

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	5
1.1 Motivation	5
1.2 Erzwungene Fermionverdoppelungen	8
1.3 Bemerkungen zur Methodik, Überblick	11
2 Die „mean-field“-Approximation im Higgs-Yukawa-Modell mit Spiegelfermionen	13
2.1 Das Higgs-Yukawa-Modell	13
2.2 Die MFA als Variationsprinzip	16
2.3 Die Entwicklungen von $\langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H$	18
2.3.1 Die Hoppingparameterentwicklung für $\lambda = \infty$	18
2.3.2 Die Undurchführbarkeit einer systematischen, inversen HPE .	22
2.3.3 Das Verhalten bei endlichen λ -Werten	28
2.4 Das $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -Modell	38
2.4.1 HPE von $\langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H$	38
2.4.2 Das Verhalten bei endlichen λ -Werten	41
2.5 Wellenfunktionsrenormierung, Masse und Kondensat der Fermionen	46
2.5.1 Zusammenhang der Meßgrößen mit dem Fermionpropagator .	46
2.5.2 Berechnung des Propagators in MFA	48
2.5.3 Korrekturen zur führenden Ordnung der MFA	50
2.5.4 Vergleich mit den MC-Daten	54
2.5.5 Das Fermionkondensat	57
3 Die Fermiondeterminante im U(1)-Modell	59
3.1 Motivation	59
3.2 Realisierung der Determinantenmessung auf dem Computer	60
3.3 Überprüfung des Programms	63
3.4 Ergebnisse	64

4 Numerische Untersuchungen	69
4.1 Allgemeine Bemerkungen	69
4.2 Zwei Simulationsalgorithmen im Vergleich	70
4.3 Monte Carlo Algorithmen mit Fermionen	75
4.4 Ein verallgemeinerter HMC-Algorithmus	78
4.5 Numerische Resultate	79
4.5.1 Vergleich des HCLA mit dem HMCA für verschiedene algorithmische Parameter	79
4.5.2 Numerische Untersuchung zur Verschiebung der Phasengrenzen beim Übergang von zwei zu einem Fermion-Spiegelfermion-Paar	88
4.5.3 Kopplungsschranken im Fall entkoppelter Spiegelfermionen .	90
5 Algorithmische Untersuchungen zur Lösung linearer Gleichungssysteme	99
5.1 Vorbemerkungen	99
5.1.1 Problemstellung	99
5.1.2 Relaxationsalgorithmen	100
5.2 Vorstellung verschiedener Inversionsverfahren	101
5.2.1 Die Methode des steilsten Abstiegs (SD)	101
5.2.2 Die Methode des konjugierten Gradienten (CG)	102
5.2.3 Die Methode des konjugierten Restes (CR) und verwandte .	104
5.2.4 Die Methode des bikonjugierten Gradienten (BCG)	105
5.2.5 Die Methode des minimalen Restes (MR)	106
5.3 „Odd-even-Preconditioning“	108
5.3.1 Realisierung auf dem Computer	109
5.3.2 Numerischer Aufwand	110
5.3.3 Ergebnisse	111
5.4 Preconditioning mit schneller Fouriertransformation	123
5.5 „Educated“ Guess	125
5.5.1 Der „Gottliebtrick“	125
5.5.2 Ratevektor durch Hoppingparameterentwicklung (HPE) . . .	127
5.5.3 Das Rateverfahren mit schneller Fouriertransformation . . .	130

5.6	Rechneranpassungen	131
5.6.1	Anpassung an die CRAY Y-MP	131
5.6.2	Anpassung an die CM-2	132
6	Kopplungsgrenzen im $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$-symmetrischen Higgs-Yukawa-Modell	137
7	Zusammenfassung	143
A	Erwartungswerte und deren Grenzverhalten in der MFA	147
A.1	Erwartungswerte bei divergentem λ	148
A.2	Erwartungswerte bei endlichem λ	148
A.3	Das Grenzverhalten einiger Erwartungswerte	149
A.4	Erwartungswerte im $SU(2)$ -Modell	150
B	Vereinfachung der Spur in der A-B-Darstellung der MFA	152
C	Explizite Berechnung der ersten Koeffizienten der HPE	154
C.1	$\lambda = \infty$	154
C.2	$\lambda < \infty$	155
D	Inversion der Hoppingmatrix	157
D.1	Formale Inversion	157
D.2	Analyse der d -Abhangigkeit	158
D.3	Explizite Berechnung von \bar{H}^{-1} in fuhrender Ordnung von d	159
E	Rechnungen zum Fermionpropagator in der MFA	161
E.1	Summationen uber alle Wege	161
E.2	Einbinden irreduzibler Bausteine	162
F	Ahnlichkeitstransformation der Fermionmatrix fur $G_\psi = G_\chi$	165
G	Konvergenzbeweis fur das BCG-Verfahren	166

1 Einleitung

1.1 Motivation

Zur Vervollständigung unseres heutigen, niederenergetischen Weltbildes im Rahmen der Elementarteilchenphysik bedarf es nach der Entdeckung vieler wesentlicher Ingredientien innerhalb der letzten beiden Dekaden noch wenigstens zweier weiterer Bausteine: des Topquarks und des Higgsbosons. Experimente, die zu deren Erforschung beitragen könnten, sind mit sehr großem Aufwand und entsprechenden Kosten verbunden. Um so wichtiger ist jede Unterstützung, die theoretische Betrachtungen der Konzeptionierung solcher Vorhaben zu geben in der Lage sind.

Derartige Hilfestellungen zu erbringen ist einer der gewichtigsten Gründe für die Beschäftigung mit der Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung. Daneben lassen sich noch eine Reihe weiterer Motive ausmachen, die eng damit zusammenhängen:

1. Die elektroschwache Wechselwirkung ist nach der Gravitation, der ausnahmslos alle Elementarteilchen unterliegen, die universellste Wechselwirkung. An ihr nehmen zumindest sämtliche Fermionen teil, während die starke Wechselwirkung nur die Hadronen beeinflußt. Die Gravitation aber ist bei den heute erreichbaren Energien von ca. 10^2 GeV vernachlässigbar, sie wird vermutlich erst in der Nähe der Planckskala, also bei ca. 10^{19} GeV, relevant.
2. Das Glashow-Weinberg-Salam-Modell [1] der elektroschwachen Wechselwirkung ist nach Maxwells Elektrodynamik wieder eine Theorie, in der zwei bis dahin unabhängig voneinander beschriebene Grundkräfte, die schwache Kraft, im niederenergetischen Bereich durch die V-A-Theorie gut wiedergegeben, und die elektromagnetische Wechselwirkung, Inhalt der QED, zu einer elementaren Kraft vereinigt wurden, und stellt somit einen wichtigen Schritt zur Vereinheitlichung aller Grundkräfte dar.
3. Dem GWS-Modell sind hinsichtlich der experimentellen Bestätigung bislang außerordentliche Erfolge beschieden gewesen:
 - (a) Die Existenz des schwachen, neutralen Stroms durch Austausch eines entsprechenden schwachen, neutralen Bosons, wurde 1973 nachgewiesen [2].
 - (b) Die Existenz des c-Quarks, 1970 im Rahmen dieses Modells gefordert, um strangeness verletzende Übergänge zu vermeiden, konnte in der „Novemberrevolution“ 1974 bestätigt werden [3].
 - (c) 1983 wurden die vorausgesagten Eichbosonen W^\pm und Z entdeckt. Ihre Massen stimmten mit den aufgrund von niederenergetischen Experimenten vorhersagbaren Werten sehr gut überein [4].

Das Hauptargument für das Studium des GWS-Modells ist jedoch, wie angedeutet, darin zu sehen, daß es den masseerzeugenden Sektor und damit die Mehrzahl der freien Parameter des Standardmodells umfaßt. In diesem Sektor erhalten alle massiven Teilchen, und als solche auch das Topquark und das Higgsboson, durch den Mechanismus der spontanen Symmetriebrechung des Higgsfeldes aufgrund der Kopplung an selbiges ihre Massen. Für die Unterstützung der Suche nach diesen beiden Bausteinen durch eine Abschätzung relevanter Energiebereiche ist die Untersuchung des GWS-Modells bzw. seines masseerzeugenden Sektors daher von besonderer Bedeutung.

Eine andere Fragestellung betrifft die Existenz einer vierten Fermionengeneration. Zwar schließen Zerfallsmessungen am Z -Boson eine solche in der bisherigen Form aus [5], aber weitere Generationen mit schwerem Neutrino stehen nicht im Widerspruch zur bisherigen Phänomenologie. [6, 7].

Dasselbe gilt auch für schwere Spiegelfermionen, die sich von ihren fermionischen Partnern in Chiralität und Masse unterscheiden [7, 8]. Ihre Existenz würde bedeuten, daß nur das niederenergetische Spektrum chiral ist, die gesamte Teilchenwelt aber vektorartig.

Die bisherigen Erfolge der GWS-Theorie berechtigen zu der Hoffnung, daß weitere Untersuchungen in den genannten Fällen wichtige Anhaltspunkte liefern können.

Derartige Studien werden durch die große Zahl freier Parameter im GWS-Modell erschwert. So bilden die Eichkopplungen zwischen den Eichfeldern auf der einen und dem Higgs- bzw. den Fermionfeldern auf der anderen Seite sowie die Higgs-selbstkopplung und die Yukawakopplungen der Fermionen an das Higgsfeld schon eine Vielzahl zunächst beliebiger Größen, von denen man hofft, sie bereits durch die Forderung nach innerer Konsistenz der Theorie auf erlaubte Parameterbereiche eingrenzen zu können. Die Komplexität des Modells gebietet hierbei ein schrittweises Vorgehen, d.h. zunächst die Betrachtung bestimmter Teilbereiche. Will man in diesem Zusammenhang den Aspekt der Massenerzeugung durch spontane Symmetriebrechung nicht aus den Augen verlieren, ist die Minimalversion eines solchen Teilbereiches die reine ϕ^4 -Theorie, welche allein das Higgsfeld beschreibt. Diese ist dann in weiteren Schritten um Eichbosonen oder/und Fermionen zu erweitern.

In all diesen Fällen verhindert die unbekannte Higgskopplung die naive Anwendung der Störungstheorie und macht eine nichtperturbative Untersuchung zunächst unumgänglich. Stellt sich im Laufe einer solchen heraus, daß die für die Kopplung erlaubten Werte klein sind, wäre zwar die Anwendung der Störungsrechnung a posteriori gerechtfertigt, die Bestimmung ihres Anwendungsbereichs selbst bleibt jedoch ein nichtperturbatives Problem.

Ein wichtiges Instrumentarium zur Behandlung derartiger Problemstellungen in feldtheoretischen Modellen ist die Regularisierung auf einem Raum-Zeit-Gitter. Diese Methode wurde von K.G.Wilson zur Beschreibung niederenergetischer Aspekte der starken Wechselwirkung eingeführt [9]. Neben analytischen Methoden wie der „mean-field“-Approximation (MFA) oder der Hoppingparameterentwicklung (HPE) gewannen in diesem Rahmen numerische Simulationen mit steigender Computerleistung zunehmend an Bedeutung und bilden heute einen Hauptbestandteil bei den Studien nichtperturbativer Phänomene.

Unter Verwendung der Gitterregularisierung wurden bereits einige Teile des GWS-Modells untersucht:

Für die reine ϕ^4 -Theorie, die im Standardmodell das Higgsfeld beschreibt, trat im Verlaufe dieser Betrachtungen die Eigenschaft der Trivialität zutage [10]. Im Rahmen einer nichtperturbativen Hoppingparameterentwicklung stellte sich heraus, daß die renormierte Kopplung λ_R bei Annäherung an den Phasenübergang, an dem der Kontinuumslimes vollzogen wird, für beliebige Werte der nackten Kopplung λ_0 sehr klein wurde und sich deshalb schließlich der Kontinuumslimes mit Hilfe der Störungsrechnung durchführen ließ. Dabei verschwand die renormierte Kopplung für alle nackten Kopplungen, d.h. die auf dem Gitter noch wechselwirkende ϕ^4 -Theorie wird beim Übergang ins Kontinuum frei. Diese Ergebnisse konnten durch numerische Studien untermauert werden; siehe z.B. [11] und dortige Referenzen sowie Literaturangaben in [10].

In der Folgezeit bis heute ist es eine zentrale Fragestellung, ob sich die Higgskopplung

diese Trivialität auch bei Berücksichtigung weiterer Bestandteile des GWS-Modells bewahrt. Obwohl dies bedeuten würde, daß das GWS-Modell nur eine effektive, d.h. nur bis zu einer bestimmten Energie gültige Theorie wäre, muß Trivialität nicht als Nachteil angesehen werden, erlaubt sie doch die Bestimmung von Massengrenzen für noch nicht entdeckte, aber von der Theorie vorhergesagte Teilchen. Ferner läßt sich auf diese Weise auch die Energieskala abschätzen, bei der neue Physik zu erwarten ist.

Die Betrachtung dieser Eigenschaft gewinnt weiter an Gewicht vor dem Hintergrund, daß man in vier Dimensionen keine Kopplung kennt, die nicht entweder asymptotisch frei oder trivial ist [12].

Ein erster Schritt im Hinblick auf die Erweiterung des Higgssektors zum Standardmodell war die Einbeziehung von Eichfeldern. Perturbative und numerische, nicht-perturbative Studien finden sich z.B. in [13] nebst dortigen Referenzen. Sie lieferten keine Anzeichen für einen nichtperturbativen Fixpunkt, in dem sich eine wechselwirkende Kontinuumstheorie formulieren ließe. In der Umgebung des Gaußschen Fixpunktes selbst änderte die Existenz von Eichfeldern nichts an der Trivialität der Theorie.

Die vorliegende Arbeit hingegen entstand im Rahmen eines Projektes, das sich mit dem Einfluß von Fermionen auf die Eigenschaften des Higgssektors beschäftigt. Dabei hatte man zunächst die Quarkdublette der dritten Fermionengeneration im Auge, da sie aus den beiden schwersten Fermionen, dem Bottom- und dem Topquark bestehen, die aufgrund der mit ihrer großen Masse verbundenen starken Kopplung an das Higgsfeld die größte Auswirkung auf den Higgssektor haben sollten. Die unbekannte und daher möglicherweise sehr große Yukawakopplung des Topquark war ein Grund für die Anwendung nichtperturbativer Methoden. Die innerhalb der hier betrachteten Energiebereichen bis zur elektroschwachen Skala im Vergleich dazu kleinen Kopplungen aller anderen Fermionen und der Eichbosonen können dabei einstweilen vernachlässigt und später mit Hilfe perturbativer Mittel berücksichtigt werden. Ein zweiter Grund liegt in der Higgskopplung, bei der zunächst wieder von beliebigen Werten auszugehen ist, da sich ihr Charakter hinsichtlich der Trivialität durch den Einfluß der Fermionen durchaus ändern kann.

Zwar wurde in der Zwischenzeit die Masse des Topquarks auf konsistente Weise mit Hilfe der Störungsrechnung auf ungefähr 150 GeV geschätzt [14], so daß sich selbst die Auswirkungen dieses schwersten Fermions auf den Higgssektor störungstheoretisch behandeln lassen sollten. Aber die evtl. Möglichkeit einer konsistenten Beschreibung des Standardmodells in einem Rahmen, der über die Störungsrechnung hinausgeht, liefert schon in sich die Motivation für weitere nichtperturbative Untersuchungen. Ferner sind nichtperturbativ bestimmte Grenzen für Massen bzw. Kopplungen von prinzipieller feldtheoretischer Bedeutung. So beantworten sie die für einige mögliche Erweiterungen des Standardmodells relevante Frage, wie schwer Fermionen in einer effektiven Theorie überhaupt werden können, wenn ihre Massen in einem der Störungsrechnung unzugänglichen Bereich liegen und durch Kopplung an ein Skalarfeld entstehen, ohne daß die Theorie inkonsistent wird, also der Cutoff zu nahe an der größten Masse liegt.

Für die nichtperturbativen Studien verbleibt man daher mit dem Higgs-Yukawa-Sektor des schwersten Quarkdublette im Standardmodell und somit einer globalen $SU(2)_L \otimes U(1)_Y$ -Symmetrie. Neben der Reduktion der Menge betrachteter Teilchen ergibt sich durch Gleichsetzen der Yukawakopplungen bzw. Massen für beide Mitglieder des Fermiondublette eine weitere Vereinfachung. In diesem Fall erhält man als globale Symmetrie die $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ -Gruppe. Diese Abwandlung sollte das

Verhalten der Theorie in einigen wesentlichen Punkten unbeeinflußt lassen und daher wichtige Erkenntnisse bereits auf Basis des $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ -Modells erlauben. Insbesondere einige Hauptprobleme bei der Gitterformulierung sind dieser Theorie mit dem Standardmodell gemein:

So erzeugt die spontane Brechung ihrer Symmetrien in beiden Fällen Goldstone-Bosonen, die wegen ihrer verschwindenden Masse auf dem Gitter für große „finite-size“-Effekte sorgen. Sie machen die später einzuführenden Eichfelder massiv. Ferner sind beide Symmetrien chiral, eine Eigenschaft, die eine Formulierung auf dem Gitter besonders erschwert.

Ein wesentliches Merkmal des Standardmodells jedoch geht aufgrund der Pseudorealität der $SU(2)$ bei dieser Vereinfachung verloren: die Existenz von Anomalien. Dies ist bei Verwendung einer noch weiter reduzierten Symmetrie, der $U(1)_R \otimes U(1)_L$ -Gruppe, nicht der Fall. Auch ein solches Modell weist die obengenannten Probleme auf. Hinsichtlich des Aspektes der Anomalien kommt es der Symmetrie des Standardmodells aber noch näher. Zudem lässt es sich aufgrund der, verglichen mit der $SU(2)$ -Version, kleineren Zahl von Freiheitsgraden bei gegebener Rechenzeit ausführlicher untersuchen.

Selbst dann ist das Modell für eine eingehende numerische Untersuchung jedoch noch zu umfangreich. Aus diesem Grund werden zusätzlich die Farbfreiheitsgrade des Quarkdubletts vernachlässigt. Die Einschränkung auf ein Dublett, generell die Beschreibung einer ungeraden Anzahl von Dubletts, bedeutet allerdings im Hinblick auf die möglichen Untersuchungsmethoden keineswegs eine Vereinfachung, sondern ist i.a. mit zusätzlichen Schwierigkeiten verbunden, die bisher dazu führten, daß vornehmlich Modelle mit zwei Fermiondubletts studiert wurden.

1.2 Erzwungene Fermionverdoppelungen

Neben der Renormierbarkeit ist die Anomaliefreiheit der Ströme, die an Eichfelder koppeln, eine zentrale Forderung, die an eine Quantenfeldtheorie zu stellen ist, da diese es andernfalls nicht erlaubt, allen physikalischen Größen endliche Werte beizumessen.

In der Störungsrechnung versteht man unter einer Anomalie einen divergenten Graphen, der sich nicht renormieren lässt, ohne die Symmetrie des Modells zu verletzen, d.h. Counterterme in der Wirkung verursacht, die deren ursprüngliche Symmetrie brechen. Eine Übertragung der Symmetrie der klassischen Wirkung auf die Beziehungen zwischen den quantenmechanischen Greenfunktionen, die Wardidentitäten, wird daher verhindert und die Erhaltung bestimmter Ströme verletzt. Da in einer Störungsrechnung die Divergenzen der Theorie zunächst durch eine Regularisierung beseitigt werden, kann man verallgemeinernd sagen, daß Anomalien dort auftreten, wo sich kein Regulator findet, der die Symmetrie des betrachteten Modells erhält. In diesem Sinne lassen sich Anomalien auch außerhalb der Störungsrechnung erklären. Sinnvolle Theorien sind beim Auftreten von Anomalien demnach nur definierbar, wenn letztere sich gegenseitig aufheben. Eine Anomalie diesen Typs ist die axiale Anomalie des Standardmodells [15]. Bedingung für die gegenseitige Kompensation aller Anomalien im Standardmodell ist das Verschwinden der Ladungssumme über die acht Teilchen einer Generation. In diesem Falle kompensieren die von den Leptonen verursachten Anomalien diejenigen der Quarks [16].

Die Möglichkeit einer Gitterregularisierung, welche die Symmetrie der Wirkung für alle Werte der Gitterkonstanten, also auch im Kontinuumslimes, erhält, steht zu Obigem nur scheinbar im Widerspruch. Denn auch auf dem Gitter lässt sich eine vorgegebene, chiral invariante Theorie unter Wahrung der Symmetrie bei gleichzeitiger

Entfernung der Anomalien nicht formulieren. Da aber die Anomalien verschwinden müssen, ist es entweder die Symmetrie oder die Form der Theorie selbst, die man auf dem Gitter aufzugeben gezwungen ist:

1. Überträgt man die Wirkung einer Theorie mit chiraler Anomalie naiv, d.h. ohne Symmetrieverlust, auf das Gitter, so entstehen durch „Verdopplung“ in vier Dimensionen 15 zusätzliche Fermionen. Dies ist Inhalt des Nielsen-Ninomiya-Theorems [17], welches besagt, daß unter sehr allgemeinen und wünschenswerten Voraussetzungen das Fermionspektrum auf dem Gitter aus Fermion-Spiegelfermion-Paaren besteht. Es handelt sich dabei um links- und rechtshändige Teilchen, welche unter derselben Darstellung der Symmetriegruppe transformieren, so daß die Theorie dort automatisch denselben rechts- wie linkshändigen Inhalt hat und deshalb nicht chiral, sondern vektoriell ist. Jedes dieser Teilchen trägt zur Anomalie bei, und zwar je nach seiner Händigkeit mit verschiedenem Vorzeichen, so daß sich die Beiträge zur Anomalie insgesamt kompensieren. Ein derartiges Vorgehen verändert also die ursprüngliche Form der Theorie, die nun sechzehn Fermionen anstelle eines einzelnen beschreibt. Eine genauere Untersuchung des Zusammenhangs zwischen Fermionverdopplung und chiraler Anomalie findet sich in [18].
2. Das Nielsen-Ninomiya-Theorem macht allerdings keine Aussage über die Kopplung der Fermionen bzw. Spiegelfermionen. Daher besteht die Möglichkeit, die überzähligen Teilchen aus dem Spektrum zu entfernen. Versucht man dies mit Hilfe eines naiven Wilsonterms, der die Massen der Doppler proportional zum Cutoff macht, ist zwar die Form der Theorie gewahrt, da man dann i.a. nur ein Fermion beschreibt, aber die chirale Symmetrie der Wirkung durch den Wilsonterm gebrochen.

Aufbauend auf dieser Erkenntnis wurden im wesentlichen zwei Wege eingeschlagen, die beide durch Einführung eines chiral invarianten Wilsonterms das beschriebene Problem zu umgehen versuchen. Der erste Vorschlag geht zurück auf Smit [19] und Swift [20]. Sie regten an, die chirale Invarianz des naiven Wilsonterms zu erzwingen, indem man an den dafür erforderlichen Stellen ein Skalarfeld mit geeigneten Transformationseigenschaften einführt. Untersuchungen in diesem Modell ergaben, daß es bei geeigneter Wahl der dadurch eingeführten Wilson-Yukawa-Kopplung zwar gelang, die unerwünschten Doppler schwer zu machen, gleichzeitig aber das verbleibende Fermion im Kontinuumslimes nicht mehr zu wechselwirken schien [21]. Eine Beschreibung des Higgs-Yukawa-Sektors mit Hilfe der Wilson-Yukawa-Kopplung ist daher nicht zu erwarten.

Ein zweiter Versuch besteht in der expliziten Einführung von Spiegelfermionen [22]. Er beruhte auf der Feststellung, daß Spiegelfermionen nicht nur über die auf Anomalie basierende Fermionverdopplung ins Spiel kommen, sondern unter bestimmten Voraussetzungen auch dynamisch als Bindungszustände erzeugt werden können [23], d.h. eine Entkopplung der Doppler mit Hilfe des naiven Wilsonterms gelänge in diesen Fällen nur zum Teil, da ein Spiegelfermion im Spektrum verbleibt. Sind Spiegelfermionen aber in der Theorie ohnehin vorhanden, scheint es besser zu sein, sie explizit als elementare Felder in die Wirkung einzuführen. Über die eigenen Kopplungen sollte sich ihr Verhalten dann direkter und damit leichter kontrollieren lassen.

Die Entkopplung der nun 30 Doppler im Sinne Wilson's entpuppte sich als problemlos. Für die Entfernung des danach noch verbleibenden Spiegelfermions aus dem Spektrum gibt es, nach Einstellen des Mischungswinkels zwischen Fermion und

Spiegelfermion auf Null durch geeignete Wahl einiger Parameterwerte, im Prinzip zwei Szenarien:

1. Eine Möglichkeit basiert darauf, das Spiegelfermion wie die Doppler schwer zu machen. Dazu muß die renormierte Yukawakopplung des Spiegelfermions hinreichend groß werden können. Dem sind in einer trivialen Theorie allerdings Grenzen gesetzt, so daß dort die Spiegelfermionen als neue Physik bei höheren Energien im Spektrum verbleiben würden.
2. Ein anderes Verfahren beruht auf der Golterman-Petcher-Shiftsymmetrie [24] und besteht darin, Masse und Kopplung des Spiegelfermions zum Verschwinden zu bringen und es damit gänzlich aus dem Spektrum zu entfernen. Aufgrund der Golterman-Petcher-Shiftsymmetrie läßt sich ein so gearteter Fall über die nackten Parameter der Theorie sehr leicht einstellen. Dieser Vorschlag wird u.a. auch in der vorliegenden Arbeit aufgegriffen. Der Nachteil einer solchen Vorgehensweise liegt in der Brechung der Golterman-Petcher-Shiftsymmetrie durch die Eichfelder, so daß der Anwendungsbereich auf eichfeldfreie Modelle beschränkt ist.

Neben der über die chirale Anomalie physikalisch motivierten Verdopplung der Fermionen trat in den bisherigen Arbeiten dieses Projektes immer auch eine Verdopplung rein technischen Ursprungs auf: In Monte Carlo-Simulationen von Theorien mit Fermionen werden deren Grassmannintegrale aufgrund des andernfalls auftretenden Minuszeichenproblems [25] in der Regel explizit ausgeführt. Bei Verwendung des Hybrid-Monte Carlo-Algorithmus (HMCA) wird die daraus resultierende Fermiondeterminante $\det Q$ dann mit Hilfe sogenannter Pseudofermionen als Integral über kommutierende Felder berücksichtigt. Die letztgenannte Vorgehensweise führt nur dann zum Ziel, wenn die Realteile aller Eigenwerte der Fermionmatrix Q positiv sind. Da es im allgemeinen Fall dafür keinen Grund gibt, betrachtet man anstelle von Q die selbstadjungierte Matrix Q^+Q , deren positive Definitheit sichergestellt ist. Dies entspricht einer Verdopplung der Fermionzahl, bei der die „technischen“ Doppler im Vergleich zu den ursprünglichen Teilchen entgegengesetzte Chiralität aufweisen. Auch im Falle einer gelungenen Entkopplung des Spiegelfermions verbleibt man deshalb mit einem Teilchenpaar aus einem Fermion und dessen „technischem“ Doppler. Eine Möglichkeit, den Fermioninhalt der Theorie ohne technische Verdopplung zu berücksichtigen, besteht darin, die Fermiondeterminante als einen hochgradig nichtlokalen Anteil der effektiven Wirkung aufzufassen. Für die numerische Simulation wird sie damit zu einem Teil des Integrationsmaßes. Voraussetzung für eine Statistik mit akzeptablen Fehlern ist daher eine nicht zu große Fluktuation der Determinante in der komplexen Ebene.

Die Untersuchungen im Rahmen des Projektes mit Spiegelfermionen für den Fall einer geraden Anzahl von Dubletts sind im wesentlichen abgeschlossen [22, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33]. Es zeigte sich, daß man den Higgs-Yukawa-Sektor mit Hilfe der Spiegelfermionen auf dem Gitter studieren kann, da sie und die Doppler entkoppeln. Dies gelang allerdings nur im oben angegebenen zweiten Fall und ist daher nicht auf Theorien mit Eichfeldern zu verallgemeinern. Die numerischen Resultate sind konsistent mit denen der Störungsrechnung erster Ordnung und deuten somit auf eine triviale Theorie auch unter Einschluß schwerer Fermionen hin.

Ein Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, eine ähnliche Untersuchung für den Fall einer ungeraden Zahl von Fermionen (hier ein Fermion im U(1)-symmetrischen Modell) vorzubereiten und, soweit es die verfügbare Rechenzeit zuläßt, durchzuführen. Im

Rahmen dieser Studien soll ein Monte Carlo-Verfahren auf seine Anwendbarkeit hinsichtlich der Betrachtung physikalisch interessanter Fragestellungen geprüft werden. Begleitend dazu werden analytische Untersuchungen angestellt. Sie sollen u.a. die numerischen Arbeiten erleichtern und deren Resultate kontrollieren helfen.

1.3 Bemerkungen zur Methodik, Überblick

Mißt man den Wert einer Theorie an ihrem Bezug zur Realität, so sind vor allem ihre experimentell zugänglichen Vorhersagen von Bedeutung. In einer Quantenfeldtheorie sind dies die Erwartungswerte. Sie haben im euklidischen Pfadintegralformalismus die allgemeine Form:

$$\langle \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int D\phi e^{-S(\phi)} \Omega(\phi), \quad \text{mit } Z = \int D\phi e^{-S(\phi)}. \quad (1)$$

S ist eine von der Feldkonfiguration ϕ abhängige Wirkung, welche die Theorie charakterisiert. Nur in Ausnahmefällen ist die vollständige analytische Berechnung eines solchen unendlichdimensionalen Integrals durchführbar. Erlaubt die Problemstellung zudem nur eine nichtperturbative Behandlung, so stellt der Übergang vom Kontinuum auf ein Raum-Zeit-Gitter ein geeignetes Mittel dar, die Integrale sowohl endlichdimensional als auch konvergent zu machen. Der in diesen Fällen später wieder auszuführende Kontinuumslimes bildet dann ein weiteres Problem, dem hier allerdings geringere Bedeutung beigemessen wird. Es geht vielmehr zunächst darum, Schwierigkeiten zu bewältigen, die bei Untersuchungen auf dem Gitter selbst auftreten. Dort ist der Erwartungswert jetzt durch ein N -dimensionales Integral gegeben:

$$\langle \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \left(\prod_{x=1}^N \int d\phi_x \right) e^{-S(\phi_x)} \Omega(\phi_x) \quad \text{mit } Z = \left(\prod_{x=1}^N \int d\phi_x \right) e^{-S(\phi_x)}, \quad (2)$$

für dessen Bestimmung sich zwei grundverschiedene Möglichkeiten anbieten. Zum einen besteht die Option einer analytischen Rechnung. Dazu ist in der Regel eine Entwicklung oder andersartige Näherung der Exponentialfunktion erforderlich; Beispiele dafür sind etwa die „mean-field“-Approximation sowie die Hoch- und Tieftemperaturrentwicklung. All diesen Methoden ist gemein, daß sie die zugrundeliegende Physik nur in Grenzfällen sehr kleiner oder großer Parameterwerte gut beschreiben. Interessiert man sich für den Zwischenbereich, ist man gezwungen, auf numerische Verfahren zur Berechnung solcher Integrale auszuweichen. Da es sich auch nach der Gitterregularisierung noch um hochdimensionale Integrale handelt, verwendet man dazu Monte Carlo-Methoden.

Diesem allgemeinen Schema ordnet sich auch die vorliegende Arbeit unter: Im zweiten Kapitel wird mit Hilfe der „mean-field“-Approximation der Phasenraum des Higgs-Yukawa-Modells mit expliziten Spiegelfermionen für die $U(1)_L \otimes U(1)_R$ - und die $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ -Symmetrie untersucht.

Die Festlegung der Phasengrenzen dient dazu, den in numerischen Simulationen für einen späteren Kontinuumslimes relevanten Bereich abzuschätzen und soll daher u.a. die numerischen Rechnungen für eine ungerade Zahl von Fermionen vorbereiten. Die Qualität der „mean-field“-Resultate wird durch einen Vergleich mit numerischen Ergebnissen früherer Rechnungen im Falle einer geraden Zahl von Fermionen überprüft. Zusätzlich werden einige fermionische Meßgrößen berechnet.

Das dritte Kapitel betrachtet den im Higgs-Yukawa-Modell mit $U(1)$ -Symmetrie

bei Berechnung von Erwartungswerten als Fermiondeterminante auftretenden fermionischen Anteil des Integralmaßes. Die Resultate zeigen, daß er im wesentlichen reell ist und erlauben daher im Rahmen von Monte Carlo-Rechnungen eine einfache Simulation dieses Anteils, die auch die Beschreibung einer ungeraden Anzahl von Fermionen auf dem Gitter zuläßt.

Die Untersuchung einer dafür geeigneten Methode, des Hybrid-Classical-Langevin-Algorithmus (HCLA) und ein Vergleich mit dem bisher genutzten Hybrid-Monte Carlo-Verfahren findet sich in Kapitel 4. Unter Verwendung des Hybrid-Classical-Langevin-Algorithmus werden dort die in der „mean-field“-Approximation zu erkennenden Verschiebungen der Phasengrenzen beim Übergang von zwei zu einem Fermiondublett numerisch nachvollzogen. Für den Fall der Golterman-Petcher-Shiftsymmetrie wird ferner die Verwendbarkeit des Hybrid-Classical-Langevin-Algorithmus zur Bestimmung von Grenzen des erlaubten Parameterbereichs der renormierten Higgsselbstkopplung in Abhängigkeit von der renormierten Yukawa-kopplung des Fermions untersucht.

In beiden Monte Carlo-Algorithmen bilden Matrixinversionen hinsichtlich des Verbrauchs an Computerzeit – über 90 Prozent der Rechenleistung müssen darauf verwendet werden – den bei weitem bedeutendsten Anteil. Bei den sehr rechenzeitintensiven Untersuchungen, die für die Bestimmung physikalisch relevanter Größen erforderlich sind, ist daher ein für den speziellen Fall (Parametersatz der Theorie) optimiertes Inversionsverfahren von großer Bedeutung. Umfangreiche Untersuchungen dazu finden sich in Kapitel 5.

Im letzten Kapitel sind die aktuellsten numerischen Ergebnisse des Higgs-Yukawa-Projektes kurz zusammengefaßt. Sie betreffen u.a. einige bereits in Kapitel 4 ange deutete Fragestellungen. Die zu ihrer Erstellung verwendeten Computerprogramme stützen sich hinsichtlich der Matrixinversion auf die in Kapitel 5 dokumentierten Erfahrungen.

2 Die „mean-field“-Approximation im Higgs-Yukawa-Modell mit Spiegelfermionen

2.1 Das Higgs-Yukawa-Modell

Abgesehen vom fünften Kapitel über Programmoptimierungen wurde in dieser Arbeit zunächst immer das Higgs-Yukawa-Modell mit $U(1)_R \otimes U(1)_L$ -Symmetrie betrachtet, da es das einfachste derartiger Modelle mit Spiegelfermionen darstellt. Eine Übertragung der angewandten Techniken auf das $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -Modell bereitete dann keine prinzipiellen Schwierigkeiten mehr. Aus diesem Grunde sollen nun die wesentlichen Definitionen für den $U(1)$ -Fall erläutert werden (vgl. [28]).

Die Forderung nach chiraler $U(1)_R \otimes U(1)_L$ -Symmetrie bedeutet Einschränkungen für die Wirkung, die das Modell beschreiben soll. So darf sie z.B. keinen diagonalen, d.h. in den einzelnen Feldern bilinearen, Massenterm für die Fermionen enthalten, da dieser die chirale Symmetrie explizit bricht.

Mögliche Terme der Wirkung ergeben sich aus den Transformationseigenschaften der (Spiegel)Fermionen. Bezeichnet man diese im folgenden mit $(\chi)\psi$ und schreibt die Transformationen aus $U(1)_{L/R}$ als $e^{-i\alpha_{L/R}}$, so resultiert für die (Spiegel)Fermionen das Transformationsverhalten

$$\psi_{L,R} \rightarrow e^{-i\alpha_{L,R}} \psi_{L,R}, \quad \chi_{L,R} \rightarrow e^{-i\alpha_{R,L}} \chi_{L,R}. \quad (3)$$

Damit ist klar, wie sich auf dem Gitter ein Wilsonterm zur Entfernung von Fermion-dopplern aus dem physikalischen Spektrum in chiral invariante Weise einführen lässt. Die Beziehungen in (3) erlauben neben den üblichen Termen einer chiral invarianten Higgs-Yukawa-Wirkung für ψ und χ die Definition eines bilinearen, fermionischen Mischterms. Spaltet man die Wirkung in einen rein fermionischen, einen bosonischen und einen Yukawaanteil auf, $S^c = S_F^c + S_B^c + S_Y^c$, so lautet sie im euklidischen Kontinuum:

$$\begin{aligned} S_F^c &= \int d^4x \left\{ \bar{\psi}_0(x) \not{\partial} \psi_0(x) + \bar{\chi}_0(x) \not{\partial} \chi_0(x) + \mu_0 [\bar{\chi}_0(x) \psi_0(x) + \bar{\psi}_0(x) \chi_0(x)] \right\} \\ S_B^c &= \int d^4x \left\{ (\partial_\mu \phi_0(x))^+ (\partial_\mu \phi_0(x)) + m_0^2 \phi_0^+(x) \phi_0(x) + \frac{\lambda_0}{6} (\phi_0^+(x) \phi_0(x))^2 \right\} \\ S_Y^c &= \int d^4x \left\{ G_{0\psi} \bar{\psi}_0(x) [\phi_{01}(x) - i\gamma_5 \phi_{02}(x)] \psi_0(x) + \right. \\ &\quad \left. G_{0\chi} \bar{\chi}_0(x) [\phi_{01}(x) + i\gamma_5 \phi_{02}(x)] \chi_0(x) \right\} \end{aligned} \quad (4)$$

mit $\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{01} + i\phi_{02})$.

S_F^c enthält neben dem Mischterm mit der Mischmasse μ_0 die rein kinetischen Terme für ψ_0 und χ_0 . Der skalare Anteil S_B^c ist der für ein geladenes, d.h. komplexes, Higgsfeld ϕ_0 mit $U(1)$ -Symmetrie übliche. Er umfaßt den kinetischen Term, den Massenterm ($\propto m_0^2$) sowie die Selbstwechselwirkung ($\propto \lambda_0$). Der Yukawabeitrag S_Y^c sorgt schließlich für die Kopplung des Higgsfeldes an die Fermionen, so daß letztere in der spontan gebrochenen Phase auch für $\mu_0 = 0$ massiv werden. Ihre Massen sind dann proportional zu den jeweiligen Kopplungsstärken.

Durch S_Y^c ist auch das Transformationsverhalten des Skalarfeldes unter der $U(1)_L \otimes U(1)_R$ -Gruppe festgelegt, denn die gesamte Wirkung ist nur invariant, falls bei Transformation der folgende Zusammenhang besteht:

$$\phi_0 \rightarrow e^{-i(\alpha_L - \alpha_R)} \phi_0. \quad (5)$$

Vor Übertragung dieser Wirkung auf das Gitter ist es üblich, die Felder und Koppungen zu reskalieren. Mit

$$\psi_0 \equiv \sqrt{2K_\psi}\psi, \quad \chi_0 \equiv \sqrt{2K_\chi}\chi, \quad \phi_0 \equiv \sqrt{\kappa}\phi \quad (6)$$

und

$$\mu_0 \equiv \frac{\mu_{\psi\chi}}{\sqrt{4K_\psi K_\chi}}, \quad G_{0\psi} \equiv \frac{G_\psi}{2K_\psi\sqrt{2\kappa}}, \quad G_{0\chi} \equiv \frac{G_\chi}{2K_\chi\sqrt{2\kappa}} \quad (7)$$

sowie

$$m_0^2 \equiv \frac{\mu_\phi}{\kappa} - 8, \quad \lambda_0 \equiv \frac{6\lambda}{\kappa^2} \quad (8)$$

lauten die entsprechenden Ausdrücke der Gitterwirkung einschließlich des Wilsontermes ($\propto K_r$) für den fermionischen Teil:

$$\begin{aligned} S_F = & \sum_x \left\{ \mu_{\psi\chi} [(\bar{\chi}_x \psi_x) + (\bar{\psi}_x \chi_x)] - \sum_\mu [K_\psi (\bar{\psi}_{x+\hat{\mu}} \gamma_\mu \psi_x) + K_\chi (\bar{\chi}_{x+\hat{\mu}} \gamma_\mu \chi_x)] \right. \\ & \left. - \sum_\mu K_r [(\bar{\chi}_{x+\hat{\mu}} \psi_x) - (\bar{\chi}_x \psi_x) + (\bar{\psi}_{x+\hat{\mu}} \chi_x) - (\bar{\psi}_x \chi_x)] \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

für den bosonischen Beitrag:

$$S_B = \sum_x \left\{ \mu_\phi \phi_x^+ \phi_x + \lambda (\phi_x^+ \phi_x)^2 - \kappa \sum_{x,\mu} \phi_{x+\hat{\mu}}^+ \phi_x \right\} \quad (10)$$

und für den Yukawaanteil:

$$S_Y = \sum_x \left\{ G_\psi [\bar{\psi}_x (\text{Re}(\phi_x) - i\gamma_5 \text{Im}(\phi_x)) \psi_x] + G_\chi [\bar{\chi}_x (\text{Re}(\phi_x) + i\gamma_5 \text{Im}(\phi_x)) \chi_x] \right\}. \quad (11)$$

Dabei läuft μ über die $2d$ Richtungen der nächsten Nachbarn eines Punktes im d -dimensionalen hyperkubischen Gitter, und x steht für die Gitterpunkte.

Zu klären ist noch die Form der euklidischen γ -Matrizen. In der oben verwendeten chiralen Basis haben sie die Gestalt:

$$\gamma_\mu = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_\mu \\ \bar{\Sigma}_\mu & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \quad (12)$$

mit $\Sigma_\mu = -\bar{\Sigma}_\mu = -i\sigma_\mu$ für $\mu = 1, 2, 3$ und $\Sigma_4 = \bar{\Sigma}_4 = \mathbb{I}$; für negative Indices gilt $\Sigma_\mu = -\Sigma_{-\mu}$.

Durch die Wahl einer für numerische Zwecke geeigneten Normierung der Felder, erhält man zwischen den Parametern der Wirkung folgende Relationen:

$$\mu_\phi = 1 - 2\lambda, \quad K_\psi = K_\chi \equiv K, \quad K_r \equiv rK, \quad \bar{\mu} \equiv \mu_{\psi\chi} + 8rK = 1. \quad (13)$$

(Bei analytischen Untersuchungen, insbesondere in der Störungsrechnung, erweisen sich andere Beziehungen als geeigneter.) Setzt man den Wilsonparameter $r = 1$ – für diesen Fall ist die Osterwalder-Schrader-Positivität bewiesen [29] –, verbleiben also fünf freie Parameter: die Hoppingparameter κ, K , die Higgsselbstkopplung λ und die Yukawakopplungen G_ψ, G_χ .

