterkoeffizient für U(1) als die modifizierte Bessel-Funktion der ersten Art, $I_n(\beta)$ und den Charakter, die Plaquette U_P^n , identifizieren.

$$\exp\left[\left(\frac{\beta}{2}\right)\left(U_P + U_P^{-1}\right)\right] = \sum_n U_P^n I_n(\beta)$$
(53)

Mit (52) ergibt sich dann eine Gewichtung von

$$\exp(-S_G[U]) = \prod_P \sum_n U_P^{n_P} I_{n_P}(\beta)$$
(54)

Die Summe geht über Konfiguration der Plaquettbesetzungszahlen jeder Plaquette $P = (x, \mu, \nu)$ mit $\mu < \nu$.

2.3.3 Entwicklung der fermionischen Wirkung

Ausgehend von (50) lässt sich die Fermionische Wirkung [4] als

$$\exp(-S_F[\chi, \overline{\chi}, U]) = \sum_{\{d_{x,\mu}, \overline{d}_{x_\mu}\}} \prod_{x,\mu} (W^+)^{d_{x,\mu}} (W^-)^{d_{x,\mu}}$$
(55)

darstellen, wobei (W^+) die positiven und (W^-) negativen Gewichte (Springterm) in

$$W^{+} = -\overline{\chi}(x)U_{\mu}(x)\chi(x+\widehat{\mu}), \qquad W^{-} = +\overline{\chi}(x+\widehat{\nu})U_{\mu}^{\dagger}(x)\chi(x)$$

sind. Dabei entsprechen $d_{x,\mu}, \overline{d}_{x,\mu} \in \{0,1\}$ dualen Variablen.

Des Weiteren sei angemerkt, dass das Produkt über die Kogut-Susskind-Phasen um eine Plaquette immer

$$\eta_{\mu}(x)\eta_{\nu}(x+\hat{\mu})\eta_{\mu}(x+\hat{\nu})\eta_{\nu}(x) = -1$$
(56)

ist.

Im folgenden werden für das spätere Vorgehen, Dimerzahlen $k_{x,\mu}$ mit $k_{x,\mu} = \min\{d_{x,\mu}, \overline{d}_{x,\mu}\} \epsilon\{0, 1\}$ und die Fermionenflüsse $f_{x,\mu}$ mit $f_{x,\mu} = d_{x,\mu} - \overline{d}_{x,\mu} \epsilon\{-1, 0, 1\}$ dargestellt. Damit ändert sich (55) zu

$$\exp\left(-S_F[\chi,\overline{\chi},U]\right) = \sum_{\{k_{x,\mu},f_{x,\mu}\}} \prod_{x,\mu} (W_D)^{k_{x,\mu}} (W_F)(f_{x,\mu})$$
(57)

 mit

$$W_D = \overline{\chi}(x)\chi(x)\overline{\chi}(x+\hat{\mu})\chi(x+\hat{\mu})$$

$$W_F(f_{x,\mu}) = \delta_{f,1}W^+ + \delta_{f,-1}W^- + \delta_{f,0}$$
(58)

2.3.4 Grassmann-und Eichintegration

Nun kann die Zustandssumme mittels Grassmann-und Eichintegration bestimmt werden.

$$Z = \int [dU] [d\overline{\chi} d\chi] \exp(-S_G[U]) \exp(-S_F[\chi, \overline{\chi}, U])$$
(59)

Zunächst wird die fermionische Wirkung S_F mit dem Integrationsmaß $[d\overline{\chi}d\chi] = \prod_{x \in \Lambda} d\overline{\chi}_x d\chi_x$ betrachtet.

Dabei ist es möglich, dass sich fermionische Flüsse $f_{\mu}(x)$ entlang eines Links x nach $x + \mu$ bilden. Zudem können bei der Ausintegration, Dimere auf einen Link (x nach $x + \mu$) entstehen, die für einen Vorwärts-und Rückwärts-Sprung ein Gewicht von

$$\int d\overline{\chi}(x)d\chi(x)d\overline{\chi}(x\pm\hat{\mu})d\chi(x\pm\hat{\mu})\overline{\chi}(x)\chi(x)\overline{\chi}(x\pm\hat{\mu})\chi(x\pm\hat{\mu}) = 1$$
(60)

tragen. Des Weiteren können sich zwei Fermionenflüsse auf zwei verschiedenen Links befinden. Hier gilt, nach dem Gaußschen Satz, dass ein Fluss f_x durch ein Fermion $(\chi(x))$ oder Anti-Fermion $(\overline{\chi}(x))$ kompensiert wird.

$$\sum_{\mu} (f_{x,+\mu} - f_{x,-\mu}) = 0 \tag{61}$$

Die Konsequenz dessen sind nicht durchdringende Schleife ℓ mit einem Gewicht von

$$\sigma(\ell) = (-1)^{1+r_0(\ell)+N_-(\ell)} \prod_{i=1}^{|\ell|} \eta_{\mu_i}(x_i)$$
(62)