Eine Zusammenfassung von Fermion und Spiegelfermion in $\Psi_y = (\psi_y, \chi_y)$ verleiht der Wirkung nunmehr nachstehende Form:

$$S = \sum_x \left[\phi_x^+ \phi_x + \lambda (\phi_x^+ \phi_x - 1)^2 - \kappa \sum_\mu \phi_{x+\hat{\mu}}^+ \phi_x \right] + \sum_{xy} \bar{\Psi}_y Q(\phi)_{yx} \Psi_x. \quad (14)$$

Die hier verwendete Fermionmatrix $Q(\phi)_{yx}$ ist in chiraler Darstellung und $2 \otimes 2$ -Blocknotation gegeben durch

$$Q(\phi)_{yx} = \delta_{yx} \begin{pmatrix} G_\psi \phi_x^+ & 0 & \bar{\mu} & 0 \\ 0 & G_\psi \phi_x & 0 & \bar{\mu} \\ \bar{\mu} & 0 & G_\chi \phi_x & 0 \\ 0 & \bar{\mu} & 0 & G_\chi \phi_x^+ \end{pmatrix} - K \sum_{\mu} \delta_{y,x+\hat{\mu}} \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_{\mu} & r & 0 \\ \bar{\Sigma}_{\mu} & 0 & 0 & r \\ r & 0 & 0 & \Sigma_{\mu} \\ 0 & r & \bar{\Sigma}_{\mu} & 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Eine andere Darstellung, die in analytischen Rechnungen wie der HPE Verwendung findet, ist die A-B-Formulierung:

Nach Definition der chiralen Projektoren $P_L \equiv \frac{1}{2}(1 + \gamma_5)$, $P_R \equiv \frac{1}{2}(1 - \gamma_5)$, folgt sie aus der chiralen Darstellung durch Transformation mit

$$U = \begin{pmatrix} P_L & P_R \\ P_R & P_L \end{pmatrix}.$$

Mit $(\psi_A, \psi_B)^T \equiv U(\psi, \chi)^T$ ergibt sich also

$$\psi_A \equiv \psi_L + \chi_R, \quad \psi_B \equiv \psi_R + \chi_L. \quad (16)$$

In dieser Darstellung wird die Fermionmatrix bei verschwindender Yukawakopplung blockdiagonal bzgl. der ψ_A, ψ_B -Felder, und in $4 \otimes 4$ -Blocknotation bekommt man für $\bar{\mu} = 1$ die Relation:

$$\begin{aligned} \bar{Q}(\phi)_{yx} &\equiv \bar{U}^+ Q(\phi)_{yx} U \\ &= \begin{pmatrix} \delta_{yx} - K \sum_{\mu} \delta_{y,x+\hat{\mu}} (\gamma_{\mu} + r) & \delta_{yx} \phi_x (G_{\alpha} - \gamma_5 G_{\beta}) \\ \delta_{yx} \phi_x^+ (G_{\alpha} + \gamma_5 G_{\beta}) & \delta_{yx} - K \sum_{\mu} \delta_{y,x+\hat{\mu}} (\gamma_{\mu} + r) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (17)$$

Die darin auftretenden, neuen Kopplungskonstanten sind definiert als:

$$G_{\alpha} \equiv \frac{1}{2}(G_{\psi} + G_{\chi}), \quad G_{\beta} \equiv \frac{1}{2}(G_{\psi} - G_{\chi}). \quad (18)$$

Im nun folgenden Abschnitt soll das Phasendiagramm dieses Modells mit Hilfe der MFA und der HPE näherungsweise bestimmt werden. Ein Vergleich mit den durch MC-Rechnungen gewonnenen Daten schließt sich an.

2.2 Die MFA als Variationsprinzip

Im zunächst betrachteten Fall unendlicher Higgskopplung sind die Felder gerade so normiert, daß dies ein Einfrieren des Skalarfeldes auf die Länge Eins bedeutet. Man spricht dann in der reinen ϕ^4 -Theorie vom Isinglimes. Der bosonische Teil der Wirkung besteht in diesem Fall nur noch aus dem bilinearen Hoppingterm

$$S_B^\infty = -\kappa \sum_{x,\mu} \phi_{x+\mu}^+ \phi_x . \quad (19)$$

Schreibt man dementsprechend das Skalarfeld als $\phi_x = e^{i\theta_x}$, so ergibt sich für die Zustandssumme die folgende Formulierung:

$$Z = \left(\prod_x \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_x \right) \left(\prod_y \int d\psi_y d\bar{\psi}_y \right) e^{-S} \equiv \left(\prod_x \int d\mu_x \right) \left(\prod_y \int d\psi_y d\bar{\psi}_y \right) e^{-S} . \quad (20)$$

Für ihre Berechnung mit Hilfe der MFA gibt es im wesentlichen zwei Möglichkeiten. Der eine Weg wird z.B. in [35] beschritten. Dort wird zunächst der skalare Teil des Integrals exakt ausgeführt und daraufhin das verbleibende fermionische Integral mit MF-Methoden gelöst. Dies hat den Vorteil, daß eine Entwicklung der Fermiondeterminante vermieden werden kann. Die expliziten Spiegelfermionen unseres Modells lassen allerdings einen zweiten Weg praktikabler erscheinen, da sie das Aufstellen und Lösen der Konsistenzbedingungen, wie sie im ersten Fall auftreten, erschweren. Zudem ist eine exakte Integration des Skalarintegrals dort ohnehin nur in $\kappa = 0$ möglich; bei nichtverschwindendem κ muß auch für das Skalarfeld eine MFA gemacht werden. In unserem Fall verschwindet der skalare Hoppingparameter jedoch nicht. Dieser Sachverhalt legt es nahe, der u.a. in [36, 37] eingeschlagenen Richtung zu folgen und zunächst über die fermionischen Freiheitsgrade zu integrieren. Daraus resultiert die Beziehung:

$$Z = \left(\prod_x \int d\mu_x \right) e^{-S_B^\infty + \ln \det \bar{Q}} . \quad (21)$$

Betrachtet man die MFA im Sinne eines Variationsprinzips, ist das weitere Vorgehen klar. Der erste Schritt besteht in der Einführung eines leichter handhabbaren, normierten Maßes, und zwar

$$\frac{1}{Z_H} \exp \left(\frac{1}{2} (H \sum_x \phi_x^+ + H^+ \sum_x \phi_x^-) \right) . \quad (22)$$

Der Ausdruck für Z_H läßt sich dabei exakt angeben. Bezeichnet I_0 die modifizierte Besselfunktion nullter Ordnung, so lautet er

$$Z_H \equiv \left(\prod_x \int d\mu_x \right) \exp \left(\frac{1}{2} (H \sum_x \phi_x^+ + H^+ \sum_x \phi_x^-) \right) = I_0(|H|)^N . \quad (23)$$

Damit ergibt sich die exakte Beziehung:

$$Z = I_0(|H|)^N < \exp \left(-S_B^\infty + \ln \det \bar{Q} - \frac{1}{2} (H \sum_x \phi_x^+ + H^+ \sum_x \phi_x^-) \right) >_H . \quad (24)$$

Der Index H deutet an, daß der Erwartungswert bzgl. des Maßes (22) gemeint ist. Mit Hilfe der Peierlsungleichung $< e^A > \geq e^{< A >}$ folgt daraus die Zustandssumme der MFA:

$$Z_{\text{MFA}} \equiv I_0(|H|)^N \exp \left(-S_B^\infty + \ln \det \bar{Q} - \frac{1}{2} (H \sum_x \phi_x^+ + H^+ \sum_x \phi_x^-) >_H \right) \leq Z . \quad (25)$$

Den zweiten Schritt bildet nun die Variation des freien Parameters H . Er steht für das mittlere Feld, welches das Skalarfeld an einem beliebigen Gitterpunkt spürt. Wie Gleichung (25) zu entnehmen ist, muß er so gewählt werden, daß Z_{MFA} maximiert wird und dadurch der echten Zustandssumme so nah wie möglich kommt. Dies stellt die Konsistenzbedingung an H dar.

Bevor auf weitere Details eingegangen wird, sollen einige qualitative Aussagen über die Phasenstruktur gemacht werden, die sich bereits anhand der Gestalt der Wirkung treffen lassen. Der skalare Anteil sorgt in der Zustandssumme für einen Maßfaktor $\exp(\kappa \sum_{x,\mu} \phi_{x+\mu}^+ \phi_x)$. Demnach werden Konfigurationen bevorzugt, in denen benachbarte Feldwerte für positives κ parallel und für negatives κ antiparallel ausgerichtet sind. Da in einem statistischen System, wie es hier vorliegt, der Energieminimierung durch geeignete Ausrichtung der Felder die Maximierung der Entropie entgegenwirkt, wird sich für hinreichend kleine κ -Werte eine ungeordnete Phase einstellen. Damit ergeben sich für das reine Higgsfeld drei Phasen,

1. die ferromagnetische Phase (FM) für genügend große, positive κ mit $\langle \phi \rangle \neq 0$,
2. die paramagnetische Phase (PM) für hinreichend kleine $|\kappa|$ mit $\langle \phi \rangle = \langle \phi^{st} \rangle = 0$, wenn ϕ_x^{st} durch $(-1)^{\sum_{\mu=1}^d x_\mu} \phi_x$ gegeben ist
3. und für ausreichend negative κ die antiferromagnetische Phase (AFM) mit $\langle \phi^{st} \rangle \neq 0$.

Sind die Phasengrenzen zwischen FM- und PM-Phase auf der einen sowie PM- und AFM-Phase auf der anderen Seite, bedingt durch das Auftreten von fermionischen Ordnungsmechanismen, unterschiedlich gekrümmmt, besteht die Möglichkeit, daß sie sich schneiden. Das Gebiet, welches dann von unten durch den FM-PM-Übergang und von oben durch den PM-AFM-Übergang begrenzt wird, bezeichnet man als ferrimagnetische Phase (FI). Dort sind $\langle \phi \rangle$ und $\langle \phi^{st} \rangle$ von Null verschieden.

Nun zurück zur Untersuchung der Phasenstruktur mit Hilfe der MFA. Eine Größe, die sich dazu besser eignet als die Zustandssumme selbst, ist die freie Energie. In der MFA lautet sie:

$$\begin{aligned} W_{\text{MFA}}(H) &= -\frac{1}{N} \ln Z_{\text{MFA}} \\ &= -\ln I_0(|H|) + \frac{1}{N} \langle S_B^\infty \rangle_H - \frac{1}{N} \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H \\ &\quad + \frac{1}{N} \frac{1}{2} \left(H \sum_x \langle \phi_x^+ \rangle_H + H^+ \sum_x \langle \phi_x \rangle_H \right). \end{aligned} \quad (26)$$

Die Maximierung von Z_{MFA} entspricht demnach der Minimierung der freien Energie.

Die Berechnung der Felderwartungswerte bzgl. Z_H erfolgt nicht explizit als Integration, sondern geschieht durch die entsprechende Differentiation von $Z_H = (I_0(|H|))^N$ nach H . Da Z_H im Bezug auf die Gitterplätze faktorisiert, ist dabei eine weitere Vereinfachung möglich. Details dazu finden sich im Anhang A. Aufgrund der fehlenden Korrelationen im MF-Ansatz ergeben sich auf einfache Weise die Beziehung $\langle \phi_x^+ \phi_y \rangle_H = \langle \phi_x^+ \rangle_H \langle \phi_y \rangle_H$ für $x \neq y$ sowie die Relation $\langle \phi_x \rangle_H = \frac{1}{2}H + O(H^3)$, welche die Bezeichnung von H als mittlerem Feld rechtfertigt. Ihre Verwendung führt bis zur zweiten Ordnung in $|H|$ auf den nachstehenden Ausdruck:

$$W_{\text{MFA}}(H) = -\ln I_0(|H|) - \frac{1}{2}\kappa d|H|^2 - \frac{1}{N} \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H + \frac{1}{2}|H|^2 + O(|H|^3). \quad (27)$$

In der symmetrischen Phase dieses Modells verschwindet mit dem Erwartungswert des Skalarfeldes auch der Parameter H . Diese Phase bleibt daher beim Durchlaufen des Phasenraumes solange stabil, wie die freie Energie durch $H = 0$ minimiert wird. Ein Extremum hat W_{MFA} dort in jedem Fall, denn der nichtfermionische Teil bildet eine Funktion von $|H|$. Dasselbe gilt auch für den fermionischen Teil $\langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H$, der als Erwartungswert dieselben Invarianzeigenschaften besitzen muß wie das Maß (22), mit dem er gebildet wird. Dieses ist invariant unter gleichzeitiger, identischer $U(1)$ -Transformation von H und ϕ . Da aber der Erwartungswert des Logarithmus nicht mehr von ϕ abhängt, ist er folglich invariant unter beliebigen $U(1)$ -Transformationen von H , kann also nur eine Funktion von $|H|$ sein.

Die Bedingung für das Minimum in $H = 0$ und damit die Existenz der symmetrischen Phase lautet daher:

$$\frac{\partial^2 W_{\text{MFA}}}{\partial |H|^2}|_{H=0} > 0 . \quad (28)$$

In diesem Fall hat man sich W_{MFA} als rotationssymmetrische Funktion von H mit einer Mulde in $H = 0$ vorzustellen. Um mit Hilfe dieser Beziehung die Phasenstruktur untersuchen zu können, muß die freie Energie in der Ordnung $|H|^2$ bekannt sein. Während die Relation $\ln I_0(|H|) = \frac{1}{4}|H|^2 + O(|H|^4)$ leicht einzusehen ist, gestaltet sich die Berechnung von $\langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H$ in zweiter Ordnung von $|H|$ zum eigentlichen Problem dieses Abschnitts. Eine explizite Berechnung ist wegen der Nichtlokalität dieses Ausdrucks unmöglich. Aus diesem Grunde macht man eine HPE nach dem fermionischen Hoppingparameter K bzw. dessen Inversem K^{-1} . (Als eigentliche Entwicklungsparameter werden sich in d Dimensionen Größen proportional zu $K^2 d$ bzw. $(K^2 d)^{-1}$ herausstellen.)

Bereits an dieser Stelle sei erwähnt, daß es aufgrund der komplizierten Struktur des fermionischen Anteils $\ln \det \bar{Q}$ allerdings nicht, wie in einfacheren Spinmodellen, möglich sein wird, für jede Ordnung einer Entwicklung, in diesem Falle nach K bzw. K^{-1} , den in d führenden Term zu bestimmen. Daher wird in der vorliegenden Arbeit die Entwicklung in beiden Fällen nur bis zur sechsten Ordnung durchgeführt. Für die inverse HPE gelingt aber selbst dies nicht in konsistenter Weise.

2.3 Die Entwicklungen von $\langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H$

2.3.1 Die Hoppingparameterentwicklung für $\lambda = \infty$

Um Schreibarbeit zu sparen, werden folgende Abkürzungen eingeführt:

$$\bar{Q}(\phi)_{yx} = M_x + G_x - K \bar{H}_{yx} . \quad (29)$$

Dabei sind die einzelnen Größen in $4 \otimes 4$ -Blocknotation durch die Gleichungen

$$\begin{aligned} M_x &\equiv \begin{pmatrix} \bar{\mu} & 0 \\ 0 & \bar{\mu} \end{pmatrix} \delta_{yx} , \\ G_x &\equiv \begin{pmatrix} 0 & (G_\alpha - \gamma_5 G_\beta) \phi_x \\ (G_\alpha + \gamma_5 G_\beta) \phi_x^+ & 0 \end{pmatrix} \delta_{yx} , \\ \bar{H}_{yx} &\equiv \sum_\mu \begin{pmatrix} \gamma_\mu + r & 0 \\ 0 & \gamma_\mu + r \end{pmatrix} \delta_{y,x+\hat{\mu}} \end{aligned} \quad (30)$$

definiert. Auf Basis dieser Abkürzungen schreibt sich der fermionische Teil der freien Energie als:

$$\langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H = \sum_x \langle \ln \det(M_x + G_x) \rangle_H$$

$$-\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} < \text{Tr}(K(M+G)^{-1}\bar{H})^i >_H . \quad (31)$$

Tr steht hier für die Spur über alle Freiheitsgrade einschließlich der Ortskoordinaten. Mit Hilfe der Beziehungen $\det(M_x + G_x) = (\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2))^4$ und $(M+G)^{-1} = \frac{M-G}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)}$ erhält man nach Ausführung der Spur über die Ortskoordinaten den Ausdruck

$$\begin{aligned} < \ln \det \bar{Q} >_H &= 4N \ln [\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)] - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{2i} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^{2i} \times \\ &\times \sum_{x_1 \dots x_{2i}} < \text{tr}((M_{x_1} - G_{x_1})\bar{H}_{x_1 x_2} \cdots (M_{x_{2i}} - G_{x_{2i}})\bar{H}_{x_{2i} x_1}) >_H , \end{aligned} \quad (32)$$

wobei tr die Spur über die verbleibenden Freiheitsgrade bezeichnet. Im U(1)-Modell sind dies Spin-, Chiralitäts- und Fermion-Spiegelfermion-Freiheitsgrade.

Der obige Ausdruck eignet sich für eine graphische Darstellung, welche die „Buchführung“ erleichtert: Symbolisieren die x_i Punkte auf einem d -dimensionalen Gitter, so lässt sich $\bar{H}_{x,x+\hat{\mu}}$ durch ein von x in Richtung $\hat{\mu}$ zeigendes link darstellen. Ohne die Faktoren $(M_x - G_x)$ kann man daher die Spur in (32) durch geschlossene Graphen (von x_1 nach x_1) der Länge $2i$ veranschaulichen. In (32) wurde demnach bereits ausgenutzt, daß geschlossene Wege auf dem Gitter (Spur über die Ortskoordinaten) nur mit einer geraden Anzahl von Schritten zurückzulegen sind. Das Auftreten eines G-Faktors G_x lässt sich z.B. durch einen Punkt in x berücksichtigen (später ist eine weitere Differenzierung günstig (Anhang C)). An den Stellen des Graphen, an denen dieser Punkt fehlt, tritt dann ein M_x auf. Ein einfaches Beispiel ist der folgende Graph:



Er entspricht dem Ausdruck:

$$\text{tr}(M_{x_1} H_{x_1 x_2} M_{x_2} H_{x_2 x_3} G_{x_3} H_{x_3 x_4} G_{x_4} H_{x_4 x_5} M_{x_5} H_{x_5 x_6} G_{x_6} H_{x_6 x_3} G_{x_3} H_{x_3 x_8} M_{x_8} H_{x_8 x_1}).$$

Das Auftreten zweier G-Faktoren in x_3 wird durch einen zusätzlichen Kreis ange deutet.

Für die Berechnung der Summe über die Ortskoordinaten in (32) lassen sich einige allgemeine Ausagen treffen, die zu den folgenden Regeln führen:

1. G_x ist blockoffdiagonal, während M_x und \bar{H}_{xz} blockdiagonal sind. Beim Ausmultiplizieren der Spur tragen daher nur Ausdrücke mit einer geraden Anzahl von G-Faktoren bei.
2. Das Skalarfeld ϕ_x ist nur in G_x enthalten. Da im U(1)-Modell die Beziehung $<(\phi_x)^n>_H = O(H^n)$ besteht (siehe Anhang A), bedeutet das zum einen, daß $< \ln \det \bar{Q} >_H$ eine gerade Funktion in H ist und daher, wie bereits erwähnt, in $H = 0$ ein Extremum hat. Zum anderen sind unter dieser Voraussetzung zur Bestimmung des Phasenübergangs mit (28) nur die Wege auf dem Gitter interessant, für die sich bis auf genau zwei ϕ -Einträge alle anderen zu Betragsquadraten kompensieren.

3. Zu fester K -Potenz $4i$ gehören geschlossene Wege der Länge $4i$. Ohne Zwangsbedingungen ist deren Anzahl, bedingt durch den Einbettungsfaktor, proportional zu d^{2i} . Die Einführung von mehr als zwei G-Faktoren bedeutet nun für jedes zusätzliche Paar eine Zwangsbedingung, da am Schluß nur zwei alleinstehende G-Faktoren übrig sein dürfen. Sie besteht darin, daß sich der zugehörige Graph an den passenden Stellen in geeigneter Weise überschneidet, so daß sich die mit den G-Faktoren verbundenen überzähligen ϕ -Felder zu Betragsquadraten kompensieren können. Diese Zwangsbedingungen sorgen zwar für eine Einschränkung hinsichtlich der Zahl erlaubter Graphen, müssen allerdings nicht dazu führen, daß sich die führende d -Potenz verringert. Als Beispiel dazu diene der Graph, den man erhält, wenn man lauter elementare Plaketten, die jeweils in einer beliebigen Gitterebene liegen, an ihren Spitzen so zusammenklebt, daß sie die Glieder einer irgendwie gewundenen Kette bilden. (Der kürzeste Graph dieser Sorte hat die Länge Acht, d.h. $i = 2$ und ist in (33) angegeben.) Dieser Graph hat $i - 1$ Kreuzungspunkte und kann bis zu $2i$ G-Faktoren tragen. Treten weniger G-Faktoren auf, kann man eine entsprechende Zahl von Kreuzungen auf beliebige Weise entflechten und an diesen Stellen mehrere Kettenglieder zugunsten eines größeren auflösen. Alle diese Graphen sind in führender Ordnung proportional zu d^{2i} ; d.h. auch bei Vernachlässigung niedrigerer Ordnungen von d müssen für den Koeffizienten von K^{4i} alle geschlossenen Graphen betrachtet werden, die zwischen 2 und $2i$ G-Faktoren tragen und daher zwischen 0 und i Zwangsbedingungen unterliegen. Letztere wirken sich auf die Anzahl (nicht die führende d -Potenz) der Graphen in vermutlich nicht allgemein berechenbarer Weise aus. Aus diesem Grunde muß auf eine vollständige Entwicklung von (32) in führender Ordnung von d verzichtet werden. Im folgenden werden deshalb nur Graphen der Länge ≤ 6 behandelt. Festzuhalten bleibt, daß der Entwicklungsparameter proportional zu K^2d ist.

Die zweite Regel erlaubt in [36, 37], bedingt durch die Tatsache, daß dort mit jedem Gitterpunkt automatisch ein G_x -Faktor verbunden ist, starke Vereinfachungen, die dazu führen, daß nur noch sogenannte Doppelkettengraphen betrachtet werden müssen. Dem im Wege steht in unserem Modell das explizite Auftreten des fermionischen Massenterms M_x . Er sorgt dafür, daß ein Graph nicht an jedem Gitterplatz ein Skalarfeld tragen muß.

Ein Beispiel liefert wiederum der Graph aus (33), der nur aufgrund des Massenterms beiträgt. Er ist gleichzeitig der kürzeste Graph, der mehr als zwei G-Faktoren tragen kann. Die mit G_{x_3} verbundenen Felder heben sich auf, da $\phi_{x_3}^+ \phi_{x_3}^- = 1$, so daß genau zwei alleinstehende ϕ -Faktoren zurückbleiben. Nach Bildung des Erwartungswertes ist dieser Graph daher proportional zu $|H|^2$. Infolgedessen tragen bis zur Ordnung K^6 einschließlich nur Terme mit genau zwei G-Faktoren zur $O(H^2)$ bei.

Daher gilt bis zur sechsten Ordnung in K inklusive

$$\begin{aligned}
A_i &\equiv \sum_{x_1 \cdots x_{2i}} \langle \text{tr}((M_{x_1} - G_{x_1}) \bar{H}_{x_1 x_2} \cdots (M_{x_{2i}} - G_{x_{2i}}) \bar{H}_{x_{2i} x_1}) \rangle_H \\
&= \bar{\mu}^{2i-2} \sum_{j_1 < j_2=1}^{2i} \sum_{x_1 \cdots x_{2i}} \langle \text{tr}(\bar{H}_{x_1 x_2} \cdots G_{x_{j_1}} \cdots G_{x_{j_2}} \cdots \bar{H}_{x_{2i} x_1}) \rangle_H \\
&\quad + R . \tag{34}
\end{aligned}$$

R enthält alle Terme mit von $|H|^2$ verschiedener Ordnung und entfällt daher bei der weiteren Betrachtung. Unter Ausnutzung der Beziehung $\langle \phi_x^+ \phi_y^- \rangle = \frac{1}{4} |H|^2$ und mit

der Definition

$$\bar{H}_{xy} \equiv \begin{pmatrix} h_{xy} & 0 \\ 0 & h_{xy} \end{pmatrix} \quad (35)$$

formt man diesen Ausdruck weiter um zu

$$\begin{aligned} A_i = \bar{\mu}^{2i-2} \frac{1}{2} |H|^2 \sum_{x_1 \dots x_{2i}} & \left\{ (2i^2 - i) G_\alpha^2 \text{tr}(h_{x_1 x_2} \dots h_{x_{2i} x_1}) \right. \\ & - 2i G_\beta^2 \sum_{k=1}^{i-1} \text{tr}(\gamma_5 h_{x_1 x_2} \dots h_{x_k x_{k+1}} \gamma_5 h_{x_{k+1} x_{k+2}} \dots h_{x_{2i} x_1}) \\ & \left. - i G_\beta^2 \text{tr}(\gamma_5 h_{x_1 x_2} \dots h_{x_i x_{i+1}} \gamma_5 h_{x_{i+1} x_{i+2}} \dots h_{x_{2i} x_1}) \right\} \\ & + R . \end{aligned} \quad (36)$$

Detailliertere Angaben dazu folgen im Anhang B. Die Spurbildung wird jetzt nur noch im Raum der γ -Matrizen, d.h. über Spin- und Chiralitätsfreiheitsgrad vollzogen. Die zyklische Vertauschbarkeit von Matrizen in einer Spur wurde hier bereits ausgenutzt und führt zu den angegebenen Vorfaktoren.

Bevor der explizite Ausdruck bis zur sechsten Ordnung in K angegeben werden kann, ist noch eine Anpassung an die MC-Rechnungen nötig. Dort erfolgt aus technischen Gründen, bedingt durch die Verwendung des HMCA, ein Flavourverdopplung (Kapitel 4). Diese Verdopplung besteht darin, anstelle von \bar{Q} die erweiterte Fermionmatrix

$$\begin{pmatrix} \bar{Q} & 0 \\ 0 & \bar{Q}^+ \end{pmatrix} \quad (37)$$

zu verwenden. Daher ist für einen Vergleich mit den auf diese Weise gewonnenen numerischen Daten nun

$$\langle \ln \det \begin{pmatrix} \bar{Q} & 0 \\ 0 & \bar{Q}^+ \end{pmatrix} \rangle_H = \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H + \langle \ln \det \bar{Q}^+ \rangle_H . \quad (38)$$

zu betrachten. Da aber \bar{Q}^+ aus \bar{Q} durch die Ersetzung $G_\beta \rightarrow -G_\beta$ und $\gamma_\mu \rightarrow \gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu$ hervorgeht, sind beide Summanden in (38) gleich. Denn aufgrund der Spurbildung im Fermion-Spiegelfermion-Raum treten bei der Berechnung von A_i nur gerade Potenzen von $\gamma_5 G_\beta$ auf. Demzufolge tragen, bedingt durch die Spurbildung im Diracraum auch nur solche Terme bei, die eine gerade Anzahl von γ -Faktoren enthalten. Alle Beiträge sind also invariant unter Vorzeichenwechsel der γ -Matrizen bzw. von G_β (Anhang B).

Die Auswertung der Graphen und Berechnung der γ -Spuren führt schließlich zu folgendem Resultat bzgl. der Ordnung $|H|^2$:

$$\begin{aligned} \langle \ln \det \bar{Q}^+ \bar{Q} \rangle_H = & 8N \ln(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)) + \frac{1}{4} |H|^2 N d 2^{d/2} \left\{ \right. \\ & \frac{1}{2} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^2 16G_\beta^2 + \\ & \frac{1}{4} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^4 64\bar{\mu}^2 [3G_\alpha^2(d-1) + G_\beta^2(5d-3)] + \\ & \left. \frac{1}{6} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^6 384\bar{\mu}^4 [5G_\alpha^2(4d^2-9d+5) + G_\beta^2(13d^2-21d+10)] \right\} \\ & + R . \end{aligned} \quad (39)$$

Für eine exemplarische Rechnung bei niedriger Ordnung sei auf den Anhang C verwiesen. Aus Konsistenzgründen, die weiter unten in Verbindung mit der inversen HPE deutlich werden, wird im folgenden nur das führende d -Verhalten berücksichtigt. Der vollständige Entwicklungsparameter ist dann $(\frac{K\sqrt{d}}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)})^2$. Nach Auswertung des skalaren Anteils ergibt sich in $d = 4$ Dimensionen für das kritische κ bei $\bar{\mu} = 1$ der Zusammenhang:

$$\begin{aligned}\kappa_{cr} &= \frac{1}{8} - \left\{ \left(\frac{2K}{G_\alpha^2 - G_\beta^2 - 1} \right)^2 4G_\beta^2 + \left(\frac{2K}{G_\alpha^2 - G_\beta^2 - 1} \right)^4 (24G_\alpha^2 + 40G_\beta^2) \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{2K}{G_\alpha^2 - G_\beta^2 - 1} \right)^6 (640G_\alpha^2 + 416G_\beta^2) \right\} .\end{aligned}\quad (40)$$

2.3.2 Die Undurchführbarkeit einer systematischen, inversen HPE

Schon bei der einfachen HPE ließ sich die Entwicklung des fermionischen Logarithmus nicht für beliebige Potenzen von K in jeweils führender Ordnung von d durchführen, da hierfür geschlossene Graphen beliebiger Länge hätten betrachtet werden müssen. Diese waren zwar Zwangsbedingungen unterworfen, die jedoch nicht zu einer genügend eingeschränkten Graphenklasse führten, wie es z.B. in [36] der Fall war. Man ist daher gezwungen, sich auf kleine Potenzen von K zu beschränken. Für große K , d.h. in einer $1/K$ -Entwicklung, ist aber nicht einmal dies in systematischer Weise möglich. Wie weiter unten klar wird, legt nämlich jetzt weder die $1/K$ -Potenz noch die Beschränkung auf die führende Ordnung von d die maximale Länge beitragender Graphen fest.

Zur Untersuchung der Phasenstruktur für große K wird zunächst der Logarithmus der Fermiondeterminante nach dem inversen Hoppingparameter entwickelt. Es ergibt sich analog dem Ausdruck (31) die Gleichung:

$$\begin{aligned}<\ln \det \bar{Q}>_H &= <\ln \det(-K \bar{H})>_H \\ &\quad - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} <\text{Tr}(\frac{1}{K}(M+G)\bar{H}^{-1})^i>_H .\end{aligned}\quad (41)$$

Die Hauptschwierigkeit bei der weiteren Behandlung dieser Entwicklung besteht in der Bestimmung der inversen Hoppingmatrix in führender Ordnung d . Nach längerer Rechnung (Anhang D) folgt die Beziehung

$$(\bar{H}^{-1})_{xy} \equiv \sum_{\mu} \begin{pmatrix} -\gamma_{\mu} + 1 & 0 \\ 0 & -\gamma_{\mu} + 1 \end{pmatrix} G_{0,y-x+\hat{\mu}} \quad (42)$$

und mit der auch im Anhang verwendeten Abkürzung $t = y - x + \hat{\mu} = (t_1, \dots, t_d)$

$$G_{0,t} = \frac{1}{2d} \int_0^\infty \frac{du}{\sqrt{8\pi}} e^{-u} \int_{-\infty}^\infty dz e^{-\frac{z^2}{8}} \prod_{\mu=1}^d \left(\sum_{n=-\infty}^\infty i^{|t_{\mu}-2n|} I_n(\frac{u}{d}) J_{|t_{\mu}-2n|}(\sqrt{\frac{u}{d}}z) \right) . \quad (43)$$

Wie im Anhang D gezeigt wird, hat $G_{0,t}$ schematisch die folgende Struktur:

$$G_{0,t} = \frac{a}{d} \delta_{0,t} + \frac{b}{d^2} \sum_{\nu} \delta_{0,t+\hat{\nu}+\hat{\nu}} + \frac{c}{d^2} \sum_{|\lambda| \neq |\rho|} \delta_{0,t+\hat{\lambda}+\hat{\rho}} + \dots \quad (44)$$

Allgemein gehört zur Potenz $d^{-(n+1)}$ ein Abstand der Größe $2n$ zwischen 0 und t , der sich in entsprechenden δ -Funktionen ausdrückt. „Abstand“ bedeutet dabei, daß die Richtungen, über die summiert wird, wie auch die Einschränkung unter dem letzten Summenzeichen erkennen läßt, nicht entgegengesetzt gleich sein dürfen. Ersetzt man nun wieder t durch $y - x + \hat{\mu}$, ist leicht einzusehen, daß jeweils benachbarte d -Potenzen zu ein und demselben Matrixelement beitragen können. Denn ein Abstand von $2n+1$ zwischen x und y , die das Matrixelement festlegen, bedeutet je nach Wahl von $\hat{\mu}$ einen Abstand von $2n$ oder $2n+2$ zwischen x und $y + \hat{\mu}$. Alternativ kann man sagen: Bei Festlegung einer Richtung auf $-\hat{\mu}$ in den Summen zur Potenz $d^{-(n+2)}$ ergibt sich ein zusätzlicher Beitrag zu einer entsprechenden δ -Funktion aus der Ordnung $d^{-(n+1)}$. Eingesetzt in (42) bedeutet dies für die ersten Beiträge:

$$\begin{aligned} (\bar{H}^{-1})_{xy} &= \sum_{\mu} (\gamma_{-\mu} + 1) \otimes \mathbb{1}_2 \left(\frac{a}{d} \delta_{x,y+\hat{\mu}} + \frac{b}{d^2} \sum_{\nu} \delta_{x,y+\hat{\mu}+2\nu} + \frac{c}{d^2} \sum_{|\lambda| \neq |\rho|} \delta_{x,y+\hat{\mu}+\hat{\lambda}+\hat{\rho}} \right) \\ &= \sum_{\mu} (\gamma_{-\mu} + 1) \otimes \mathbb{1}_2 \left(\frac{a}{d} \delta_{x,y+\hat{\mu}} + \frac{b}{d^2} \delta_{x,y-\hat{\mu}} + \frac{2c}{d^2} \sum_{|\lambda| \neq |\mu|} \delta_{x,y+\hat{\lambda}} + L_3 \right) \\ &= \frac{1}{d} \sum_{\mu} \left(\gamma_{-\mu} \left(a - \frac{b}{d} \right) + \left(a + \frac{b}{d} + \frac{4c(d-1)}{d} \right) \right) \otimes \mathbb{1}_2 \delta_{x,y+\hat{\mu}} + L_3 . \end{aligned} \quad (45)$$

Dabei bezeichnet L_3 Elemente der bzgl. der Ortskoordinaten x, y dritten Nebendiagonalen von \bar{H}_{xy} . L_3 erfährt nun wiederum Korrekturen durch Terme der Ordnung d^{-3} . Wie in (45) wird es aber auch in diesem Fall effektiv wieder zu Korrekturen in der führenden Ordnung, d.h. hier d^{-2} , kommen. Ursache dafür ist die eine zusätzliche Summation, die den Korrekturtermen nach Festlegung einer Richtung in $-\hat{\mu}$ im Vergleich zu den ursprünglichen L_3 -Terminen noch bleibt. Sie liefert bei richtungsunabhängigem Vorfaktor (d.h. nicht $\gamma_{-\mu}$) im wesentlichen einen Faktor d .

Die Berechnung der führenden Ordnung in $1/d$ von \bar{H}^{-1} erzwingt also die Berücksichtigung einer Summe von Termen, in der jeder einzelne nicht mehr zu dieser führenden Ordnung gehört. Im Ganzen ergibt sich

$$\begin{aligned} (\bar{H}^{-1})_{xy} &= \frac{1}{d} \sum_{\mu} (a \gamma_{-\mu} + (a + 4c)) \otimes \mathbb{1}_2 \delta_{x,y+\hat{\mu}} + O\left(\frac{1}{d^2}\right) \\ &= \frac{1}{2d} \sum_{\mu} (g \gamma_{-\mu} + (1 - g)) \otimes \mathbb{1}_2 \delta_{x,y+\hat{\mu}} + O\left(\frac{1}{d^2}\right) \end{aligned} \quad (46)$$

mit $g = 0.65568\dots$ (Anhang D). Setzt man diesen Wert für $d = 4$ Dimensionen ein, erhält man in führender Ordnung von $1/d$ gerundet

$$(\bar{H}^{-1})_{xy} = \sum_{\mu} (0.0820 \gamma_{-\mu} + 0.0430) \otimes \mathbb{1}_2 \delta_{x,y+\hat{\mu}} . \quad (47)$$

Die Übereinstimmung mit der numerisch invertierten Hoppingmatrix (48) ist überraschend gut.

Auf einem 10^4 -Gitter, welches, wie der Vergleich mit kleineren Gittern zeigte, bzgl. dieser Matrixinversion dem unendlichen Gitter schon sehr nahe kommt, ergab die Berücksichtigung der betragsmäßig größten Elemente für die numerische Inversion

$$(\bar{H}^{-1})_{xy} = \sum_{\mu} (0.0794 \gamma_{-\mu} + 0.0456) \otimes \mathbb{1}_2 \delta_{x,y+\hat{\mu}} . \quad (48)$$

Alle weiteren Matrixelemente waren um wenigstens einen Faktor Vier unterdrückt. Die verbleibende Diskrepanz zwischen numerischem und analytischem Resultat sollte durch Hinzunahme weiterer Ordnungen verschwinden.

Selbst wenn man also, wie gesehen, in der Lage ist, die Inversion der Hoppingmatrix bzgl. der Ordnung von $1/d$ systematisch durchzuführen, stellt sich doch bei der Einbindung in die Graphen der HPE ein nichtlösbares Konsistenzproblem: Elemente $(\bar{H}^{-1})_{xy}$ der inversen Matrix, die durch eine entsprechende δ -Funktion einen Gitterabstand von $2n+1$ zwischen x und y festlegen, tragen in führender Ordnung einen Faktor $\propto d^{-(n+1)}$. Andererseits ergibt die Einbettung eines geschlossenen Graphen der Länge $2i$ auf dem Gitter einen Faktor $\propto d^i$, so daß sich jedem seiner Einheitslinks einen Einbettungsfaktor $\propto \sqrt{d}$ zuordnen läßt. Für ein dem $(\bar{H}^{-1})_{xy}$ entsprechendes link der Länge $2n+1$ innerhalb eines geschlossenen Graphen ergibt sich daher insgesamt ein Faktor $\propto \sqrt{d^{2n+1}}d^{-(n+1)} = (\sqrt{d})^{-1}$, unabhängig von dessen Länge. Aus diesem Grunde sind die durch \bar{H}^{-1} erzeugten links bzgl. ihrer Ordnung in $1/d$ für beliebige Längen gleichberechtigt. Man erhält also bereits in der Ordnung K^{-2} der HPE (d.h. zwei Faktoren \bar{H}^{-1}), in führender Ordnung von d , geschlossene Graphen beliebiger Länge.

Soll dennoch eine inverse HPE durchgeführt werden, muß man auf die führende Ordnung des Ausdrucks (46) zurückgreifen und die fehlende Systematik in Kauf nehmen. Da in diesem Fall die bisherige Diracstruktur der Hoppingmatrix aufgegeben wird, tragen jetzt alle denkbaren Graphen bei, denn ein Appendix, d.h. ein Weg der Länge zwei, der zum Ausgangspunkt zurückkehrt, verschwindet auch ohne G-Faktor nicht mehr. Vielmehr gilt nun $(g\gamma_{-\mu} + 1 - g)(g\gamma_\mu + 1 - g) = 1 - 2g \neq 0$. Bis auf das Vorzeichen der γ -Matrix ergibt sich wieder die alte Diracstruktur, wenn man in (46) $g = 0.5$ setzt, womit dann auch ein Appendix ohne G-Faktor nicht länger beiträgt. Das gegenüber der einfachen Hoppingmatrix umgekehrte Vorzeichen der γ -Matrix spielt aus bereits oben erwähnten Gründen keine Rolle. Demzufolge müssen sich alle Resultate auf die der einfachen HPE reduzieren, wenn man g auf 0.5 festlegt und die Ersetzung

$$\frac{1}{2Kd} \rightarrow \frac{2K}{G_\alpha^2 - G_\beta^2 - 1} \quad (49)$$

durchführt. Die Beiträge aller bisher nichtrelevanten Graphen müssen dann wieder wegfallen. Dies ist, wie sich an der folgenden Gleichung erkennen läßt, in der Tat der Fall, denn mit $f \equiv 1-g$ und $h \equiv 1-2g$ bekommt man für die PM-FM-Phasengrenze in $d = 4$ Dimensionen die Beziehung:

$$\begin{aligned} \kappa_{cr} = & \frac{1}{8} \left\{ -\frac{1}{(8K)^2} \left\{ \begin{array}{l} 8G_\beta^2 (g^2 + f^2) - 8G_\alpha^2 h \\ -64G_\beta^2 [h^2 + 4h(g^2 + f^2) + 2g^4 + 4g^2f^2 + 4f^4] - \end{array} \right. \right. \\ & -\frac{1}{(8K)^4} \left\{ \begin{array}{l} 192G_\alpha^2 [2h^2 - g^4 - 2g^2f^2 + f^4] \\ -512G_\beta^2 [4h^3 + 14h^2(g^2 + f^2) + 2h(5g^4 + 10g^2f^2 + 13f^4) \end{array} \right. \\ & -\frac{1}{(8K)^6} \left\{ \begin{array}{l} +g^6 - g^4f^2 + 21g^2f^4 + 31f^6] - \\ 2560G_\alpha^2 [5h^3 - 6h(g^4 + 2g^2f^2 - f^4) \end{array} \right. \\ & \left. \left. -2g^6 - 6g^4f^2 - 12g^2f^4 + 4f^6] \right\} . \right\} . \end{aligned} \quad (50)$$

Der Phasenübergang AFM-PM

Um auch den Phasenübergang zwischen PM-Phase und AFM-Phase ($\langle \phi^{st} \rangle \neq 0$) bestimmen zu können, nutzt man die Invarianz der Wirkung unter den gleichzeitig durchzuführenden Transformationen:

$$\kappa \rightarrow -\kappa, \quad \phi_x \rightarrow \zeta_x \phi_x, \quad G_{\alpha,\beta} \rightarrow \zeta_x G_{\alpha,\beta} \quad \text{mit} \quad \zeta_x = (-1)^{\sum_{\mu=1}^d x_\mu}. \quad (51)$$

Das so definierte Feld $\phi_x^{st} = \zeta_x \phi_x$ ist die „staggered“-Version des alten Feldes. Da-her entspricht der gesuchte Übergang PM \rightarrow AFM der alten Wirkung jetzt dem Übergang PM \rightarrow FM in der transformierten Wirkung.

Während die Transformation $\kappa \rightarrow -\kappa$ eine Änderung im skalaren Teil der Ausdrücke (40) und (50) zufolge hat, kommt die Transformation $G_{\alpha,\beta} \rightarrow \zeta_x G_{\alpha,\beta}$ nur innerhalb der Fermiondeterminante zum Tragen. Das Auftreten der ζ_x führt dabei je nach Position der G-Faktoren zu relativen Vorzeichen zwischen den verschiedenen Graphen und ändert dadurch die Vorfaktoren der Yukawakopplungen. Man erhält

$$\begin{aligned} < \ln \det \bar{Q}^+ \bar{Q} >_H = & 8N \ln(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)) - \frac{1}{4}|H|^2 N d 2^{d/2} \left\{ \right. \\ & \frac{1}{2} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^2 16G_\beta^2 + \\ & \frac{1}{4} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^4 64\bar{\mu}^2 [G_\alpha^2(d-1) - G_\beta^2(d+1)] + \\ & \frac{1}{6} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^6 384\bar{\mu}^4 [G_\alpha^2(4d^2 - 9d + 5) - G_\beta^2(3d^2 - 7d + 2)] \left. \right\} \\ & + R . \end{aligned} \quad (52)$$

Daraus ergibt sich für das kritische κ in führender Ordnung d in $d = 4$ Dimensionen bei $\mu = 1$

$$\begin{aligned} \kappa_{cr} = & -\frac{1}{8} - \left\{ \left(\frac{2K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^2 4G_\beta^2 + \left(\frac{2K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^4 (8G_\alpha^2 - 8G_\beta^2) \right. \\ & \left. + \left(\frac{2K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^6 (128G_\alpha^2 - 96G_\beta^2) \right\} . \end{aligned} \quad (53)$$

Für die inverse HPE führt eine entsprechende Änderung der Koeffizienten in $d = 4$ Dimensionen zu folgendem Resultat:

$$\begin{aligned} \kappa_{cr} = & -\frac{1}{8} - \frac{1}{(8K)^2} \left\{ \begin{array}{l} 8G_\beta^2 (g^2 + f^2) - 8G_\alpha^2 h \\ -64G_\beta^2 [h^2 - 4h(g^2 + f^2) - 2g^4 + 4g^2 f^2] \\ -64G_\alpha^2 [2h^2 - g^4 - 2g^2 f^2 + f^4] \end{array} \right\} \\ & - \frac{1}{(8K)^4} \left\{ \begin{array}{l} 512G_\beta^2 [-4h^3 + 14h^2(g^2 + f^2) + 2h(7g^4 - 10g^2 f^2 - f^4) \\ + g^6 - 17g^4 f^2 - 3g^2 f^4 + 7f^6] - \\ 512G_\alpha^2 [5h^3 - 6h(g^4 + 2g^2 f^2 - f^4) \\ - 2g^6 - 6g^4 f^2 - 12g^2 f^4 + 4f^6] \end{array} \right\} . \end{aligned} \quad (54)$$

Auch hier gelangt man durch die Ersetzung (49) bei $g = 0.5$ wieder zum Ausdruck der einfachen HPE in (53) zurück.

Vergleich mit MC-Resultaten

Die folgenden Abbildungen veranschaulichen den Vergleich der MF-Resultate mit den durch HMC-Simulationen bestimmten Ergebnissen aus [27].

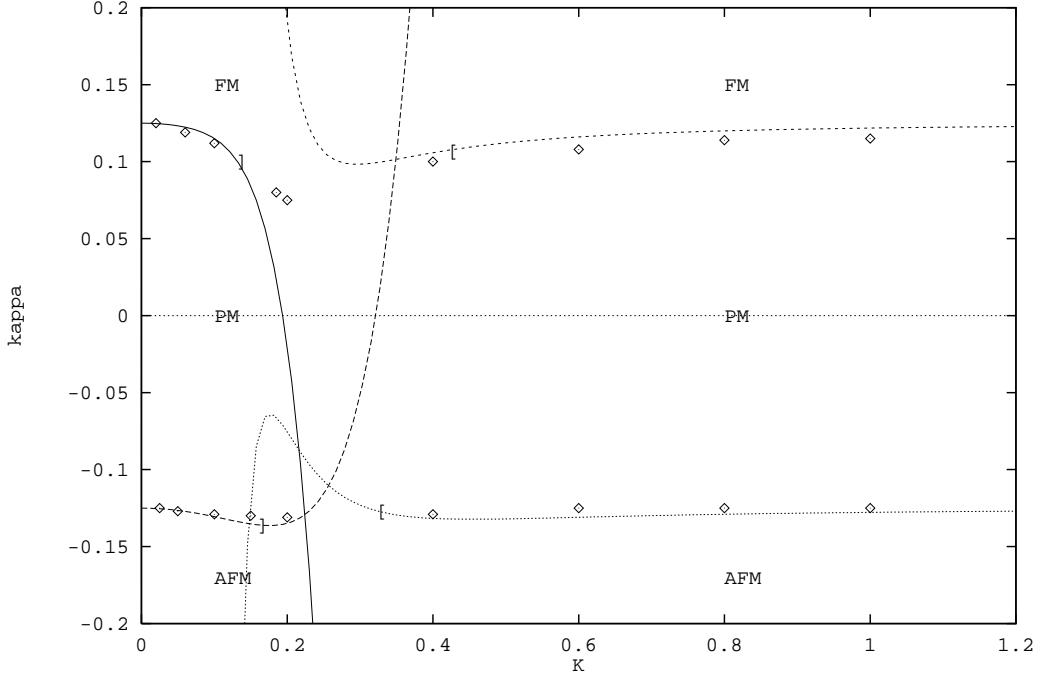


Abbildung 1: Phasenstruktur des $U(1)$ -Modells für $\lambda = \infty$, $G_\psi = 0.1$, $G_\chi = -0.3$. Die Daten stammen aus MC-Rechnung auf einem $4^3 \cdot 8$ -Gitter, für $m_R \simeq 1$ in der PM-Phase [27]. Die vier Kurven gehören zu den Gleichungen (40,50,53,54).

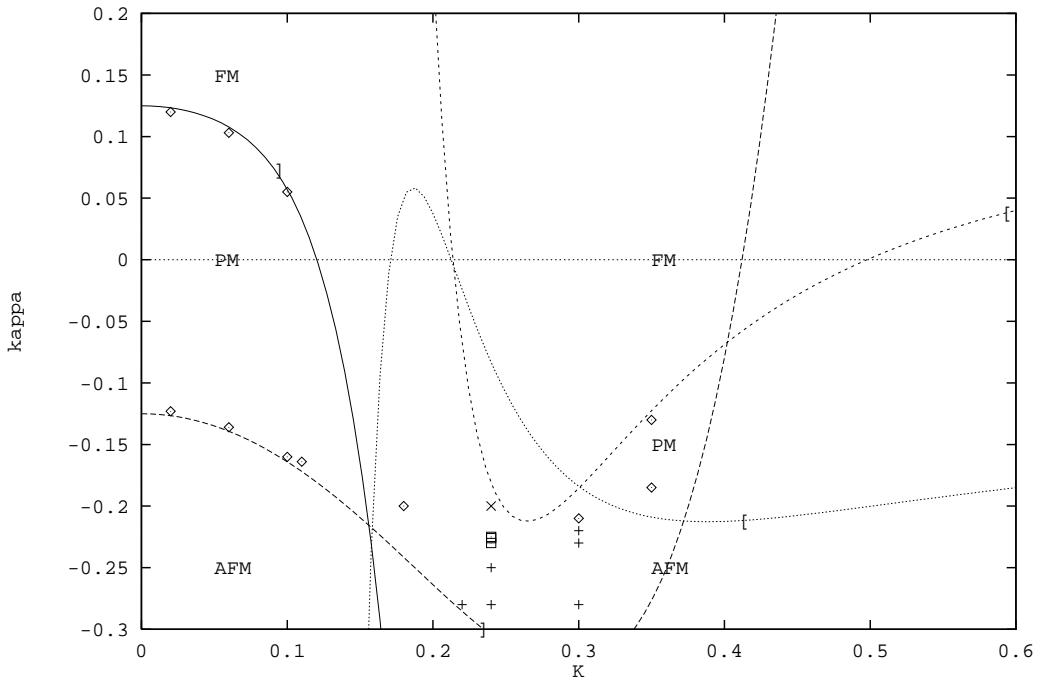


Abbildung 2: Phasenstruktur des $U(1)$ -Modells für $\lambda = \infty$, $G_\psi = 0.1$, $G_\chi = -1.0$. Die Rauten stehen wie bisher für Messpunkte in der PM-phase mit $m_R \simeq 1$, Quadrate repräsentieren Messpunkte in der FI-phase, „ \times “ in der FM-Phase und „ $+$ “ in der AFM-Phase. Die Kurven werden durch dieselben Beziehungen wie in Figur 1 definiert.

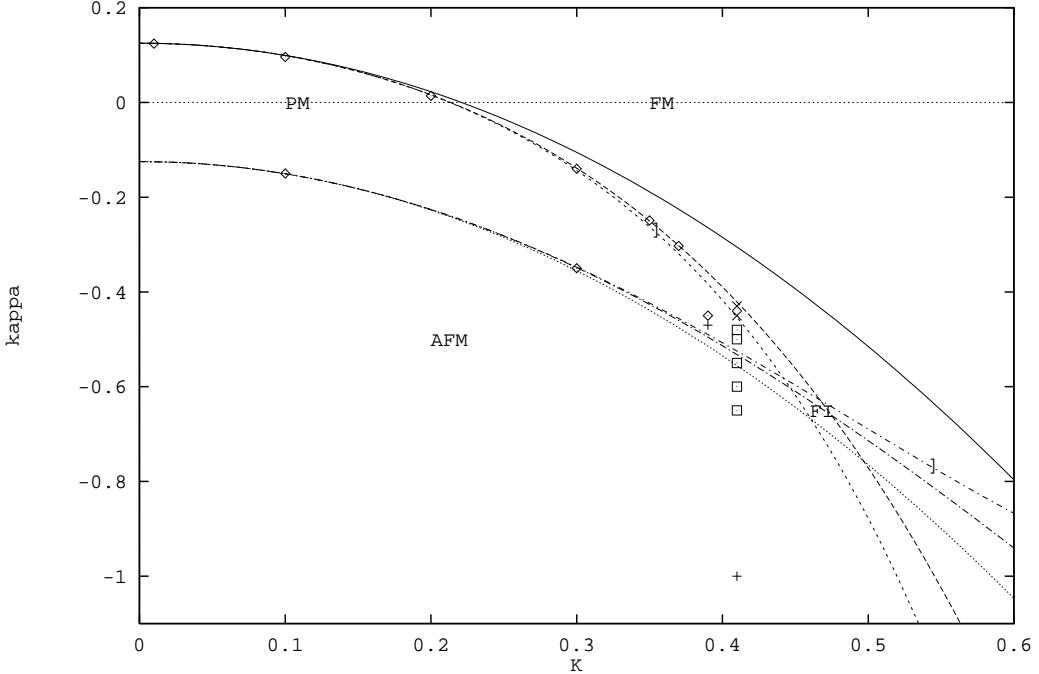


Abbildung 3: Phasenstruktur des U(1)-Modells für $\lambda = \infty$, $G_\psi = 2.0$, $G_\chi = -2.0$. Die Symbole sind wie in den vorigen Abbildungen verwendet. Die Kurven gehören diesmal zu den verschiedenen Ordnungen in K der Gleichungen (40,53). Für die ferromagnetische Phasengrenze nimmt die Ordnung von oben nach unten zu, bei der antiferromagnetischen Grenze ist es umgekehrt.

Ist eine vollständige Summation führender Terme in einer Entwicklung nicht möglich oder lassen sich nicht einmal einzelne Ordnungen systematisch berechnen, kann über den Konvergenzradius einer solchen Entwicklung nur eine beschränkte Aussage gemacht werden (s.u.). In unserem Fall sei daher festgelegt, daß man den Gültigkeitsbereich der MF-Resultate verläßt, sobald die Korrekturen an den bis zur vierten Ordnung bestimmten Werten durch Terme sechster Ordnung in K größer als fünf Prozent sind. Innerhalb dieser Grenzen, sie sind in den Abbildungen durch eckige Klammern auf den Kurven verdeutlicht, sollte man auch bei Berücksichtigung weiterer Ordnungen keine wesentlichen Änderungen mehr erwarten. Außerhalb dieses Bereiches können allenfalls noch qualitative Aussagen möglich sein. Das Studium der voranstehenden Abbildungen ergibt das folgende Bild:

1. Betrachtet man den Bereich kleiner K , zeigt ein Vergleich der Abbildungen, daß sich der Gültigkeitsbereich dieser Entwicklung von Abbildung 1 bzw. 2 zu Abbildung 3 vergrößert und die Übereinstimmung mit den numerischen Daten dabei zunehmend besser wird. Dies wird plausibel, wenn man bedenkt, daß der Entwicklungsparameter proportional zu $\frac{K^{2d}}{(G_\psi G_\chi - 1)^2}$ ist und demnach in Abbildung 3 für festes K deutlich kleiner wird. Insbesondere im physikalisch interessanten Fall der Entkopplung der Spiegelfermionen, d.h. $G_\chi = 0$, darf die Leistungsfähigkeit der MFA im Bereich kleiner K -Werte daher nicht überschätzt werden.
2. Trotz der unsystematischen Näherung im Verlauf der inversen HPE wird die Phasengrenze auch für große K gut approximiert, wie in Abbildung 1 zu sehen ist. Da allerdings für andere Punkte im Parameterraum numerische Vergleichsdaten fehlen – in Abbildung 2 liegen sie außerhalb des Gültigkeitsbereichs der MFA –, ist diese gute Übereinstimmung nicht überzubewerten.

3. Außerhalb des durch MF-Rechnungen approximierbaren Bereichs, d.h. für mittlere K treffen die analytischen Resultate immerhin noch die richtigen Aussagen hinsichtlich der Existenz einer ferrimagnetischen Phase. Während sie im Fall der Abbildung 1 bereits durch das Verhalten der inversen HPE nahezu ausgeschlossen werden kann, ist sie auf dieser Ebene in den beiden anderen Fällen vorhanden.

An dieser Stelle sei nochmals betont, daß die Datenpunkte der numerischen Rechnungen sich auf eine skalare Masse von ungefähr Eins in der symmetrischen Phase beziehen. Sie sollen also im Gegensatz zu den MF-Resultaten keinesfalls die Phasengrenze darstellen, sondern dazu näherungsweise parallelverschoben in der symmetrischen Phase liegen. Damit wird deutlich, daß die MFA in allen drei oben gezeigten Fällen die Größe der ungeordneten PM-Phase unterschätzt. Dieses Phänomen ist für die MFA charakteristisch und liegt in der Vernachlässigung von Fluktuationen durch Einführung eines mittleren Feldes begründet. Unterdrückte Fluktuationen verkleinern den Bereich der ungeordneten Phase.

Weitere, exemplarisch bereits durch MC-Rechnungen bekräftigte Vermutungen über die Phasenstruktur, die auch durch die MFA Bestätigung finden, sind die folgenden:

1. Im absteigenden Teil der FM-PM-Phasengrenze ist deren Krümmung stärker als die der PM-AFM-Phasengrenze, wie ein Blick auf die Gleichungen (40,53) sofort zeigt.
2. Beim Übergang zu größeren Werten von $|G_\psi|$ und $|G_\chi|$ wächst die Breite der FI-Phase. Definiert man ihre Breite als den Abstand der Schnittpunkte der FM-PM-Phasengrenze mit der PM-AFM-Phasengrenze für die einfache und inverse HPE, so findet sich dieser Sachverhalt auch in der MFA.
3. Bei noch größeren Beträgen der Yukawakopplungen verschwindet die FI-Phase wieder. In der MFA bis zur sechsten Ordnung in K bzw. K^{-1} ist dies der Fall, wenn beide Beträge größer als Drei sind.
4. Die FI-Phase verschwindet auch für hinreichend große K . In der MFA sind die Phasengrenzen für sehr große K gemäß (50,54) durch $\kappa_{cr} = \pm \frac{1}{8} - \frac{c}{(8K)^2}$ gegeben, wobei c nicht von K abhängt. Sie schneiden sich daher in diesem Bereich nicht, und die Grenze zur FM-Phase liegt über derjenigen zur AFM-Phase, so daß dort keine FI-Phase existiert.
5. Hält man eine der Yukawakopplungen fest und erhöht den Betrag der anderen, so wandert die FI-Phase, sobald sie existiert, zu größeren K -Werten. Auch dies wurde durch eine einfache Meßreihe für wachsende G_χ bestätigt.

Da für alle soeben geschilderten Feststellungen, abgesehen von den Daten der obigen Abbildungen, numerische Resultate fehlen, ist ein quantitativer Vergleich nicht möglich. Auf die explizite Angabe von MF-Resultaten, welche die obigen Aussagen untermauern, wird daher verzichtet.

2.3.3 Das Verhalten bei endlichen λ -Werten

Für endliche Werte der skalaren Selbstkopplung ist das Higgsfeld nicht länger auf die Einheitslänge festgelegt. Daher entfällt auch die Integration über den Betrag des

Feldes nicht mehr, und der Ausdruck für die Zustandssumme lautet nun

$$Z = \left(\prod_x \int_0^\infty |\phi_x| d|\phi_x| \int d\mu_x \right) \left(\prod_y \int d\psi_y d\bar{\psi}_y \right) e^{-S} , \quad (55)$$

wobei die Wirkung wieder in ihrer allgemeinen Form (14) eingeht. Hier wie auch im folgenden werden alle Normierungsfaktoren weggelassen, da sie bei der Berechnung von Erwartungswerten ohnehin herausfallen. Nach Integration über die fermionischen Freiheitsgrade erhält man wie gewohnt

$$Z = \left(\prod_x \int_0^\infty |\phi_x| d|\phi_x| \int d\mu_x \right) e^{-S_B + \ln \det \bar{Q}} . \quad (56)$$

Die eigentlichen Schwierigkeiten treten erst jetzt bei der Einführung und Berechnung des neuen Maßes auf. Es ist definiert durch:

$$\frac{1}{Z_H} e^{-\sum_x [|\phi_x|^2 + \lambda(|\phi_x|^2 - 1)^2]} e^{\frac{1}{2}(H \sum_x \phi_x^+ + H^+ \sum_x \phi_x)} . \quad (57)$$

Die Zustandssumme Z_H lautet demzufolge

$$Z_H \equiv \left(\prod_x \int_0^\infty |\phi_x| d|\phi_x| \int d\mu_x \right) e^{-\sum_x [|\phi_x|^2 + \lambda(|\phi_x|^2 - 1)^2]} e^{\frac{1}{2}(H \sum_x \phi_x^+ + H^+ \sum_x \phi_x)} . \quad (58)$$

Die Ausführung der θ -Integration verläuft wie im Falle unendlicher Selbstkopplung und führt auf das Integral:

$$Z_H = \prod_x \left(\int_0^\infty |\phi_x| d|\phi_x| e^{-|\phi_x|^2 - \lambda(|\phi_x|^2 - 1)^2} I_0(|H||\phi_x|) \right) . \quad (59)$$

Mit der Potenzreihendarstellung der Besselfunktion und Substitution von $|\phi_x|^2$ durch ν_x ergibt sich eine Summe von Integralen des Typs

$$\int_0^\infty d\nu e^{-(1-2\lambda)\nu - \lambda\nu^2} \nu^k , \quad (60)$$

die im wesentlichen durch die parabolischen Zylinderfunktionen $D_n(z)$ beschrieben werden. In der Notation von [38] erhält man schließlich das Resultat:

$$Z_H = \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\frac{1}{4}|H|^2)^k}{k!} (2\lambda)^{-\frac{k}{2}} D_{-k-1} \left(\frac{1-2\lambda}{\sqrt{2\lambda}} \right) \right]^N \equiv (F_0(|H|, \lambda))^N . \quad (61)$$

Infolgedessen hat Z_H bezüglich des Parameters H dieselbe Struktur wie schon bei divergenter Selbstkopplung. Es ist die N -te Potenz einer in $|H|$ geraden Funktion. Insbesondere läßt sich daraus ableiten (Anhang A), daß auch hier die für die Auswahl der relevanten Graphen maßgebliche Beziehung $\langle (\phi_x)^n \rangle_H = O(H^n)$ erfüllt ist.

Die nun folgenden, weiterführenden Untersuchungen sind nach zunehmender Komplexität geordnet. Für verschwindendes Produkt $GG \equiv G_\psi G_\chi$ oder für großes K reicht wie bisher eine K - bzw. $1/K$ -Entwicklung aus. Ist $K = 0$, so hat man in Potenzen von GG bzw. $1/GG$ zu entwickeln. Ein nichtverschwindendes Produkt GG und ein kleiner Hoppingparameters K führen auf die Entwicklung in eine Doppelreihe bezüglich dieser beiden Größen.

Die $1/K$ -Entwicklung und der Fall $G_\psi G_\chi = 0$

Der Fall endlicher Selbstkopplung unterscheidet sich von den bisherigen Betrachtungen nicht nur in der für die Berechnung von Erwartungswerten zugrundegelegten Zustandssumme Z_H , sondern im allgemeinen auch durch die Observablen selbst, deren Erwartungswerte zu berechnen sind, d.h. durch die Potenzen von $|\phi|$. In der Notation von (32) gilt nämlich jetzt für die einfache K -Entwicklung

$$\begin{aligned} \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H &= 4N \langle \ln [\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)|\phi|^2] \rangle_H - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{2i} K^{2i} \times \\ &\quad \times \sum_{x_1 \dots x_{2i}} \langle \text{tr} \left(\frac{M_{x_1} - G_{x_1}}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)|\phi_{x_1}|^2} \bar{H}_{x_1 x_2} \cdots \bar{H}_{x_{2i} x_1} \right) \rangle_H . \end{aligned} \quad (62)$$

Nur bei verschwindendem $G_\psi G_\chi = G_\alpha^2 - G_\beta^2$ erhält man folglich die für $\lambda = \infty$ üblichen Potenzen in $|\phi|$. Für die inverse HPE ist keine solche Einschränkung nötig, da dort (41) der störende Faktor $(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)|\phi|^2)^{-1}$ nicht auftritt. In beiden Fällen enthalten dann alle Graphen bis zur sechsten Ordnung in K bzw. K^{-1} wie bisher gerade das Produkt $\langle \phi^+ \rangle_H \langle \phi \rangle_H$. Frühestens in achter Ordnung von K bzw. K^{-1} kann ein Faktor $\langle |\phi|^2 \rangle$ hinzukommen (am Kreuzungspunkt des Graphen aus (33)), der die Ordnung Null in $|H|$ hat, so daß der gesamte Graph weiterhin von $O(|H|^2)$ ist.

Für den Erwartungswert ergibt sich analog zu $\lambda = \infty$ (Anhang A)

$$\langle \phi \rangle_H = \frac{H}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \frac{D_{-2}}{D_{-1}} \left(\frac{1-2\lambda}{\sqrt{2\lambda}} \right) + O(H^3) \equiv \frac{H}{2} f(\lambda) + O(H^3) . \quad (63)$$

D.h. der Unterschied zu unendlicher Selbstkopplung besteht in der Multiplikation aller Erwartungswerte mit $f(\lambda)$. Definiert man die Zustandssumme der MFA auf dieselbe Weise wie früher, folgt somit für die freie Energie bis zur zweiten Ordnung in $|H|$

$$\begin{aligned} W_{\text{MFA}} &\equiv -\frac{1}{N} \ln Z_{\text{MFA}} \\ &= \frac{1}{4} |H|^2 f(\lambda) - \frac{1}{2} \kappa d |H|^2 f(\lambda)^2 - \frac{1}{N} \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H^{\lambda=\infty} f(\lambda)^2 + O(|H|^3) . \end{aligned} \quad (64)$$

Dabei ist die λ -Abhängigkeit der Graphen, die bei Entwicklung des fermionischen Anteils bis zur sechsten Ordnung in K bzw. K^{-1} auftreten, aus $\langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H$ herausgezogen worden. Diese Größe ist demzufolge, wie bereits die Indizierung andeutet soll, exakt dieselbe wie im Fall $\lambda = \infty$. Für das kritische κ resultiert dann aus der Bedingung (28) in $d = 4$ Dimensionen die Gleichung:

$$\kappa_{cr} = \pm \frac{1}{8} f(\lambda)^{-1} - \{ \quad \} . \quad (65)$$

Die geschweifte Klammer ist je nach betrachtetem Phasenübergang identisch mit denen aus (40,50,53,54). Das positive Vorzeichen ist beim Übergang zur FM-Phase, das negative beim Übergang zur AFM-Phase zu wählen.

Zusammenfassend bleibt festzuhalten, daß die Betrachtung des Falles $\lambda < \infty$ für große K oder eine verschwindende Yukawakopplung bei Entwicklung bis zur sechsten Ordnung ausschließlich eine Multiplikation des konstanten Anteils im κ_{cr} -Verhalten bewirkt und damit lediglich eine Verschiebung der Phasenübergänge.

Wie Abbildung 4 zeigt, ist diese λ -Abhangigkeit, beschrieben durch $f^{-1}(\lambda)$, allerdings nicht sehr gro. Das asymptotische Verhalten von $f^{-1}(\lambda)$ wird durch den Ausdruck $\frac{2\lambda}{2\lambda - 1}$ charakterisiert, fur verschwindende Selbstkopplung λ nimmt sie den Wert Eins an (Anhang A).

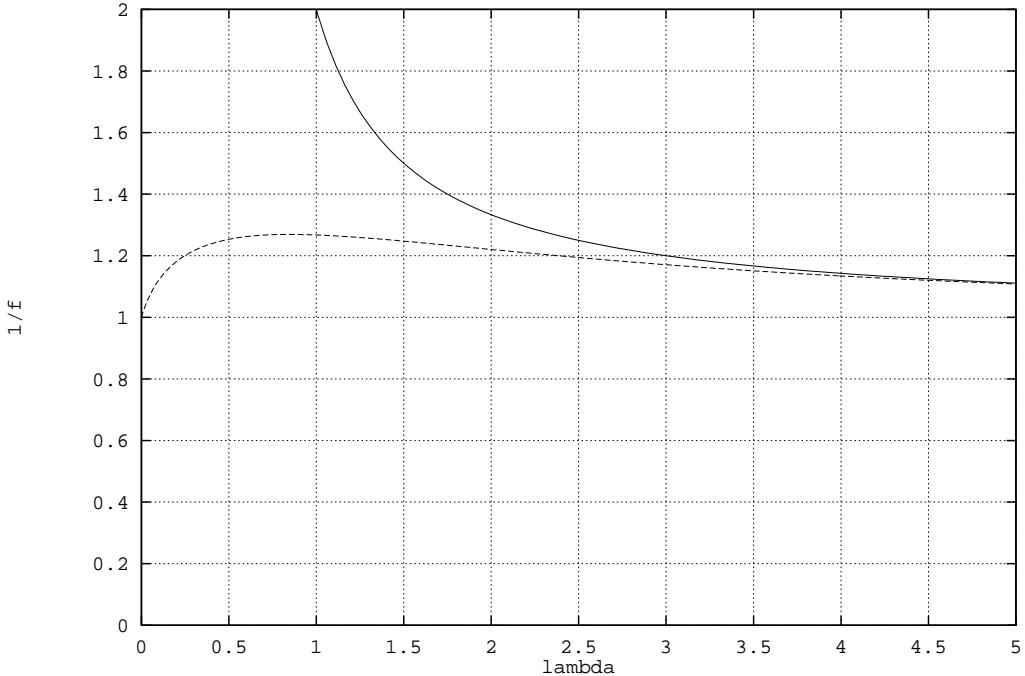


Abbildung 4: $f(\lambda)^{-1}$ sowie $2\lambda/(2\lambda - 1)$

Das Auftreten der Funktion $f(\lambda)$ bereits in dem von K unabhangigen Teil von (65) erlaubt es im Rahmen ihrer numerischen Messung, die Yukawakopplungen und den fermionischen Hoppingparameter auf Null zu setzen, und sorgt somit, bedingt durch die jetzt gegebene, analytische Invertierbarkeit der Fermionmatrix, fur das Verschwinden des numerisch aufwendigsten Teils der Simulation: der iterativen Matrixinversion. Demzufolge lsst sich die Suche nach den Punkten in der symmetrischen Phase, die eine skalare Masse von ungefahr Eins aufweisen, nun mit groerer Statistik durchfuhren. Die Resultate der numerischen Simulation mit Hilfe des Lan- gevinalgorithmus erster Ordnung (Kapitel 4) basieren auf einer Statistik von ca. 20000 Messungen nach einer ebensolangen Equilibrierung. In der folgenden Tabelle werden sie den Ergebnissen der MFA und einer skalaren HPE bis zur vierzehnten Ordnung [26] gegenubergestellt. Eine Interpretation dieser Daten ist allerdings nur eingeschrankt moglich, da unterschiedliche Punkte im Phasenraum betrachtet werden; die MFA bezieht sich auf den Punkt $m_R = 0$, die skalare HPE auf $m_R = 0.5$ und die numerischen Messungen auf $m_R \approx 1$ in der symmetrischen Phase.

Tabelle 1: **Kritisches κ in $G_\psi = G_\chi = K = 0$ in Abhangigkeit von der skalaren Selbstkopplung λ**

λ	κ_{cr}^{num}	κ_{cr}^{MFA}	κ_{cr}^{HPE}
0.01	0.115	0.127	0.128
0.10	0.132	0.140	0.146
1.0	0.155	0.158	0.177
10	0.130	0.132	0.157
100	0.125	0.126	0.151

Es läßt sich eine relativ gute Übereinstimmung der numerisch gewonnenen Daten mit denen der MFA feststellen. Auch sie unterliegt wieder der Eigenschaft der MFA, die Ordnung des Systems zu überschätzen.

Der Fall $K = 0$

Als Vorbereitung auf den allgemeinen Fall nichtverschwindender Yukawakopplungen und kleiner K -Werte sei hier der Hoppingparameter exakt Null. Dann gilt zunächst für kleines GG

$$\begin{aligned} \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H &= 4N \langle \ln[\bar{\mu}^2 - G_\psi G_\chi |\phi|^2] \rangle_H \\ &= -4N \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} \left(\frac{G_\psi G_\chi}{\bar{\mu}^2} \right)^i \langle |\phi|^{2i} \rangle_H + 8N \ln \bar{\mu}. \end{aligned} \quad (66)$$

Im Anhang A wird näher auf die Berechnung der relevanten Erwartungswerte eingegangen. Dort ergibt sich bis zur zweiten Ordnung in $|H|$ der folgende Ausdruck:

$$\langle |\phi|^{2i} \rangle = \frac{i!}{\sqrt{2\lambda}^i} \frac{D_{-i-1}}{D_{-1}} + \left(\frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \right)^{i+1} \frac{i!}{4} \left[(i+1) \frac{D_{-i-2}}{D_{-1}} - \frac{D_{-i-1} D_{-2}}{D_{-1} D_{-2}} \right] |H|^2. \quad (67)$$

Das Argument der bereits erwähnten Zylinderfunktionen ist wie bisher $(1-2\lambda)/\sqrt{2\lambda}$. Die Grenzwerte lauten:

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow 0} \langle |\phi|^{2i} \rangle_H &= i! + \frac{i!}{4} |H|^2, \\ \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \langle |\phi|^{2i} \rangle_H &= 1. \end{aligned} \quad (68)$$

Wie zu erwarten, gibt es daher bei verschwindendem Hoppingparameter K und divergenter Selbstkopplung keinen Beitrag des Logarithmus. κ_{cr} nimmt den konstanten Wert $1/2d$ an.

Das zweite Resultat in (68) stimmt mit dem exakten Fall überein und legt daher die Vermutung nahe, daß für große Selbstkopplungen λ bessere Approximationen an numerische Werte zu erwarten sind. Diese Annahme findet in den folgenden Resultaten eine Bestätigung:

Unter Berücksichtigung der Potenzen in GG bis zur sechsten Ordnung ergibt ein Vergleich mit Daten aus einer HPE in κ bis zur 14. Ordnung [26] die in Abbildung 5 dargestellten Ergebnisse.

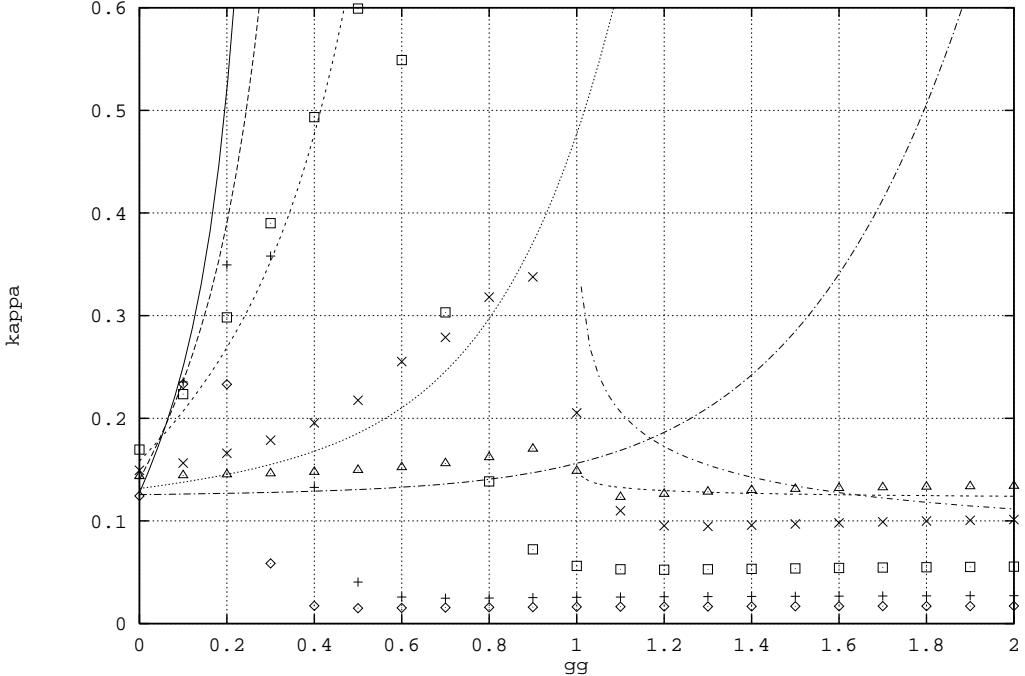


Abbildung 5: Für $K = 0$ charakterisieren die verschiedenen Punkte die Werte von κ , bei denen die skalare Masse in der symmetrischen Phase $m_R = 0.5$ ist. Sie gehören, bei $GG = 1.2$ von unten nach oben gelesen, zu $\lambda = 0.01, 0.1, 1.0, 10.0, 100.0$. Die von links einlaufenden Kurven sind das Resultat der Entwicklung für kleine GG . Das zugehörige λ nimmt bei ihnen in $GG = 0.2$ von oben nach unten zu. Die Kurven im rechten Teil ergeben sich aus einer Entwicklung nach großem GG . Zu der in $GG = 2$ unteren Kurve gehört der Wert $\lambda = 10$, zur oberen $\lambda = 100$.

Der jeweils ansteigende Teil der Meßreihen aus [26] kann also durch diese Approximation qualitativ reproduziert werden. Die Tatsache, daß die Kurven alle zu niedrig liegen, ist wie auch schon in den vorigen Abschnitten ein Charakteristikum der MFA, bedingt durch die der MFA eigenen Überschätzung der geordneten Phase.

Diese Rechnungen machen erneut die Grenzen der MFA deutlich: Aufgrund der „falschen“ Zustandssumme Z_H weichen natürlich auch die Felderwartungswerte $\langle |\phi|^{2i} \rangle_H$ von den tatsächlichen Ergebnissen ab. Diese Abweichung verschwindet, wie oben festgestellt, für den Fall divergenter Selbstkopplung. Je weiter man sich davon entfernt, desto unsicherer sind daher die Aussagen der MFA zu bewerten. Geht man zudem zu höheren Potenzen von $|\phi|$, wird der Fehler erneut zunehmen. Demzufolge sind die Ergebnisse da sehr schlecht, wo kleines λ und großes GG vorgegeben sind, denn letzteres verleiht den höheren Potenzen von $|\phi|$ wachsende Bedeutung. Daß die „Übereinstimmung“ bei kleiner werdendem λ nur bis zu immer geringerem GG besteht, ist deshalb nicht verwunderlich. Es erklärt auch, warum bei der nun folgenden $1/GG$ -Entwicklung, d.h. der Betrachtung großer GG , nur noch für große λ ein akzeptables Ergebnis erzielt werden konnte.

Für großes GG lautet die Entwicklung:

$$\begin{aligned}
 & \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H = \\
 & 4N \left(\langle \ln(GG) \rangle_H + \langle \ln(|\phi|^2) \rangle_H + \langle \ln \left(1 - \frac{\bar{\mu}^2}{GG|\phi|^2} \right) \rangle_H \right) = \\
 & -4N \left(-\ln(GG) + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} \langle (1 - |\phi|^2)^i \rangle_H + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i} \langle \left(\frac{\bar{\mu}^2}{GG|\phi|^2} \right)^i \rangle_H \right). \tag{69}
 \end{aligned}$$

Dabei ist der Erwartungswert inverser Potenzen von $|\phi|$ gegeben durch

$$\langle |\phi|^{-2i} \rangle_H = \frac{1}{F_0(|H|, \lambda)} \left(\frac{1}{4} \int \int dH dH^+ \right)^i F_0(|H|, \lambda). \quad (70)$$

Auch hier war eine Berechnung bis zur zweiten Ordnung in $|H|$ induktiv möglich (Anhang A). Das Resultat ist unabhängig von i und lautet

$$\langle |\phi|^{-2i} \rangle_H = 1 + \frac{1}{4} (1 - f(\lambda)) |H|^2, \quad (71)$$

was im Limes divergenter Selbstkopplung wieder das exakte Resultat liefert. Damit kann man den letzten Term in (69) bereits angeben. Sein zu $|H|^2$ proportionaler Anteil besteht für $\bar{\mu} = 1$ aus:

$$N (1 - f(\lambda)) \ln \left(1 - \frac{1}{GG} \right) |H|^2. \quad (72)$$

Er enthält die zur Bestimmung von κ_{cr} relevante Abhängigkeit von GG bereits vollständig, da der erste Term in (69) nicht von $|H|$ abhängt und daher das Phasenübergangsverhalten nicht beeinflussen kann. Das Problem besteht in der verbleibenden Berechnung der durch den zweiten Term verursachten Verschiebung der Phasengrenze. Hier konnten im Sinne einer Approximation befriedigende Resultate aus den oben angegebenen Gründen nur für große λ erzielt werden, denn dort gilt das folgende Verhalten:

$$\langle |\phi|^{2i} \rangle_H \sim \frac{i}{8\lambda} \left(\frac{2\lambda - 1}{2\lambda} \right)^{i-1} |H|^2. \quad (73)$$

Der zweite Term in (69) verhält sich demzufolge bei großem λ wie

$$N \frac{1}{2\lambda - 1} |H|^2 \quad (74)$$

und führt zusammen mit (72) auf die im rechten Teil von Abbildung 5 angegebenen Kurven.

Anstelle einer analytischen Entwicklung lässt sich in $K = 0$ der fermionische Beitrag auch durch numerische Integration bestimmen. Wegen der Lokalität des Problems ($K = 0$) sind dazu nur eindimensionale Integrale zu betrachten, die sich mit Standardmethoden (NAG) lösen lassen. Sie wurden für die verschiedenen λ -Werte von $GG = 0.0$ bis 2.0 in Schritten von 0.1 bestimmt. Das Resultat zeigt die nachstehende Abbildung. Zur besseren Übersicht sind dort die auf diese Weise berechneten Punkte verbunden worden. Man sieht erneut, daß die Qualität der MFA mit abnehmendem λ bzgl. GG immer früher zu wünschen übrig lässt.

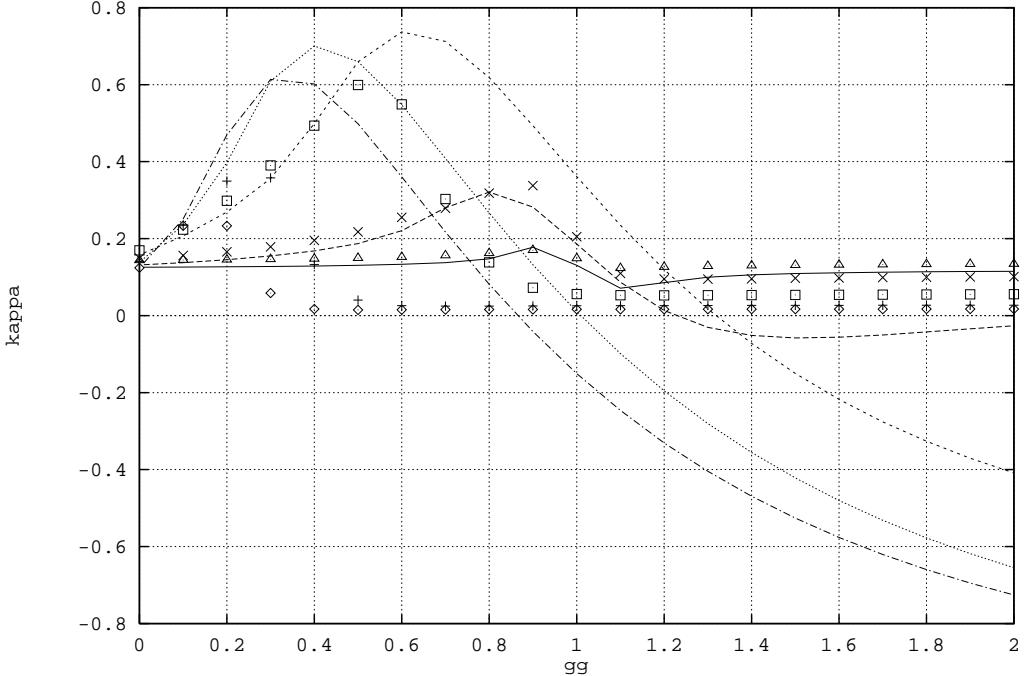


Abbildung 6: Die Datenpunkte sind dieselben wie in Abbildung 5. Den Kurven sind bei $GG = 2$ in aufsteigender Reihenfolge die Werte $\lambda = 0.01, 0.1, 1.0, 10.0, 100.0$ zuzuordnen.

Die HPE für kleine K bei endlichen λ und $G_\psi G_\chi \neq 0$

Vor dem Hintergrund der soeben ausgeführten Vorbereitungen kann das Vorgehen bei kleinem K und endlichem λ nur aus einer Doppelreihenentwicklung in GG und K bestehen. Der Fall großer GG , d.h. die Entwicklung nach GG^{-1} , wird nicht aufgegriffen, da die MFA, wie der obige Abschnitt zeigte, dort nur für sehr große λ , qualitativ akzeptable Resultate liefern kann. Für diese λ -Werte weicht das Verhalten des Modells aber nicht mehr wesentlich von dem bei divergenter Selbstkopplung ab und kann daher durch letzteres approximiert werden.

Da für den betrachteten Fall keine numerischen Vergleichsdaten existieren, geht es im folgenden nur darum, das Prinzip zu verdeutlichen. Zu diesem Zweck reicht es aus, sich auf den PM-FM-Phasenübergang zu beschränken und die Entwicklung bis zur ersten Ordnung in GG und zur vierten Ordnung in K durchzuführen. Die Untersuchung des PM-AFM-Phasenübergangs sollte ebenso wie eine Weiterführung zu höheren Ordnungen keine grundlegenden Probleme mehr bereiten.

Die Ausgangssituation wird nun durch die Gleichung

$$\begin{aligned} < \ln \det \bar{Q} >_H = & 4N < \ln |\bar{\mu}^2 - GG|\phi|^2| >_H \\ & - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{K^{2i}}{2i} < \text{Tr} \left(\frac{M - G}{\bar{\mu}^2 - GG|\phi|^2} \bar{H} \right)^{2i} >_H . \end{aligned} \quad (75)$$

beschrieben. Im Gegensatz zum Fall divergenter Selbstkopplung gibt es jetzt also auch einen Beitrag nullter Ordnung in K . Er war Gegenstand des vorigen Abschnitts. Des Weiteren existieren jetzt Beiträge ohne G-Faktoren, da $M/(\bar{\mu}^2 - GG|\phi|^2)$ – im Gegensatz zu $M/(\bar{\mu}^2 - GG)$ bei $\lambda = \infty$ – relevant von $|H|$ abhängt. Denn die Entwicklung dieses Ausdrucks enthält beliebige Potenzen von $|\phi|^2$, deren Erwartungswerte alle einen zu $|H|^2$ proportionalen Term besitzen (67).

Aus ebendiesem Grund dürfen sich nun auch sämtliche, mit den G-Faktoren verbundenen ϕ zu Betragsquadraten kompensieren, es müssen also nicht wie bei $\lambda = \infty$

zwei getrennte ϕ -Faktoren übrig bleiben. Dieser letzte Typ von Beiträgen tritt allerdings bei Graphen der Länge kleiner oder gleich Vier, wie sie hier betrachtet werden, noch nicht auf.

Abgesehen davon gibt es, wie im Fall divergenten λ 's, nur noch Beiträge von Wegen mit genau zwei getrennten ϕ -Faktoren. Die dafür relevanten Graphen sind demzufolge mit den bisherigen identisch. Graphen mit einer größeren Zahl getrennter ϕ -Faktoren können ebenso wie Graphen mit nur einem freien ϕ nicht beitragen, da $\langle (\phi)^n | \phi |^{2i} \rangle_H = O(H^n)$ und $\langle |\phi|^{2i} \rangle_H = O(1)$ (Anhang A).