Hierbei entspricht $r_0(\ell)$ der Windungs-Zahl, $N_-(\ell)$ der Anzahl der Links in der Schleife, welche in negative Richtung orientiert sind und $\prod_{(x,\mu)\in\ell}$ ist das Produkt, welches über alle positiv orientierten Richtungen geht. η_{μ} entspricht hier wieder den Kogut-Susskind Phasen. Natürlich ist es möglich, dass durch einen Gitterpunkt keine Flüsse fließen, dann erhält man bei der Ausintegration ein Monomer auf dem Gitterpunkt x mit einem Gewicht von 2ma. Zusammenfassend lassen sich bei der Ausintegration des fermionischen Anteils neben (61), die Bedingung (63) aufstellen.

$$m_x + \sum_{\mu=\pm 0}^{\pm 2} \left(k_\mu(x) + \frac{|f_\mu(x)|}{2}\right) = 1$$
(63)

Dies besagt genauer, dass

- (1) sich ein Monomer an dem Gitterpunkt x befindet mit $m_x = 1$ und folglich $k_{\mu}(x) = 0$, sowie $f_{\mu}(x) = 0$
- (2) es ein Dimer zwischen x und $x + \hat{\mu}$ gibt mit $k_{\mu}(x) = 1$ und $m_x = 0$, bzw. $f_{\mu}(x) = 0$
- (3) sich eine Schleife bildet mit $f_{\mu}(x) = \pm 1$ und $m_x = 0$, $k_{\mu}(x) = 0$.

Neben den Fermionenflüssen gibt es noch Eichflüsse $\phi(x)$. Hierbei gilt, wie bei (61), der Gaußsche Satz (dass die Summe der eingehende Flüsse, dasselbe ergeben muss, wie die Summe der ausgehenden Flüsse).

$$\phi_{\mu}(x) = \sum_{\nu > \mu} [\delta n_{x,\mu\nu} - \delta n_{x-\hat{\nu},\mu\nu}] + \sum_{\nu < \mu} [\delta n_{x-\hat{\nu},\nu\mu} - \delta n_{x,\nu\mu}]$$
(64)

mit $\delta n_p = n_p - \overline{n}_p$.

Die Zustandssumme nach der Grassmannintegration hat nun die Form

$$Z = \sum_{\{n,\ell,m,k\}} \prod_{\ell} \sigma(\ell) \prod_{x \in \Lambda} (2ma)^{m_x} \prod_{P} I_{\delta_{n_P}}(\beta) \int [dU] \prod_{\substack{x \in \Lambda\\ \mu=0,1,2}} U_{\mu}(x)^{f_{\mu}(x) + \Phi_{\mu}^{(n)}}$$
(65)

Nun folgt die Eichintegration über das Haar-Maß dU. Um hier ein nicht-verschwindendes Gewicht zu erreichen, muss an jedem Link die selbe Anzahl an Vorwärts $(U_{x,\mu})$ - und Rückwärts $(U_{x,\mu}^{\dagger})$ -Eich-Links geboten sein (63). Daraus folgt, dass der Gesamtfluss

$$f_{\mu}(x) + \phi_{\mu}(x) = 0 \tag{66}$$

ist. Zusammen mit (65) wird das Integral 1 und es ergibt sich eine duale Zustandssumme von

$$Z = \sum_{\{n,m,k\}} \sigma(n) \prod_{x \in \Lambda} (2ma)^{m_x} \prod_P I_{\delta_{n_P}}(\beta).$$
(67)

Aufgrund des Gaußschen Satzes, ist die Windungs-Zahl $r_0(\ell) = 0$ und das Vorzeichen lässt sich durch $\sigma(\{n\}) = \prod_{\ell} \sigma(\ell)$ ausdrücken. Des Weiteren fällt $\{\ell\}$ raus, da diese durch δn_p vollständig bestimmt ist.

2.3.5 Taylorentwicklung und Trunkierung

Die modifizierte Besselfunktion erster Art aus (67) ist durch die Taylorentwicklung

$$I_{\delta_{n_p}}(\beta) = \sum_{\overline{n_p}} \frac{\left(\frac{\beta}{2}\right)^{2\overline{n_p} + \delta_{n_p}}}{\overline{n_p}!(\overline{n_p} + \delta_{n_p})!}$$
(68)

definiert. Sie beinhaltet die Trunkierungs-Bedingung $n_p=1, \overline{n}_p=0$ oder $n_p=0, \overline{n}_p=1$, bzw. $\delta_{n_p}=n_p-\overline{n}_p=-1, 0, +1$. Diese sind durch die Flussrichtung der Elektron-Schleifen und Plaquetteflüssen bedingt, siehe Abbildung 2



Abb. 2: Dargestellt sind zwei Plaquetten mit der jeweiligen Plaquettebesetzungszahl $\delta n_p = \pm 1$. Der blau markierte Fluss beschreibt den Plaquettefluss und der rot markierte die Elektron-Schleife. In a) und b) sind die jeweiligen Richtungen angegeben. Für $\delta n_p = 0$ gibt es keine Elektronenschleife um die Plaquette herum. Sie kann dabei z.B. durch ein Dimer-Paar ersetzt worden sein oder in zwei separate Elektron-Schleifen gesplittet.