Zur Erstellung der Doppelreihe erfolgt nun zunächst die Entwicklung nach GG :

$$\frac{M - G}{\bar{\mu}^2 - GG|\phi|^2} = \frac{M - G}{\bar{\mu}^2} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{GG}{\bar{\mu}^2} |\phi|^2 \right)^j \equiv (M - G) h(|\phi|^2). \quad (76)$$

Bei Entwicklung bis zu n -ten Ordnung in GG sind alle auftretenden Potenzen von $h(|\phi|^2)$ an dieser Stelle abzubrechen. In unserem Fall ($n = 1$) führt dies auf die Näherung:

$$\left(\frac{M - G}{\bar{\mu}^2 - GG|\phi|^2} \right)^{2i} \approx \left(\frac{M - G}{\bar{\mu}^2} \right)^{2i} \left(1 + 2i \frac{GG}{\bar{\mu}^2} |\phi|^2 \right). \quad (77)$$

Zu bestimmen sind jetzt die Koeffizienten von $K^{2i}/2i$, im folgenden mit a_i bezeichnet. Nach Ausführung der Spur über die Ortskoordinaten ergibt sich in diesem Kontext

$$\begin{aligned} a_i &= \langle \text{Tr} \left(\frac{M - G}{\bar{\mu}^2 - GG|\phi|^2} \bar{H} \right)^{2i} \rangle_H \\ &= \sum_{x_1 \dots x_{2i}} \langle \text{tr} \left[(M - G)_{x_1} h(|\phi_{x_1}|^2) \bar{H}_{x_1, x_2} \dots (M - G)_{x_{2i}} h(|\phi_{x_{2i}}|^2) \bar{H}_{x_{2i}, x_1} \right] \rangle_H. \end{aligned} \quad (78)$$

Die Struktur der $8 \otimes 8$ -Matrizen in der Spur erlaubt für beliebige Wege eine weitere Vereinfachung; die Erwartungswerte lassen sich wie bei $\lambda = \infty$ aus der Spur herausziehen. Damit sind aber die Beiträge der Wege, die zwei getrennte ϕ -Faktoren enthalten, mit denen im Fall divergenter Selbstkopplung bis auf die Erwartungswerte identisch, d.h. Art und Einbettung dieser Wege auf dem Gitter können unverändert übernommen werden (Anhang B). Schließlich verbleibt man bei $\bar{\mu} = 1$ mit dem Resultat:

$$\begin{aligned} \langle \ln \det \bar{Q}^+ \bar{Q} \rangle_H &= -4N \quad GG \langle |\phi|^2 \rangle_H + Nd 2^{d/2} \left\{ \right. \\ &\quad \frac{1}{2} K^2 \quad \left[16G_\beta^2 \left(\langle \phi \rangle_H \langle \phi^+ \rangle_H + GG \langle \phi | \phi |^2 \rangle_H \langle \phi^+ \rangle_H \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + GG \langle \phi \rangle_H \langle \phi^+ | \phi |^2 \rangle_H \right) \right] + \\ &\quad \frac{1}{4} K^4 \quad \left[64 \left[3G_\alpha^2(d-1) + G_\beta^2(5d-3) \right] \left[\langle \phi \rangle_H \langle \phi^+ \rangle_H + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. GG \left(\langle \phi | \phi |^2 \rangle_H \langle \phi^+ \rangle_H + \langle \phi \rangle_H \langle \phi^+ | \phi |^2 \rangle_H \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + \langle \phi \rangle_H \langle \phi^+ \rangle_H \langle 2 | \phi |^2 \rangle_H \right) \right] + \\ &\quad \left. \left. 16(d-1)GG \langle 4 | \phi |^2 \rangle_H \right] \right\}. \end{aligned} \quad (79)$$

Im Vergleich zum Fall divergenter Kopplung (39) bekommt man zusätzlich den ersten Term, von nullter Ordnung in K , der im vorigen Abschnitt untersucht wurde, und den letzten Term. Dieser stammt vom Weg kleinster Länge, der keine G-Faktoren trägt, dem Rand einer einfachen Plakette, ist also proportional zu $\bar{\mu}^4$. Die beiden anderen Terme entstehen, wie leicht einzusehen ist, aus den entsprechenden in (39)

durch Ersetzung der Erwartungswerte.

Für den bei endlicher Kopplung zu Beginn betrachteten Fall $GG = 0$ erkennt man hier nochmals explizit, daß sich der fermionische Beitrag aufgrund von (63) nur durch einen Faktor $f(\lambda)^2$ vom Fall divergenter Selbstkopplung (39) unterscheidet. Schließlich erhält man für das kritische κ in $d = 4$ Dimensionen in führender Ordnung von d den nachstehenden, von $\lambda, K, G_\psi, G_\chi$ abhängigen Ausdruck:

$$\begin{aligned} \kappa_{cr} = & \frac{1}{8} + \frac{GG}{2\lambda} \left(2 \frac{D_{-3}}{D_{-2}} - \frac{D_{-2}}{D_{-1}} \right) \frac{D_{-2}}{D_{-1}} - \\ & \left\{ K^2 \left[64G_\beta^2 \left(\frac{1}{8\lambda} \left(\frac{D_{-2}}{D_{-1}} \right)^2 + \frac{GG}{\sqrt{2\lambda}^3} \frac{D_{-3}D_{-2}}{D_{-1}D_{-1}} \right) \right] \right. \\ & + K^4 \left[(1536G_\alpha^2 + 2560G_\beta^2) \left(\frac{1}{8\lambda} \left(\frac{D_{-2}}{D_{-1}} \right)^2 + \frac{GG}{\sqrt{2\lambda}^3} \left(\frac{D_{-3}D_{-2}}{D_{-1}D_{-1}} + \left(\frac{D_{-2}}{D_{-1}} \right)^3 \right) \right) \right. \\ & \left. \left. + 256 \frac{GG}{\lambda} \left(2 \frac{D_{-3}}{D_{-2}} - \frac{D_{-2}}{D_{-1}} \right) \frac{D_{-2}}{D_{-1}} \right\} . \right. \end{aligned} \quad (80)$$

Die D_i bezeichnen erneut die parabolischen Zylinderfunktionen mit dem Argument $\frac{1-2\lambda}{\sqrt{2\lambda}}$.

2.4 Das $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -Modell

Bei divergenter skalarer Kopplung wird dieses Modell durch folgende Wirkung beschrieben:

$$\begin{aligned} S &= -\kappa \sum_x \sum_{\mu>0}^d \text{Tr}(\varphi_{x+\hat{\mu}}^+ \varphi_x) + \sum_{x,y} \bar{\Psi}_y Q(\varphi)_{y,x} \Psi_x \\ &\equiv S_B^\infty + S_F . \end{aligned} \quad (81)$$

$\Psi_y = (\psi_y, \chi_y)$ bezeichnet erneut das Fermion-Spiegelfermion-Paar, allerdings mit zusätzlichem $SU(2)$ -Freiheitsgrad. Das nun vierkomponentige Skalarfeld wird auch hier durch die divergente Higgskopplung auf die Einheitslänge festgelegt. Es läßt sich daher als $SU(2)$ -Matrix ausdrücken und führt mit $T = (\mathbb{1}, i\vec{\sigma})$ und der Einsteinschen Summenkonvention auf die Schreibweise $\varphi_x \equiv T^k \phi_x^k$. Die im weiteren verwendete A-B-Darstellung für die Fermionmatrix lautet analog zur entsprechenden Beziehungen des $U(1)$ -Modells in $8 \otimes 8$ -Blocknotation:

$$\bar{Q}(\phi)_{yx} = \begin{pmatrix} \delta_{yx} - K \sum_\mu \delta_{y,x+\hat{\mu}} (\gamma_\mu + r) & \delta_{yx} (G_\alpha - \gamma_5 G_\beta) \varphi_x \\ \delta_{yx} (G_\alpha + \gamma_5 G_\beta) \varphi_x^+ & \delta_{yx} - K \sum_\mu \delta_{y,x+\hat{\mu}} (\gamma_\mu + r) \end{pmatrix} . \quad (82)$$

Die Berechnung der Zustandssumme erfolgt nun mit Hilfe eines entsprechenden Parameters $\mathcal{H} = T^k H^k$, welcher aber nicht wie φ auf die Einheitslänge beschränkt sein muß. Bezeichnet man das Gruppenmaß mit $d\mu$, ergibt sich zunächst

$$Z_H \equiv \left(\prod_x \int d\mu_x \right) \exp \left(\sum_x H^k \phi_x^k \right) = (I_0(|H|) - I_2(|H|))^N . \quad (83)$$

Daraus folgt die Zustandssumme in MFA:

$$Z_{\text{MFA}} = Z_H \exp \left(\langle -S_B^\infty + \ln \det \bar{Q} - \sum_x H^k \phi_x^k \rangle_H \right) \leq Z . \quad (84)$$

Für die als Funktion von H zu minimierende freie Energie resultiert unter der Berücksichtigung der Beziehungen $\langle \phi_x^k \rangle_H = \frac{1}{4} H^k + O(H^3)$ sowie $\ln(I_0(|H|) - I_2(|H|)) = \frac{1}{8} |H|^2 + O(|H|^4)$, der Ausdruck:

$$W_{\text{MFA}}(H) = -\frac{1}{8} |H|^2 - \frac{1}{8} \kappa d |H|^2 - \frac{1}{N} \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H + \frac{1}{4} |H|^2 . \quad (85)$$

Ein Extremum von W_{MFA} in $H = 0$ wird erneut durch die Invarianzeigenschaften des Maßes in (83) sichergestellt. Für den Logarithmus der Fermiondeterminante ist daher wieder eine HPE durchzuführen, die Terme der Ordnung $O(|H|^2)$ berücksichtigt.

2.4.1 HPE von $\langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H$

Zunächst gelangt man analog dem $U(1)$ -Modell zu der Beziehung:

$$\begin{aligned} \langle \ln \det \bar{Q} \rangle_H &= 8N \ln[\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)] - \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{2i} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^{2i} \times \\ &\quad \times \sum_{x_1 \dots x_{2i}} \langle \text{tr}((M_{x_1} - G_{x_1}) \bar{H}_{x_1 x_2} \cdots (M_{x_{2i}} - G_{x_{2i}}) \bar{H}_{x_{2i} x_1}) \rangle_H . \end{aligned} \quad (86)$$

Jetzt allerdings ist die Spur auch über den zusätzlichen Freiheitsgrad der SU(2)-Gruppe zu nehmen, im ganzen also ist tr eine Spur über $16 \otimes 16$ -Matrizen. Bedingt durch deren Blockstruktur tragen wie im vorigen Abschnitt wieder nur Terme mit einer geraden Anzahl von G-Faktoren bei.

Basierend auf der im Vergleich zum U(1)-Fall veränderten Zustandssumme Z_H läßt sich zeigen (Anhang A), daß der Zusammenhang

$$\langle \phi_x^{k_1} \cdots \phi_x^{k_{2n-1}} \rangle_H = O(H), \quad \langle \phi_x^{k_1} \cdots \phi_x^{k_{2n}} \rangle_H = O(1) \quad (87)$$

besteht. Deshalb sind in Verallgemeinerung zur U(1)-Symmetrie auch die Graphen relevant, die an allen bis auf zwei Gitterpunkten eine gerade Zahl von φ -Feldern tragen. Dabei werden keinerlei Bedingungen mehr an das Zusammentreffen von φ_x und φ_x^+ geknüpft. Eine zusätzliche Erweiterung erfährt die zu berücksichtigende Graphenklasse aufgrund von Termen höherer Ordnung in H in (87). Ihretwegen sind ebenso jene Graphen einzubeziehen, die auf allen Gitterpunkten eine gerade Zahl von φ -Feldern, insgesamt aber wenigstens zwei, tragen.

Betrachtet man zunächst alle schon im U(1)-Fall relevanten Graphen, so läßt sich dort wegen des Auftretens von genau zwei ϕ -Faktoren, bedingt durch die Gleichung

$$\langle \text{tr}(\varphi_{x_1} \varphi_{x_2}^+) \rangle_H = \frac{1}{8} |H|^2 = \langle \text{tr}(\varphi_{x_1}^+ \varphi_{x_2}) \rangle_H, \quad (88)$$

die SU(2)-Spur als multiplikativer Faktor aus der Spur über alle Freiheitsgrade herausziehen. Der zu $\bar{\mu}^{2i-2}$ proportionale Term der Gesamtspur aus (34) bleibt daher bis auf die Ersetzung von $\frac{1}{4}|H|^2$ im U(1)- durch $\frac{1}{8}|H|^2$ im SU(2)-Modell unverändert. Für die bereits im U(1)-Fall betrachteten Graphen ist also lediglich diese Substitution durchzuführen. Die Vergrößerung der Klasse der relevanten Graphen äußert sich darin, daß bei Rechnungen bis zur sechsten Ordnung in K nun auch Teile der zu $\bar{\mu}^{2i-4}$ und $\bar{\mu}^{2i-6}$ proportionalen Terme berücksichtigt werden müssen. Es ergibt sich schließlich für die Entwicklung bis zur sechsten Ordnung in K der Ausdruck:

$$\begin{aligned} \langle \ln \det \bar{Q}^+ \bar{Q} \rangle_H &= 16N \ln(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)) + \frac{1}{8}|H|^2 Nd2^{d/2} \left\{ \right. \\ &\frac{1}{2} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^2 16G_\beta^2 + \\ &\frac{1}{4} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^4 \left[64\bar{\mu}^2 \left(3G_\alpha^2(d-1) + G_\beta^2(5d-3) \right) + \right. \\ &\quad \left. 16G_\beta^2 \left(G_\beta^2(d+3) + G_\alpha^2 d \right) \right] + \\ &\frac{1}{6} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^6 \left[384\bar{\mu}^4 \left(5G_\alpha^2(4d^2 - 9d + 5) + G_\beta^2(13d^2 - 21d + 10) \right) + \right. \\ &\quad \left. 192\bar{\mu}^2 G_\beta^2 \left((G_\beta^2(5d^2 - 3d - 2) + G_\alpha^2(11d^2 - 7d - 2) \right) + \right. \\ &\quad \left. 32G_\beta^2 \left(G_\beta^4(d^2 + 3) + G_\alpha^2 G_\beta^2(2d^2 - d + 1) + G_\alpha^4(d^2 - d + 1) \right) \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (89)$$

Der Zusammenhang, der den Phasenübergang zwischen PM- und FM-Phase für $d = 4$ Dimensionen in führender Ordnung d charakterisiert, lautet demnach:

$$\begin{aligned} \kappa_{cr} = \frac{1}{4} - \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^2 8(G_\psi - G_\chi)^2 + \\ \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^4 [192(G_\psi + G_\chi)^2 + 320(G_\psi - G_\chi)^2 \\ \quad + 4(G_\psi - G_\chi)^4 + 4(G_\psi^2 - G_\chi^2)^2] + \\ \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^6 [20480(G_\psi + G_\chi)^2 + 13312(G_\psi - G_\chi)^2 \\ \quad + 640(G_\psi - G_\chi)^4 + 1408(G_\psi^2 - G_\chi^2)^2 \\ \quad + \frac{16}{3}(G_\psi - G_\chi)^6 + \frac{32}{3}(G_\psi - G_\chi)^4(G_\psi + G_\chi)^2 \\ \quad + \frac{16}{3}(G_\psi - G_\chi)^2(G_\psi + G_\chi)^4] \end{array} \right\}. \end{aligned} \quad (90)$$

Entsprechend dem U(1)-Modell kommt es auch hier bei einigen Graphen zu einem Vorzeichenwechsel, wenn man den Übergangs zur AFM-Phase betrachtet. Dies führt für den PM-AFM-Phasenübergang auf

$$\begin{aligned}
\langle \ln \det \bar{Q}^+ \bar{Q} \rangle_H &= 16N \ln(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)) - \frac{1}{8}|H|^2 N d 2^{d/2} \left\{ \right. \\
&\frac{1}{2} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^2 16G_\beta^2 + \\
&\frac{1}{4} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^4 \left[64\bar{\mu}^2 \left(G_\alpha^2(d-1) - G_\beta^2(d+1) \right) - \right. \\
&\quad \left. 16G_\beta^2 \left(G_\beta^2(d+3) + G_\alpha^2 d \right) \right] + \\
&\frac{1}{6} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^6 \left[384\bar{\mu}^4 \left(G_\alpha^2(4d^2 - 9d + 5) - G_\beta^2(3d^2 - 7d + 2) \right) + \right. \\
&\quad 192\bar{\mu}^2 G_\beta^2 \left((G_\beta^2(d^2 - 3d + 2) - G_\alpha^2(d^2 - d - 2)) + \right. \\
&\quad \left. \left. 32G_\beta^2 \left(G_\beta^4(d^2 + 3) + G_\alpha^2 G_\beta^2(2d^2 - d + 1) + G_\alpha^4(d^2 - d + 1) \right) \right] \right\} \tag{91}
\end{aligned}$$

und in führender Ordnung d in $d = 4$ Dimensionen schließlich zu

$$\begin{aligned}
\kappa_{cr} = -\frac{1}{4} - \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^2 8(G_\psi - G_\chi)^2 + \\ \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^4 [64(G_\psi + G_\chi)^2 - 64(G_\psi - G_\chi)^2 \\ \quad - 4(G_\psi - G_\chi)^4 - 4(G_\psi^2 - G_\chi^2)^2] + \\ \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1} \right)^6 [4096(G_\psi + G_\chi)^2 - 3072(G_\psi - G_\chi)^2 \\ \quad + 256(G_\psi - G_\chi)^4 - 128(G_\psi^2 - G_\chi^2)^2 \\ \quad + \frac{16}{3}(G_\psi - G_\chi)^6 + \frac{32}{3}(G_\psi - G_\chi)^4(G_\psi + G_\chi)^2 \\ \quad + \frac{16}{3}(G_\psi - G_\chi)^2(G_\psi + G_\chi)^4] \end{array} \right\}. \tag{92}
\end{aligned}$$

Die Beziehungen für die inverse HPE ergeben sich analog denen des U(1)-Modells. Ein Vergleich von (90) und (92) mit numerischen Daten liefert das nachstehende Bild:

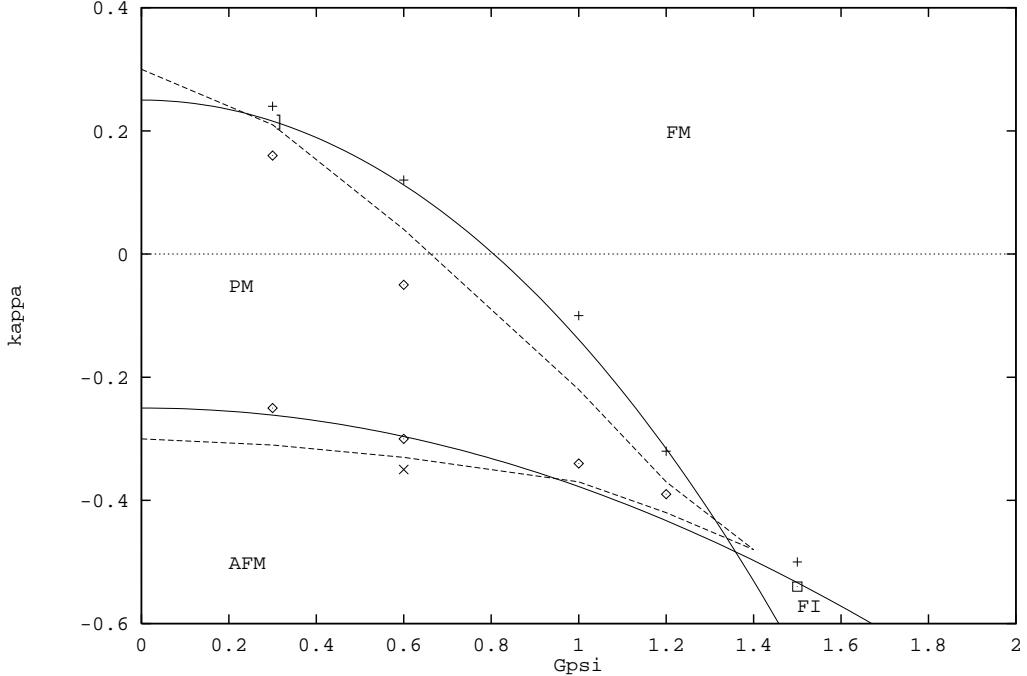


Abbildung 7: Phasenstruktur des SU(2)-Modells für $\lambda = \infty$, $K = 0.125$, $G_\chi = 0$. „+“ zeigen Punkte der MC-Rechnungen in der FM-Phase, Rauten in der PM-, Quadrate in der AFM- und „×“ in der FI-Phase. In allen Punkten ist die Masse des Higgsfeldes ungefähr eins. Die gestrichelte Linie ist eine ebenfalls auf numerische Daten beruhende Abschätzung der Phasengrenze.

Die Übereinstimmung mit den numerischen Daten ist, verglichen mit dem U(1)-Fall, weniger gut. Dennoch kann die MFA ihre Aufgabe einer approximativen Beschreibung erfüllen. Ihr Gültigkeitsbereich wird unter demselben Gesichtspunkt wie bereits im U(1)-Modell festgelegt und ist damit erneut durch die eckigen Klammern begrenzt. Die mit $G_\psi \approx 2.2$ relativ hohe Grenze für den AFM-PM-Übergang steht im Einklang mit der Qualität der MF-Daten. Sie sind für die AFM-PM-Phasengrenze weit besser und müßten durch höhere Ordnungen der HPE nur noch minimal geändert werden, während für die schlechteren PM-FM-Werte eine größere Korrektur erforderlich ist. Ein Vergleich der verschiedenen Ordnungen zeigt, daß die jeweiligen Korrekturen jedesmal eine weitere Annäherung an die numerischen Resultate bedeuten. Mit höheren Ordnungen sollte daher insbesondere der Übergang zur ferromagnetischen Phase noch besser getroffen werden. An den von den MC-Werten abweichenden Startpunkten ± 0.25 der MF-Kurven wird sich dabei allerdings nichts ändern.

2.4.2 Das Verhalten bei endlichen λ -Werten

Wie im U(1)-Modell bedeutet auch hier ein endliches λ eine zusätzliche Integration über die Länge des Higgsfeldes φ . Bezeichnet man das Maß der SU(2) weiterhin mit $d\mu$ lautet die Zustandssumme jetzt

$$Z = \left(\prod_x \int_0^\infty |\phi_x|^3 d|\phi_x| \int d\mu_x \right) \left(\prod_y \int d\psi_y d\bar{\psi}_y \right) e^{-S} , \quad (93)$$

wobei S nun wieder die bosonische Wirkung in ihrer allgemeinen Form enthält:

$$S_B = \sum_x \left\{ \frac{1}{2} \text{Tr}(\varphi_x^+ \varphi) + \lambda \left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\varphi_x^+ \varphi) - 1 \right]^2 - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \text{Tr}(\varphi_{x+\mu}^+ \varphi) \right\}. \quad (94)$$

Erneut ohne Berücksichtigung von Normierungsfaktoren ergibt sich nach Integration über die fermionischen Freiheitsgrade

$$Z = \left(\prod_x \int_0^\infty |\phi_x|^3 d|\phi_x| \int d\mu_x \right) e^{-S_B + \ln \det \bar{Q}}. \quad (95)$$

Die Definition eines neuen Maßes Z_H entsprechend dem U(1)-Modell ergibt nach Ausführung der SU(2)-Gruppenintegration in analoger Weise den Ausdruck:

$$Z_H = \prod_x \left[\int_0^\infty |\phi_x|^3 d|\phi_x| e^{-|\phi_x|^2 - \lambda(|\phi_x|^2 - 1)^2} (I_0(|H||\phi_x|) - I_2(|H||\phi_x|)) \right]. \quad (96)$$

Unter Zuhilfenahme der parabolischen Zylinderfunktionen verbleibt man schließlich mit folgendem Ergebnis:

$$Z_H = \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\frac{1}{4}|H|^2)^k}{k!} \sqrt{2\lambda}^{-k} D_{-k-2} \left(\frac{1-2\lambda}{\sqrt{2\lambda}} \right) \right]^N \equiv (F_1(|H|, \lambda))^N. \quad (97)$$

Da sich auch hier die Struktur von Z_H bzgl. H im Vergleich zur divergenten Selbstkopplung nicht geändert hat, lassen sich wie schon im U(1)-Modell die Ausdrücke für die Felderwartungswerte hinsichtlich ihrer Ordnung in H übernehmen. Lediglich die Koeffizienten sind andere. Demnach gelten auch jetzt die Relationen (87).

Bei den anschließenden Untersuchungen wird nur der Fall $GG = 0$ betrachtet. Er umfaßt den physikalisch interessanten Entkopplungsfall $G_\chi = 0$. Numerische Vergleichsdaten bei endlicher Selbstkopplung liegen allerdings nicht vor. Mit der Abkürzung

$$a_k^\lambda \equiv (2\lambda)^{-\frac{k}{2}} D_{-k-2} \left(\frac{1-2\lambda}{\sqrt{2\lambda}} \right) \quad (98)$$

ergibt sich für die Erwartungswerte, die in den HPE bis zur sechsten Ordnung auftreten können (ein geschlossener Graph der Länge Sechs kann einen Gitterpunkt höchstens dreimal anlaufen und gibt damit Anlaß zu einem Produkt von maximal drei ϕ -Faktoren), das folgende Bild:

$$\begin{aligned} <\phi^k>_H &= H^k \frac{a_1^\lambda}{2a_0^\lambda} + O(H^3) \equiv \frac{H^k}{4} g(\lambda) + O(H^3), \\ <\phi^k \phi^l>_H &= \delta_{kl} \left(\frac{a_1^\lambda}{2a_0^\lambda} + \frac{1}{8}|H|^2 \left(\frac{a_2^\lambda}{a_0^\lambda} - \left(\frac{a_1^\lambda}{a_0^\lambda} \right)^2 \right) \right) + H^k H^l \frac{a_2^\lambda}{4a_0^\lambda} + O(H^4) \\ &\equiv \frac{1}{4} \delta_{kl} g(\lambda) + O(H^2), \\ <\phi^k \phi^l \phi^m>_H &= (\delta_{lm} H^k + \delta_{kl} H^m + \delta_{km} H^l) \frac{a_2^\lambda}{4a_0^\lambda} + O(H^3). \end{aligned} \quad (99)$$

Die größere Komplexität der SU(2) bzgl. der in den Graphen erlaubten ϕ -Faktoren spiegelt sich auch in der λ -Abhängigkeit wider. Sie läßt sich nicht wie im U(1)-Fall vollständig aus der HPE herausziehen, selbst wenn man diese nur bis zur sechsten Ordnung ausführt. Beschränkt man sich wie bisher lediglich auf die führende Ordnung in d , ist das λ -Verhalten allerdings allein durch die Funktion $g(\lambda)$ beschreibbar.

Diese Beschränkung sorgt nämlich dafür, daß nur die ersten beiden Erwartungswerte in (99) eine Rolle spielen, denn ein geschlossener Graph der Länge Sechs, der einen Gitterpunkt dreimal anläuft und zur Ordnung H^2 beiträgt, liefert allenfalls einen Faktor d^2 , ist also nicht von führender Ordnung in d .

Für den PM-FM-Phasenübergang ergibt sich in führender Ordnung d in $d = 4$ Dimensionen unter Berücksichtigung der λ -Abhängigkeit die Beziehung

$$\begin{aligned} \kappa_{cr} = & \frac{1}{4}g(\lambda)^{-1} - \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1}\right)^2 8(G_\psi - G_\chi)^2 + \\ \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1}\right)^4 [192(G_\psi + G_\chi)^2 + 320(G_\psi - G_\chi)^2 \\ + [4(G_\psi - G_\chi)^4 + 4(G_\psi^2 - G_\chi^2)^2]g(\lambda)] + \\ \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1}\right)^6 [20480(G_\psi + G_\chi)^2 + 13312(G_\psi - G_\chi)^2 \\ + [640(G_\psi - G_\chi)^4 + 1408(G_\psi^2 - G_\chi^2)^2]g(\lambda) \\ + [\frac{16}{3}(G_\psi - G_\chi)^6 + \frac{32}{3}(G_\psi - G_\chi)^4(G_\psi + G_\chi)^2 \\ + \frac{16}{3}(G_\psi - G_\chi)^2(G_\psi + G_\chi)^4]g(\lambda)^2] \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (100)$$

und für den PM-AFM-Phasenübergang der Ausdruck

$$\begin{aligned} \kappa_{cr} = & -\frac{1}{4}g(\lambda)^{-1} - \left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1}\right)^2 8(G_\psi - G_\chi)^2 + \\ \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1}\right)^4 [64(G_\psi + G_\chi)^2 - 64(G_\psi - G_\chi)^2 \\ - [4(G_\psi - G_\chi)^4 + 4(G_\psi^2 - G_\chi^2)^2]g(\lambda)] + \\ \left(\frac{K}{G_\psi G_\chi - 1}\right)^6 [4096(G_\psi + G_\chi)^2 - 3072(G_\psi - G_\chi)^2 \\ + [256(G_\psi - G_\chi)^4 - 128(G_\psi^2 - G_\chi^2)^2]g(\lambda) + \\ [\frac{16}{3}(G_\psi - G_\chi)^6 + \frac{32}{3}(G_\psi - G_\chi)^4(G_\psi + G_\chi)^2 \\ + \frac{16}{3}(G_\psi - G_\chi)^2(G_\psi + G_\chi)^4]g(\lambda)^2] \end{array} \right\}. \end{aligned} \quad (101)$$

Asymptotisch verhält sich $g(\lambda)^{-1}$ wie $\frac{4\lambda^2 - 2\lambda}{4\lambda^2 - 2\lambda + 1}$, ihr Grenzwert für verschwindende Selbstkopplung ist $\frac{1}{2}$. Ein genaues Bild zeigt Abbildung 8.

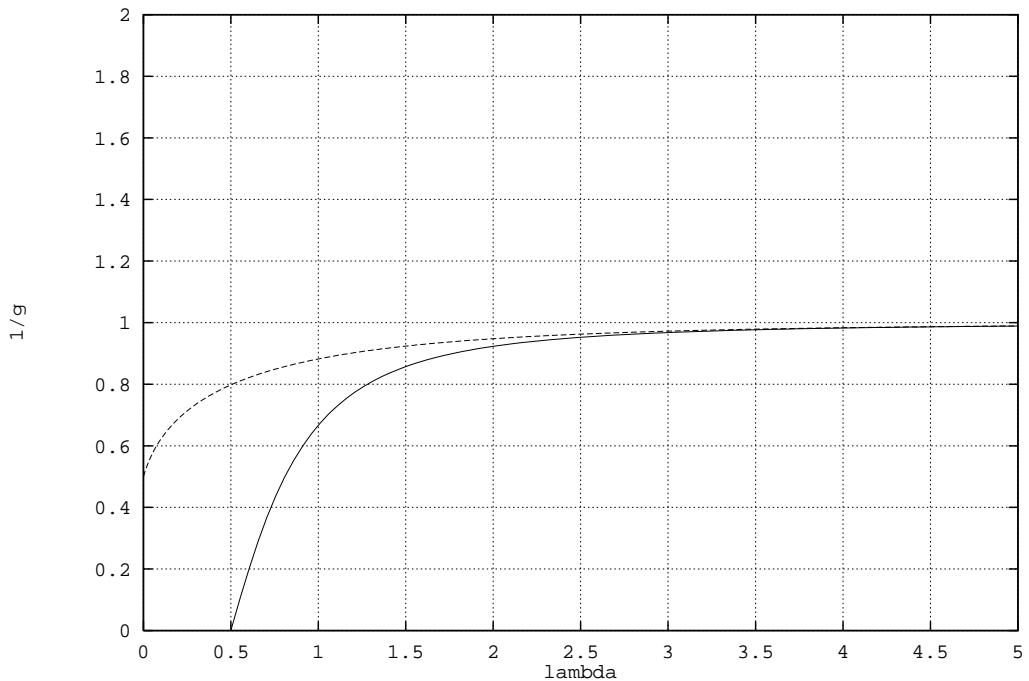


Abbildung 8: $g(\lambda)^{-1}$ sowie $(4\lambda^2 - 2\lambda)/(4\lambda^2 - 2\lambda + 1)$

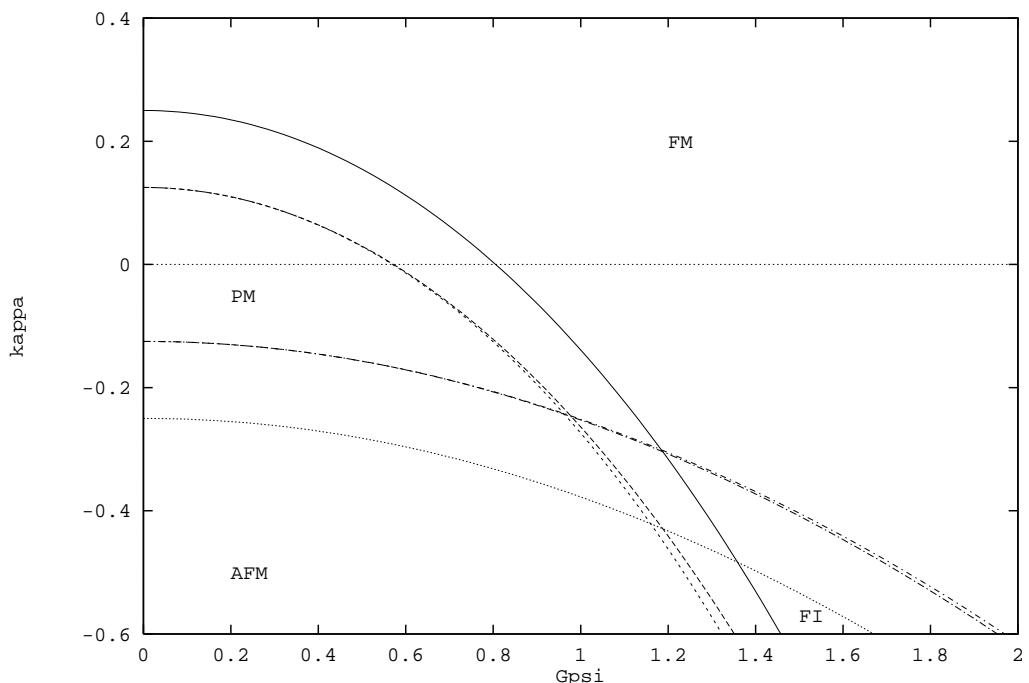


Abbildung 9: Die Phasenübergänge für unendliches und verschwindendes λ in sechster Ordnung K für $K = 0.125$ und $G_\chi = 0$. Die in $\kappa = \pm \frac{1}{8}$ startenden Kurven beziehen sich auf $\lambda = 0$. Für den PM-FM-Übergang ergibt sich die obere und für den PM-AFM-Übergang die untere der beiden $\lambda = 0$ -Kurven aus den $\lambda = \infty$ -Kurven durch reine Verschiebung, d.h. Berücksichtigung von g^{-1} in (100) bzw. (101).

Abbildung 9 zeigt den Einfluß von $g(\lambda)$ auf die Phasenstruktur für den Extremfall verschwindender Higgsselbstkopplung (dort ist die Abweichung der Funktion $g(\lambda)$ von 1, d.h. dem Wert bei $\lambda = \infty$ maximal). Als Unterstützung sind in diese Abbildung auch die Kurven aufgenommen, die sich allein durch Verschiebung des Phasenübergangs bei $\lambda = \infty$, d.h. Berücksichtigung des Faktors $g(\lambda)^{-1}$ in (100) bzw. (101), ergeben.

Es wird deutlich, daß die Verformung der Kurven aufgrund der Faktoren $g(\lambda)$ und $g(\lambda)^2$ keine großen Abweichungen hervorbringt.

Im Gegensatz zum U(1)-Modell tritt hier allerdings eine deutliche Verschiebung auf, die bei $K = 0$ und verschwindender skalarer Kopplung auf $\kappa_{cr} = \pm \frac{1}{8}$ führt. Dies stimmt mit den aus der Störungstheorie abgeleiteten Resultaten [31] wie auch im U(1)-Modell [28] überein.

2.5 Wellenfunktionsrenormierung, Masse und Kondensat der Fermionen

In diesem Abschnitt sollen mit Hilfe der MFA einige fermionische Meßgrößen bestimmt werden. Es handelt sich um die renormierte, fermionische Masse μ_R sowie die Wellenfunktionsrenormierungen Z_ψ und Z_χ und das Fermionkondensat. Bis auf letzteres kann man alle diese Größen aus dem Fermionpropagator gewinnen, der wiederum über die MFA und die HPE berechnet wird. Demzufolge ist zunächst der Zusammenhang zwischen den gesuchten Meßgrößen und dem Fermionpropagator zu klären.

2.5.1 Zusammenhang der Meßgrößen mit dem Fermionpropagator

In Analogie zum Verhalten des freien Fermionpropagators [28] definiert man den Propagator der wechselwirkenden Theorie im Impulsraum unter Berücksichtigung der Translationsinvarianz durch die Relation

$$\tilde{\Delta}_\Psi(p) = \sum_x e^{-ip \cdot x} \langle \Psi_x \bar{\Psi}_0 \rangle_c = A - i\bar{p} \cdot \gamma B + O(\bar{p}^2) \quad (102)$$

mit $\bar{p}_\mu \equiv \sin p_\mu$. Die Entwicklung des inversen Propagators um die Ecken der Brillouinzone ($\bar{p} = 0$) ergibt demnach

$$\tilde{\Delta}_\Psi^{-1}(p) = M + i\bar{p} \cdot \gamma N + O(\bar{p}^2), \quad (103)$$

wobei die Matrizen M und N durch

$$M = A^{-1}, \quad N = A^{-1}BA^{-1} \quad (104)$$

gegeben sind. Die Wellenfunktionsrenormierung Z_Ψ ist so zu wählen, daß sie die Matrix N auf die Einheitsmatrix transformiert. Diese Wahl führt für den renormierten, inversen Propagator auf die Beziehung:

$$(\tilde{\Delta}_\Psi^{-1})_R(p) = Z_\Psi^{1/2} \tilde{\Delta}_\Psi^{-1}(p) Z_\Psi^{1/2} = \mathbb{I}_4 \otimes M_R + i\bar{p} \cdot \gamma \otimes \mathbb{I}_2 + O(\bar{p}^2). \quad (105)$$

Die Massenmatrix M_R ist in der symmetrischen Phase, die auch hier Gegenstand der weiteren Betrachtung sein soll, eine rein offdiagonale $2 \otimes 2$ -Matrix mit den Einträgen μ_R . Mit Hilfe der so definierten Meßgrößen liest sich der Propagator als:

$$\tilde{\Delta}_\Psi(p) = \frac{1}{\mu_R^2 + \bar{p}^2} \begin{pmatrix} -i\gamma \cdot \bar{p} Z_\psi & \mu_R \sqrt{Z_\psi Z_\chi} \\ \mu_R \sqrt{Z_\psi Z_\chi} & -i\gamma \cdot \bar{p} Z_\chi \end{pmatrix}. \quad (106)$$

Dieser Zusammenhang ist nun nach den gesuchten Größen aufzulösen. Ein Vergleich mit (102) zeigt zunächst:

$$\begin{aligned} A &\equiv \begin{pmatrix} 0 & A_{\psi\chi} \\ A_{\psi\chi} & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}_4 = \frac{\mu_R \sqrt{Z_\psi Z_\chi}}{\mu_R^2 + \bar{p}^2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}_4, \\ B &\equiv \begin{pmatrix} B_\psi & 0 \\ 0 & B_\chi \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}_4 = \frac{1}{\mu_R^2 + \bar{p}^2} \begin{pmatrix} Z_\psi & 0 \\ 0 & Z_\chi \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}_4. \end{aligned} \quad (107)$$

In den Ecken der Brillouinzone, die im folgenden mit q bezeichnet werden (d.h. $q = (p_1, \dots, p_d)$ mit $p_\mu \in \{0, \pi\}$) ergibt sich damit

$$\mu_R(q) = \frac{A_{\psi\chi}(q)}{\sqrt{B_\psi(q)B_\chi(q)}} \quad , \quad Z_\psi(q) = \frac{A_{\psi\chi}^2(q)}{B_\chi(q)} \quad , \quad Z_\chi(q) = \frac{A_{\psi\chi}^2(q)}{B_\psi(q)}. \quad (108)$$

Die Größen $A(q)$ und $B(q)$ erhält man nach (102) aus dem Impulsraumpropagator auf die folgende Weise:

$$\begin{aligned} A(q) &= \tilde{\Delta}_\Psi(q) = \sum_x e^{-iq \cdot x} \langle \Psi_x \bar{\Psi}_0 \rangle_c , \\ B(q) &= \frac{i}{d} \sum_{k=1}^d \gamma_k \frac{\partial}{\partial \bar{p}_k} \tilde{\Delta}_\Psi(\bar{p})|_{\bar{p}=0} = \frac{2i}{2d - \hat{q}^2} \sum_{k=1}^d \gamma_k \frac{\partial}{\partial p_k} \tilde{\Delta}_\Psi(p)|_{p=q} \\ &= \frac{2}{2d - \hat{q}^2} \sum_x \left(\sum_{k=1}^d \gamma_k x_k \right) e^{-iq \cdot x} \langle \Psi_x \bar{\Psi}_0 \rangle_c . \end{aligned} \quad (109)$$

Die Gleichungen (108) und (109) ergeben den gesuchten Zusammenhang. Dabei ist $\hat{p}_\mu \equiv 2 \sin \frac{p_\mu}{2}$.

Wie schon in den vorangegangenen Abschnitten ist der Wechsel zur A-B-Darstellung für die Berechnung von $A(q)$ und $B(q)$ sinnvoll. Mit der Definition $B_\alpha \equiv \frac{1}{2}(B_\psi + B_\chi)$ und $B_\beta \equiv \frac{1}{2}(B_\psi - B_\chi)$ lautet sie

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A(q) & 0 \\ 0 & A(q) \end{pmatrix} \otimes \mathbb{1}_4 &= \tilde{\Delta}_{AB}(q) = \sum_x e^{-iq \cdot x} \langle \Psi_x \bar{\Psi}_0 \rangle_c^{AB} , \\ \begin{pmatrix} B_\alpha - \gamma_5 B_\beta & 0 \\ 0 & B_\alpha + \gamma_5 B_\beta \end{pmatrix}(q) &= \frac{2}{2d - \hat{q}^2} \sum_x \left(\sum_{k=1}^d \gamma_k x_k \right) e^{-iq \cdot x} \langle \Psi_x \bar{\Psi}_0 \rangle_c^{AB} . \end{aligned} \quad (110)$$

Im folgenden ist mit $A(q)$ immer die Zahl in (110) gemeint. Nach Berechnung der in (110) spezifizierten Größen erlaubt ein Wechsel zurück zur chiralen Darstellung die Bestimmung der gesuchten Größen μ_R sowie Z_ψ und Z_χ mittels Gleichung (108).

Der daher zunächst zu untersuchende Ausdruck $\langle \Psi_x \bar{\Psi}_0 \rangle_c^{AB}$ ergibt sich üblicherweise nach Einführung von Quelltermen in die Wirkung

$$S \longrightarrow \bar{S} = S - \sum_x (\bar{N}_x \Psi_x + \bar{\Psi}_x N_x) \quad (111)$$

aus der Differentiation der freien Energie nach den Quellen, d.h.

$$\langle \Psi_x \bar{\Psi}_0 \rangle_c^{AB} = \frac{\partial^2}{\partial \bar{N}_x \partial N_0} \ln \bar{Z}(N, \bar{N})|_{N, \bar{N}=0} , \quad (112)$$

mit $\bar{Z}(N, \bar{N}) = \prod_x \int d\mu_x e^{-\bar{S}}$ und einem der Symmetrie entsprechenden Integrationsmaß $d\mu_x$. Im hier untersuchten U(1)-Modell ist $\bar{Z}(0, 0)$ mit dem Z aus den Gleichungen (20,55) identisch. Man führt nun dasselbe Ersatzmaß Z_H ein wie dort und definiert

$$\begin{aligned} \bar{Z}_{\text{MFA}}(N, \bar{N}) \equiv Z_H \exp & \left(\langle -S_B^\infty + \ln \det \bar{Q} - \frac{1}{2} (H \sum_x \phi_x^+ + H^+ \sum_x \phi_x^-) \right. \\ & \left. + \sum_{xy} \bar{N}_y \bar{Q}_{yx}^{-1}(\phi) N_x \rangle_H \right) , \end{aligned} \quad (113)$$

wobei Z_H und S_B für endliches und divergentes λ passend zu wählen sind und das Skalarfeld für $\lambda = \infty$ der Einschränkung $|\phi| = 1$ unterliegt.

Unter Zuhilfenahme dieser Zustandssumme lässt sich nun die MFA des Propagators bestimmen:

$$\langle \Psi_x \bar{\Psi}_0 \rangle_c^{\text{MFA}} = \langle \bar{Q}_{x0}^{-1}(\phi) \rangle_H . \quad (114)$$

So wie bei der Untersuchung der Phasenstruktur die $O(H^2)$ solcher Erwartungswerte zu berechnen war – denn das Verschwinden ihrer zweiten Ableitung in $H = 0$ legte die Grenze der symmetrischen Phase fest –, muß von diesem Ausdruck in der symmetrischen Phase die $O(1)$ bzgl. H bestimmt werden, da alle höheren Ordnungen in $H = 0$ verschwinden. Betrachtungen in der gebrochenen Phase sind aus diesem Grund sehr viel aufwendiger; dort nimmt H nämlich von Null verschiedene Werte an.

2.5.2 Berechnung des Propagators in MFA

Wegen der Nichtlokalität des Propagators versucht man auch hier eine HPE. Mit denselben Definitionen wie bisher resultiert daraus der Ausdruck:

$$\begin{aligned} <\bar{Q}_{x0}^{-1}(\phi)>_H &= \frac{1}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{K}{\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^i \times \\ &\quad \times <[(M - G)\bar{H}]_{x0}^i(M - G)_{00}>_H . \end{aligned} \quad (115)$$

Im Gegensatz zu den früheren Untersuchungen spielen also jetzt offene Wege von 0 nach x eine Rolle. Da in (110) über alle x summiert wird, kommen so sämtliche Wege zum Tragen, die in 0 starten. Diese Tatsache erlaubt die vollständige Aufsummation bestimmter Graphenklassen für alle Ordnungen von K und damit insbesondere die Berücksichtigung aller Graphen, die bei vorgegebener K -Potenz zur führenden Ordnung von d beitragen.