Durch diese Bedingungen ergeben sich für die Besselfunktion für $\delta_{n_p} = -1, 0, 1$ folgende Ergebnisse:

$$I_0 = 1, \quad I_1 = I_{-1} = \frac{\beta}{2}$$
 (69)

2.4 Exakte Nummerierung

Im Folgenden erfolgt ein kurzer Einblick in die exakte Nummerierung für ein 2×2 -Gitter. Dieses kleine Volumina ist hier von Vorteil, da kein Vorzeichenproblem vorliegt.

Des Weiteren können die Ergebnisse analytisch angegeben und mit Monte-Carlo Resultaten verglichen werden. Zudem ist es möglich durch die exakte Nummerierung den vollen Algorithmus zu testen.

Im Gegensatz zu SU(3), in der nur β -Korrekturen möglich sind, kann in U(1) mit der Charakterentwicklung gearbeitet werden.

Es werden nun im Folgenden die Verhältnisse der Gewichte aus der Zustandssumme (67) betrachtet. Dies geschieht einmal durch die Charakterentwicklung und einmal durch die trunkierte Taylorentwicklung. In der untenstehenden Abbildung 3 ist der Vergleich dieser beiden Entwicklungen dargestellt. Zu sehen ist, dass die Gewichte der trunkierten Entwicklung nicht gegen eins konvergieren. Des Weiteren lässt sich aus der Abbildung entnehmen, dass das mittlere Vorzeichen der beiden Algorithmen bis $\beta = 0, 5$ übereinstimmen.



Abb. 3: Zu sehen, ist der Vergleich der Gewichte des vollen und des trunkierten plaquette Algorithmen. Das Gewicht der trunkierten Entwicklung konvergiert nicht gegen eins und ist durch die Bedingungen $n_p = 0$ or $\overline{n}_p = 0$ gegeben.

2.4.1 Charakterentwicklung

Die Ergebnisse der Charakterentwicklung, aus Abbildung 3, werden durch die Zustandsumme $Z(\beta, m_q)$ für ein 2 × 2 Gitter bestimmt.

$$Z(\beta, m_q) = (8 + 8(2am_q)^2 + (2am_q)^4) \cdot I_0(\beta)^4 \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)}\right)^4\right) + 8I_0(\beta)^3 I_1(\beta) \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(\frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)}\right)^3 \left(\frac{I_{n+1}(\beta)}{I_1(\beta)}\right)\right) + 4I_0(\beta)^2 I_1(\beta)^2 \left(\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left(\frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)}\right)^2 \left(\frac{I_{n+1}(\beta)}{I_1(\beta)}\right)^2\right)$$
(70)

Dabei werden die Verhältnisse der Gewichte der modifizierten Besselfunktionen betrachtet, sowie die Gewichte aus der fermionischen Wirkung, die sich hier aus den dualen Variablen, wie Dimere, Monomere und deren Verknüpfung zusammensetzt.

2.4.2 trunkierte Taylorentwicklung

Als zweiter Vergleich in Abbildung 3 wird der trunkierte Algorithmus dargestellt. Dieser lässt sich bestimmen, indem der Ausdruck (70) trunkiert wird. Berechnet kann dieser mittels der Ergebnisse der trunkierten Besselfunktionen (69).

$$Z(\beta, m_q) = (8 + 8(2am_q)^2 + (2am_q)^4) \cdot I_0(\beta)^4 \left(\sum_{n=-1}^{1} \left(\frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)}\right)^4\right) + 8I_0(\beta)^3 I_1(\beta) \left(\sum_{n=-1}^{1} \left(\frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)}\right)^3 \left(\frac{I_{n+1}(\beta)}{I_1(\beta)}\right)\right) + 4I_0(\beta)^2 I_1(\beta)^2 \left(\sum_{n=-1}^{1} \left(\frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)}\right)^2 \left(\frac{I_{n+1}(\beta)}{I_1(\beta)}\right)^2\right)$$
(71)

$$= (8 + 8(2am_q)^2 + (2am_q)^4) + 4\beta + 2\beta^2$$
(72)

3 Algorithmen

3.1 Observablen

Mit dem unten erläuterten Algorithmus ist es möglich viele verschiedene Observablen zu messen. In dieser Arbeit wurde sich vorwiegend auf die mittlere Plaquette $\langle P \rangle$, das chirale Kondensat $\langle \overline{\Psi}\Psi \rangle$ und das mittlere Vorzeichen $\langle \sigma \rangle$ konzentriert.