Läßt man zunächst die Yukawakopplungsmatrizen G außer acht, betrachtet also in (115) den einen Term höchster M -Potenz, ergeben sich in $r = \bar{\mu} = 1$ die Gleichungen

$$\begin{aligned} A(q) \otimes \mathbb{I}_4 &= \frac{1}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \cdot \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{K}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^i \\ &\quad \sum_x e^{-iq \cdot x} \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} \prod_{j=1}^i (\gamma_{\mu_j} + 1) \delta_{x,0+\mu_1+\dots+\mu_i} , \\ B_\alpha(q) \otimes \mathbb{I}_4 &= \frac{2}{2d - \hat{q}^2} \frac{1}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \cdot \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{K}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^i \\ &\quad \sum_x e^{-iq \cdot x} \left(\sum_{k=1}^d x_k \gamma_k \right) \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} \prod_{j=1}^i (\gamma_{\mu_j} + 1) \delta_{x,0+\mu_1+\dots+\mu_i} , \\ B_\beta(q) \otimes \gamma_5 &= 0 . \end{aligned} \quad (116)$$

Die jeweils zweite Zeile in den Ausdrücken für A und B_α beschreibt die Summation über alle möglichen Wege der Länge i auf dem Gitter. Mit jedem Schritt auf dem Gitter in eine Richtung $\hat{\mu}$ ist dabei der Faktor $(\gamma_\mu + 1)$ verbunden, der, bedingt durch die Relation $(\gamma_\mu + 1)(\gamma_{-\mu} + 1) = 0$, wie schon in den beiden vorangegangenen Abschnitten zum Wegfall der Beiträge sämtlicher Graphen mit Appendices führt. Für B_α sind die verbleibenden Wege je nach ihrem Endpunkt x noch mit verschiedenen Faktoren gewichtet. Solange keine G -Faktoren berücksichtigt werden, tritt die γ_5 -Matrix nicht auf und B_β verschwindet. Wie im Anhang E bewiesen wird, läßt sich die Summationen für A und B_α vollständig ausführen. Mit n_q als Zahl der von Null verschiedenen Komponenten von q liefert sie

$$A(q) = \frac{1}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{2(d - 2n_q)K}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^i$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2) - 2(d - 2n_q)K}, \\
B_\alpha(q) &= \frac{1}{d - 2n_q} \frac{1}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \sum_{i=0}^{\infty} i \left(\frac{2(d - 2n_q)K}{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2)} \right)^i \\
&= \frac{2K}{(1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2) - 2(d - 2n_q)K)^2}.
\end{aligned} \tag{117}$$

Die Summation über alle Längen i ist natürlich nur innerhalb des Konvergenzradius durchführbar. Für die renormierte Fermionmasse und die Wellenfunktionsrenormierung ergeben sich demzufolge ohne Berücksichtigung der G-Matrizen die nachstehenden, für alle Ordnungen von K aufsummierten Ausdrücke:

$$\begin{aligned}
\mu_R(q) &= \frac{1 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2) - 2(d - 2n_q)K}{2K} = \mu_R(0) + 2n_q, \\
Z_\psi(q) &= Z_\chi(q) = \frac{1}{2K}.
\end{aligned} \tag{118}$$

Es sei nochmals betont, daß in (118) die Beiträge aller denkbaren Graphen ohne G-Matrizen enthalten sind, also nicht etwa nur führende Ordnungen in d .

An dieser Stelle findet man eine weitere, aus numerischen Simulationen gewonnene Aussage [27] qualitativ durch die MFA bestätigt: Der kritische Wert des fermionischen Hoppingparameters K_{cr} wächst für $G_\psi G_\chi < 0$ monoton mit wachsendem $|G_\psi G_\chi|$. Nach (118) ist er gegeben durch $K_{cr} = \frac{1 - G_\psi G_\chi}{8}$ und besitzt daher genau diese Eigenschaft.

Nimmt man die MFA ernst und macht eine HPE in K nur in führender Ordnung der Dimension d , wie es für „mean-field“-Rechnungen typisch ist, da sie in $d \rightarrow \infty$ exakt werden, bildet (118) das Endresultat. Denn die Hinzunahme von G-Matrizen bedeutet die Einführung von ϕ -Faktoren, welche sich in der symmetrischen Phase genau aufheben müssen. Die damit verbundenen Zwangsbedingungen an die Wege auf dem Gitter (sie müssen sich an geeigneten Stellen kreuzen) schränken die freie Wahl der Wege im Gegensatz zur Situation bei geschlossenen Graphen derart ein, daß Beiträge dieser Art nicht mehr die maximale d -Potenz aufweisen, wie es ohne ϕ -Faktoren noch der Fall war. Sie liefern Terme proportional zu $K^m d^n$ mit $m > n$, wohingegen die Exponenten bei Termen führender Ordnung in d gleich sind.

Während die Wellenfunktionsrenormierungen in dieser Form noch mit den Resultaten für die nullte Ordnung der Störungsrechnung übereinstimmen, geht das Ergebnis der renormierten, fermionischen Masse bereits darüber hinaus. Setzt man die Yukawakopplungen auf Null, ist es allerdings damit identisch.

Da bisher keine Erwartungswerte $\langle \dots \rangle_H$ in die Ergebnisse eingingen, sind letztere unabhängig vom betrachteten Modell und gelten in gleicher Weise für die SU(2)-Symmetrie.

Im Fall endlicher Selbstkopplung ist nun wieder mit jeder Massenmatrix der Faktor $\frac{M}{1 - GG|\phi|^2}$ verbunden. Da bisher noch keine expliziten G-Faktoren betrachtet wurden, ist dies der einzige Punkt, an dem die Endlichkeit der Higgskopplung eingeht. Ist $h(|\phi|^2)$ wie in (76) definiert, folgt aus der Entwicklung bis zur ersten Ordnung in GG :

$$\begin{aligned}
A(q) &= \sum_{i=0}^{\infty} \langle h(|\phi|^2)_{0,0} [Kh(|\phi|^2)]_{x,0}^i \rangle_H (2(d - 2n_q))^i \\
&= \frac{1}{1 - 2K(d - 2n_q)} \left(1 + \frac{GG \langle |\phi|^2 \rangle_H}{1 - 2K(d - 2n_q)} + O(GG^2) \right),
\end{aligned}$$

$$B_\alpha(q) = \frac{2K}{(1 - 2K(d - 2n_q))^2} \left(1 + \frac{2GG < |\phi|^2 >_H}{1 - 2K(d - 2n_q)} + O(GG^2) \right). \quad (119)$$

Bedenkt man, daß $< |\phi|^2 >_H = f(\lambda)$ bei divergenter Selbstkopplung den Wert Eins annimmt, stimmt dieses Resultat dort mit der Entwicklung von (117) bis zur ersten Ordnung in GG überein. Für die Meßgrößen ergibt sich

$$\begin{aligned} \mu_R(q) &= \frac{1 - GGf(\lambda) - 2(d - 2n_q)K}{2K} + O(GG^2), \\ Z_\psi(q) &= Z_\chi(q) = \frac{1}{2K}(1 + O(GG^2)). \end{aligned} \quad (120)$$

Wegen fehlender numerischer Vergleichsdaten bei endlichem λ ist es nicht nötig, hier zu höheren Ordnungen von GG zu gehen. Bereits jetzt ist zu erkennen, daß die λ -abhängigen Faktoren in den höheren Ordnungen von GG im Fall $\lambda = \infty$ verschwinden müssen. Gleichung (120) zeigt ferner, daß jetzt über die fermionische Masse eine Modellabhängigkeit gegeben ist. Im SU(2)-Modell ist dort $f(\lambda)$ durch $g(\lambda)$ zu ersetzen. Die Wellenfunktionsrenormierung unterscheidet weiterhin nicht zwischen U(1)- und SU(2)-Modell.

2.5.3 Korrekturen zur führenden Ordnung der MFA

Für den Fall divergenter Selbstkopplung sollen im folgenden zwei verschiedene, auf die Einbeziehung von Termen mit G-Faktoren basierende Korrekturverfahren untersucht werden. Dazu empfiehlt es sich, die bisherigen Rechnungen aus einer anderen Sicht zu betrachten:

In Analogie zur üblichen Störungsrechnung läßt sich die Größe $2(d - 2n_q)K \equiv L(q)$ als eine Art freier Propagator und $\bar{\mu}(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2))^{-1} \equiv I_0$ als irreduzibler Anteil niedrigster Ordnung auffassen. (Da in diesem Abschnitt keine Besselfunktionen auftreten, ist eine Verwechslung ausgeschlossen.) In diesem Sinne lassen sich A und B_α unter Vernachlässigung der G-Faktoren schreiben als:

$$\begin{aligned} A(q) &= I_0 + I_0 L(q) I_0 + I_0 L(q) I_0 L(q) I_0 + \dots \\ &= I_0 \left(1 + \sum_{i=1}^{\infty} (L(q) I_0)^i \right) = \frac{I_0}{1 - L(q) I_0}, \\ (d - 2n_q) B_\alpha(q) &= I_0 \left(0 + \sum_{i=1}^{\infty} i(L(q) I_0)^i \right) = \frac{I_0 L(q) I_0}{(1 - L I_0)^2}. \end{aligned} \quad (121)$$

Auf derartige Weise werden mit Hilfe der „Bausteine“ $L(q)$ und I_0 sämtliche Graphen erzeugt und in $A(q)$ bzw. $B_\alpha(q)$ berücksichtigt, die keine G-Matrizen enthalten. Zur Konstruktion von Graphen mit G-Faktoren sind weitere elementare Bausteine einzuführen, die solche Faktoren enthalten. Diese müssen sich dabei u.a. an den Endpunkten der neuen Bausteine befinden, denn wäre letzteres nicht der Fall, ließe sich ein solcher Teilgraph wiederum aus $L(q)$ und einem Teilgraphen, der in G-Matrizen endet, zusammensetzen. In diesem Kontext darf daher von irreduziblen Bausteinen gesprochen werden, wenn die Enden mit G-Faktoren besetzt sind. Zusammen mit der Notwendigkeit, daß sich die ϕ -Felder gegenseitig aufheben müssen, schränkt die genannte Bedingung die Zahl der möglichen irreduziblen Bausteine stark ein.

Der bzgl. der Ordnung von K kleinste Baustein dieser Art trägt zwei G-Matrizen, startet und endet im gleichen Gitterpunkt und umläuft dabei eine Plakette auf dem Gitter, hat also die Länge 4. Damit befinden sich die beiden G-Matrizen im gleichen Punkt, so daß die G-Faktoren sich aufheben. (Ein Weg der Länge 2, der solches

leistet, also zu einem Gitterpunkt zurückkehrt, an dem sich dann zwei G-Matrizen plazieren ließen, wäre ein Appendix. Für $r = 1$ verschwindet ein derartiger Beitrag aber nur dann nicht, wenn in dem Appendix eine G-Matrix steht. Der dortige ϕ -Faktor allerdings fällt nicht heraus und führt zu einem Term proportional zu H , der in der betrachteten symmetrischen Phase verschwindet.)

Der Beitrag dieses Bausteines I_2 lässt sich leicht berechnen. Er lautet:

$$\begin{array}{c} \text{Diagramm eines geschlossenen Graphen der Länge } 2l \\ \text{mit einem zentralen Punkt und vier Ecken} \end{array} = \frac{\bar{\mu}^3 K^4 \mathbb{1}_4}{(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2))^5} [-4d(2d-2)(G_\alpha^2 - G_\beta^2)] = I_2 \mathbb{1}_4 . \quad (122)$$

Die Punkte deuten dabei die Stellung der G-Faktoren an. Wie alle geschlossenen Graphen der Länge $2l$ ist er in führender Ordnung d proportional zu $K^{2l} d^l$.

Für das weitere Vorgehen bieten sich zwei Möglichkeiten:

1. Zum einen kann man sämtliche Graphen berücksichtigen, die aus den drei Bausteinen $L(q), I_0, I_2$ aufgebaut werden können, den irreduziblen Baustein I_2 also vollständig einbeziehen. Dies stört allerdings die Konsistenz der d -Entwicklung für feste Ordnung von K . Denn ein Graph, der z.B. zwei I_2 -Bausteine enthält, verliert im Vergleich zur führenden Ordnung den Faktor d^{-4} , wird aber berücksichtigt, obwohl Graphen mit einem Baustein I_3 (s.u.), d.h. einem Faktor d^{-3} gegenüber der führenden Ordnung, vernachlässigt werden.
2. Die Alternative dazu besteht in der vollständigen Berechnung der in d nächsten Ordnung. Dazu tragen genau die Wege bei, die aus einem I_2 und beliebig vielen $L(q)$ und I_0 aufgebaut sind. (Dabei muß natürlich die Anzahl irreduzibler Bausteine um eins größer sein als die Zahl der $L(q)$.) Es ist dies einzusehen, wenn man bedenkt, daß Terme maximaler Ordnung proportional zu $K^l d^l$ sind, während die jetzt betrachteten Wege sämtliche Beiträge proportional zu $K^l d^{l-2}$ liefern. Ausdrücke, die sich wie $K^l d^{l-1}$ verhalten, kann es nicht geben, denn das würde bedeuten, daß ein Graph der Länge l mit $l-1$ frei wählbaren Stücken vorliegt und einen Punkt (an dem die G-Matrizen stehen) zweimal durchläuft. Der dann notwendige Appendix führt aber zum Verschwinden eines solchen Beitrags.

1. Vollständige Einbeziehung irreduzibler Bausteine

Betrachtet man alle Graphen der Länge l , so gibt es für das Ersetzen von I_0 durch I_2 genau $l+1$ Möglichkeiten. Diese neuen Graphen liefern daher statt $L(q)^l (I_0)^{l+1}$ den Beitrag $L(q)^l (I_0)^{l+1} (l+1) I_2^l I_0^{-1}$. Erlaubt man die Ersetzung einer beliebigen Zahl von I_0 durch I_2 (einschließlich Null), ergibt die Zusammenfassung

$$\begin{aligned} A(q) &= \sum_{i=0}^{\infty} L(q)^i I_0^{i+1} \sum_{j=0}^{i+1} \binom{i+1}{j} I_2^j I_0^{-j} \\ &= \sum_{i=0}^{\infty} L(q)^i (I_0 + I_2)^{i+1} = (I_0 + I_2) \cdot \left(1 + \sum_{i=1}^{\infty} (L(q)(I_0 + I_2))^i \right) \\ &= \frac{I_0 + I_2}{1 - L(q)(I_0 + I_2)} \end{aligned} \quad (123)$$

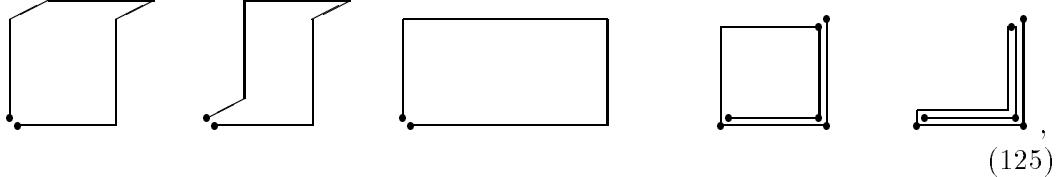
und entsprechend für $B(q)$:

$$(d - 2n_q) B_\alpha(q) = \sum_{i=0}^{\infty} i L(q)^i I_0^{i+1} \sum_{j=0}^{i+1} \binom{i+1}{j} I_2^j I_0^{-j}$$

$$= \frac{L(q)(I_0 + I_2)^2}{(1 - L(q)(I_0 + I_2))^2}. \quad (124)$$

Diesem allgemeinen Zusammenhang läßt sich entnehmen, daß weitere irreduzible Bausteine durch einfache Addition ihrer selbst zu den bereits vorhandenen Bausteinen zu ergänzen sind.

Vor einer Auswertung sollen auch die irreduziblen Bausteine sechster Ordnung in K Berücksichtigung finden, da sich hier erstmals ein von Null verschiedenes B_β ergibt und es dadurch zu einer Aufspaltung zwischen Z_ψ und Z_χ kommt. Nicht verschwindende Bausteine der Ordnung K^6 sind z.B.



während es weitere Bausteine gibt, die aufgrund ihrer Appendix-Struktur verschwinden oder sich beim Durchlaufen in beiden Richtungen gegenseitig aufheben, wie beispielsweise

$$\text{Diagram} = 0, \quad \text{Diagram} + \text{Diagram} = 0. \quad (126)$$

Die drei ersten Graphen in (125) liefern einen Beitrag zu I_3 . Insgesamt ergibt sich bei Berücksichtigung aller geschlossenen Wege der Länge 6 ohne Spitzen

$$I_3 \mathbb{1}_4 = \frac{\bar{\mu}^5 K^6 \mathbb{1}_4}{(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2))^7} [-32d(2d-2)(2d-4) - 48d(2d-2)](G_\alpha^2 - G_\beta^2). \quad (127)$$

Um alle Graphen zu berücksichtigen, die sich unter zusätzlicher Einbeziehung sämtlicher irreduzibler K^6 -Bausteine bilden lassen, müssen außer I_3 noch die letzten beiden Graphen aus (125) bestimmt werden:

$$\begin{aligned} \text{Diagram} + \text{Diagram} &= \frac{-4(G_\alpha^2 + G_\beta^2)(G_\alpha^2 + 3G_\beta^2)\bar{\mu}K^6}{(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2))^7} \times \\ &\times (G_\alpha - \gamma_5 G_\beta)(\gamma_\mu + 1)(\gamma_\nu + 1)(G_\alpha + \gamma_5 G_\beta) \\ &\equiv a(G_\alpha - \gamma_5 G_\beta)(\gamma_\mu + 1)(\gamma_\nu + 1)(G_\alpha + \gamma_5 G_\beta). \end{aligned} \quad (128)$$

Die Einbeziehung dieser irreduziblen Bausteine ergibt schließlich (Anhang E)

$$\begin{aligned} A(q) &= \frac{I_0 + I_2 + I_3 + S(q)}{1 - L(q)(I_0 + I_2 + I_3 + S(q))}, \\ (d - 2n_q)B_\alpha(q) &= \frac{T_\alpha(q) + L(q)(I_0 + I_2 + I_3 + S(q))^2}{(1 - L(q)(I_0 + I_2 + I_3 + S(q)))^2}, \\ (d - 2n_q)B_\beta(q) &= \frac{-T_\beta(q)}{(1 - L(q)(I_0 + I_2 + I_3 + S(q)))^2}. \end{aligned} \quad (129)$$

Dabei gilt

$$\begin{aligned} S(q) &= a(G_\alpha^2 - G_\beta^2)[2d(2d-2) - 16n_q(d-n_q)], \\ T_\alpha(q) &= 2a(G_\alpha^2 + G_\beta^2)[2d(2d-2) - 16n_q(d-n_q)], \\ T_\beta(q) &= 4aG_\alpha G_\beta[2d(2d-2) - 16n_q(d-n_q)]. \end{aligned} \quad (130)$$

2. Vollständige Berechnung weiterer Ordnungen in d

Ausgehend von der führenden Ordnung in d erhält man unter zusätzlicher Berücksichtigung aller Terme bis zur zweithöchsten Ordnung in d , d.h. aller Graphen, die neben einem I_2 nur aus $L(q)$ und I_0 bestehen, den folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned} A(q) &= \sum_{i=0}^{\infty} L(q)^i I_0^{i+1} \sum_{j=0}^1 \binom{i+1}{j} I_2^{(f)j} I_0^{-j} \\ &= \frac{I_0}{1 - L(q)I_0} + \frac{I_2^{(f)}}{(1 - L(q)I_0)^2}, \\ (d - 2n_q)B_\alpha(q) &= \sum_{i=0}^{\infty} iL(q)^i I_0^{i+1} \sum_{j=0}^1 \binom{i+1}{j} I_2^{(f)j} I_0^{-j} \\ &= \frac{I_0 L(q) I_0}{(1 - L(q)I_0)^2} + \frac{2I_2^{(f)} L(q) I_0}{(1 - L(q)I_0)^3}. \end{aligned} \quad (131)$$

$I_2^{(f)}$ bedeutet dabei, daß nur der Term $\propto K^4 d^2$ aus (122) einbezogen wird. Auch hier soll noch ein weiterer Schritt durchgeführt werden, der diesesmal in der Berücksichtigung aller Graphen mit dem Verhalten $K^l d^{l-3}$ besteht. Bezeichnet $I_3^{(f)}$ erneut die führende Ordnung von d in (127), so ist dazu in (131) lediglich $I_2^{(f)}$ durch $I_2 + I_3^{(f)}$ zu ersetzen.

Ehe auf die numerischen Resultate für die gesuchten Größen μ_R, Z_ψ, Z_χ eingegangen wird, sei noch ein Sachverhalt bzgl. der Ordnung der Yukawakopplungen in $B_\beta(q)$ erläutert:

Sämtliche Bausteine quadratischer Ordnung in den Yukawakopplungen sind appendixfreie, geschlossene Wege, die in G-Matrizen anfangen und enden. Den Beitrag aller solcher Wege der Länge $2l$ bezeichne man mit I_l . Sie tragen auf dieselbe Weise wie I_0, I_2, I_3 zu A, B_α, B_β bei, d.h. liefern insbesondere keinen B_β -Beitrag. Um das einzusehen, ist zu überlegen, was passiert, wenn man die G-Matrix am Anfang eines solchen Graphen, an allen mit den links verbundenen γ -Matrizen vorbei, bis zum Ende durchpermutiert:

Für den G_α -Anteil ändert sich nichts, da er mit den γ -Matrizen kommutiert; für den Teil $\pm\gamma_5 G_\beta$ hingegen kehren sich die Richtungen aller γ -Matrizen um, d.h. $\gamma_\mu \rightarrow \gamma_{-\mu}$. Infolgedessen verbleibt man bzgl. G_α beim ursprünglichen Weg und erhält für $\pm\gamma_5 G_\beta$ einen neuen, allerdings weiterhin geschlossenen Weg gleicher Länge. Da aber die Gesamtheit aller geschlossenen Wege dieser Länge betrachtet wird und die Abbildung $\gamma_\mu \rightarrow \gamma_{-\mu}$ dort bijektiv ist, ändert sich effektiv auch für $\pm\gamma_5 G_\beta$ nichts. Demzufolge ergibt sich das gleiche Resultat für I_l , wenn die G-Matrix am Anfang der Graphen direkt an deren Ende geschrieben wird. Dann aber lassen sich die beiden G-Matrizen zusammenfassen und die Abhängigkeit der I_l von den Yukawakopplungen lautet:

$$I_l \propto \frac{\mu^{2l-1} K^{2l}}{(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2))^{2l+1}} (G_\alpha^2 - G_\beta^2). \quad (132)$$

I_l enthält folglich keinen γ_5 -Beitrag, wie er für ein nichtverschwindendes B_β erforderlich wäre.

Ein ähnliches Argument schließt auch die vierte Potenz der Yukawakopplungen als Beitrag zu B_β aus:

Irreduzible Bausteine mit vier G-Faktoren tragen zwei davon an ihren Enden und zwei im Inneren. Durchläuft man einen solchen Graphen, müssen der erste und vierte sowie der zweite und dritte G-Faktor zusammenfallen. Denn da abwechselnd ϕ

und ϕ^+ auftreten, ist klar, daß letztere sich nur aufheben können, wenn eine gerade Anzahl (einschließlich Null) von G-Faktoren zwischen den beiden aufeinandertreffenden liegt. Die andere Möglichkeit wäre daher die Kompensation des ersten durch den zweiten und des dritten durch den vierten G-Faktor. Sie scheidet aus, da dies zu einem Graphen führt, der in einem erweiterten Sinne nicht irreduzibel ist, denn er setzt sich aus zwei irreduziblen Bausteinen an den Enden eines Graphen aus I_0 und $L(q)$ zusammen.

Der verbleibende Graph ist somit geschlossen (Kompensation des ersten mit dem vierten G-Faktor) und kreuzt sich wenigstens einmal im zweiten bzw. dritten G-Faktor. Auf den im zweiten Faktor startenden und im dritten Faktor endenden Teilgraphen läßt sich die obige Argumentation für die quadratische Ordnung in den Yukawakopplungen anwenden. Sie ergeben also einen Faktor $G_\alpha^2 - G_\beta^2$, d.h. eine skalare Größe. Folglich sind die beiden übrigen G-Faktoren an den Enden des Bausteins ebenfalls wie oben abzuhandeln.

Aus diesem Grunde können frühestens Terme in sechster Ordnung der Yukawakopplungen zu B_β beitragen.

2.5.4 Vergleich mit den MC-Daten

Für den Fall divergenter, skalarer Kopplung werden die MF-Resultate in den folgenden vier Abbildungen mit den numerischen Daten verglichen. Dabei ist in den ersten drei Abbildungen die fermionische Masse abzüglich ihres Wertes in nullter Ordnung Störungsrechnung aufgetragen, um die durch die MFA demgegenüber erreichte Verbesserung deutlicher zu machen. Die vierte Abbildung zeigt Z .

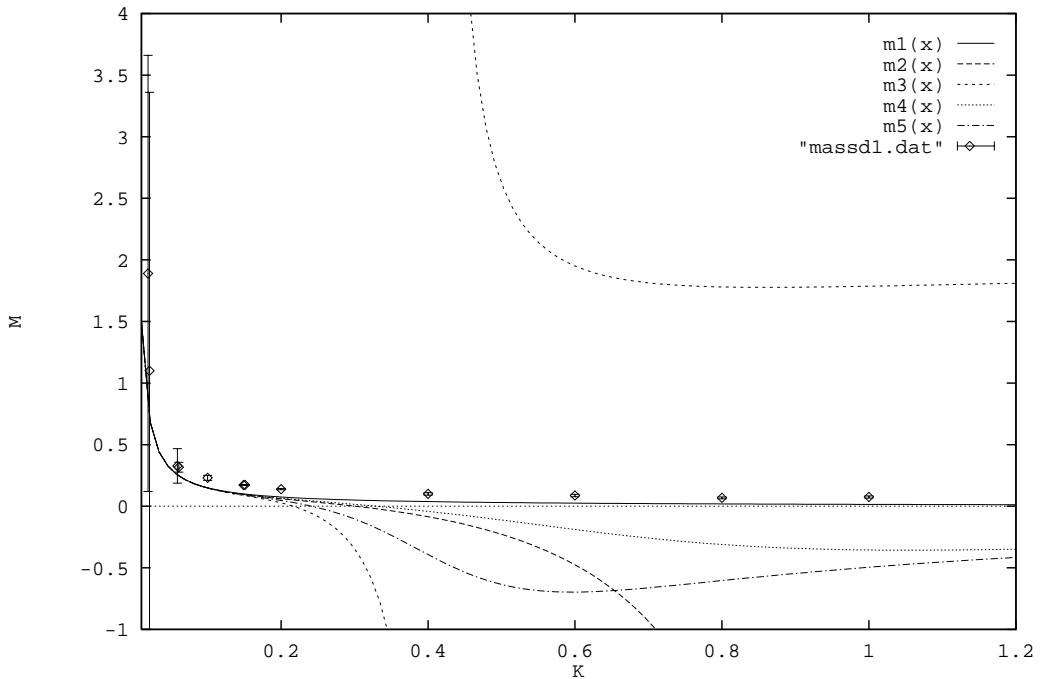


Abbildung 10: Im U(1)-Modell für $\lambda = \infty$, $G_\psi = 0.1$, $G_\chi = -0.3$ ist hier $M = \mu_R - \mu_0$ gegen K aufgetragen. Die numerischen Daten stammen erneut aus MC-Rechnung auf $4^3 \cdot 8$ -Gitter, in $m_R \simeq 1$ in der PM-Phase. Die Kurven m_1, m_2, m_3 zeigen die MF-Resultate unter Berücksichtigung der eins, zwei, drei führenden Ordnungen in d . Die Kurven m_4, m_5 basieren auf den MF-Ergebnissen, die alle irreduziblen Bausteine der Ordnung K^4 , K^6 enthalten. Der Konvergenzradius ist ≈ 0.129 .

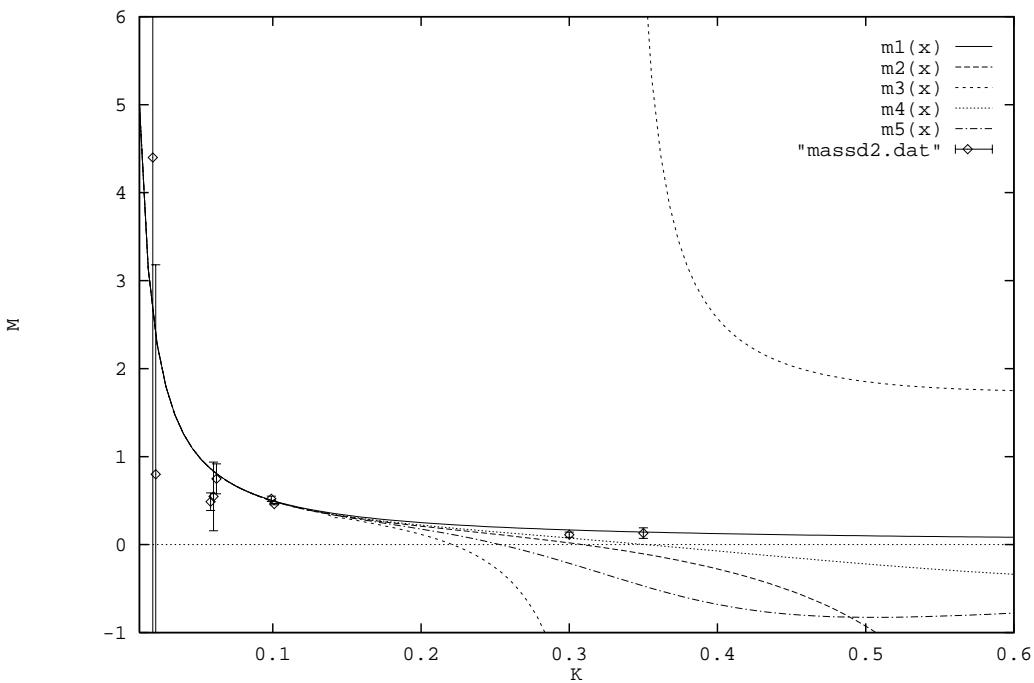


Abbildung 11: Diese Abbildung zeigt dasselbe wie die vorige für $G_\psi = 0.1$, $G_\chi = -1.0$. Der Konvergenzradius beträgt 0.1375.

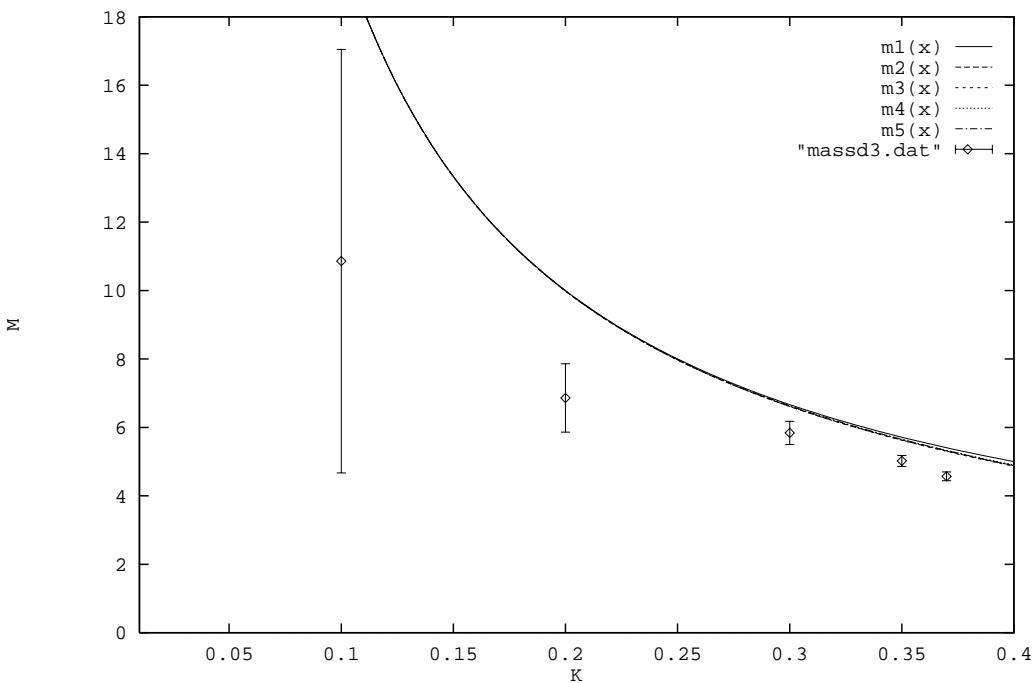


Abbildung 12: Im Vergleich zur vorangegangenen Abbildung haben sich nur die Yukawa-kopplungen geändert. Sie betragen $G_\psi = 2.0$, $G_\chi = -2.0$. Hier liegt der Konvergenzradius bei 0.625.

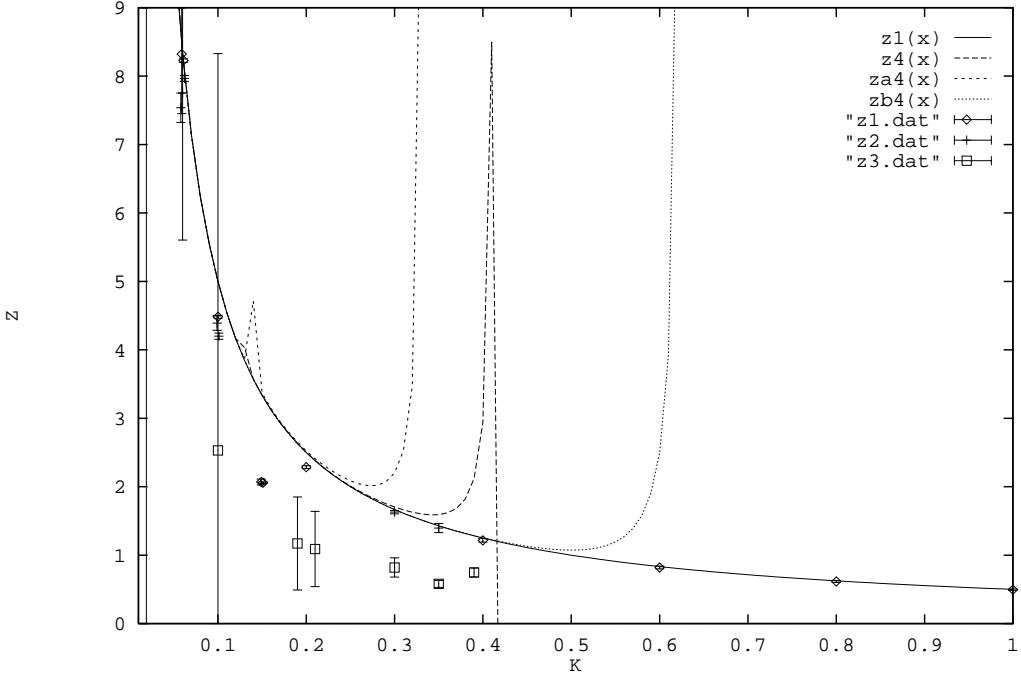


Abbildung 13: Die Kurve $z1(x)$ veranschaulicht die Wellenfunktionsrenormierung $Z = 1/2K$, Rauten zeigen MC-Werte für eine gemittelte Wellenfunktionsrenormierung $Z = \frac{1}{2}(Z_\psi + Z_\chi)$ bei $G_\psi = 0.1$, $G_\chi = -0.3$, die Kreuze in $G_\psi = 0.1$, $G_\chi = -1.0$, die Quadrate in $G_\psi = 2.0$, $G_\chi = -2.0$. Die Kurven $z(a,b)4(x)$ zeigen Z unter Berücksichtigung der ersten drei führenden Ordnungen in d für $GG = -0.03, -0.1, -4.0$.

In den ersten beiden Abbildungen erkennt man zunächst, daß die gute Übereinstimmung der unkorrigierten MF-Resultate für große K eher zufällig ist, denn nach Hinzunahme der verschiedenen Korrekturen ist sie nicht mehr gegeben. Eine solche Situation wäre auch nicht mit dem Konvergenzradius der unkorrigierten Reihe in Einklang zu bringen, den der Entwicklungsparameter auf $K < \frac{1-G_\psi G_\chi}{2(d-2n_q)}$ festlegt. Innerhalb dieses Radius unterscheiden sich in allen drei Fällen die verschiedenen Approximationen nicht wesentlich, so daß auch nach Berücksichtigung weiterer Ordnungen in d bzw. zusätzlicher Bausteine dort keine großen Änderungen mehr zu erwarten sind. Abschließend läßt sich daher sagen, daß im Gültigkeitsbereich der HPE bereits die unkorrigierte MFA die Abweichungen der numerischen Resultate von der nullten Ordnung der Störungsrechnung approximativ richtig wiedergibt. Die Korrekturen sind dort nur unwesentlich.

Die Wellenfunktionsrenormierung Z aus der vierten Abbildung zeigt erst nach Einbeziehung aller irreduziblen Bausteine bis zur Ordnung K^6 eine Aufspaltung in $Z_\psi \neq Z_\chi$. Diese ist allerdings so klein, daß sie auf der Graphik nicht sichtbar wäre. Aufgetragen ist daher der von den Yukawakopplungen unabhängige Wert $\frac{1}{2K}$. Auch unter Hinzunahme der nächsten Ordnungen von d ergibt sich innerhalb des Konvergenzradius keine sichtbare Änderung. Erst am Rand der jeweiligen Konvergenzkreise treten die jeweils ersten Pole auf. (Die Pole bei $K \approx 1/8$ für $GG = -0.03, -0.1$ sind so scharf, daß sie vom Plotprogramm nur ansatzweise erfaßt werden konnten.) Man sieht also auch hier, daß sich der Konvergenzradius sehr wohl bemerkbar macht, wenn auch erst in bzgl. d nichtführenden Termen.

Der nach den vorangehenden Bemerkungen auch approximativ nicht erfaßte Bereich großer K läßt sich aus folgendem Grund nicht durch eine inverse HPE behandeln: Während bei der Berechnung von Phasengrenzen geschlossene Graphen wesentlich waren, sind für den Propagator die offenen Graphen relevant. Sie unterscheiden

sich von den geschlossenen u.a. dadurch, daß jedes link der Länge n jetzt einen Einbettungsfaktor $(2d)^n$ statt $\sqrt{2d}^n$ trägt. Daher tragen, wie leicht einzusehen ist, die im vorigen Abschnitt in grober Weise vernachlässigten Beiträge der inversen Hoppingmatrix hier nicht nur mit gleicher, sondern höherer d -Potenz bei, als die berücksichtigten Nächste-Nachbar-Terme. Die Inkonsistenz würde also noch größer als sie für die Berechnung der Phasengrenzen ohnehin schon war.

2.5.5 Das Fermionkondensat

Bei den bisherigen MC-Rechnungen wurde das Fermionkondensat nur im Ursprung der Brillouinzone, d.h. bei $p = 0$, betrachtet. In Ermangelung an Vergleichsmöglichkeiten geschieht das auch hier. Es ist in der MFA definiert als:

$$C \equiv \frac{1}{N} \sum_x \langle \text{tr}(\chi_x \bar{\psi}_x) \rangle_H . \quad (133)$$

Eine kurze Rechnung ergibt mit den bisherigen Definitionen

$$C = \frac{1}{1 - G_\psi G_\chi} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{K}{1 - G_\psi G_\chi} \right)^{2i} \langle \text{tr} ((M - G)\bar{h})_{0,0}^{2i} (M - G)_0 \rangle_H . \quad (134)$$

Mit M und G ist jetzt allerdings nur jeweils ein $4 \otimes 4$ -Diagonalblock gemeint. Da jetzt wieder ausschließlich geschlossene Wege gefragt sind, ist die Summation der führenden Ordnung in d erneut unmöglich. Der Grund liegt, wie erwähnt, darin, daß sich zwar mit zunehmender Anzahl von G -Faktoren in einem Graphen die Zwangsbedingungen verschärfen (es tragen nur Graphen bei, in denen sich alle ϕ -Faktoren zu Betragsquadraten kompensieren), dies aber nicht unbedingt zu einer Abnahme der Ordnung in d führt. Es entsteht eine ähnliche Situation wie bei Berechnung der Phasengrenzen, so daß eine Entwicklung in K bis zur sechsten Ordnung erfolgt. Aus ihr resultiert in $d = 4$ Dimensionen

$$C = \frac{4}{1 - G_\psi G_\chi} \left[1 - (1 + G_\psi G_\chi) \left(96 \left(\frac{K}{1 - G_\psi G_\chi} \right)^4 + 4224 \left(\frac{K}{1 - G_\psi G_\chi} \right)^6 \right) + O(K^8) \right] . \quad (135)$$

Die alleinige Relevanz geschlossener Graphen erlaubt nun wieder die Durchführung einer inversen HPE mit demselben Grad an Inkonsistenz wie bei der Untersuchung der Phasengrenzen. Mit den Definitionen des vorigen Abschnitts lautet der gesuchte Zusammenhang in $d = 4$ Dimensionen:

$$C = -4 \left\{ \frac{1}{8K^2} h + \frac{1}{64K^4} [2h^2 + f^4 - 2g^2f^2 - g^4] + \frac{1}{512K^6} [5h^3 + 6h(f^4 - 2g^2f^2 - g^4) + 4f^6 - 12g^2f^4 - 6g^4f^2 - 2g^6] \right\} . \quad (136)$$

Einen Vergleich der HPE mit numerischen Daten zeigt Tabelle 2. Die Einträge in der mit HMC bezeichneten Spalte sind Ergebnis einer Mittelung aus allen MC-Daten, die bei entsprechenden Yukawakopplungen und K -Werten, aber durchaus bei verschiedenem κ bestimmt wurden. Um festzustellen, wie sehr den Resultaten zu trauen ist, sind die MF-Daten für verschiedene Ordnungen in K angegeben (die zweite Ordnung ist identisch mit der nullten Ordnung).

Tabelle 2: Fermionkondensat in der symmetrischen Phase für kleine K

G_ψ	G_χ	K	HMC	$O(1)$	$O(K^4)$	$O(K^6)$
0.1	-0.3	0.02	3.8838(8)	3.8835	3.8834	3.8834
0.1	-0.3	0.06	3.8780(9)	3.8835	3.8793	3.8787
0.1	-0.3	0.10	3.8507(8)	3.8835	3.8514	3.8380
0.1	-0.3	0.15	3.255(2)	3.8835	3.7208	3.5690
0.1	-0.3	0.18	2.945(2)	3.8835	3.5460	3.0930
0.1	-0.3	0.20	2.678(1)	3.8835	3.3690	2.5166
0.1	-0.3	0.40	0.8747(8)	3.8835	-4.340	-58.90
2.0	-2.0	0.01	0.7996(4)	0.8000	0.8000	0.8000
2.0	-2.0	0.10	0.7982(6)	0.8000	0.8000	0.8000
2.0	-2.0	0.20	0.7783(4)	0.8000	0.8006	0.8006
2.0	-2.0	0.30	0.8047(7)	0.8000	0.8030	0.8035
2.0	-2.0	0.39	0.8112(11)	0.8000	0.8085	0.8108
0.1	-1.0	0.02	3.636(2)	3.6363	3.6363	3.6363
0.1	-1.0	0.06	3.617(2)	3.6363	3.6335	3.6332
0.1	-1.0	0.10	3.581(2)	3.6363	3.6150	3.6070
0.1	-0.1	0.09	3.942(4)	3.9600	3.9367	3.9284
0.3	-0.3	0.091	3.6468(25)	3.6700	3.6541	3.6494
0.6	-0.6	0.122	2.8914(11)	2.9410	2.9290	2.9250
1.0	-1.0	0.19	1.950(2)	2.0000	2.0000	2.0000
0.6	0.6	0.055	6.213(8)	6.2500	6.2050	6.1910

Das Verhalten beim Übergang zu höheren Ordnungen macht in der ersten Meßreihe ($G_\psi = 0.1, G_\chi = -0.3$) deutlich, daß die Konvergenz bei vollständiger Entwicklung in K vermutlich bereits bei $K = 0.15$ nicht mehr gegeben ist, da sich dort die Korrekturen von der zweiten bzw. nullten zur vierten Ordnung und von der vierten zur sechsten Ordnung kaum noch unterscheiden, während sie bei kleinerem K mit zunehmender Ordnung stark zurückgehen. Die qualitativ recht gute Übereinstimmung der MF-Daten in sechster Ordnung mit den MC-Resultaten für $0.15 \leq K \leq 0.2$ ist daher rein zufällig und sollte bei höheren Ordnungen verschwinden.