Wenn man den Erwartungswert einer Observablen in Gitter QCD über einen Schätzwert bestimmen möchte,

$$\langle O \rangle = \frac{\int DUO([U])e^{-S[U]}}{\int DUe^{-S[U]}}$$
(73)

stößt man im allgemeinen auf das Problem, dass Unmengen an Integrationen durchgeführt werden müssen. Um dies zu umgehen braucht man eine effizientere Methode, in Form des "importance sampling". Dabei wird eine Sequenz von Link Variablen mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung über den Boltzmannfaktor $\exp(-S[U])$ genertiert. Dabei werden die öfter vorkommenden Zustände verstärkt berücksichtigt. Dadurch kann der Mittelwert durch folgende Approximation bestimmt werden

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} O(\{U\}_i)$$
 (74)

Die Konfigurationen bestehen aus Elementen der Markov Ketten, die durch Markov Prozesse generiert werden.

Damit jedoch die Gewichte aus der Zustandsgleichung (67) als Wahrscheinlichkeitsdichte interpretiert werden können, müssen diese positiv sein, um Monte Carlo Methoden anwenden zu können.

3.2 Vorzeichenproblem

Für Volumina größer 2×2 , liegt ein Vorzeichenproblem vor. Das Vorzeichen lässt sich wie oben als Erwartungswert einer Observablen sehen. Das totale Vorzeichen der möglichen Konfigurationen wird dabei getilgt (quench) und durch Folgenden Ausdruck

$$\langle O \rangle = \frac{\langle \sigma \cdot O \rangle}{\langle \sigma \rangle} \tag{75}$$

dargestellt.

Eine nützliche Größe, um den Schweregrade des Vorzeichens auf dem Gitter mit Volumen V zu messen ist die freie Energie Δf . Sie ist null, wenn die reale (Z) und getilgte (Z_{\parallel}) Zustandssumme übereinstimmen und steigt, wenn das Vorzeichenproblem schwerer wird. Das lässt sich durch

$$\langle \sigma \rangle = \frac{Z}{Z_{||}} = \exp(-\Delta f \frac{V}{T})$$
(76)

beschreiben.

Bei $\beta = 0$ und im chiralen Limes gibt es kein Vorzeichenproblem.

3.3 Update Strategien

3.3.1 Worm-Update

Monte-Carlo-Algorithmen werden schon seit den 1940 von Stanislaw Ulam, Nicholas Metropolis und John von Neumann entwickelt und umgesetzt.

Dieser wurde von Prokof'ev und Svistunov durch einen effizienterer Algorithmus, dem Worm Algorithmus, erweitert. Er basiert auf der Idee, Konfigurationen eines geschlossenen Pfads durch die Bewegung von Endpunkten eines getrennten Pfades upzudaten.

Damit ist es nun möglich Plaquett-Konfigurationen mit Monomer bzw. Dimer-Konfiguration miteinander zu kombinieren. Dies war vorher aufgrund der unterschiedlichen Eigenschaften der jeweiligen Konfiguration äußerst schwierig.

Der Worm startet nach dem Zufallsprinzip auf einem beliebigen Gitterpunkt. Dieser darf dabei jedoch kein Part einer Fermionen Schleife sein. Sobald der Worm zum Ausgangspunkt zurückkehrt, wird der Worm abgebrochen. Dadurch ist eine geschlossene Kontur entstanden, indem es unbesetze Links und Links mit Dimeren gibt.

Innerhalb der Kontur, kann nun geupdatet werden.

Beim Worm-Update gibt es hier zwei Arten von Updates [3], ein Mesonisches-Update und ein Monomer-Dimer-Update.

<u>Mesonisches Update</u>: Der mesonische Worm ändert nicht das Vorzeichen einer Konfiguration, dadurch können die Gitterpunkte in aktiv x_a und passiv x_p zerlegt werden. Die Zustandssumme (77) kann somit aufgesplittet werden zu

$$Z = \sum_{n,m,k} \prod_{y} (2am)^{n_y} \prod_{x} (2am)^{n_x} \sigma(n,m,k).$$
(77)

Dabei ist der erste Gitterpunkt, der ausgewählt wird der aktive Gitterpunkt. Ist dieser gerade, werden alle weiteren geraden Gitterpunkte ebenfalls als aktiv beschrieben. Die ungeraden Gitterpunkte werden zu passiven. Dasselbe Prinzip gilt, wenn der erste Gitterpunk ungerade ist, dann sind alle ungeraden Gitterpunkte aktiv und alle geraden passiv.

Im ersten Schritt des Updates werden der Worm-Head und -Tail beim Gitterpunk x in Form von Monomeren platziert. Aufgrund einer Zwangsbedingung der Monomere

$$n_x + \sum_{\mu=0,..\pm 4} m_\mu = N$$
(78)

müssen Head und Tail getrennt werden.

Dies ist möglich durch die Löschung eines Dimers in Richtung ν mit $m_{\mu} \neq 0$ und durch die Erhöhung der Monomerzahl $n_x \rightarrow n_x + 1$ bzw. $n_{x+\nu} \rightarrow n_{x+\nu} + 1$.

Im nächsten Schritt beschreibt der Gitterpunk $x + \mu$ den passiven Gitterpunkt. Das Update ändert hierbei den Zustand des Gitterpunktes durch die Auswahl einer Richtung ρ .

Im letzten Schritt des Updates, wird der Gitterpunkt $x + \mu + \rho$ als aktiv bezeichnet. Dieser hat die Möglichkeit, aufgrund, dass nur die Startstelle x ein Monomer trägt, den Pfad durch Löschung eines Monomers zu schließen. Wählt man diesen Schritt, wird das Update beendet. Um den Worm weiter zu führen, muss eine ausgehende Richtung durch $\mu \neq \rho$ gewählt werden. Dadurch wird die Rückverfolgung ausgeschlossen, da Schritte in Richtung $-\rho$ weggelassen werden. Damit wird das Update mit einer neuen Auswahl einer Richtung vom passiven Gitterpunkt fortgeführt.

Monomer-Dimer Update: Entlang der Kontur werden die Dimere vernichtet und die leeren Links mit Dimeren aufgefüllt. Dabei werden auch Paare von zwei horizontalen Nachbar-Dimeren zu einem vertikalen Paar rotiert und umgekehrt.

Dieses Update ändert nichts am relativen Boltzmanngewicht, jedoch macht der Dimer-Worm den Algorithmus ergodisch.

3.3.2 Plaquette Update

Beim Plaquette-Update handelt es sich um ein lokales Update. Dabei kann es zu der Situation kommen, dass parallele Dimere durch eine Fermionen Schleife ersetzt werden. Diese Schleife kann

in zwei Orientierung vorkommen und dadurch ändert sich die Plaquette-Besetzungszahl n_p zu $n_p \pm 1$. Die beiden Orientierungen besitzen dieselbe Wahrscheinlichkeit von 1/2.

Es ist auch möglich eine Fermionen Schleife zu einem Dimer-Paar upzudaten. In Abbildung 4 rechts, ist eine solche Situation dargestellt. Hier wird eine Fermionen Schleife mit negativer Besetzungszahl in zwei mögliche Dimer-Paare zerlegt, in ein vertikales und in ein paralleles. Auch hier sind die Wahrscheinlichkeiten wieder jeweils 1/2. Dasselbe Ergebnis erhält man auch bei einer positiv orientierten Fermionen-Schleife.

3.3.3 Detailliertes Gleichgewicht

Die obigen Updates werden in den Metropolis-Hastings-Algorithmus eingebunden. Dieser folgt aus dem detaillierten Gleichgewicht (engl.: detailed balance). Anschaulich besagt die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts, dass in einem dynamischen System der Prozess $C \to C'$ ebenso häufig stattfindet wie der Prozess $C' \to C$. C und C' beschreiben Konfigurationen vor bzw. nach einem Update. Die Häufigkeit des Prozesses $C \to C'$ ist dabei das Produkt aus der Wahrscheinlichkeit, dass Konfiguration C vorliegt (w[C]), multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit, bei der vorgegebenen Dynamik von C nach C' zu gelangen $(P(C \to C'))$.

Kurz gesagt, das detaillierte Gleichgewicht gibt an wieviele Vorwärtsrichtung und wieviele Rückwärtsrichtungen möglich sind.

Im unten dargestellten Beispiel, Abbildung 4, gibt es jeweils 2 Mögliche Hinrichtungen, wie Rückrichtungen, die mit einer Wahrscheinlichkeit von jeweils 1/2 daherkommen.



Abb. 4: Dargestellt ist ein Beispiel für ein mögliches lokales Update. Links: Ein Paar aus parallelen Dimeren wird durch eine Schleife um die Plaquette ersetzt, wobei beide Orientierungen möglich sind. Rechts: Eine Schleife wird durch ein Dimer-Paar ersetzt. Dabei ist eine senkrechte wie waagerechte Ausführung möglich. Sie haben alle dieselbe Wahrscheinlichkeit.[8]

Da die Vorschlagswahrscheinlichkeiten P(C|C') und P(C'|C) nicht immer gleich sind und die Gewichte ebenfalls unterschiedliche Werte annehmen können, wird der Metropolis-Hastings-Algorithmus angewendet. Mathematisch lässt sich dies folgendermaßen ausdrücken.

$$A(C',C) = \min\left(1, \frac{P(C|C')I_{n'_{p}}(\beta)}{P(C'|C)I_{n_{p}}(\beta)}\right)$$
(79)

Dies beschreibt genauer die Akteptanzwahrscheinlichkeit für ein Update. Mit dem Beispiel aus Abbildung 4 bedeutet der obige Ausdruck, dass P(C'|C) die Vorschlagswahrscheinlichkeit für ein C' aus C ist, und P(C|C') ist die Vorschlagswahrscheinlichkeit des umgekehrten Falls. Ausgehend von Abbildung 4 beschreibt C' eines der beiden möglichen Fermionen Loops mit den Besetzungswahrscheinlichkeiten $n_p \pm 1$. Das C ist das Ausgangspaar-Dimer mit der Besetzungszahl n_p . Die Vorschlagswahrscheinlichkeit liegt hier bei 1/2.