In allen weiteren Meßreihen ist diesen Überlegungen zufolge die vollständige HPE vermutlich konvergent. Daß der Konvergenzbereich hinsichtlich K dabei erneut von der Größe der Yukawakopplungen abhängt, liegt wiederum in der Proportionalität des Entwicklungsparameters der HPE zu $\frac{K}{1-G_\psi G_\chi}$ begründet. Besonders offensichtlich wird dies in $G_\psi = -G_\chi = 2$, wo auch bei $K = 0.39$ der Konvergenzradius noch nicht überschritten zu sein scheint.

Tabelle 3 zeigt die analytischen Resultate der inversen HPE im Vergleich mit den numerischen Ergebnissen. Der Vergleich der verschiedenen Ordnungen macht deutlich, daß in allen Fällen auch durch höhere Potenzen von K^{-1} keine wesentliche Änderung mehr zu erwarten ist. Für $K \geq 0.8$ wird der numerische Wert trotz der im Rahmen der inversen HPE notwendigen Näherungen gut getroffen.

Tabelle 3: Fermionkondensat in der symmetrischen Phase für große K

G_ψ	G_χ	K	HMC	$O(K^{-2})$	$O(K^{-4})$	$O(K^{-6})$
0.1	-0.3	1.0	0.1845(3)	0.1652	0.1707	0.1707
0.1	-0.3	0.8	0.2668(4)	0.2581	0.2716	0.2715
0.1	-0.3	0.6	0.4367(6)	0.4587	0.5015	0.5011
0.1	-0.3	0.4	0.8777(8)	1.0320	1.2490	1.2440

3 Die Fermiondeterminante im U(1)-Modell

3.1 Motivation

Die Verwendung aller bisher bekannten MC-Algorithmen zur Berechnung von Erwartungswerten in einer auf dem Gitter regularisierten, fermionischen Feldtheorie wirft ein wohlbekanntes Problem auf. Führt man die MC-Integration direkt auf der Basis der Fermionfelder aus, treten aufgrund des antikommutierenden Charakters der sie darstellenden Grassmannvariablen Differenzen großer Zahlen auf, die für die gesuchten Erwartungswerte im allgemeinen zu so großen Varianzen führen, daß eine vernünftige Statistik nicht möglich ist [25].

Um dieses „Minuszeichenproblem“ zu umgehen, macht man von der Tatsache Gebrauch, daß die Wirkung in vierdimensionalen Feldtheorien wegen der Forderung nach Renormierbarkeit i.a. bilinear in den Fermionfeldern ist, d.h. sich schreiben läßt als $S = S_\phi + S_F$, wobei der fermionische Teil durch

$$S_F = \sum_{x,y} \bar{\Psi}_x Q_{xy}(\phi) \Psi_y. \quad (137)$$

gegeben ist. In unserem Modell steht Ψ für ein Fermion-Spiegelfermion-Paar, also $\Psi = (\psi, \chi)^T$. $Q_{xy}(\phi)$ ist die in (15) eingeführte Matrix. Infolgedessen läßt sich der Grassmannanteil des Funktionalintegrals analytisch auswerten und liefert auf diese Weise die Fermiondeterminante

$$\det Q(\phi) = \int d\psi d\psi^+ e^{-S_F}. \quad (138)$$

An dieser Stelle sei angemerkt, daß die Fermiondeterminante im U(1)-Modell prinzipiell komplex sein kann. In der realistischeren SU(2)-Version unseres Modells ist die Determinante reell, allerdings nur dann, wenn die beiden Komponenten der SU(2)-Doublets jeweils gleiche Massen aufweisen; eine Symmetrie, die in der Realität offensichtlich gebrochen ist. Daher wird dort auch wieder die Problematik einer komplexen Fermiondeterminante anzutreffen sein. Vor diesem Hintergrund können alle folgenden Rechnungen im U(1)-Modell auch als Vorbereitung für spätere Rechnungen in wirklichkeitsnäheren Modellen angesehen werden.

Für die Berücksichtigung der Fermiondeterminante in den numerischen Rechnungen, die der analytischen Integration des Grassmannanteils folgen, stehen drei Möglichkeiten zur Diskussion:

1. Die Fermiondeterminante kann als ein Teil der zu messenden Observablen betrachtet werden. In der Praxis schlägt dies fehl, denn es ist nicht zu erwarten, daß sich die Determinante im Laufe der Messungen nur wenig ändert. Daher kann sie auch nicht approximativ als konstant angesehen werden und ist für jede Messung, d.h. nach jedem Updating, neu zu berechnen. Der zu diesem Zweck erforderliche Zeitaufwand kann die CPU-Zeit für ein Updating je nach Parameterwerten einige hundertmal übersteigen und macht ein solches Vorgehen folglich unpraktikabel. (Auf einem $4^3 \cdot 8$ -Gitter im U(1)-Modell beträgt die Zeit für die Berechnung einer Determinante auf der CRAY Y-MP ungefähr 180 Sekunden; die Zeit für das Durchlaufen einer HMC-Trajektorie hängt sehr von den Parameterwerten des Modells ab, liegt aber in der Regel unter zehn Sekunden.)

2. Man kann sie in das Integralmaß einbeziehen. Sinnvoll ist ein solches Verfahren allerdings nur im Fall einer reellen Determinante. Diese Methode wird u.a. beim HMCA praktiziert. Die dort angewandte Technik erfordert jedoch weitgehende Einschränkungen an die Fermionmatrix und führt dadurch zu einer unerwünschten Fermionverdopplung (Kapitel 4).
3. Der Betrag der Determinante kann als ein Teil des Maßes angesehen werden, während ihr Phasenfaktor mit in die Observablen gezogen wird.
 - (a) Fluktuiert dieser Phasenfaktor sehr stark, muß er für jede Messung neu bestimmt werden und verhindert dadurch aus dem unter 1. erwähnten Grund eine sinnvolle Simulation.
 - (b) Zeigt er allerdings nur kleine Fluktuationen, kann der Phasenfaktor näherungsweise als konstant angesehen werden und somit einen Teil der Observablen bilden, ohne für jede Messung neu berechnet werden zu müssen.

Um die Möglichkeiten einer statistischen Behandlung fermionischer Theorien auszuloten, ist daher zunächst das Verhalten der Fermiondeterminante zu untersuchen. Die oben ausgeführten Bemerkungen zeigen, daß sie i.a. als komplex anzusehen ist. Nur im letzten Fall (3b) scheint daher eine MC-Simulation mit expliziter Berücksichtigung der unveränderten Determinante möglich zu sein. In der Tat wird sich herausstellen, daß eine solche Situation im vorliegenden U(1)-Modell in allen betrachteten Meßpunkten des Phasenraumes gegeben ist. Unter bestimmten Voraussetzungen verschwindet die Phase sogar exakt, ist also die Determinante reell.

3.2 Realisierung der Determinantenmessung auf dem Computer

Grundsätzlich stellt die Berechnung einer Determinante auf dem Computer kein Problem dar, es sei denn, die betrachteten Matrizen überschreiten die Speicherkapazitäten und ein für solche Fälle vorgesehenes Pagingverfahren steht nicht zur Verfügung oder soll aus Zeitgründen vermieden werden. Dann ist man gezwungen, die Struktur der Matrix zu nutzen und sie für die Berechnung der Determinante geeignet umzuformen.

Eine in diesem Rahmen geprüfte Möglichkeit besteht darin, die Matrix durch symmetrisches Vertauschen von Spalten und Zeilen auf Blockdiagonalform oder Blockdreiecksgestalt zu bringen. Die Graphentheorie, die der Matrix bzgl. ihrer Besetzung mit von Null verschiedenen Elementen einen Graphen zuordnet, zeigt sich dort als bewährtes buchhalterisches Hilfsmittel [39]. In der Tat läßt sich so die Fermionmatrix für bestimmte Fälle in eine Matrix aus zwei Diagonalblöcken gleicher Größe umformen, von denen einer aus sämtlichen ungeraden Zeilen und Spalten, der andere entsprechend aus den geraden Zeilen und Spalten aufgebaut ist. (Wie man leicht sieht, haben die „Grundbausteine“ der Matrix, abgesehen von den Paulimatrizen im nichtlokalen, offdiagonalen Anteil, ihre Einträge entweder in geraden Zeilen und Spalten oder in ungeraden Zeilen und Spalten. Die einzigen Abweichungen treten bei den Paulimatrizen σ_1 und σ_2 für die x und y Richtung auf. Für den Spezialfall einer Ausdehnung des Gitters von zwei Einheiten in diese beiden Richtungen befinden sich aber in der Fermionmatrix die Paulimatrizen σ_1, σ_{-1} sowie σ_2, σ_{-2} jeweils auf denselben Plätzen und addieren sich daher zu Null, so daß sich die störenden Elemente aufheben.) Da man i.a. auf größeren Gittern von einer derartigen Situation nicht ausgehen kann, ist dieses Verfahren zu verwerfen.

Eine weitere Methode zur Verringerung des Speicherbedarfs besteht darin, die Speicherung der Nulleinträge wegzulassen, also etwa die Matrix mit Hilfe dreier Vektoren $Q(N), R(N), C(N)$ abzuspeichern. N ist dabei die Zahl der von Null verschiedenen Elemente, Q enthält deren Werte, C die die Nummer der Spalten und R die der Reihen, in denen sie sich befinden. Die Anordnung der von Null verschiedenen Elemente erweist sich allerdings als so ungünstig, daß im Verlaufe der LU-Zerlegung der Speicherbedarf sehr stark zunimmt. Das hat desweiteren zur Folge, daß dieses Programm auch bezüglich der Rechenzeit, die stark von dem zur Verfügung gestellten Speicherplatz abhängt, nur auf kleinen Gittern (bis $2^2 \cdot 4^2$) die günstigste Alternative darstellt.

Auch das Umordnen der Matrix auf die Form einer Bandmatrix mit anschließender Berechnung der Determinante auf Grundlage des Gauss-Seidel-Algorithmus ist eine Möglichkeit, Speicherplatz einzusparen. Als günstiger und unter den gegebenen Bedingungen der Speicherkapazität allein machbar hat sich aber schließlich eine auf einer LU-Blockzerlegung basierende Methode [39] erwiesen. Sie soll im folgenden anhand eines Beispiels erläutert werden. Die Vorgehensweise im allgemeinen Fall wird sich daraus ergeben.

Legt man sich beim Durchzählen der Gitterpunkte auf die Reihenfolge x, y, z, t - Richtung fest, so ergibt sich für die Fermionmatrix auf einem Gitter mit einer zeitlichen Ausdehnung von $L_t = 6$ und beliebiger räumlicher Ausdehnung L_x, L_y, L_z die folgende Gestalt:

$$Q = \begin{pmatrix} x_1 & a & & & & \tilde{b} \\ b & x_2 & a & & & \\ & b & x_3 & a & & \\ & & b & x_4 & a & \\ & & & b & x_5 & a \\ \tilde{a} & & & & b & x_6 \end{pmatrix}. \quad (139)$$

Darin enthalten die x_i jeweils einen vollen $L_x \cdot L_y \cdot L_z$ -Anteil der Matrix für die i -te Zeitscheibe. Die a enthalten ebenso wie die b einen reinen Zeitanteil, d.h. den Wilson- und Hoppinganteil für $\mu = \pm 4$. Nur in den beiden Blöcken \tilde{a} und \tilde{b} spiegeln sich die zeitlichen Randbedingungen wider. Die symmetrische Umordnung von Zeilen und Spalten in (139) führt zu einer drei-Blöcke-breiten Bandmatrix der Form:

$$Q \rightarrow \begin{pmatrix} x_2 & a & b & & & \\ b & x_3 & a & & & \\ & b & x_4 & a & & \\ a & & x_1 & \tilde{b} & & \\ & b & x_5 & a & & \\ \tilde{a} & b & x_6 & & & \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_3 & b & a & & & \\ a & x_2 & & b & & \\ b & & x_4 & a & & \\ a & & x_1 & & \tilde{b} & \\ & b & & x_5 & a & \\ \tilde{a} & b & & x_6 & & \end{pmatrix}. \quad (140)$$

Die Allgemeingültigkeit für alle geraden $L_t \geq 4$ beweist man durch vollständige Induktion mit Induktionsanfang bei $L_t = 4$.

Die geänderte Reihenfolge der Diagonalblöcke läßt sich durch eine Indexfunktion $T(i)$ berücksichtigen und somit für den allgemeinen Fall implementieren. Die Funktion genügt der folgenden Gesetzmäßigkeit:

$$\begin{aligned} T(1) &= \frac{L_t}{2}, \quad T(L_t) = L_t, \\ T(2i) &= \frac{L_t}{2} - i, \quad T(2i + 1) = \frac{L_t}{2} + i, \quad i = 1, \dots, \frac{L_t}{2} - 1. \end{aligned} \quad (141)$$

Daraus resultiert durch Anwendung der Methode der vollständigen LU-Blockfaktorisierung auf die Bandmatrix in (140), z.B. für den Fall $L_t = 8$, das nachstehende Rekursionsschema:

$$\begin{aligned}
D_1 &= x_{T(1)} & y_{21} &= a D_1^{-1} & z_{12} &= b \\
D_2 &= x_{T(2)} - y_{21} z_{12} & y_{32} &= -b D_1^{-1} z_{12} D_2^{-1} & z_{23} &= -y_{32} a \\
D_3 &= x_{T(3)} - y_{32} z_{23} - b D_1^{-1} a & y_{43} &= -a D_2^{-1} z_{23} D_3^{-1} & z_{34} &= -y_{43} b \\
D_4 &= x_{T(4)} - y_{43} z_{34} - a D_2^{-1} b & y_{54} &= -b D_3^{-1} z_{34} D_4^{-1} & z_{45} &= -y_{54} a \\
D_5 &= x_{T(5)} - y_{54} z_{45} - b D_3^{-1} a & y_{65} &= -a D_4^{-1} z_{45} D_5^{-1} & z_{56} &= -y_{65} b \\
D_6 &= x_{T(6)} - y_{65} z_{56} - a D_4^{-1} b & y_{76} &= -b D_5^{-1} z_{56} D_6^{-1} & z_{67} &= -y_{76} a \\
D_7 &= x_{T(7)} - y_{76} z_{67} - b D_5^{-1} a & y_{87} &= b D_7^{-1} - \tilde{a} D_6^{-1} z_{67} D_7^{-1} & z_{78} &= a - y_{87} \tilde{b} \\
D_8 &= x_{T(8)} - y_{87} z_{78} - \tilde{b} D_6^{-1} \tilde{a} & & & &
\end{aligned} \tag{142}$$

Die Zerlegung ist dabei so durchgeführt worden, daß in der unteren Dreiecksmatrix die Diagonalblöcke aus Einheitsmatrizen bestehen. Die Diagonalblöcke der oberen Dreiecksmatrix wurden mit D_i , die Blöcke der ersten Nebendiagonalen mit $y_{i+1,i}$ bzw. $z_{i,i+1}$ bezeichnet. Mit Hilfe der Diagonalblöcke läßt sich die Determinante als Produkt bestimmen:

$$\det Q = \prod_{i=1}^8 \det D_i . \tag{143}$$

Die Programmierung dieser „Rekursion“ auf dem Computer bereitet jetzt keine weiteren Probleme. Der beschränkte Speicherplatz erfordert allerdings eine etwas aufwendigere Speicherverwaltung. Verwendet werden insgesamt 6 Felder, die jeweils eine Blockmatrix erfassen können. Mit Hilfe einer Schleife, die im obigen Beispiel mit der Berechnung von y_{32} beginnt und mit der Berechnung von D_7 endet, ist dieses Programm für beliebige L_t anwendbar. Inversion und Determinantenberechnung werden mit IMSL-Routinen durchgeführt. Die Matrixmultiplikationen und -additionen in der Rekursion wurden durch Verwendung spezieller CRAY-Routinen optimiert. Letzteres verhindert allerdings die sofortige Übertragung auf andere Computer. In dieser Version wird für eine Determinantenbestimmung auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter eine CPU-Zeit von 175 Sekunden benötigt. Der Vektorisierungsgrad auf der CRAY Y-MP ist dabei sehr hoch: der nominalen Maximalgeschwindigkeit eines CRAY-Prozessors von ca. 333 MFlop steht eine Programmgeschwindigkeit von knapp 300 MFlop gegenüber.

Bei Verwendung der unterschiedlichen Methoden zur Determinatenberechnung einer $N \otimes N$ -Matrix aus Complex*16 Elementen, die sich auf obige Weise in $M \otimes M$ -Blöcke strukturieren lässt ($M = 8 \cdot L_x L_y L_z$, $N = ML_t$), ergibt sich zusammenfassend das folgende Bild:

1. Berechnung der Determinante mit gewöhnlichen NAG- oder IMSL-Routinen:

Speichererfordernis	$\approx 16 \cdot N(N + 1)$ Byte	$(\propto L_t^2)$
CPU-Zeit-Bedarf	$\propto N^3$	$(\propto L_t^3)$

 Damit folgt auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter im U(1)-Modell ein Speicherbedarf von ca. 33 MWord.
2. Umordnung in eine Bandstruktur wie in (140) mit einer Bandbreite von 3M und Verwendung von IMSL-Routinen mit Bandspeichermodus:

Speichererfordernis	$\approx 16 \cdot N(3M + 7)$ Byte	$(\propto L_t^1)$
---------------------	-----------------------------------	-------------------

Dies führt auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter im U(1)-Modell zu einem Speicherbedarf von ca. 13 MWord.

3. LU-Blockfaktorisierung der Bandmatrix und Berechnung der Fermiondeterminante mit (143):

Speichererfordernis	$\propto M^2$	$(\propto L_t^0)$
CPU-Zeit-Bedarf	$\propto M^3 L_t$	$(\propto L_t^1)$

Das bedeutet einen Speicherbedarf von ca. 3MWord.

3.3 Überprüfung des Programms

1. Bis zum $2 \cdot 4^3$ -Gitter wurden die Resultate aus der Rekursion mit denen aus SPAMA, einer abgewandelten NAG-Routine zur LU-Zerlegung dünner Matrizen, verglichen.
2. Verifiziert werden konnte folgende, allgemeingültige Beziehung:

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} [\ln \det(Q + \lambda I_{uv})] |_{\lambda=0} = Q_{vu}^{-1} \quad \text{mit} \quad (I_{uv})_{xy} = \delta_{ux} \delta_{vy}. \quad (144)$$

Das inverse Element wurde zu diesem Zweck mit dem konjugierten Gradientenalgorithmus (s.u.) berechnet und die linke Seite im Computer durch den Differenzenquotienten $[\ln \det(Q + \Delta \lambda I_{uv}) - \ln \det Q]/\Delta \lambda$ bei $\Delta \lambda = 10^{-4}$ realisiert. Die Abweichung beider Seiten voneinander lag im Bereich von $10^{-3}\%$.

3. Ein Vergleich mit einem Programm zur Bestimmung von Determinanten bei konstanten Elementen durch Fouriertransformation wurde ebenfalls durchgeführt. Letzteres basiert auf folgender Überlegung:
Seien $Q_{xy}, G, D_\mu \in \mathbb{R}$ und sei $Q_{xy} = \delta_{xy}G - K \sum_\mu D_\mu \delta_{x,y+\mu}$ mit konstantem G , so gilt mit $\psi_y^k := e^{iky} \cdot r$ der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \sum_y Q_{xy} \psi_y^k &= \sum_y \delta_{xy} G \psi_y^k - K \sum_\mu D_\mu e^{ik(x-\mu)} r \\ &= \left(G - K \sum_\mu D_\mu e^{-ik\mu} \right) \psi_x^k. \end{aligned} \quad (145)$$

ψ^k ist demnach Eigenvektor der Matrix Q mit Eigenwert $G - K \sum_\mu D_\mu e^{-ik\mu}$, und daher gilt für die Determinante

$$\det Q = \prod_k \det \left(G - K \sum_\mu D_\mu e^{-ik\mu} \right), \quad (146)$$

wobei k sämtliche Gitterimpulse durchläuft.

Auch hier bewegten sich die Abweichungen im Rahmen der Rechenungsgenauigkeit.

4. Schließlich wurden auch Parametersätze gefunden (stark unterschiedliche Yukawakopplungen, z.B. $G_\chi = 0, G_\psi = 3$), bei denen die Determinante eindeutig komplex war, d.h. einen Phasenwinkel hatte, der sich nicht mehr mit Rechenungsgenauigkeiten erklären lässt. Dies bestätigt, daß das Programm auch wirklich in der Lage ist, komplexe Ergebnisse zu produzieren.

3.4 Ergebnisse

Die Determinante wurde im Rahmen des U(1)-Modells in vier verschiedenen Punkten (H,D,b,Z) des Parameterraumes untersucht. (Die Punkte H,D sind [28], der Punkt b [29] entnommen. Ihre Parameterwerte und diejenigen von Z finden sich in der nächsten Tabelle.) Dieser wird aufgespannt durch die quartische Kopplung, die Yukawakopplungen und die Hoppingparameter. Für festgehaltene Kopplungen ergibt sich nach Kapitel 2 ein Bild, das im betrachteten Bereich schematisch wie folgt aussieht:

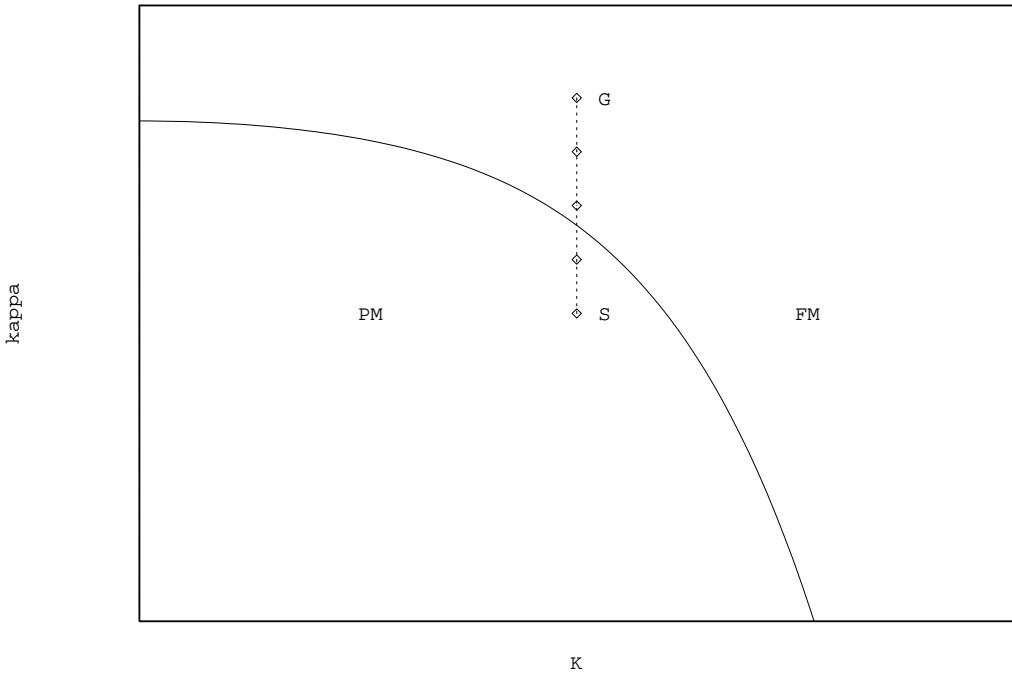


Abbildung 14: Schematische Darstellung der FM-PM-Phasengrenze

In dieser Abbildung ist der skalare Hoppingparameter κ gegen den fermionischen Hoppingparameter K aufgetragen. Die durchgezogene Linie markiert den Phasenübergang, der die untere, paramagnetische von der oberen, ferromagnetischen Phase trennt. Für alle vier Punkte wurde κ so gewählt, daß man sich mit vier äquidistanten Schritten von einer skalaren Masse $m_R \approx 1$ in der symmetrischen Phase, in der Abbildung gekennzeichnet durch S, zu einem Wert gleicher Größe in der gebrochenen Phase, markiert durch G, bewegt. Auf diese Weise erhält man 20 Messpunkte. Mit der Wahl dieser Messreihen sollte sichergestellt werden, daß die Determinante zum einen in beiden Phasen, zum anderen aber auch nahe des Phasenübergangs untersucht wird. Nach Equilibrierung wurde in diesen Messreihen jeweils alle hundert Trajektorien eine Determinante bestimmt. In jedem der betrachteten Punkte geschah dies etwa vierzigmal.

Betrachtet man die Yukawakopplungen, so sind die Messpunkte H,D,Z gerade so gewählt, daß die Differenz ihrer Beträge gegen Null geht, während die anderen Parameter festgehalten werden. Der Punkt b hat bei sehr kleiner Higgskopplung einen Wert für K , der jenseits der kritischen Größe von ca. $\frac{1}{8}$ liegt. Die Werte der einzelnen Parameter faßt die folgende Tabelle zusammen:

Tabelle 4: Parameterwerte

Punkt	λ	G_ψ	G_χ	K
H	1.0	1.0	0.0	0.100
D	1.0	0.3	0.0	0.100
Z	1.0	0.3	-0.3	0.100
b	10^{-4}	0.1	-0.2	0.130

Die anschließende Abbildung zeigt für den Punkt H in der symmetrischen Phase bei $\kappa = 0.070$ die Verteilung der 40 Werte der Fermiondeterminante in der komplexen Ebene. Die die beiden Linien in der Abbildung kennzeichnen den Phasenwinkel ± 0.01 .

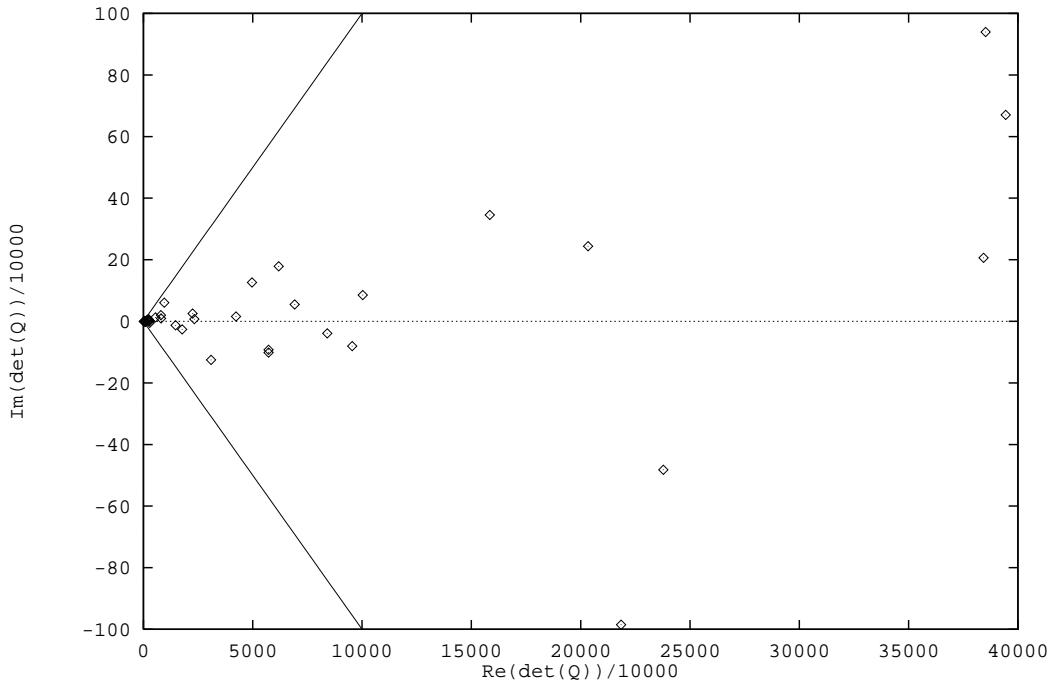


Abbildung 15: Verteilung der Determinante in der komplexen Ebene für den Punkt H in $\kappa = 0.07$.

Ähnliche Verteilungen ergaben sich auch für alle anderen Punkte der obigen Tabelle, so daß die Determinante in jedem betrachteten Punkt nahezu reell ist. Die Ergebnisse der Messungen sind in der umseitigen Tabelle aufgelistet:

Tabelle 5: Messung der Determinante

Punkt	κ	$\text{Re}(\det Q)$	$\text{Im}(\det Q)$	$\overline{\varphi_Q}$	$\text{Std}(\varphi_Q)$
H	0.070	$6.90 \cdot 10^7$	$2.68 \cdot 10^4$	$3.89 \cdot 10^{-4}$	$2.04 \cdot 10^{-3}$
	0.079	$2.20 \cdot 10^8$	$-2.48 \cdot 10^5$	$2.54 \cdot 10^{-5}$	$2.67 \cdot 10^{-3}$
	0.088	$3.34 \cdot 10^{11}$	$7.07 \cdot 10^7$	$-6.17 \cdot 10^{-4}$	$2.23 \cdot 10^{-3}$
	0.097	$9.65 \cdot 10^{13}$	$-6.46 \cdot 10^{10}$	$2.95 \cdot 10^{-4}$	$2.16 \cdot 10^{-3}$
	0.105	$7.70 \cdot 10^{18}$	$-2.14 \cdot 10^{15}$	$-4.11 \cdot 10^{-4}$	$2.16 \cdot 10^{-3}$
D	0.137	$1.67 \cdot 10^3$	$4.51 \cdot 10^{-3}$	$1.15 \cdot 10^{-6}$	$1.90 \cdot 10^{-5}$
	0.145	$2.03 \cdot 10^3$	$5.28 \cdot 10^{-4}$	$5.55 \cdot 10^{-7}$	$2.24 \cdot 10^{-5}$
	0.153	$2.64 \cdot 10^3$	$-1.35 \cdot 10^{-2}$	$-3.55 \cdot 10^{-6}$	$2.18 \cdot 10^{-5}$
	0.160	$3.09 \cdot 10^3$	$-2.10 \cdot 10^{-2}$	$-1.61 \cdot 10^{-6}$	$2.52 \cdot 10^{-5}$
	0.168	$5.46 \cdot 10^3$	$-1.98 \cdot 10^{-2}$	$-2.34 \cdot 10^{-6}$	$2.14 \cdot 10^{-5}$
Z	0.104	$3.90 \cdot 10^{84}$	$-1.39 \cdot 10^{70}$	$1.81 \cdot 10^{-16}$	$5.50 \cdot 10^{-15}$
	0.109	$1.10 \cdot 10^{85}$	$-2.73 \cdot 10^{70}$	$-7.16 \cdot 10^{-16}$	$6.53 \cdot 10^{-15}$
	0.114	$3.38 \cdot 10^{86}$	$2.52 \cdot 10^{72}$	$9.54 \cdot 10^{-16}$	$8.06 \cdot 10^{-15}$
	0.119	$2.55 \cdot 10^{88}$	$-1.02 \cdot 10^{74}$	$-1.68 \cdot 10^{-16}$	$7.65 \cdot 10^{-15}$
	0.124	$1.27 \cdot 10^{89}$	$2.45 \cdot 10^{75}$	$2.57 \cdot 10^{-15}$	$7.42 \cdot 10^{-15}$
b	0.077	$5.72 \cdot 10^{35}$	$-5.38 \cdot 10^{31}$	$1.54 \cdot 10^{-5}$	$1.70 \cdot 10^{-4}$
	0.081	$5.77 \cdot 10^{36}$	$-1.81 \cdot 10^{33}$	$-5.58 \cdot 10^{-5}$	$2.52 \cdot 10^{-4}$
	0.086	$9.24 \cdot 10^{38}$	$4.56 \cdot 10^{35}$	$-2.20 \cdot 10^{-5}$	$2.45 \cdot 10^{-4}$
	0.091	$3.95 \cdot 10^{42}$	$-2.30 \cdot 10^{38}$	$-1.16 \cdot 10^{-5}$	$2.57 \cdot 10^{-4}$
	0.096	$2.20 \cdot 10^{65}$	$-8.98 \cdot 10^{60}$	$3.42 \cdot 10^{-5}$	$1.53 \cdot 10^{-4}$

Der Strich über den Größen kennzeichnet den Mittelwert, $\text{Std}(\varphi_Q)$ meint die Standardabweichung der Determinantenphase φ_Q . Die Nummern der einzelnen Punkte geben die Größe von κ an.

Bei Betrachtung dieser Tabelle werden im wesentlichen drei Dinge deutlich:

1. Der Phasenübergang scheint für den Wert der Determinante keine besondere Rolle zu spielen, da die Messgrößen sich beim Fortschreiten entlang der jeweiligen Messreihen nicht auffällig verhalten.
 - (a) Die Mittelwerte von Real- und Imaginärteil der Determinante zeigen, wenn man von einer kleinen Ausnahme in Imaginärteil von D absieht, ein kontinuierliches Anwachsen ihres Betrages beim Übergang von symmetrischer zu gebrochener Phase, zum Teil über viele Größenordnungen.
 - (b) Der Mittelwert der Phase dagegen ist klein und ändert innerhalb der einzelnen Messreihen im Vergleich zu Real- und Imaginärteil seine Größe nur unwesentlich.
 - (c) Die Standardabweichung hat innerhalb einer jeden Messreihe ungefähr die gleiche Größenordnung und stellt sicher, daß die Phase nur kleine Fluktuationen aufweist. Zusammen mit (b) folgt daher, daß sie sich in einem kleinen Bereich um Null bewegt.

Diese Beobachtungen behalten sehr wahrscheinlich auch bei einer Verlängerung der Messreihen im Phasenraum zu größeren Massen hin ihre Gültigkeit.

2. Eine Betrachtung der Messungen in $\lambda = 1$ (H,D,Z) zeigt, daß die Phase um so kleiner wird, je mehr sich die Beträge von G_ψ und G_χ einander nähern. In Z ist sie, bei gleichzeitig sehr großen Absolutwerten der Determinante, verglichen

mit den anderen Punkten sehr klein. Dies gibt Anlaß zu der Vermutung, daß die Determinante im Fall $|G_\psi| = |G_\chi|$ exakt reell ist, also die, relativ gesehen, kleinen Imaginärteile auf Rechenun genauigkeiten des Computers zurückzuführen sind. Dies konnte durch die Angabe geeigneter Ähnlichkeitstransformationen bewiesen werden (Anhang F). Die Untersuchung eines weiteren Punktes H070 mit $G_\psi = 3.0$ zeigte eine deutlich von Null verschiedene Phase und bestätigt die Annahme, daß für die Phasen in den Punkten mit $|G_\psi| \neq |G_\chi|$ keine Rundungsfehler mehr verantwortlich zu machen sind.

3. Für $\lambda = 10^{-4}$ ist die Phase ebenfalls sehr klein.

Daraus ist zu schließen, daß sich in dem von uns betrachteten Teil des Parameterraumes die Beträge der Yukawakopplungen hinreichend wenig unterscheiden und infolgedessen die Determinante dort näherungsweise als reell angesehen werden kann. Basierend auf den Ergebnissen der Determinantenmessung besteht eine Möglichkeit, die Fermiondeterminante zu verarbeiten, folglich darin, ihren Betrag in die Wirkung einzubeziehen und den Phasenfaktor auf eins zu setzen. Dieses Verfahren läßt sich mit Hilfe des Langevinalgorithmus realisieren. Wie dabei im einzelnen vorzugehen ist, zeigt das kommende Kapitel.

4 Numerische Untersuchungen

4.1 Allgemeine Bemerkungen

In der Einleitung wurde bereits auf die Notwendigkeit einer numerischen Berechnung hochdimensionaler Integrale für den Fall anderweitig unzugänglicher Parameterbereiche hingewiesen. Diese läßt sich i.a. nur mit Hilfe von MC-Methoden durchführen. Man sollte sich aber vor Augen halten, daß es sich dabei um einen sehr ineffizienten Weg handelt, der nur aus Mangel an Alternativen eingeschlagen wird.

Die der Berechnung von Integralen mit MC-Verfahren zugrundeliegende Idee besteht im einfachsten Fall darin, die Integrationsvariable im relevanten Bereich zufällig zu wählen, den Integranden dort auszuwerten und das Integral als statistisches Mittel aufzufassen, also den Ausdruck

$$\langle \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int d\phi e^{-S(\phi)} \Omega(\phi) \quad (147)$$

durch

$$\bar{\Omega} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{e^{-S(\phi_i)}}{Z} \Omega(\phi_i) \quad (148)$$

zu ersetzen. Die Zustandssumme Z ist dabei so gewählt, daß $\langle 1 \rangle = 1$ ist. Da der Boltzmannfaktor $e^{-S(\phi)}$ in (147) i.a. über mehrere Größenordnungen variiert, ist allerdings die Wahl einer Gleichverteilung für die ϕ_i wie in (148) sehr ineffektiv. Besser ist es, ϕ gemäß der Verteilung $\frac{e^{-S(\phi)}}{Z}$ auszuwürfeln, da in diesem Fall die Abschnitte des Integrationsbereichs entsprechend ihrer Relevanz für das Endresultat gewichtet werden. Mit einem solchen „importance sampling“ ist dann

$$\bar{\Omega} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Omega(\phi_i). \quad (149)$$

Die Berechtigung zu einem derartigen Vorgehen ergibt sich aus dem zentralen Grenzwertsatz der Wahrscheinlichkeitstheorie.

Unter einigen allgemeinen Annahmen, die hier als gegeben vorausgesetzt werden können, besagt er, daß die Summe vieler unkorrelierter Zufallsvariablen, wie sie in (149) auftritt, annähernd normalverteilt ist. Abweichungen von dieser Verteilung machen sich erst in der Entfernung mehrerer Standardabweichungen von deren Mittelwert bemerkbar. Ihr absoluter, für die Mittelwertbildung relevanter Wert ist dort aber vernachlässigbar klein.

In unserem Fall kann man daher für $\bar{\Omega}$ von einer Normalverteilung um den Mittelwert $\langle \Omega \rangle$ ausgehen. Sie ist definiert durch

$$P_N(\bar{\Omega}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \frac{\langle \Omega^2 \rangle - \langle \Omega \rangle^2}{N}}} \exp \left(-\frac{(\bar{\Omega} - \langle \Omega \rangle)^2}{2 \frac{\langle \Omega^2 \rangle - \langle \Omega \rangle^2}{N}} \right), \quad (150)$$

so daß für den Mittelwert die Relation

$$\langle \Omega \rangle = \bar{\Omega} \pm \sqrt{\frac{\langle \Omega^2 \rangle - \langle \Omega \rangle^2}{N}} \quad (151)$$

besteht.

In der effizienten Erzeugung einer vorgegebenen Verteilung der ϕ_i liegt nun die eigentliche Aufgabe der MC-Verfahren. Damit verknüpft sind die beiden folgenden Probleme:

1. Der statistische Fehler solcher Rechnungen ist, unabhängig vom gewählten MC-Algorithmus, umgekehrt proportional zu \sqrt{N} . Um einen Fehler zu halbieren, bedarf es demnach der vierfachen Computerzeit. Weil die Beziehungen in (150,151) nur im Idealfall unkorrelierter Konfigurationen ϕ_i Gültigkeit besitzen, ist dieses N in der Praxis zudem noch durch die kleinere Zahl unkorrelierter Messungen $N_{\text{eff}} = \alpha N$ mit $0 < \alpha < 1$ zu ersetzen.

Da dies wiederum in bestimmten Fällen („critical slowing down“) die Zahl unkorrelierter Messungen erheblich einschränkt und MC-Simulationen zum Teil sogar undurchführbar werden lässt, ist die Entwicklung von MC-Verfahren mit möglichst kleiner Proportionalitätskonstante α das Ziel intensiver Forschung [40].

Während aber hinsichtlich der Reduktion dieser Proportionalitätskonstante schon große Erfolge erzielt wurden, scheint es aus dem $1/\sqrt{N}$ -Verhalten keinen Ausweg zu geben. Genau dies ist der Grund für die Ineffizienz von MC-Rechnungen.

2. Ein weiteres Problem steht in Verbindung mit dem Auftreten von Fermionen: Versucht man die dadurch bedingten Grassmannintegrale direkt mit MC-Methoden zu bearbeiten, treten wegen des antikommutierenden Charakters der Grassmannvariablen Differenzen großer Zahlen auf, die für das Ergebnis große Fehler bedeuten [25].

Es wurde in unserem Modell auf zweierlei Weise angegangen:

Die in dieser Arbeit durchgeföhrten Rechnungen basieren im wesentlichen auf dem Hybrid-Classical-Langevin-Algorithmus (HCLA). Alle anderen im Rahmen des Projektes erzielten numerischen Ergebnisse ergaben sich unter Verwendung des HMCA. Beide werden im folgenden erläutert.

4.2 Zwei Simulationsalgorithmen im Vergleich

Wie oben angedeutet, besteht die eigentliche Aufgabe der MC-Methode in der Erzeugung einer vorgegebenen Verteilung von Konfigurationen $W_c(\phi) = \frac{1}{Z} e^{-S(\phi)}$. Dies geschieht durch einen ergodischen Markovprozeß, dessen einziger attraktiver Fixpunkt die gewünschte Verteilung ist. Eine hinreichende Bedingung dafür ist die „detailed balance“, welche die im Prozeß verwendeten Übergangswahrscheinlichkeiten zusammen mit dieser Verteilung erfüllen müssen:

$$W_c(\phi)P(\phi \rightarrow \phi') = W_c(\phi')P(\phi' \rightarrow \phi) . \quad (152)$$

D.h. in der Verteilung $W_c(\phi)$ findet der Übergang zwischen zwei beliebigen Konfigurationen ϕ und ϕ' in beiden Richtungen mit gleicher Häufigkeit statt, die Verteilung $W_c(\phi)$ bleibt also erhalten. Eine Möglichkeit, diese Bedingung zu erfüllen, bietet der Metropolisalgorithmus [41]. Dort ist die Akzeptanzwahrscheinlichkeit, also die Wahrscheinlichkeit, mit der die neu erwürfelte Konfiguration ϕ' als Nachfolge von ϕ angenommen wird, durch

$$P_M(\phi \rightarrow \phi') = \min \left(1, \frac{W_c(\phi')}{W_c(\phi)} \right) \quad (153)$$

gegeben.

Bei dieser Vorgehensweise stellt sich folgendes Problem:

Die Form der Akzeptanzwahrscheinlichkeit in (153) legt nahe, daß man zwar recht schnell zu einer in der Gleichgewichtsverteilung sehr wahrscheinlichen Konfiguration

ϕ gelangt. Wählt man dann aber im Phasenraum den Abstand $\delta\tau$ zu der als nächstes erzeugten Konfiguration ϕ' groß, damit sie mehr oder weniger unabhängig von ϕ ist, ergibt sich in der Regel ein sehr kleiner Faktor $W_c(\phi')/W_c(\phi)$, und die neue Konfiguration wird mit großer Wahrscheinlichkeit zurückgewiesen. Die Akzeptanzrate möglichst unabhängiger Konfigurationen ist also gering. Wird dagegen eine kleine Schrittweite $\delta\tau$ verwendet, ist zwar die Akzeptanz groß, aber aufeinanderfolgende Konfigurationen sind stark korreliert.

Hier hilft ein Trick weiter, der unmittelbar zum HMCA und HCLA führt: Eine künstliche Erweiterung des Phasenraumes um den zu ϕ kanonisch konjugierten Impuls π erlaubt die Definition einer Hamiltonfunktion:

$$H(\phi, \pi) \equiv \frac{1}{2}\pi^2 + S(\phi). \quad (154)$$

Die Erzeugung einer Konfiguration vollzieht sich dann in drei Schritten: Man wählt zunächst den Impuls aus einer Gaußverteilung, also

$$P_G(\pi) \propto e^{-\frac{1}{2}\pi^2}, \quad (155)$$

führt dann eine reversible Abbildung im Phasenraum durch, die ansonsten beliebig sein darf, d.h.

$$P_f [(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] = P_f [(\phi', -\pi') \rightarrow (\phi, -\pi)], \quad (156)$$

und lässt einen Metropolis Schritt folgen, der durch

$$P_M [(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] = \min(1, e^{-\delta H}) \quad (157)$$

mit $\delta H = H(\phi', \pi') - H(\phi, \pi)$ definiert ist.