 $I_{n'_p}(\beta)$ bzw. $I_{n_p}(\beta)$ ist das relative Gewicht aus (67). Es ändert sich nur im Plaquette-Update und nicht im Monomer-Dimer-Update.

4 Auswertung

Im Folgenden wird nun der Algorithmus ausgewertet. Die Diskussion der Ergebnisse erfolgt durch die Gegenüberstellung der zwei Formalismen Hybrid-Monte-Carlo (HMC) und dem Monomer-Dimer-Polymer (MDP). Über den Worm Algorithmus und dessen Update-Strategien ist es möglich viele verschiedene Observablen zu messen.

Hier von Interesse, dass mittlere Vorzeichen $\langle \sigma \rangle = \frac{Z}{Z_{||}} = \exp(-\Delta f \frac{V}{T})$, das chirale Kondensat $\langle \overline{\psi}\psi \rangle = \frac{1}{V} \frac{\partial log Z}{\partial m_q}$ und die mittlere Plaquette $\langle P \rangle = \frac{1}{NV} \frac{\partial log Z}{\partial \beta}$.

Die mittlere Plaquette und das chirale Kondensat sind in folgender Abbildung 5 dargestellt. Der Crosscheck beläuft sich auf ein 4x4 Gitter für jeweils fünf unterschiedlichen Massen in Abhängigkeit von β .

Zu sehen ist, dass schon mit kleiner Statistik die Datenpunkte von HMC und MDP für beide Observablen übereinstimmen.

Bei der mittleren Plaquette ist zu sehen, dass für immer größer werdenden β die Steigung abnimmt und die fünf Massen anfangen sich zu überlagern. Beim chiralen Kondensat, bilden die Massen m = 0 und m = 2,00 eine Gerade. Die Massen die zwischen den beiden liegen, erfahren eine negative Steigung. Dabei ist zu sehen, je kleiner die Masse, desto größer ist die Steigung.



Abb. 5: *Links:* Die mittlere Plaquette als Funktion von β für MDP vs. HMC für Massen zwischen m = 0 und m = 2. *Rechts:* Chirales Kondensat MDP vs. HMC

4.1 Numerischer Vergleich zwischen der trunkierten Taylorentwicklung und der Charakterentwicklung und dessen Vorzeichenproblem

Im Folgenden, wird der numerische Vergleich zwischen trunkierter Taylorentwicklung und der Charakterentwicklung betrachtet. Der Vergleich erfolgt für vier unterschiedliche Massen in Abhängigkeit von β . Das Gitter hat eine Größe von 16×16 , ähnlich zu SU(3). Die Auswertung geht diesmal über die mittlere Plaquette, das chirale Kondensat und das mittlere Vorzeichen.

Zunächst erfolgt eine Betrachtung der mittleren Plaquette. In Abbildung 6 ist zu sehen, dass hier alle vier Massen mit größer werdenden β etwa gleich stark ansteigen. Des Weiteren stimmen die Ergebnisse von der Charakterentwicklung (-) und der trunkierten Taylorentwicklung (--) überein.

Für das chirale Kondensat sieht das ganze schon anders aus, hier gibt es eine negative Steigung für alle Massen mit größer werdenden β . Je größer die Masse um so näher sind die Ergebnisse von trunkierter Taylorentwicklung und der Charakterentwicklung. Allgemein gehen die Ergebnisse der beiden Algorithmen ab einem β -Wert von etwa 0,5 auseinander.

Als letztes erfolgt noch die eingehende Betrachtung des mittleren Vorzeichen, dies ist in Abbildung 5 die rechte Graphik. Auch hier gibt es eine negative Steigung für beide Algorithmen. Ausgenommen ist die Masse mit m=0, hier rot dargestellt. Hier stimmen beide Algorithmen überein und stehen bei eins. Von den vier betrachteten Massen, weisen die zwei mittleren Massen m = 0, 20 und m = 0, 50 die größte Diskrepanz zwischen der Charakterentwicklung und der trunkierten Taylorentwicklung, mit größer werdenen β , auf. Zudem ist zu erkennen, dass die trunkierte Taylorentwicklung mit größer werdenden β schneller fällt als die Charakterentwicklung.



Abb. 6: β -Abhängigkeit verschiedener Observablen, für den vollen und trunkierten Fall. Links: Mittlere Plaquette, Mitte: Chirales Kondensat, Rechts: Mittleres Vorzeichen

Was das jetzt genau bedeutet, kann man gut in Abbildung 7 sehen. Diese Abbildung zeigt die schwere des Vorzeichenproblems in Form eines Farbschemas. Sie zeigt die freie Energie Δf als Funktion der Masse und β . Zu sehen ist, dass sich die schwere des Vorzeichenproblems von weiß über blau und grün bis rot entwickelt. Bis $\beta < 0.5$ gibt es kein Vorzeichenproblem, was auch in Abbildung 6 zu erkennen ist. Die schwere des Vorzeichenproblems steigt mit größer werdenden β und kleiner Masse m < 0, 5.