Demzufolge ist die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen zwei Konfigurationen durch

$$P(\phi \rightarrow \phi') = \int d\pi d\pi' P_G(\pi) P_f [(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] P_M [(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] \quad (158)$$

gegeben. Es ist nun leicht einzusehen, daß die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (152) erfüllt ist, denn aufgrund der Identität

$$W_c(\phi) P_G(\pi) P_M [(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] = W_c(\phi') P_G(\pi') P_M [(\phi', \pi') \rightarrow (\phi, \pi)] \quad (159)$$

folgt zusammen mit der Invarianz von $H(\phi, \pi)$ und $P_G(\pi)$ unter Vorzeichenwechsel des Impulses sowie der Reversibilität der Abbildung (156) im Phasenraum die Beziehung:

$$\begin{aligned} W_c(\phi) P_G(\pi) P_M [(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] & P_f [(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] = \\ W_c(\phi') P_G(-\pi') P_M [(\phi', -\pi') \rightarrow (\phi, -\pi)] & P_f [(\phi', -\pi') \rightarrow (\phi, -\pi)]. \end{aligned} \quad (160)$$

Eine Integration über beide Impulse liefert daher die gewünschte „detailed balance“-Beziehung für $W_c(\phi)$ und $P(\phi \rightarrow \phi')$. Das soeben definierte Verfahren ist der HMCA. Neben der „detailed balance“-Beziehung ist auch die zum Erreichen der vorgegebenen Verteilung erforderliche Ergodizität gesichert, da der Impuls aus der Gaußverteilung beliebige Werte annehmen kann.

Der Vorteil gegenüber dem einfachen Metropolisalgorithmus besteht in der Möglichkeit, jetzt große Schritte im Phasenraum zu machen, ohne gleichzeitig die Akzeptanzrate zu sehr zu reduzieren:

Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit einer neuen Konfiguration ϕ' durch den Metropolisschritt ist nach (157) um so größer, je kleiner bei der durch $P_f[(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')]$ charakterisierten Abbildung die Verletzung der Energieerhaltung, also δH ist. Steht $P_f[(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')]$ z.B. für die klassischen Hamiltongleichungen (sie sind, wie gefordert, reversibel), so bleibt die Energie erhalten und δH verschwindet, d.h. jedes ϕ' wird akzeptiert. (Der dadurch definierte Hybridalgorithmus simuliert einen physikalischen Vorgang, bei dem ein in Ruhe befindliches System immer wieder mit einem gaußverteilten Zufallsimpuls angestoßen wird und sich dann für eine gewisse Zeit entlang seiner dadurch vorgegebenen klassischen Trajektorie bewegt.) Dieser wünschenswerte Zustand läßt sich allerdings nicht erreichen, da die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen i.a. nicht exakt lösbar sind.

Man begnügt sich daher mit einer näherungsweisen Lösung dieser Gleichungen durch die ebenfalls reversible „Leapfrog“-Integration [42], welche die Differentialgleichungen auf bestimmte Weise durch Differenzengleichungen approximiert. Die dabei definierte Schrittänge $\delta\tau$ legt die Größe der Energieverletzung δH fest. Im HMCA werden nach Wahl eines gaußverteilten Impulses in der Regel mehrere solcher Integrationen hintereinander ausgeführt, d.h. N Stücke der Länge $\delta\tau$ im Phasenraum aneinandergesetzt, so daß sich eine Trajektorie vorgegebener Länge $\tau_0 = N\delta\tau$ ergibt. Die Energieverletzung ist dann von der Ordnung $\delta H = O(\tau_0\delta\tau^2)$. Infolgedessen kann dieses Verfahren bei hinreichend kleiner Schrittänge $\delta\tau$ immer noch eine große Akzeptanzrate gewährleisten, obwohl ϕ' um τ_0 von ϕ entfernt ist. Nähere Untersuchungen zur Abhängigkeit der Akzeptanzrate im HMCA vom Gittervolumen, von der Schrittänge und von der mittleren Schrittzahl pro Trajektorie finden sich in [43] nebst dortigen Referenzen.

An dieser Stelle sei nochmals hervorgehoben, daß auch bei einer solchen approximativen Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen exakt das gewünschte Gleichgewicht reproduziert wird. Aufgrund des Metropolisschrittes ist keine Extrapolation $\delta\tau \rightarrow 0$ erforderlich.

Genau darin liegt der wesentliche Unterschied zum Langevinalgorithmus (LA). Dort führt man zwischen den Zufallsimpulsen nur eine „Leapfrog“-Integration durch, erhält also für δH den kleineren Wert $O(\delta\tau^3)$, verzichtet dann aber gänzlich auf den Metropolisschritt. Dies führt dazu, daß die letztlich erzeugte Verteilung von der vorgegebenen abweicht. Da eine Variation dieses Algorithmus in dem hier untersuchten Modell erstmals Verwendung fand, ist eine detailliertere Betrachtung angemessen:

Der erste „Leapfrog“-Schritt ergibt sich aus einer geeigneten Diskretisierung zweiter Ordnung der Hamiltonschen Bewegungsgleichung. Dies bedeutet für die Feldkonfiguration

$$\phi_x^{n+1} = \phi_x^n + \delta\tau \pi_x^n - \frac{\delta\tau^2}{2} \frac{\partial S(\phi^n)}{\partial \phi_x}, \quad (161)$$

wobei $\delta\tau = \tau_{n+1} - \tau_n$ und $\phi^n = \phi(\tau_0 + n\delta\tau)$ ist; d.h. ϕ_x^{n+1} ist die Konfiguration, welche sich nach numerischer Lösung von (161) als Folgekonfiguration von ϕ_x^n in der Markovkette ergibt. π^n ist der nach einer Gaußverteilung erwürfelte Zufallsimpuls. Die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung $W(\phi)$ folgt der Fokker-Planck-Gleichung. Aus ihr läßt sich die Form der Gleichgewichtsverteilung $W_c(\phi) = \frac{1}{Z} e^{-S_c(\phi)}$ ableiten [44]. Es ergibt sich

$$S_c(\phi) = S(\phi) + \delta\tau^2 S_1(\phi) + O(\delta\tau^4) \quad (162)$$

mit

$$S_1(\phi) = \frac{1}{4} \sum_x \left(\frac{\partial^2 S(\phi)}{\partial \phi_x \partial \phi_x} - \frac{1}{2} \frac{\partial S(\phi)}{\partial \phi_x} \frac{\partial S(\phi)}{\partial \phi_x} \right). \quad (163)$$

Die Abweichung von der gewünschten, durch $S(\phi)$ charakterisierten Verteilung verschwindet also erst in der Extrapolation $\delta\tau \rightarrow 0$.

Dieser LA erster Ordnung läßt sich durch eine genauere Approximation der kontinuierlichen Bewegungsgleichungen, z.B. mit Hilfe eines geeigneten Runge-Kutta-Verfahrens, noch verbessern. Anstelle eines in $\delta\tau$ quadratischen Fehlers der simulierten Wirkung kommt man auf diesem Wege zu höheren Ordnungen [44]. So ist die Abweichung von der echten Wirkung unter Verwendung von

$$\phi_x^{n+1} = \phi_x^n + \delta\tau \pi_x^n - \frac{\delta\tau^2}{4} \left(\frac{\partial S(\phi^n)}{\partial \phi_x} + \frac{\partial S(\bar{\phi}^{n+1})}{\partial \phi_x} \right) \quad (164)$$

mit einer vorher in niedrigerer Ordnung nach (161) berechneten, vorläufigen Konfiguration $\bar{\phi}^{n+1}$ nur noch proportional zu $\delta\tau^4$. Allerdings vergrößert sich dadurch auch der Aufwand zur Erzeugung einer neuen Konfiguration im wesentlichen um den Faktor zwei, so daß es je nach benötigter Genauigkeit ratsam sein kann, in der niedrigsten Ordnung zu verbleiben (s.u.).

Ein Nachteil dieses reinen LA beliebiger Ordnung ist die Korrelation zwischen den aufeinanderfolgenden Feldkonfigurationen. Zwei Nachbarkonfigurationen haben im Phasenraum den Abstand $\propto \delta\tau$. Dadurch, daß nach jedem Update ein neuer gaußverteilter Zufallsimpuls gewählt wird, vergrößert sich der Abstand zu den folgenden Konfigurationen nicht so sehr wie in der klassischen Dynamik (KD), die den neuen Impuls nicht erwürfelt, sondern mit der zweiten Hamiltongleichung berechnet. Die sukzessiven Änderungen der Feldkonfiguration sind bei Verwendung dieser Gleichung folglich stark korreliert und führen sehr schnell zu einer weiter entfernten Konfiguration. So ist für kurze Zeiten die nach N Schritten unter der KD zurückgelegte Entfernung ungefähr $\propto N$, während sie sich im LA wie \sqrt{N} verhält. Letzteres folgt aus der Diffusionsgleichung, deren Lösung für den kontinuierlichen Fall den „random walk“ durch einen d -dimensionalen Raum beschreibt.

Der Vorteil bei Verwendung des LA liegt in der durch die Wahl von Zufallsimpulsen garantierten Ergodizität, welche die KD nicht sichergestellen kann. So ist es vorstellbar, daß sich das System dort in irgendwelchen periodischen Zyklen verfängt oder aufgrund verborgener Erhaltungssätze nicht in der Lage ist, die Energieschale des mikrokanonischen Ensembles gleichförmig zu bedecken.

Die Stärken beider Verfahren, Ergodizität auf der einen und schnelles Erreichen weit entfernter, unkorrelierter Konfigurationen auf der anderen Seite, vereinigen sich im Hybrid-Classical-Langevin-Algorithmus (HCLA). Dort wird nach einem Update der neue Impuls mit einer Wahrscheinlichkeit $1 - \beta$ aus der Gaußverteilung erwürfelt und mit der Wahrscheinlichkeit β klassisch berechnet. Erfolgt diese Berechnung mit

$$\pi_x^{n+1} = \pi_x^n - \frac{\delta\tau}{2} \left(\frac{\partial S(\phi^n)}{\partial \phi_x} + \frac{\partial S(\phi^{n+1})}{\partial \phi_x} \right) , \quad (165)$$

so ist auch in der klassischen Dynamik der systematische Fehler in der Wirkung von der Ordnung $\delta\tau^2$. Dies ergibt sich bei Betrachtung des aus (165,161) resultierenden Ausdrucks

$$\phi_x^{n+1} - 2\phi_x^n + \phi_x^{n-1} = -\delta\tau^2 \frac{\partial S(\phi^n)}{\partial \phi_x} . \quad (166)$$

Fragt man nämlich nach der Wirkung, welche dadurch in der KD wirklich simuliert wird, so ist damit die effektive Wirkung \bar{S} gemeint, die im kontinuierlichen Grenzfall in Zeitabständen $\delta\tau$ gerade die Folge (ϕ^n) hervorbringt. Es wird demzufolge nach

derjenigen Wirkung gesucht, für die $\hat{\phi}(\tau_0 + n\delta\tau)$ als exakte Lösung der Bewegungsgleichung

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{\phi}_x(t) = -\frac{\partial \bar{S}(\hat{\phi}(t))}{\partial \hat{\phi}_x} \quad (167)$$

mit ϕ^n identisch ist. Eine solche Untersuchung führt schließlich auf $\bar{S}(\phi) = S(\phi) + O(\delta\tau^2)$, so daß sich hier wie in (162) die simulierte Wirkung \bar{S} von der vorgegebenen S ebenfalls in der Ordnung $\delta\tau^2$ unterscheidet. Detailliertere Betrachtungen zu diesem Sachverhalt finden sich in [46].

Auch in der KD besteht die Möglichkeit, die Ordnung des Fehlers in $\delta\tau$ durch Verwendung besserer Approximationen an die kontinuierlichen Hamiltongleichungen zu erhöhen. So ist er bei Approximation der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen mit der Runge-Kutta-Methode vierter Ordnung proportional zu $\delta\tau^4$. Darauf soll allerdings nicht genauer eingegangen werden, da ein derartiges Verfahren aufgrund des vierfach erhöhten Aufwandes für ein Update in den späteren numerischen Rechnungen keine Verwendung finden wird.

Eine genauere Begründung für die Verwerfung höherer Ordnungen liefert ein Studium der Autokorrelationszeit. Sie ist umgekehrt proportional zu der pro Zeiteinheit im Phasenraum zurückgelegten Entfernung. Da letztere in der KD ungefähr proportional zur Zahl der Messungen pro Zeit n , im LA aber nur zu \sqrt{n} ist, resultiert für die $\delta\tau^2$ -Algorithmen bei einer Schrittweite von $\delta\tau = s$ eine Entfernung von ns in der KD und von \sqrt{ns} im LA. Will man den Fehler hinsichtlich der Ordnung von s konstant halten, kann man bei Nutzung der $\delta\tau^4$ -Algorithmen die Schrittweite auf $\delta\tau = \sqrt{s}$ erhöhen. Aufgrund des gestiegenen Rechenaufwandes ergeben sich nun die Entfernungen $\frac{n}{4}\sqrt{s}$ in der KD und $\frac{\sqrt{n}}{2}\sqrt{s}$ im LA. Ein größerer Vorteil durch die Algorithmen höherer Ordnung ist also nur dann zu erwarten, wenn

$$\begin{aligned} ns &<< \frac{n}{4}\sqrt{s} \quad \Rightarrow \quad s << 0.0625 \quad \text{für KD ,} \\ \sqrt{ns} &<< \frac{\sqrt{n}}{2}\sqrt{s} \quad \Rightarrow \quad s << 0.25 \quad \text{für LA .} \end{aligned} \quad (168)$$

Es hat sich herausgestellt (s.u.), daß für unsere Zwecke eine Schrittweite von $s \geq 0.04$ geeignet, die Verwendung des genaueren $\delta\tau^4$ -Algorithmus der KD also nicht notwendig ist; zumal mit ihr zusätzlich ein größerer Speicherbedarf einhergeht, der auf der CRAY Y-MP, auf der die Programme entwickelt und zum Teil angewendet wurden, zu einem Übergang in eine ungünstigere Jobklasse führt. Dies aber macht vermutlich den bei $s \geq 0.04$ noch verbleibenden kleinen Rechenzeitvorteil hinsichtlich der Echtzeit gänzlich zunichte.

Auch von der Möglichkeit, im Rahmen der KD in niedrigster Ordnung zu verbleiben und im LA mit dem $\delta\tau^4$ -Algorithmus bei entsprechend größerer Schrittweite \sqrt{s} zu arbeiten – nach (168) ist dort ein weit höherer Rechenzeitgewinn zu erwarten –, wurde kein Gebrauch gemacht. Grund ist der hauptsächliche Gebrauch der KD, die nur gelegentlich durch einen LA-Update unterbrochen wurde.

Aber nicht nur Algorithmen höherer Ordnung mit entsprechend vergrößerter Schrittweite $\delta\tau$, d.h. mit konstantem systematischem Fehler, sind in unserem Fall zu verwerfen, sondern auch ihr Gebrauch bei fester Schrittweite zur Reduktion des systematischen Fehlers. Der Grund liegt in der verfügbaren Rechenzeit. Wenn sie nämlich die Größe der Statistik derart einschränkt, daß der systematische Fehler $\delta\tau^2$ im statistischen Rauschen untergeht, wäre die Verwendung eines besseren und damit zeitaufwendigeren HCLA nicht zu vertreten. Eine Verringerung des systematischen Fehlers durch bessere Approximationen der Bewegungsgleichungen würde nur auf Kosten eines größeren statistischen Fehlers gehen. Ein derartiges Vorgehen macht

aber erst Sinn, wenn sich der systematische Fehler deutlich von den statistischen Schwankungen abhebt.

Die knappe Rechenzeit ist auch die Ursache für das Fehlen einer Extrapolation der Schrittweite nach Null, die ebenfalls die Reduktion des systematischen Fehlers zum Ziel hat. Denn für feste CPU-Zeit wächst der statistische Fehler gemäß $1/\sqrt{\delta\tau}$. Um also für die Extrapolation wenigstens noch einen zweiten Punkt, z.B. bei halber ursprünglicher Schrittweite, mit gleichem statistischen Fehler studieren zu können, ist nochmals das Doppelte der ursprünglichen CPU-Zeit erforderlich.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß der HMCA eine gute Möglichkeit zur Simulation einer vorgegebenen Verteilung bietet. Ist man aber, wie im vorliegenden Fall, nicht in der Lage, den Hamiltonian des Systems zu berechnen (s.u.) und muß daher auf den Metropolisschritt verzichten, zeigt sich im HCLA eine Alternative, die allerdings die gewünschte Verteilung nicht genau trifft.

4.3 Monte Carlo Algorithmen mit Fermionen

Alle bisherigen Ausführungen bezogen sich auf rein bosonische Modelle. Bevor daher auf numerische Resultate eingegangen werden kann, muß die Einbeziehung der Fermionen erläutert werden. Sie wird auch den Grund für die Verwendung des HCLA anstelle des HMCA liefern.

Wie bereits erwähnt, besteht die Schwierigkeit einer statistischen Behandlung von Fermionen in dem antikommutierenden Charakter der sie darstellenden Grassmannvariablen. Aus diesem Grunde berechnet man zunächst das Grassmannintegral exakt und erhält so die Fermiondeterminante $\det Q(\phi)$. In der Handhabung des auf diese Weise zusammengefaßten, fermionischen Teils unterscheiden sich die beiden oben beschriebenen Algorithmen.

Bei dem bisher verwendeten HMCA ist es üblich, die Determinante in das Wahrscheinlichkeitsmaß einzubeziehen, indem man die Relation

$$\int d\psi d\psi^+ e^{-\psi^+ A \psi} = \det A \propto \int d\phi d\phi^* e^{-\phi^* A^{-1} \phi} \quad (169)$$

ausnutzt. ψ, ψ^+ sind die ursprünglichen Grassmannvariablen, ϕ, ϕ^* dagegen sind kommutierende Variablen, die sogenannten Pseudofermionfelder. Bedingung für die Gültigkeit der zweiten Relation in (169) ist allerdings, daß die Realteile der Eigenwerte von A positiv sind. Derartiges läßt sich aber für eine fermionische Wirkung nicht allgemein fordern. Eine Möglichkeit, diesen Weg dennoch verfolgen zu können, besteht in einer auf bestimmte Art und Weise vorzunehmenden Verdopplung der Fermionzahl.

Hierbei handelt es sich nicht um das Verdopplungsproblem, welches auf die Beschreibung von Fermionen auf dem Gitter zurückzuführen ist und mit der Anomaliefreiheit bei naiver Übertragung der klassischen Wirkung auf das Gitter zusammenhängt. Vielmehr ist es ein rein technisches Problem, das auftritt, wenn man Pseudofermionen nutzen will, um den Einfluß der Fermionen auf die Theorie zu berücksichtigen.

Führt man also neben dem schon existierenden Fermion-Spiegelfermion-Paar $\Psi^{(1)}$ ein weiteres, sich dazu gespiegelt transformierendes Paar $\Psi^{(2)}$ ein, erhält man die Wirkung

$$S = S_B + \sum_{f=1,2} \sum_{x,y} \bar{\Psi}_y^{(f)} Q(\phi)^{(f)}_{yx} \Psi_x^{(f)} \quad (170)$$

und hat in diesem vergrößerten Raum nunmehr den Ausdruck

$$\det \begin{pmatrix} Q & 0 \\ 0 & Q^+ \end{pmatrix} = \det Q^+ Q \equiv \det A \quad (171)$$

zu betrachten. A ist folglich hermitesch und positiv definit. Die jetzt positive Determinante kann infolgedessen zusammen mit dem bosonischen Exponentialfaktor als Wahrscheinlichkeitsmaß interpretiert werden. Erwähnt sei hier, daß die Verdopplung der Fermionen im $U(1)$ -Modell zu einer Erweiterung der Symmetrie auf das Produkt $U(1)_L \otimes U(1)_R \otimes U(1)_{1-2}$ führt, dessen letzter Faktor für die Erhaltung der Teilchenzahldifferenz zwischen den Sorten Eins und Zwei sorgt. Da über $U(1)_L \otimes U(1)_R$ auch die Gesamtteilchenzahl erhalten bleibt, impliziert dies die Erhaltung beider Teilchensorten für sich.

Nun ist klar, daß auf soeben beschriebene Weise, selbst wenn mit Hilfe der Spiegelfermionen die Entkopplung aller „Anomalie-Doppler“ gelingt und sich aufgrund der unterschiedlichen Yukawakopplungen auch das verbleibende Spiegelfermion zusammen mit seinem „technischen Doppler“ aus dem Spektrum entfernen läßt, neben dem ursprünglichen Fermion immer noch dessen ungewollter „technischer Doppler“ übrig bleibt. Man ist daher nicht in der Lage, durch derartiges Vorgehen eine ungerade Anzahl von Fermionen auf dem Gitter zu beschreiben. Insbesondere wird es so nicht möglich sein, z.B. die Wirkungsweise eines einzelnen schweren Fermions in seinen drei Farben auf Charakter und eventuelle Kopplungsschranken des Higgs-Yukawa-Modells zu erfassen.

Für die Behandlung einer ungeraden Zahl von Fermionen ist die Fermiondeterminante demzufolge auf eine andere Art und Weise berücksichtigen. An der Fermiondeterminante selbst, d.h. an der analytischen Ausführung des Grassmannintegrals, führt, wegen der oben angedeuteten Schwierigkeiten hinsichtlich der Statistik, zunächst kein Weg vorbei.

Soll diese technisch motivierte Verdopplung vermieden werden, faßt man die Determinante als Teil einer effektiven Wirkung auf, d.h.

$$S_{\text{eff}}(\phi) = S_B(\phi) - N_f [\ln |\det Q(\phi)| + i\varphi_Q] , \quad (172)$$

wenn φ_Q den Phasenwinkel der Determinante und N_f die Zahl der betrachteten Flavours bezeichnet. Es ist offensichtlich, daß eine stark fluktuierende Phase bei der statistischen Behandlung ähnliche Probleme aufwirft wie der antikommutierende Charakter der Grassmannvariablen. Denn es kann zu Differenzen großer Zahlen und damit zu sehr großen Fehlern kommen, welche die hier angestrebte Verfahrensweise unmöglich machen. Ebenjene Phase ist deshalb im vorhergehenden Kapitel eingehend untersucht worden. Wie das Ergebnis zeigte, ist sie in den hier betrachteten Fällen nicht zu großer Yukawakopplungen vernachlässigbar klein und verschwindet manchmal ($|G_\psi| = |G_\chi|$) sogar identisch. Im folgenden wird daher

$$S_{\text{eff}}(\phi) \approx S_B(\phi) - N_f \ln |\det Q(\phi)| = S_B(\phi) - \frac{N_f}{2} \ln [\det (Q^+(\phi)Q(\phi))] \quad (173)$$

zu betrachten sein. Eine solche nur noch von einem Skalarfeld abhängige Wirkung wird nun durch den für den bosonischen Fall dargelegten HCLA simuliert. Im Prinzip wäre das auch mit Hilfe des HMCA für rein bosonische Wirkungen möglich, allerdings wäre dann für den Metropolisschritt nach jedem Update der Hamiltonian und damit die Fermiondeterminante zu bestimmen. Die Verwendung eines derartigen Verfahrens ist aber aus Rechenzeitgründen ausgeschlossen.

Wendet man sich aufgrund dessen wieder dem HCLA zu, so tritt die Wirkung dort

nur als Ableitung auf. Für ein komplexes Skalarfeld, wie es hier vorliegt, gilt die Beziehung:

$$\begin{aligned}\phi_x^{n+1} &= \phi_x^n + \delta\tau\pi_x^n - \frac{\delta\tau^2}{2} \left(\frac{\partial S_{\text{eff}}(\phi_x^n)}{\partial \text{Re}(\phi_x)} + i \frac{\partial S_{\text{eff}}(\phi_x^n)}{\partial \text{Im}(\phi_x)} \right) \\ &= \phi_x^n + \delta\tau\pi_x^n - \delta\tau^2 \frac{\partial S_{\text{eff}}(\phi_x^n)}{\partial \phi_x^+}\end{aligned}\quad (174)$$

und für den dazu kanonisch konjugierten Impuls:

$$\pi_x^{n+1} = \pi_x^n - \delta\tau \left(\frac{\partial S_{\text{eff}}(\phi_x^{n+1})}{\partial \phi_x^+} + \frac{\partial S_{\text{eff}}(\phi_x^n)}{\partial \phi_x^+} \right). \quad (175)$$

Das verbleibende Problem besteht nun in der Berechnung von $\frac{\partial S_{\text{eff}}(\phi)}{\partial \phi_x^+}$. Für den skalaren Anteil der Wirkung geschieht dies noch analytisch vermöge der Beziehung

$$\frac{\partial S_B(\phi)}{\partial \phi_x^+} = \phi_x [1 + 2\lambda(\phi_x \phi_x^+ - 1)] - \kappa \sum_\mu \phi_{x+\mu}, \quad (176)$$

und eine direkte Programmierung ist möglich. Zu bestimmen ist somit nur noch der Ausdruck $\frac{N_f}{2} \frac{\partial}{\partial \phi_x^+} \ln(\det(Q^+ Q))$. Das geschieht unter Ausnutzung des nachstehenden Zusammenhangs:

$$\begin{aligned}\frac{N_f}{2} \frac{\partial}{\partial \phi_x^+} \ln(\det(Q^+ Q)) &= \frac{N_f}{2} \frac{\partial}{\partial \phi_x^+} \text{Tr} \ln(Q^+ Q) = \frac{N_f}{2} \text{Tr}[(Q^+ Q)^{-1} \frac{\partial}{\partial \phi_x^+} (Q^+ Q)] \\ &= \frac{N_f}{2} \sum_{uv} (Q^+ Q)^{-1}_{uv} \left(\frac{\partial(Q^+ Q)}{\partial \phi_x^+} \right)_{vu}.\end{aligned}\quad (177)$$

Da eine explizite Matrixinversion, wie sie hier gefordert wäre, zu viel Rechenzeit beansprucht, wird mit der Relation

$$(Q^+ Q)^{-1}_{uv} = \frac{\int d\chi d\chi^+ e^{-\chi^+ Q^+ Q \chi}}{\int d\chi d\chi^+ e^{-\chi^+ Q^+ Q \chi}} = \langle \chi_u \chi_v^+ \rangle \quad (178)$$

gearbeitet, d.h. die Matrix $(Q^+ Q)^{-1}$ wird mit sogenanntem „Baby“-Monte Carlo-Verfahren bestimmt. Bei Verwendung des HCLA ist demnach eine weitere Approximation in der Berücksichtigung der Fermionen notwendig. Zu diesem Zweck erzeugt man sich aus zwei reellen Zahlen einer gleichförmigen Verteilung eine Gaußverteilung $e^{-r^+ r}$ für komplexes r [44] und erhält so $\chi = Q^{-1}r$ in der gewünschten Verteilung aus (178). Somit lässt sich $(Q^+ Q)^{-1}$ durch Messung mit Hilfe von χ unter Verwendung der Gleichung

$$(Q^+ Q)^{-1}_{uv} = \lim_{N_B \rightarrow \infty} \frac{1}{N_B} \sum_{i=1}^{N_B} \chi_u^i \chi_v^{+i} \quad (179)$$

bestimmen, in der χ^i den Vektor der i -ten Messung darstellt. Folglich verbleibt man mit dem programmierbaren Ausdruck:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \phi_x^+} \ln(\det(Q^+ Q)) &\approx \frac{1}{N_B} \sum_{i=1}^{N_B} \sum_{uv} \chi_u^i \chi_v^{+i} \left(\frac{\partial(Q^+ Q)}{\partial \phi_x^+} \right)_{uv} \\ &= \frac{1}{N_B} \sum_{i=1}^{N_B} \chi^i \cdot \frac{\partial(Q^+ Q)}{\partial \phi_x^+} \cdot \chi^{+i}.\end{aligned}\quad (180)$$

Bei vorhandenem χ^i berechnet sich dann jeder einzelne Summand der i -Summe durch passenden Aufruf der bereits im Rahmen früherer HMC-Simulationen benötigten Subroutine DERIV.

4.4 Ein verallgemeinerter HMC-Algorithmus

Für den Fall, daß die Eigenwerte der Fermionmatrix immer einen positiven Realteil aufweisen, wurde ein verallgemeinerter HMCA vorgeschlagen [45], der zum einen in der Lage ist, die Determinante der einfachen Fermionmatrix zu berücksichtigen, und zum anderen die Vorteile des einfachen HMC-Verfahrens besitzt, d.h. insbesondere keine Extrapolation zu verschwindender Schrittweite erfordert. In groben Zügen wurde in diesem Zusammenhang an folgende Vorgehensweise gedacht:

Basierend auf der für positive Realteile gültigen Beziehung

$$\det Q \propto \int d\eta d\eta^* e^{-\eta^* Q^{-1} \eta} \quad (181)$$

wird der Faktor $\exp(-i\text{Im}(\eta^* Q^{-1} \eta))$ der Observablen zugeschlagen, während der Faktor $\exp(-\text{Re}(\eta^* Q^{-1} \eta))$ in das Maß Eingang findet. Die Phase wird also hier nicht wie im HCLA vernachlässigt, sondern kann für jede Messung ohne zu großen Aufwand neu berechnet werden. Da der Betrag $\exp(-\text{Re}(\eta^* Q^{-1} \eta))$, wie $e^{-S(\phi)}$ selbst, unter Umständen über mehrere Größenordnungen variiert und somit seine Berücksichtigung sehr ineffizient wäre, würde sie erst in der Observablen erfolgen, wird er durch die Erzeugung des Skalarfeldes gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$e^{-S(\phi) - \text{Re}(\eta^* Q^{-1}(\phi) \eta)} \quad (182)$$

direkt in das Integralmaß einbezogen. Dies läßt sich über die Lösung der folgenden zwei Sätze von Gleichungen mit Hilfe der „Leapfrog“-Integration erreichen:

$$\dot{\phi} = \pi, \quad \dot{\pi} = -2 \frac{\partial H}{\partial \phi^*}, \quad \dot{\eta} = \xi, \quad \dot{\xi} = -2 \frac{\partial H}{\partial \eta^*}. \quad (183)$$

Dabei gilt für den Hamiltonian die Relation:

$$H(\phi, \pi, \eta, \xi) = \frac{1}{2}\pi^2 + \frac{1}{2}\xi^2 + S(\phi) + \text{Re}(\eta^* Q^{-1}(\phi) \eta). \quad (184)$$

Er ist jetzt, anders als beim HCLA, schnell bestimmbar und ein Metropolistest daher möglich. Das Erreichen des gewünschten Gleichgewichts (182) folgt wie beim einfachen HMCA aus dem Beweis der entsprechenden „detailed balance“-Beziehung. Dieser verläuft analog zum oben Gezeigten.

Um festzustellen, ob alle Eigenwerte der Fermionmatrix tatsächlich einen positiven Realteil besitzen, der Vorschlag also überhaupt durchführbar ist, betrachte man ihre Spur:

$$\text{tr}(Q) = 4(G_\psi + G_\chi) \sum_x \text{Re}(\phi_x). \quad (185)$$

Sie ist unabhängig vom Wert des Skalarfeldes immer reell. Nimmt sie auch für $G_\psi + G_\chi > 0$ negative Werte an, so muß es Eigenwerte mit negativem Realteil geben, denn die Spur ist invariant unter Ähnlichkeitstransformationen, also insbesondere unter Triagonalisierung der Fermionmatrix.

Messungen der Spur für equilibrierte Skalarfelder führen auf positive und negative Resultate, zeigen also, daß Eigenwerte mit negativem Realteil existieren können. Der verallgemeinerte HMCA ist demnach hier nicht anwendbar, womit sich auch die Diskussion evtl. Fluktuationen des Phasenfaktors $\exp(-i\text{Im}(\eta^* Q^{-1} \eta))$ erübriggt.

4.5 Numerische Resultate

Ehe man physikalisch interessanteren Fragestellungen nachgehen kann, die sich unter Verwendung des HMCA nicht beantworten lassen, d.h. insbesondere Fragen in Zusammenhang mit einer ungeraden Zahl von Fermionen, muß zunächst die Arbeitsweise des HCLA überprüft werden. Dies bezieht sich zum einen auf die Korrektheit der Programmierung, die sich durch Vergleich mit HMC Resultaten überprüfen läßt, zum anderen darauf, geeignete Werte für die frei wählbaren algorithmischen Parameter ($\beta, N_B, \delta\tau$) zu finden.

Im Anschluß daran wird exemplarisch die Phasenstruktur des Higgs-Yukawa-Modells mit nur einem Fermion studiert. Schließlich wird untersucht, ob und mit welchem Aufwand die Berechnung von Massenschranken, hier insbesondere der Trivialitätsgrenze, in diesem Modell möglich ist.

4.5.1 Vergleich des HCLA mit dem HMCA für verschiedene algorithmische Parameter

Wie bereits erwähnt sind in der klassischen Dynamik die aufeinanderfolgenden Änderungen der Feldkonfiguration stark korreliert. Die Entfernung, die im Phasenraum zurückgelegt wird, entspricht daher ungefähr der Zahl N der Updatings und ist damit weit größer als bei Verwendung des reinen Langevinalgorithmus, bei dem sie wegen der zufälligen Wahl des Impulses nur proportional zu \sqrt{N} ist. Durch einen gelegentlichen Zufallsimpuls sichert man sich allerdings die im rein klassischen Fall nicht unbedingt vorhandene Ergodizität. Als erstes sollen daher die Auswirkungen des durch β charakterisierten Verhältnisses zwischen klassischer Dynamik und Langevinalgorithmus studiert werden.

Zu diesem Zweck wurde der HCLA in einem Punkt der symmetrischen Phase ($\lambda = 1.0, G_\psi = 0.1, G_\chi = 0.0, \kappa = 0.15, K = 0.1$), im folgenden mit A bezeichnet, auf einem $4^3 \cdot 8$ -Gitter im U(1)-Modell für verschiedene Werte von β angewendet. Um einen Vergleich mit dem HMCA durchführen zu können, war der Fall zweier Fermion-Spiegelfermion-Paare ($N_f = 2$) zu simulieren. Einen Eindruck von der damit verknüpften unterschiedlichen Schnelligkeit der Equilibrierung verschaffen die folgenden Abbildungen. Dort ist die Magnetisierung des Higgsfeldes $\langle |\phi| \rangle$ gegen die Zahl der Messungen aufgetragen. Die zuvor mit dem HMCA gemessene Magnetisierung [28] beträgt im Gleichgewicht 0.098(1) und wird mittels der durchgezogenen Linie angedeutet. Die gestrichelte glatte Kurve zeigt jeweils die über die Vergangenheit gemittelte Magnetisierung, während die gezackte Kurve die der einzelnen Messung repräsentiert. In allen Fällen wurde dabei mit einer Einheitsmagnetisierung ($|\phi| = 1$) gestartet.

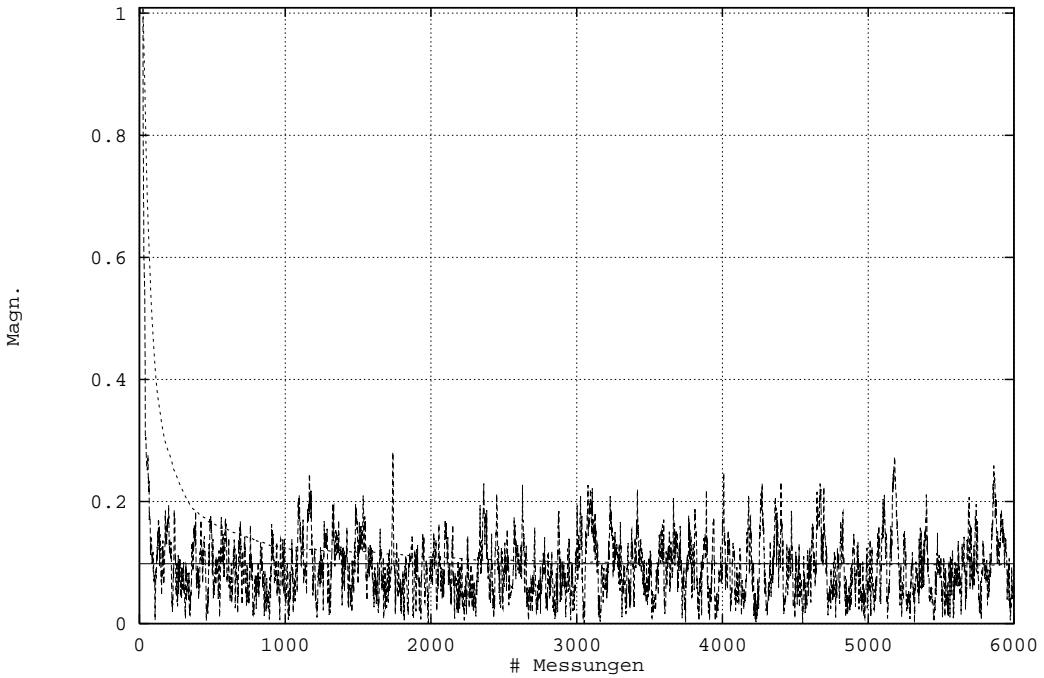


Abbildung 16: Magnetisierung im U(1)-Modell auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter für $\lambda = 1$, $G_\psi = 0.1$, $G_\chi = 0.0$, $\kappa = 0.15$, $K = 0.1$ und zwei Fermion-Spiegelfermion-Paare. Die durchgezogene Linie bei $M = <|\phi|> = 0.098(1)$ symbolisiert den Meßwert des HMCA aus [28], die glatte, gestrichelte Kurve zeigt die über die Vergangenheit gemittelte Magnetisierung und die gezackte Kurve die Magnetisierung für jede Einzelmessung. Zur Berechnung wurde hier der HMCA mit einer Schrittweite von $\delta\tau = 0.08$ und einer mittleren Trajektorienlänge von sechs „Leapfrog“-Schritten gewählt.

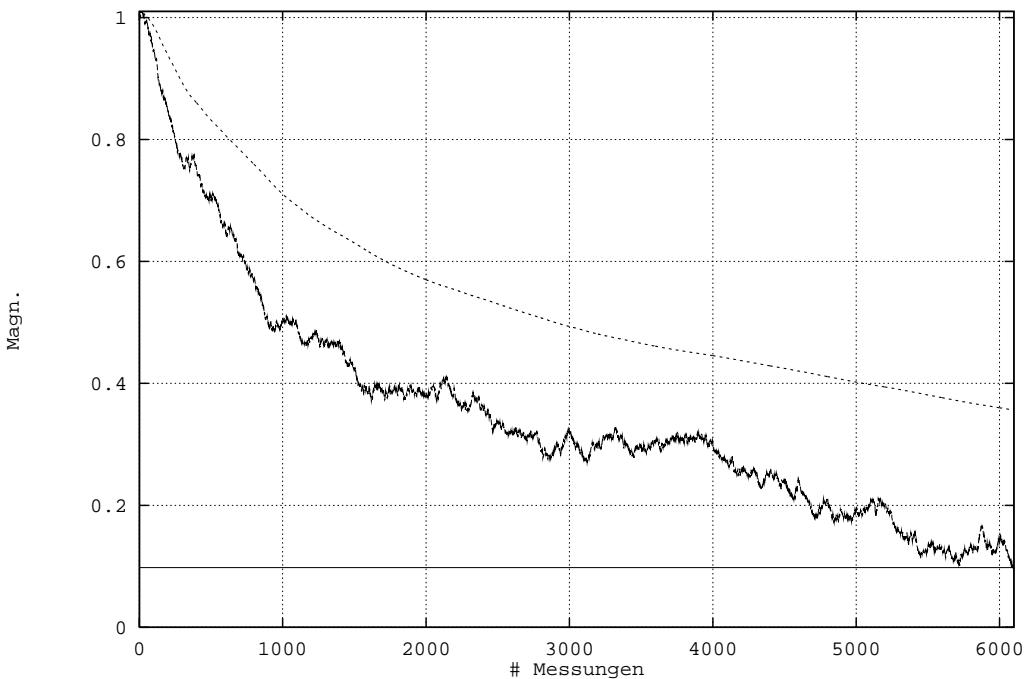


Abbildung 17: Hier sind dieselben Größen wie in Abbildung 16 dargestellt, allerdings wurde zur Berechnung der HCLA mit $\beta = 0.0$, d.h. der reine Langevinalgorithmus verwendet. Die Schrittweite ist $\delta\tau = 0.05$, die Anzahl der „Baby“-Monte Carlo-Messungen ist $N_B = 20$. Gestartet wurde mit einer Einheitskonfiguration, d.h. $\phi_x = 1.0 \forall x$.

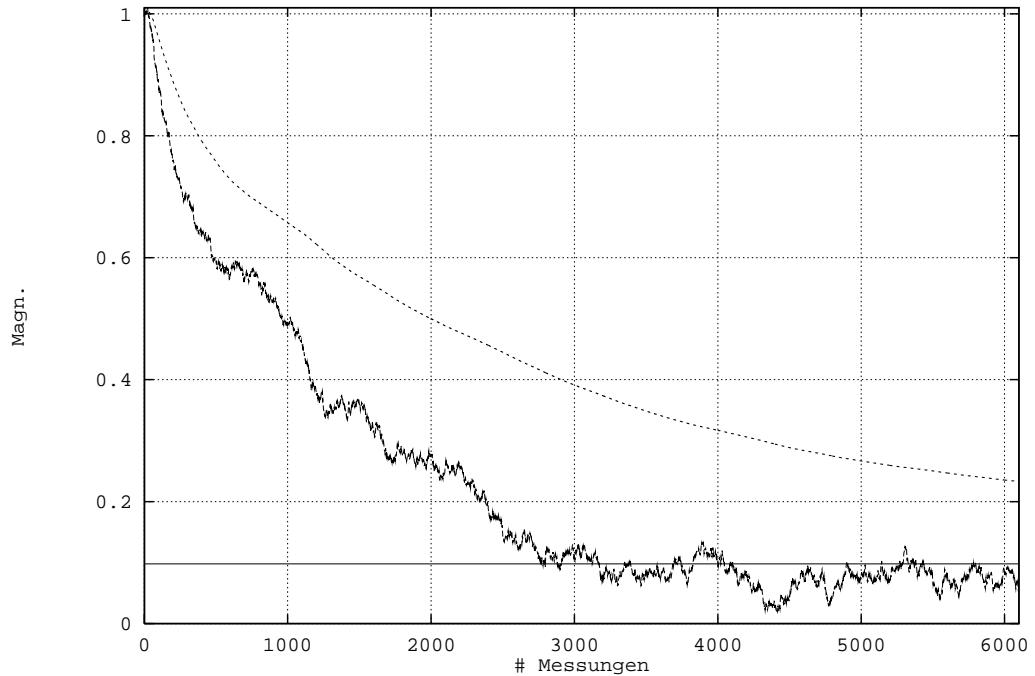


Abbildung 18: Diese Abbildung zeigt die Magnetisierung bei Verwendung des HCLA in $\beta = 0.2$. Alle weiteren Angaben entsprechen denen in Abbildung 17.

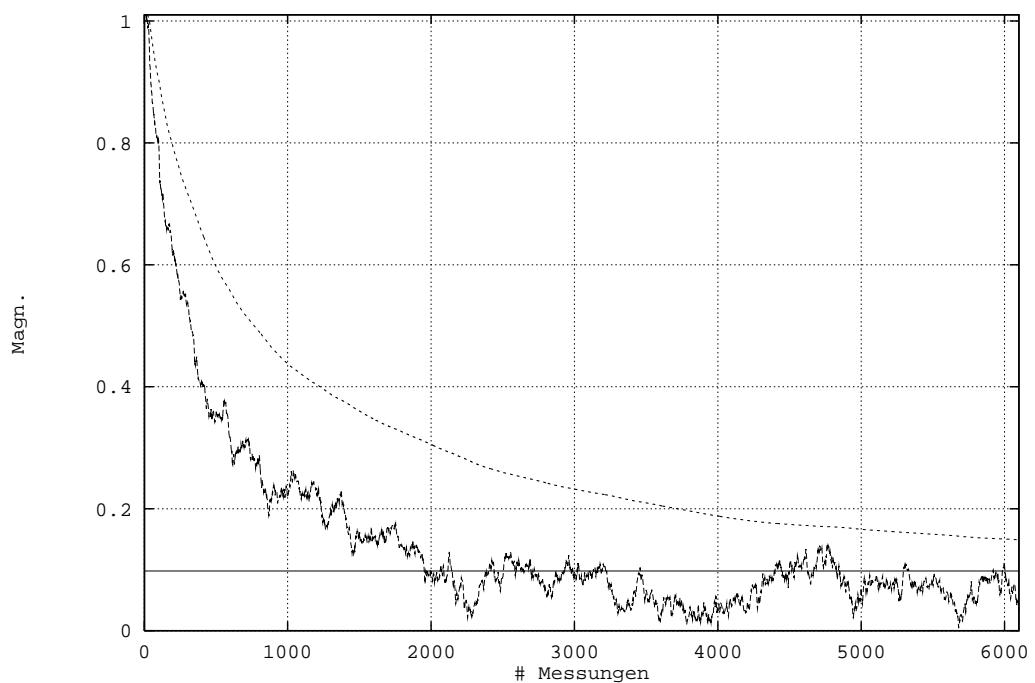


Abbildung 19: Die Magnetisierung ergibt sich in diesem Fall aus dem HCLA bei $\beta = 0.5$. Alles Weitere entnimmt man Abbildung 17.