Abb. 7: Zu sehen ist die schwere des Vorzeichens Δf in Abhängigkeit von β und der Masse. Dargestellt in einem Farbschema

Mit diesen Ergebnissen aus Abbildung 6 und Abbildung 7 hat der Algorithmus mit der trunkierte Taylorentwicklung ein größeres Vorzeichenproblem, als der Algorithmus, der die Charakterentwicklung beinhaltet.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Der Hintergrund dieser Masterarbeit ist es ein besseres Verständnis über das Vorzeichenproblem zu erlangen. Dabei wird zunächst in Kapitel 2 auf die benötigten Grundlagen, wie die QED auf dem Gitter und den Kogut-Susskind Fermionen eingegangen. Hierbei werden die Eichwirkung und die Fermionen Wirkung über sogenannte Plaquetten ausgedrückt. Mit diesen Grundlagen wird die duale Darstellung eingeführt, damit ist es möglich neue (duale) Variablen, wie die Elektron-Schleifen, Monomere, Dimere und Plaquettbesetzungszahlen einzubinden.

Der Vorteil dieser dualen Darstellung ist es, dass dadurch das Vorzeichenproblem milder gemacht werden kann. Da in dieser Arbeit, das Schwinger Modell ohne topologischen Term betrachtet wird, gibt es kein Vorzeichenproblem in der ursprünglichen Formulierung. Es zeigt sich jedoch ein Vorzeichenproblem bei den Eichkorrekturen.

Um dies genauer zu betrachten, erfolgt zunächst eine Entwicklung der Eichwirkung durch die Charakterentwicklung. Die Wirkung besteht im Anschluss aus Plaquetten und der modifizierten Besselfunktion erster Art. Auch bei der Entwickling der fermionischen Wirkung, besteht die Wirkung aus dualen Variablen.

Im nächsten Schritt erfolgt die Ausintegration der fermionischen Wirkung und der Eichwirkung. Dadurch erreicht man eine Zustandssumme die aus dualen Variablen besteht und ein Vorzeichen aufweist.

Dieses Vorzeichen gilt es nun zu Untersuchen. Dies geschieht durch den in Kapitel 3 angegebenen Worm Algorithmus. Dieser wird mittels eines mesonischen Updates und einem Monomer-Dimer-Update geupdatet. Zusätzlich wird noch ein lokales Update, dem Plaquette Update, eingebunden. Aus den Ergebnissen, wie in Kapitel 4 zu entnehmen, ist zu erkennen, dass die Charakterentwicklung gegenüber der Taylorentwicklung ein milderes Vorzeichenproblem aufweist. Demnach ist zu entnehmen, dass die Charakterentwicklung ein besseres Mittel darstellt, um das Vorzeichenproblem zu minimieren.

Aufgrund dieser Ergebnisse für U(1), ist es zu überlegen, wie dies auf SU(3) übertragbar ist. Dabei hat die Charakterentwicklung für SU(3) folgendendes aussehen

$$u(\beta) = \frac{\sum_{n=-\infty}^{\infty} D_n^{(3,f)}(\frac{\beta}{N_c})}{\sum_{n=-\infty}^{\infty} D_n^{(3,e)}(\frac{\beta}{N_c})}.$$

Die darin enthaltenen Bessel-Determinanten sind gegeben durch

$$D_n^{(3,e)} = \begin{vmatrix} I_n & I_{n+1} & I_{n+2} \\ I_{n-1} & I_n & I_{n+1} \\ I_{n-2} & I_{n-1} & I_n \end{vmatrix}, D_n^{(3,f)} = \begin{vmatrix} I_{n+1} & I_{n+2} & I_{n+3} \\ I_{n-1} & I_n & I_{n+1} \\ I_{n-2} & I_{n-1} & I_n \end{vmatrix}.$$

Dies in einen Worm Algorithmus zu implementieren erweist sich als schwierig. Ein ähnliche Vorgehen ist für SU(N) in [4] zu sehen.

6 Appendix

6.1 Bestimmung des Maßes

Zur Bestimmung des Maßes, wird zunächst angenommen, dass die Eigenzustände des eichinvarianten Dirac-Operator gelöst werden kann

$$i \mathcal{D} \phi_k(x) = i \gamma^\mu \left(\partial_\mu + i e \gamma_5 \partial_\mu \left(n \epsilon \right) - i e \gamma_5 \eta \right) \phi_k(x) \tag{80}$$

$$=\lambda_k\phi_k(x)\tag{81}$$

Dabei entspricht λ den Eigenwerten und ϕ den Eigenzuständen des Operators. Zur Vereinfachung gilt zudem, dass es sich hier um diskrete Zustände handeln und diese eine orthonormale Basis bilden.

$$\int d^2 x_E \phi_k^{\dagger}(x) \phi_m(x) = \delta_{km} \tag{82}$$

$$\sum_{k} \phi_k(x) \phi_k^{\dagger}(y) = \delta^2(x-y)$$
(83)

Mit diesen Eigenschaften, können nun die Grassmann-Variablen Ψ und $\overline{\Psi}$ entwickelt werden.

$$\Psi(x) = \sum_{m} a_m \Phi_m(x) \tag{84}$$

$$\overline{\Psi}(x) = \sum_{m} b_m \Phi_m^{\dagger}(x) \tag{85}$$

Damit ergibt sich für das Maß

$$D\overline{\Psi}D\Psi = \prod_{m} db_{m}da_{m} \tag{86}$$

wobei sich $\Psi(x)$ nach

$$\Psi(x) \to \Psi'(x) = \sum_{m} \langle x|m \rangle \langle m|c|\Psi \rangle = \sum_{m,l} \langle x|m \rangle \langle m|c|l \rangle \langle l|\Psi \rangle$$
(87)

$$=\sum_{m}a'_{m}\phi_{m}(x) \tag{88}$$

$$=\sum_{m,l}c_{m,l}a_l\phi_m(x) \tag{89}$$

 mit

$$c_{m,l} = < m|c|l> \tag{90}$$

$$= \int d^2x d^2x' < m |x| > < x|c|x'| > < x'|l| >$$
(91)

$$= \int d^2x d^2x' \phi_m^{\dagger}(x) c(x, x') \phi_l(x') \tag{92}$$

transformiert.

Die chirale Transformation ist eine lokale transformation, so dass auch c(x, x') eine lokale Funktion ist

$$\Psi'(x) = c(x)\Psi(x) = 1 - ie\gamma_5\epsilon\Psi \tag{93}$$

Daraus folgt für $c_{m,l}$

$$c_{m,l} = \int d^2x d^2x' \phi_m^{\dagger}(x) c(x, x') \phi_l(x)$$
(94)

$$= \int d^2x d^2x' \phi_m^{\dagger}(x) c(x) \delta(x-x') \phi_l(x') \tag{95}$$

$$= \int d^2x \phi_m^{\dagger} c(x) \phi_l(x) \tag{96}$$

$$= \int d^2x \phi_m^{\dagger}(x) (1 - ie\gamma_5 \epsilon) \phi_l(x) \tag{97}$$

$$=\delta_{ml} - ie \int d^2 x \epsilon(x) \phi_m^{\dagger} \gamma_5 \phi_l(x)$$
(98)

Literatur

- [1] Symmetrien in der Physik, chapter 12. Wipf, Andreas, 2019.
- [2] A. Das. <u>Field Theory: A Path Integral Approach (2nd Edition)</u>. World Scientific Lecture Notes In Physics. World Scientific Publishing Company, 2006.
- [3] Michael Verfasser Fromm. Lattice qcd at strong coupling, 2010.
- [4] G. Gagliardi and W. Unger. New dual representation for staggered lattice qcd. <u>Physical</u> Review D, 101(3), Feb 2020.
- [5] Christof Gattringer, Thomas Kloiber, and Vasily Sazonov. Dual representation for massless fermions with chemical potential and u(1) gauge fields, 2015.
- [6] Christof Gattringer and Christian B. Lang. <u>Quantum chromodynamics on the lattice</u>, volume 788. Springer, Berlin, 2010.
- [7] Christof Gattringer and Kurt Langfeld. Approaches to the sign problem in lattice field theory. International Journal of Modern Physics A, 31(22):1643007, Aug 2016.
- [8] Daniel Göschl, Christof Gattringer, Alexander Lehmann, and Christoph Weis. Simulation strategies for the massless lattice schwinger model in the dual formulation. <u>Nuclear Physics</u> B, 924:63–85, Nov 2017.
- W. K. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. Biometrika, 57(1):97–109, 04 1970.
- [10] Nikolay Prokof'ev and Boris Svistunov. Worm algorithms for classical statistical models. Physical Review Letters, 87(16), Sep 2001.
- [11] H.J. Rothe. <u>Lattice Gauge Theories: An Introduction</u>. EBSCO ebook academic collection. World Scientific, 2005.
- [12] Alessandro Sciarra. The fermion doubling issue and the staggering procedure. Technical report, Goethe University, January 2014.
- [13] Leonard Susskind. Lattice fermions. Phys. Rev. D, 16:3031–3039, Nov 1977.
- [14] Ulli Wolff. Strong coupling expansion monte carlo, 2010.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und nur unter Benutzung der angegebenen Hilfsmittel und Quellen verfasst habe. Die Stellen der Arbeit, die anderen Werken entnommen sind, habe ich unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht. Überdies erkläre ich, dass die vorliegende Arbeit noch nicht im Rahmen eines anderen Prüfungsverfahrens eingereicht wurde.

 Datum

Unterschrift