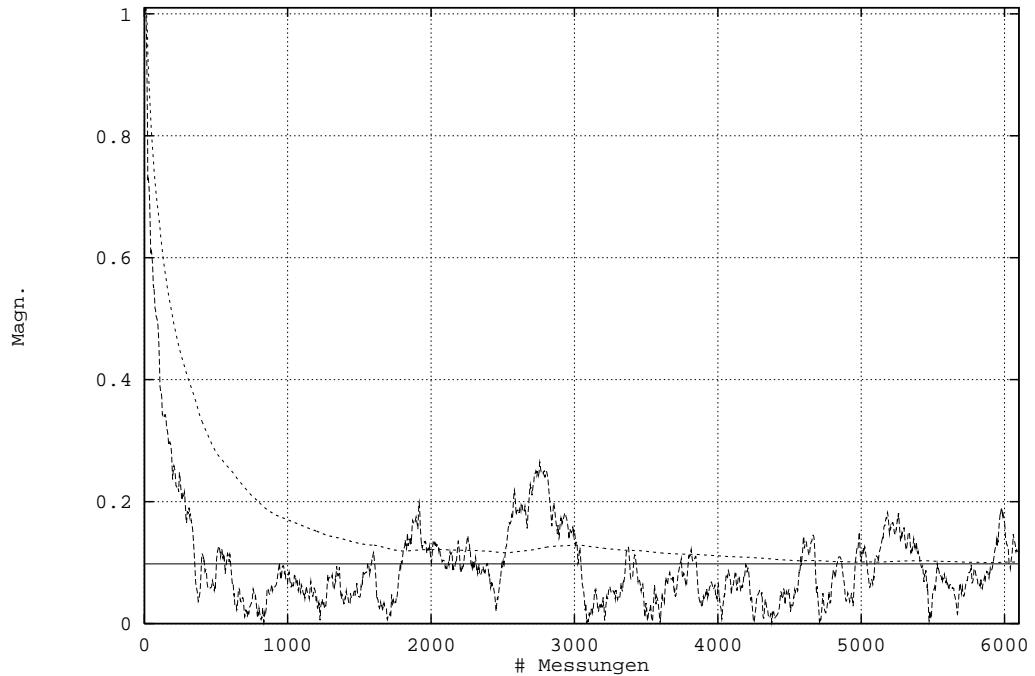


Abbildung 20: In dieser Abbildung wurde die Magnetisierung mit dem HCLA bei $\beta = 0.8$ berechnet. Einzelheiten lassen sich den Erläuterungen zu Abbildung 17 entnehmen.

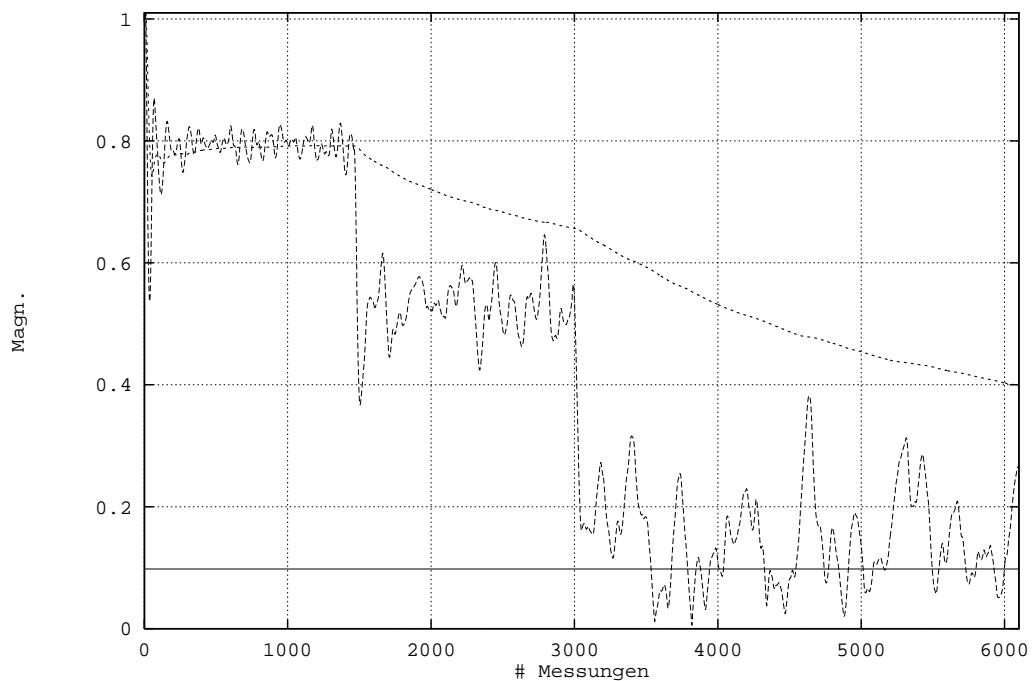


Abbildung 21: Hier wurde das System der klassischen Dynamik unterworfen, nach jeweils ca. 1500 Messungen allerdings ein Zufallsimpuls eingestreut. Die weiteren Angaben entsprechen denen aus Abbildung 17.

Ein Vergleich der Abbildungen macht folgendes deutlich:

1. Die beiden Extrema, der reine Langevinalgorithmus und die (fast) reine klassische Dynamik (Abbildung 17 und 21), sind hinsichtlich der Equilibrierungszeit den Mischfällen unterlegen. Der reine LA kommt aufgrund des jedesmal neu zufällig gewählten Impulses im Phasenraum nur langsam voran, die reine KD kann sich in metastabilen Zuständen verfangen, wie es in den ersten und zweiten 1500 Messungen der Fall zu sein scheint. Am schnellsten ist der HCLA mit $\beta = 0.8$.
2. Je höher die Beimischung der klassischen Dynamik, desto größer ist, wie zu erwarten, die Korrelation aufeinanderfolgender Impulse. Dies äußert sich in den Abbildungen durch immer stärker ausgeprägte Zacken in der Kurve der Einzelmagnetisierung. Nach Einstellung eines Gleichgewichtes sind daher die stärkeren Schwankungen um selbiges bei höheren β -Werten zu vermuten.
3. Für keinen Wert von β erreicht der HCLA auch nur annähernd die Qualität des HMCA in Abbildung 16. Dort wird sowohl von der Einzel- als auch von der gemittelten Magnetisierung sehr schnell der spätere Mittelwert erreicht. Ebenfalls deutlich zu erkennen ist die weitaus geringere Korrelation zwischen aufeinanderfolgenden Konfigurationen. Während die gezackte Kurve in allen HCL-Varationen doch noch mehr oder weniger ausgeprägte „Berge“ und „Täler“ durchläuft, ist das Verhalten der einzelnen Magnetisierung im HMCA von statistischem Rauschen nicht mehr zu unterscheiden. Die oben kurz angesprochene Proportionalitätskonstante zur Berechnung der Anzahl effektiver Messungen ist also viel größer als beim HCLA. In der Tat wird auch für den HMCA ein kleinerer, dynamischer, kritischer Exponent und damit eine kürzere Autokorrelationszeit vorhergesagt [40].

Das unkorreliertere Verhalten der Magnetisierung im HMCA wird auch plausibel, wenn man bedenkt, daß bei einer mittleren Trajektoriellänge von sechs „Leapfrog“-Schritten der Länge $\delta\tau = 0.08$ zwischen den einzelnen Konfigurationen im Vergleich zum HCLA nahezu die zehnfache Entfernung liegt. (Die Akzeptanzrate übertraf dabei sogar noch die angestrebten 75 %). Da im HMCA zudem nach jeder Konfiguration ein neues Zufallsimpuls gewählt wird, ist er selbst der „besten“ HCLA Version bei $\beta = 0.8$ weit überlegen.

Die verschiedenen Meßgrößen, denen das Interesse gilt, equilibrieren unterschiedlich schnell, je nach ihrer „Reichweite“ auf dem Gitter. Die Magnetisierung als lokale Größe zählt zu den schnell equilibrierenden Meßwerten. Wenn also die Abbildungen für bestimmte Parameter dies bzgl. bereits nach einigen hundert Messungen die Einstellung des Gleichgewichtes anzeigen, gilt das sicher nicht für langsam equilibrierende Meßgrößen, wie z.B. die Higgsmasse. Die Untersuchung der Magnetisierung liefert daher nur eine untere Grenze für die zum Erreichen des Gleichgewichts durchzuführenden Messungen. Für die langsamste, hier untersuchte Version des HCLA liegt diese Grenze in der Gegend von 6000 Messungen.

Aufgrund der knappen Rechenzeit wurde daher für alle untersuchten Werte von β die eigentliche Messung im Punkt A nach einer Equilibrierung von ca. 6500 Trajektorien gestartet. Die dabei gewonnenen Ergebnisse einiger wichtiger Meßgrößen zeigt die folgende Tabelle. Die Bezeichnung der Größen ist dieselbe wie in [28]. Die Resultate des HCLA ergeben sich aus einer Statistik von ca. 8000 Messungen, die des HMCA [28] aus ca. 30000 Messungen. Neben der kürzeren Autokorrelationszeit ist dies ein weiterer Grund für den kleineren statistischen Fehler:

Tabelle 6: MC-Resultate für einige Meßgrößen bei verschiedenem β in $\delta\tau = 0.05$, $N_B = 20$

	HCLA					HMCA
	$\beta = 0.0$	$\beta = 0.2$	$\beta = 0.5$	$\beta = 0.8$	$\beta \approx 0.999$	
m_R	0.9(1)	0.8(2)	1.3(2)	1.03(10)	0.97(6)	0.99(2)
μ_R	1.0745(4)	1.074(1)	1.075(1)	1.0743(8)	1.0743(6)	1.0744(2)
l	0.153(3)	0.178(5)	0.163(4)	0.163(2)	0.169(2)	0.1661(4)
$\langle \chi_x \bar{\psi}_x \rangle$	3.971(1)	3.971(1)	3.970(1)	3.9718(12)	3.9696(11)	3.9712(3)
$\langle \psi_{Lx} \phi_x^+ \bar{\psi}_{Rx} \rangle$	0.0029(5)	0.0035(6)	0.0029(6)	0.0025(6)	0.0029(5)	0.0026(2)
$\langle \chi_{Lx} \phi_x \bar{\chi}_{Rx} \rangle$	-0.1662(6)	-0.1686(6)	-0.1670(6)	-0.1677(6)	-0.1680(5)	-0.1676(1)
$\langle \phi \rangle$	0.098(6)	0.12(1)	0.077(7)	0.095(6)	0.106(4)	0.098(1)
$\langle \phi_x \rangle$	0.857(3)	0.863(1)	0.859(1)	0.860(1)	0.8624(5)	0.8600(1)
$G_{R\psi}$	0.92(12)	1.1(2)	1.1(2)	1.0(2)	0.96(12)	1.10(2)
$G_{R\chi}$	-0.17(15)	-0.3(2)	-0.2(2)	-0.2(2)	-0.3(2)	-0.13(3)
Z_ϕ	2.5(4)	4(1)	3.4(7)	3.1(4)	3.3(2)	3.04(3)
Z_ψ	4.37(4)	4.50(5)	4.39(6)	4.49(5)	4.40(4)	4.446(11)
Z_χ	4.50(5)	4.39(5)	4.51(6)	4.41(5)	4.44(5)	4.418(9)

Die relativ gute Übereinstimmung der HCLA-Resultate mit denen des HMCA für alle Werte von β , d.h. für verschiedene Abstufungen zwischen reinem Langevinalgorithmus und fast reiner klassischer Dynamik, deuten darauf hin, daß der HCLA fehlerfrei programmiert ist.

Der Vergleich der langsamer equilibrierenden Größen, insbesondere der skalaren Wellenfunktionsrenormierung Z_ϕ und des Linkerwartungswertes l sowie der Higgsmasse m_R , läßt darauf schließen, daß bei kleineren β -Werten ($\beta \leq 0.5$) eine größere Statistik, bzw. eine längere Equilibrierungsphase, d.h. mehr Rechenzeit zum Erzielen hinreichend guter Resultate erforderlich ist. Dies steht in Übereinstimmung mit den aus den Abbildungen gewonnenen Erkenntnissen.

Da weitere ausführliche Tests in anderen Punkten des Phasenraumes aus Rechenzeitgründen nicht möglich waren und eine analytische Untersuchung nur für einige einfache Fälle durchführbar zu sein scheint [46, 47], wurde bei allen weiteren Rechnungen der Wert $\beta = 0.8$ verwendet. Einerseits erlaubt er durch die häufige Verwendung der klassischen Dynamik große Schritte im Phasenraum, andererseits wird aber auch der Impuls sooft aus einer Gaußverteilung zufällig ausgewählt, daß das System nicht innerhalb eines begrenzten Gebietes im Phasenraum hängen bleibt, sondern sich in jedem Fall ergodisch entwickelt. Ferner ist, wie bei allen anderen algorithmischen Parametern auch, der optimale Wert von β numerisch ohnehin nicht genau festzulegen und zudem sicher von den Werten der anderen Parameter abhängig. Eine erneute Bestimmung des β -Wertes für jede weitere Meßreihe verbietet aber die verfügbare Rechenzeit. Aufgrund dieser Überlegungen scheint der Wert $\beta = 0.8$ für alle untersuchten Punkte in der symmetrischen und gebrochenen Phase angemessen zu sein.

Ein weiterer wichtiger Parameter des HCLA ist die Schrittweite $\delta\tau$. Zum einen sollte sie möglichst groß sein, damit man sich schnell durch den Phasenraum bewegt und zu unkorrelierten Konfigurationen gelangt, gleichzeitig aber auch so klein wie nötig, da sie den systematischen Fehler des Algorithmus bestimmt. Der hinsichtlich des Fehlers gerade noch akzeptable Wert hängt sicherlich erneut von den anderen Parameterwerten der Theorie ab. In den Untersuchungen wurde $\delta\tau$ in $\beta = 0.8$ an zwei verschiedenen Punkten in der symmetrischen Phase variiert. Das Verhalten der Magnetisierung für den bereits oben betrachteten Punkt A zeigen die folgenden Abbildungen:

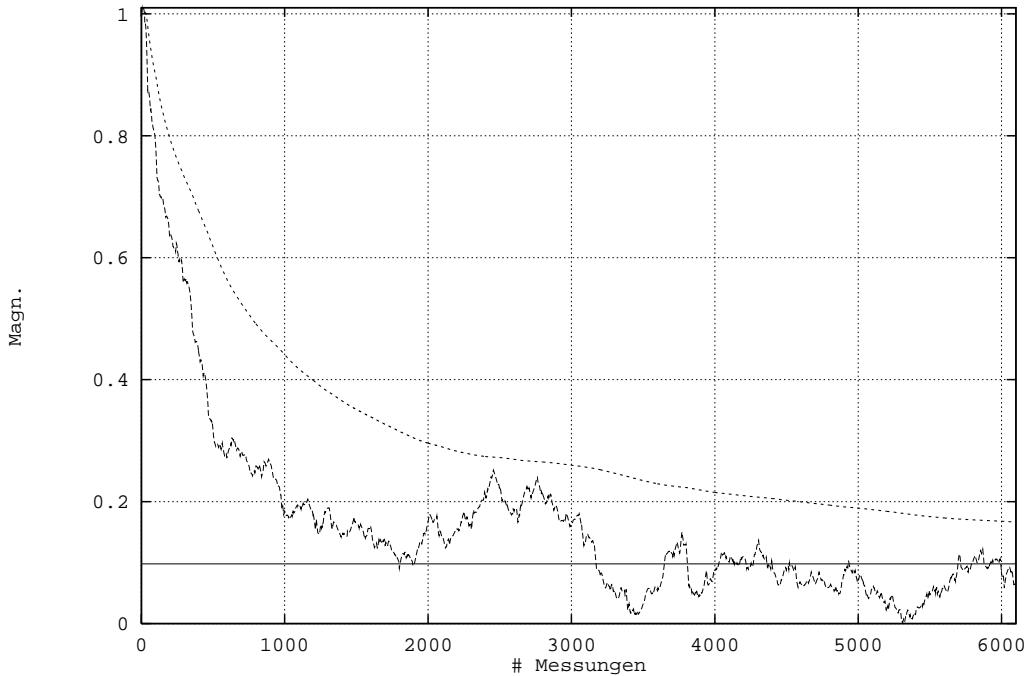


Abbildung 22: Hier wurde der HCLA bei $\beta = 0.8$ benutzt. Die Schrittweite $\delta\tau$ beträgt 0.025. Weitere Einzelheiten entnimmt man Abbildung 17.

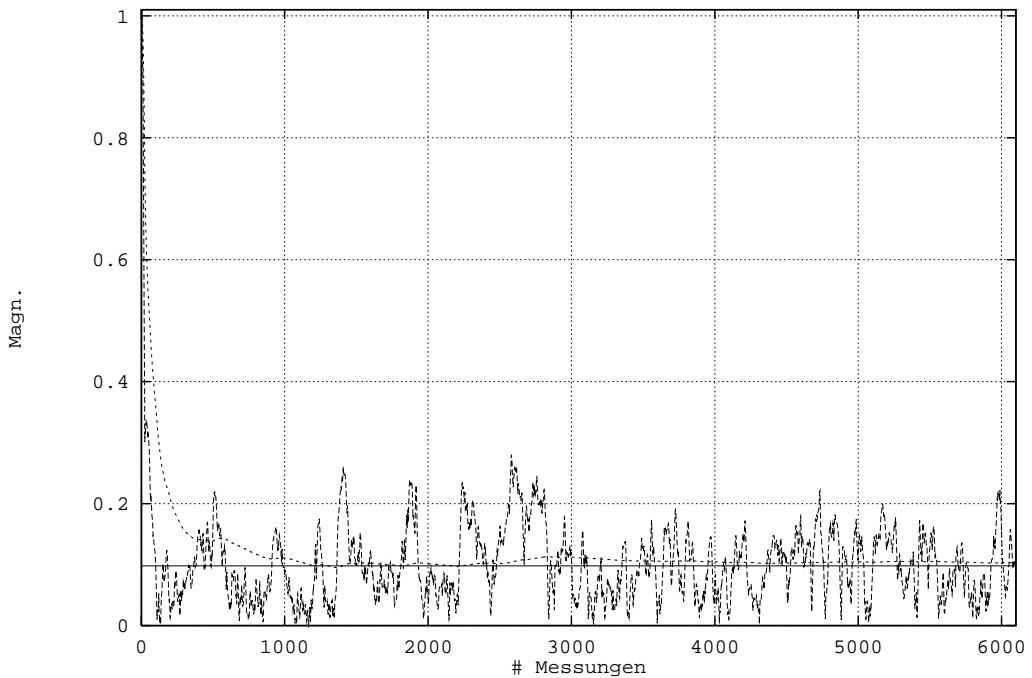


Abbildung 23: Die Magnetisierung folgt hier aus der Verwendung des HCLA bei $\beta = 0.8$ und einer Schrittweite von $\delta\tau = 0.1$. Alles Übrige folgt aus Abbildung 17.

Vergleicht man die Abbildungen 20, 22 und 23, so ist zu erkennen, daß gemäß den Erwartungen die Bewegung durch den Phasenraum, d.h. insbesondere das Erreichen der Gleichgewichtsmagnetisierung, mit zunehmender Schrittweite schneller erfolgt. Die Korrelation zwischen benachbarten Konfigurationen wird kleiner. Aber auch der HCLA mit $\delta\tau = 0.1$ kann einem Vergleich mit dem HMCA in keiner Weise standhalten.

Während sich bei Verwendung von $\delta\tau = 0.025$ ein deutlich schlechteres Bild bzgl. der Equilibrierungsgeschwindigkeit zeigt, scheint der Unterschied zwischen $\delta\tau = 0.1$ bzw.

0.05 nicht mehr so gravierend zu sein. In beiden Fällen hat die Einzelmagnetisierung bereits nach wenigen hundert Messungen erstmals den Gleichgewichtswert erreicht. Der diesbzgl. noch bestehende Laufzeit-Unterschied darf bei Produktionsläufen von vielen tausend Messungen als irrelevant angesehen werden. Ein etwas anderes Bild ergibt die Betrachtung der mittleren Magnetisierung. Sie nähert sich im Falle der Schrittweite $\delta\tau = 0.1$ ihrem Gleichgewicht deutlich schneller als für $\delta\tau = 0.05$. Diese Resultate lassen es ratsam erscheinen, die Equilibrierung in zwei Phasen aufzuteilen, von denen die erste bei größerer Schrittweite durchlaufen wird. Die dann folgende kleinere Schrittweite wurde vor dem Hintergrund, daß der größte akzeptable Wert von $\delta\tau$ nicht für jede Messreihe neu bestimmt werden kann, in allen anschließenden Rechnungen auf $\delta\tau = 0.05$ bzw. $\delta\tau = 0.04$ gesetzt.

Wie die nachstehende Tabelle zeigt, war im Punkt *A* selber bei Verwendung von $\delta\tau = 0.1$ noch keine wesentliche Abweichung von den HMC-Resultaten zu erkennen, wenn auch die Messwerte für $\delta\tau = 0.05$ jene fast durchgehend besser reproduzieren. Darin übertreffen sie den langsam equilibrierenden Fall $\delta\tau = 0.025$ ebenfalls. Der Gebrauch von $\delta\tau = 0.3$ liefert jedoch bereits deutlich schlechtere Ergebnisse.

Da die Korrelation zwischen den Konfigurationen mit zunehmender Schrittweite abnimmt und über die Anzahl der effektiven Messungen in den statistischen Fehler eingeht, sollte dieser für $\delta\tau = 0.3$ jeweils am kleinsten, für $\delta\tau = 0.025$ am größten sein. Wie man sieht, ist dies bis auf eine Ausnahme in der Tat der Fall.

Infolgedessen gibt die Tabelle mit $\delta\tau = 0.3$ ein Beispiel für eine schlechte Wahl der Schrittweite. Zwar konnte der statistische Fehler wegen der geringeren Korrelation zwischen aufeinanderfolgenden Konfigurationen relativ klein gehalten werden, aber der zu $\delta\tau^2$ proportionale systematische Fehler tritt nun klar hervor.

Tabelle 7: MC-Resultate für einige Meßgrößen bei verschiedenenem $\delta\tau$ in $\beta = 0.8$, $N_B = 20$

	$\delta\tau = 0.025$	$\delta\tau = 0.05$	$\delta\tau = 0.1$	$\delta\tau = 0.3$
m_R	0.95(14)	1.03(10)	0.93(5)	1.21(6)
μ_R	1.0746(9)	1.0743(8)	1.0747(7)	1.0761(5)
l	0.169(4)	0.163(2)	0.1635(15)	0.139(1)
$\langle \chi_x \bar{\psi}_x \rangle$	3.970(2)	3.9718(12)	3.973(1)	3.976(1)
$\langle \psi_{Lx} \phi_x^+ \bar{\psi}_{Rx} \rangle$	0.0017(6)	0.0025(6)	0.0038(6)	0.0289(5)
$\langle \chi_{Lx} \phi_x \bar{\chi}_{Rx} \rangle$	-0.1683(6)	-0.1677(6)	-0.1666(6)	-0.1426(5)
$\langle \phi \rangle$	0.105(10)	0.095(6)	0.103(5)	0.081(4)
$\langle \phi_x \rangle$	0.860(1)	0.860(1)	0.8591(5)	0.8398(4)
$G_{R\psi}$	1.1(2)	1.0(2)	1.1(2)	1.02(15)
$G_{R\chi}$	-0.18(16)	-0.2(2)	-0.17(15)	-0.24(14)
Z_ϕ	3.3(4)	3.1(4)	2.9(3)	3.2(2)
Z_ψ	4.49(5)	4.49(5)	4.43(5)	4.50(4)
Z_χ	4.38(5)	4.41(5)	4.39(5)	4.39(4)

Durch die Einbeziehung von Fermionen ist in der Anzahl N_B der Messungen des oben geschilderten „Baby“-Monte Carlo ein weiterer algorithmischer Parameter gegeben. Sein Einfluß wurde ebenfalls in zwei Punkten der symmetrischen Phase studiert.

In der folgenden Tabelle werden die Resultate der Messungen im U(1)-Modell für den Punkt *H* bei $G_\chi = 0.0$, $G_\psi = 1.0$, $K = 0.1$, $\kappa = 0.07$, $\lambda = 1.0$ auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter gezeigt. Aufgrund der größeren Yukawakopplung tritt dort ein durch zu kleines N_B nur unzureichend beschriebener Einfluß der Fermionen deutlicher zu Tage als im Punkt *A*. Alle Werte ergaben sich nach einer Equilibrierung von ungefähr 5000 Trajektorien gefolgt von knapp 15000 Messungen. Die vorletzte Spalte zeigt Meßergebnisse

ohne Berücksichtigung von Fermionen, die letzte die Resultate einer Simulation mit dem HMCA.

Tabelle 8: MC-Resultate für einige Meßgrößen bei unterschiedlichem N_B in $\beta = 0.8$, $\delta\tau = 0.05$

	$N_B = 20$	$N_B = 10$	$N_B = 5$	$N_B = 1$	$N_f = 0$	HMC
m_R	1.12(8)	1.0(1)	1.06(15)	1.29(11)	2.9(2)	1.07(6)
μ_R	0.971(6)	0.96(1)	0.960(7)	0.987(7)	1.038(6)	0.963(5)
l	0.125(2)	0.128(2)	0.127(2)	0.116(2)	0.067(1)	0.1290(4)
$\langle \chi_x \bar{\psi}_x \rangle$	3.923(1)	3.929(1)	3.929(1)	3.936(1)	3.954(2)	3.9253(7)
$\langle \psi_{Lx} \phi_x^+ \bar{\psi}_{Rx} \rangle$	0.0203(5)	0.0224(6)	0.0206(4)	0.0228(7)	0.0100(6)	0.0206(9)
$\langle \chi_{Lx} \phi_x \bar{\chi}_{Rx} \rangle$	-1.607(2)	-1.605(2)	-1.615(2)	-1.649(6)	-1.566(2)	-1.6041(9)
$\langle \phi \rangle$	0.081(5)	0.086(6)	0.088(6)	0.073(4)	0.043(2)	0.088(2)
$\langle \phi_x \rangle$	0.8496(5)	0.8498(7)	0.8519(6)	0.860(1)	0.8358(9)	0.8493(5)
$G_{R\psi}$	8.4(4)	8.2(5)	8.3(4)	8.7(6)	13(1)	8.6(4)
$G_{R\chi}$	-1.3(2)	-1.0(2)	-1.2(1)	-1.3(2)	-1.5(3)	-1.28(11)
Z_ϕ	2.7(2)	2.7(4)	2.8(3)	2.8(3)	5.0(8)	2.94(9)
Z_ψ	3.52(5)	3.48(7)	3.48(6)	3.66(6)	4.11(9)	3.50(9)
Z_χ	4.32(4)	4.25(4)	4.26(3)	4.33(4)	4.41(5)	4.24(9)

Die Variation von N_B verursacht, wie zu erwarten, bei sehr kleinen Werten eine Verschlechterung der Messergebnisse. Da der Rechenzeitaufwand proportional zu N_B ist, muß aber auch hier ein Kompromiß zwischen dem Fehler bei der Berücksichtigung der Fermionen durch zu kleines N_B und dem statistischen Fehler aufgrund einer zu geringen Zahl von Messungen gefunden werden. Der Tabelle nach zu urteilen, scheint dafür bereits $N_B = 5$ auszureichen, denn schon in $N_B = 1$ wird der Einfluß der Fermionen, wie der Vergleich mit dem Fall $N_f = 0$ und den HMC-Resultaten zeigt, im wesentlichen richtig wiedergegeben.

Desweiteren scheint eine systematische Verbesserung in $N_B > 20$ bei akzeptablem Rechenzeitaufwand nicht mehr zu erwarten zu sein. Zwar ist demnach die Verwendung von $N_B = 20$ zu hoch gegriffen, da diese Untersuchungen jedoch nur in zwei Punkten des Phasenraumes durchgeführt wurden, schien es für die allgemeinen Studien sicherer, den Fehler im „Baby“-Monte Carlo nicht zu groß werden zu lassen. Daher wurde bei den folgenden Messungen in der symmetrischen Phase der HCLA mit $N_B = 20$ verwendet, zumal die betrachteten Yukawakopplungen und damit der Einfluß der Fermionen in einigen Meßpunkten größer waren als in H . Die anschließenden Rechnungen in der gebrochenen Phase fanden jedoch wieder bei mit H vergleichbaren bzw. kleineren Kopplungen statt, so daß auch die Verwendung von $N_B = 10$, wie sie dort aus Gründen der Rechenzeit erforderlich war, akzeptiert werden konnte. Ein exemplarischer Vergleich mit HMC-Resultaten in der gebrochenen Phase bestätigte diese Vorgehensweise zusätzlich. Aufgrund der oben aufgeführten Ergebnisse ist der Parametersatz für alle folgenden Rechnungen in der symmetrischen Phase durch $\beta = 0.8$, $\delta\tau = 0.05$, $N_B = 20$ gegeben.

4.5.2 Numerische Untersuchung zur Verschiebung der Phasengrenzen beim Übergang von zwei zu einem Fermion-Spiegelfermion-Paar

Nach obigen Vorarbeiten ist zunächst eine u.a. auf den „mean-field“-Rechnungen des zweiten Kapitels beruhende Vermutung zu untersuchen, welche die Phasenstruktur des Higgs-Yukawa-Modells mit nur einem Fermion-Spiegelfermion-Paar betrifft. Danach soll sich in einem K, κ -Diagramm bei festem K der Abstand der Phasengrenzen im Higgs-Yukawa-Modell zu den entsprechenden Grenzen der rein skalaren Theorie in etwa halbieren, wenn das Modell statt der in den HMC-Rechnungen betrachteten zwei Fermion-Spiegelfermion-Paare nur eines aufweist. Dieser Sachverhalt ist auch physikalisch plausibel:

Für die Ordnung im System, parametrisiert durch die Magnetisierung $\langle |\phi| \rangle$, ist die Wechselwirkung des ϕ -Feldes an den verschiedenen Punkten des Gitters verantwortlich. Je stärker sie wird, desto größer ist die Tendenz zur geordneten Phase. Diese nichtlokale Wechselwirkung wird zunächst direkt durch den skalaren Hoppingparameter vermittelt. Liegt keine andere Kopplungsmöglichkeit zwischen benachbarten Gitterpunkten vor, d.h. betrachtet man die rein skalare Theorie oder das Higgs-Yukawa-Modell mit unendlich schweren Fermionen ($K = 0$), so bestimmt im wesentlichen der Wert von κ wie groß die Magnetisierung ist, d.h. in welcher Phase man sich befindet. Die Abhängigkeit von der lokalen Selbstwechselwirkung, vermittelt durch die skalare Selbstkopplung λ , ist, wie die Untersuchungen im Rahmen der MFA (Kapitel 2) gezeigt haben, nicht sehr groß.

Werden propagierende Fermionen in die Betrachtung einbezogen ($K > 0$), liefern auch sie über die Yukawakopplungen einen Beitrag zur Ordnung. So ist am Ort x das Higgsfeld über diese Kopplungen an Fermionen geknüpft. Letztere können nun zum Nachbarort $x + \hat{\mu}$ propagieren, wo sie dann wieder über die Yukawakopplungen das Higgsfeld beeinflussen. Ein Maß für die Propagation der Fermionen ist deren Masse. Sie verschwindet auf der kritischen Linie in K_{cr} , deren Lage wiederum von der Größe der Yukawakopplungen abhängt. (Das MF-Resultat lautete $K_{cr} = \frac{1-G_\psi G_\chi}{8}$.) In der Nähe der kritischen Linie sollte daher der Einfluß der Fermionen maximal sein und sowohl für kleiner als auch größer werdende K langsam verschwinden.

Mit dem Einfluß der Fermionen ändert sich der für eine vorgegebene Magnetisierung (Ordnung) erforderliche skalare Anteil, d.h. bei fester Magnetisierung muß κ nun einen anderen Wert annehmen als in der rein skalaren Theorie oder bei $K = 0$. Eine ähnliche Argumentation greift für den Übergang zur antiferromagnetischen Phase. Dort hat sich die Ordnungstendenz des skalaren Anteils allerdings umgekehrt, denn bei negativem κ werden, am Maßfaktor $\exp(\kappa \sum_\mu \phi_{x+\mu}^+ \phi_x)$ klar erkennbar, Konfigurationen bevorzugt, in denen das Higgsfeld schachbrettartig ausgerichtet ist.

Im Lichte der voranstehenden Betrachtung sollte für beide Phasengrenzen bei der doppelten Zahl von Fermionen auch ihr Beitrag zur Ordnung in etwa doppelt so groß sein. Dies führt zu der oben angesprochenen Halbierung des Abstandes der Phasengrenzen zu den Grenzen der rein skalaren Theorie, wenn man nur halb soviel (Spiegel)Fermionen betrachtet.

Wie die beiden folgenden Abbildungen zeigen, konnte diese Vermutung bestätigt werden. Dort sieht man die MF-Resultate für ein und zwei Fermion-Spiegelfermion-Paare sowie numerische Ergebnisse aus MC-Rechnungen. Die MC-Daten wurden für $N_f = 2$ aus [27] entnommen, für $N_f = 1$ mit dem oben beschriebenen HCLA berechnet. Letzteres geschah nach einer Equilibrierung von ca. 6000 Updates mit einer Statistik von ungefähr 8000 Messungen. Diese Zahlen fallen für einige Punkte, die sich aufgrund der Werte von K und G_ψ, G_χ hinsichtlich der Matrixinversion besonders ungünstig verhalten, etwas niedriger aus.

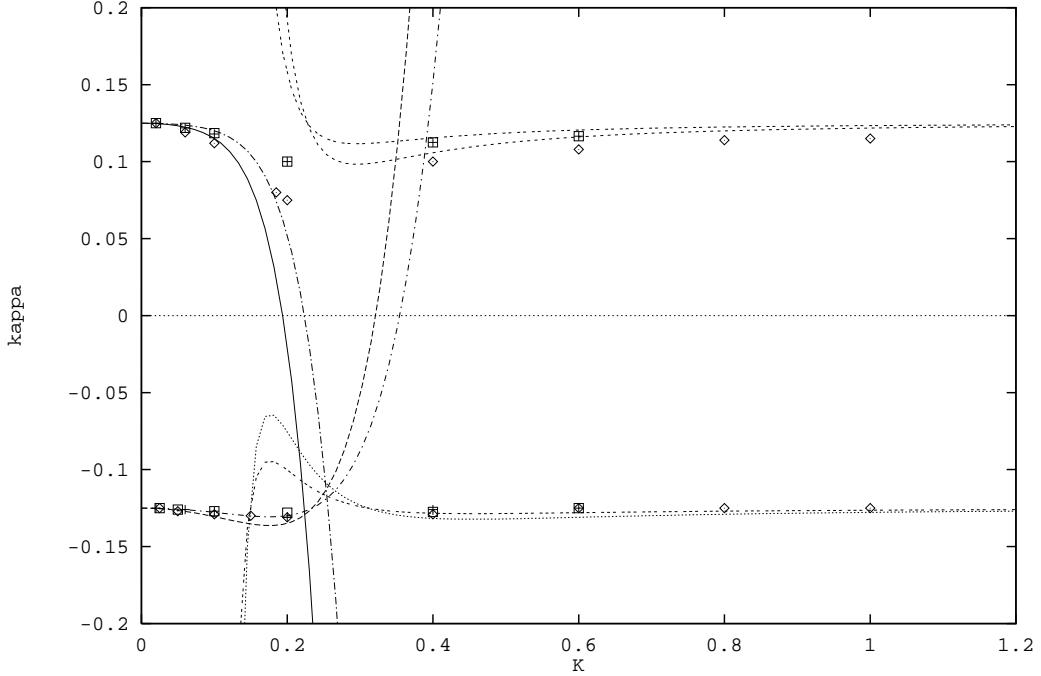


Abbildung 24: Bei divergenter Selbstkopplung beträgt der Wert der Yukawakopplungen hier $G_\psi = 0.1$, $G_\chi = -0.3$. Die numerischen Resultate wurden auf einem $4^3 \cdot 8$ -Gitter gewonnen. Alle Punkte beziehen sich auf eine skalare Masse $m_R \approx 1$ in der symmetrischen Phase. Die Rauten zeigen dies für $N_f = 2$, die Kreuze für $N_f = 1$. Die Quadrate folgen aus den Meßwerten für $N_f = 2$ durch Halbierung des Abstandes zu $\kappa = \pm 0.125$ und entsprechen damit unserer Vermutung. Die in $K = 0.1$ und $K = 0.6$ jeweils oberen Kurven der vier Kurvenpaare ergeben sich aus der MFA bei $N_f = 1$, die unteren aus selbiger bei $N_f = 2$.

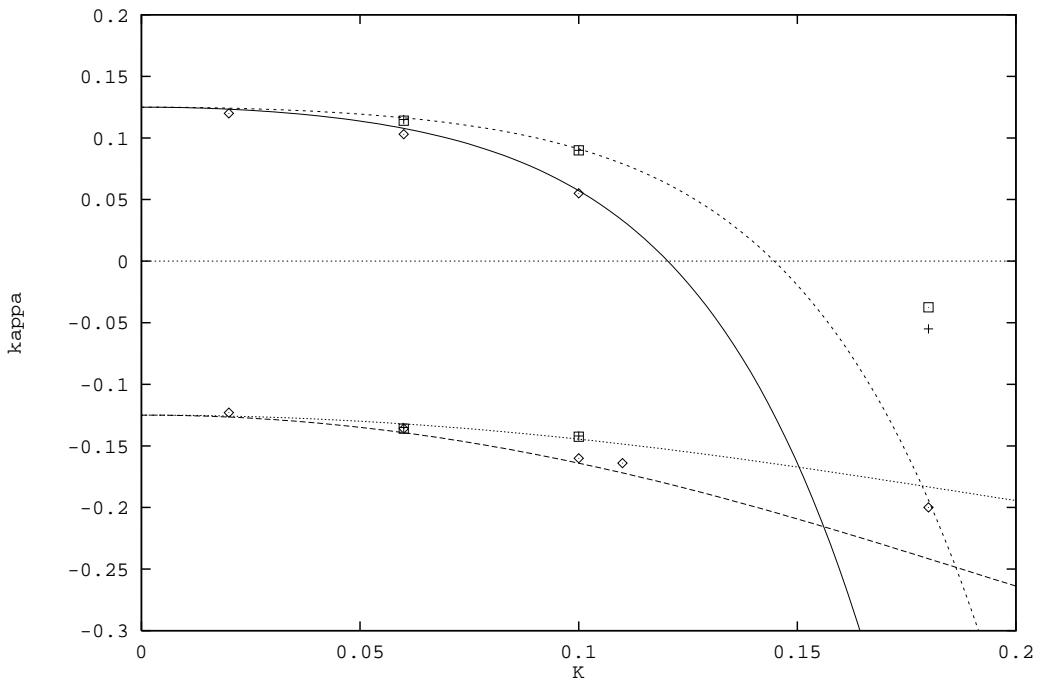


Abbildung 25: Die einzige Änderung im Vergleich zu Abbildung 24 besteht in einer Verkleinerung von G_χ auf den Wert -1.0 . Alle anderen Werte sowie Bezeichnungen sind dieselben.

Man erkennt im Gültigkeitsbereich der MFA eine gute Übereinstimmung der numerischen Resultate mit den vermuteten. Bei kleinem $|G_\chi G_\psi|$ scheint dies auch im Bereich mittlerer K -Werte der Fall zu sein. Die einzige wesentliche Diskrepanz tritt im Punkt $G_\chi = -1.0, K = 0.18$ auf. Hier mag eine Vergrößerung der Statistik die Abweichung vom vermuteten Verhalten noch entschärfen. Zudem ist der K -Wert größer als der bei den meisten Untersuchungen interessierende, kritische Wert des fermionischen Hoppingparameters, der hier bei ca. 0.15 liegt.

Demzufolge deuten die Resultate darauf hin, daß es selbst bei sehr unterschiedlichen Yukawakopplungen, wie in Abbildung 25, bis zum jeweils kritischen Wert von K nicht zu großen Abweichungen vom vermuteten Verhalten der Phasengrenzen bei Halbierung der Fermionenzahl kommen wird.

4.5.3 Kopplungsschranken im Fall entkoppelter Spiegelfermionen

Entkopplung der Spiegelfermionen

Da das Fermionspektrum bei heute erreichbaren Energien rein chiral ist, sind gitterregularisierte Theorien, die Spiegelfermionen enthalten, nur in zwei Fällen relevant. Entweder werden die Spiegelfermionen im Kontinuumslimes schwer, so daß zumindest das bisher bekannte, niederenergetische Spektrum chiral bleibt, oder ihre Massen und Kopplungen an den „Rest der Welt“ verschwinden, d.h. sie werden vollständig aus dem Spektrum entfernt.

In unserem Fall müssen zusätzlich für beide genannten Alternativen die bzgl. der chiralen Darstellung offdiagonalen Massen μ_R der fermionischen Massenmatrix

$$M_R = \begin{pmatrix} \mu_{R\psi} & \mu_R \\ \mu_R & \mu_{R\chi} \end{pmatrix} \quad (186)$$

verschwinden, um Fermionen und Spiegelfermionen zu entmischen. Die beiden obigen Möglichkeiten ergeben daher für das Higgs-Yukawa-Modell die folgenden Szenarien:

1. Die Entkopplung durch große Masse, d.h. $|\mu_{R\chi}| \gg |\mu_{R\psi}|$, ist wegen der in der gebrochenen Phase gültigen Beziehung $\mu_{R\chi} = G_{R\chi} v_R$ nur durchführbar, wenn die renormierte Yukawakopplung $G_{R\chi}$ hinreichend groß werden kann. Liegt eine triviale Kontinuumstheorie vor, stößt man diesbezüglich auf Grenzen. Denn um eine wechselwirkende Theorie zu beschreiben, muß der durch das Gitter eingeführte Cutoff nun endlich bleiben. Das wiederum bedeutet Cutoff-abhängige obere Grenzen für Higgs- und Yukawakopplungen.

In einem solchen Fall treten die Spiegelfermionen bei höheren Energien als neue Physik auf. Eine wesentliche Frage für numerische Untersuchungen in diesem Rahmen ist daher, wie groß die renormierten Yukawakopplungen im Falle der Trivialität werden können.

Da Spiegelfermionen prinzipiell nicht nur direkt, sondern auch über die Mischung mit Fermionen in Beschleunigern erzeugt werden können, liefern die heute erreichbaren Energien untere Grenzen für ihre Massen und obere Grenzen für den Mischungswinkel. Demnach widerspricht ihre Existenz nicht der bisherigen Phänomenologie [8].

Die Entmischung von Fermionen und Spiegelfermionen wird hier durch geeignete Wahl der Hoppingparameter κ, K erreicht.

2. In dieser Arbeit wird der zweite Weg zur Entkopplung der Spiegelfermionen eingeschlagen, d.h. der Weg über eine verschwindende Masse $\mu_{R\chi} = 0$. Im Higgs-Yukawa-Modell kann diese Situation aufgrund der fehlenden Eichfelder

durch geeignete Wahl einiger nackter Parameter exakt herbeigeführt werden. Erstmals angewandt wurde dieses Verfahren zur Entkopplung eines rechtshändigen Neutrinos in einer chiralen Eichtheorie [24]. Die Grundlage dafür bietet die Shiftsymmetrie der Wirkung in dem entsprechenden Fermionfeld, welche besagt, daß in $\mu_{\psi\chi} = 0$ die Wirkung unter der Transformation

$$\chi_x \rightarrow \chi_x + \epsilon, \quad \bar{\chi}_x \rightarrow \bar{\chi}_x + \bar{\epsilon} \quad (187)$$

invariant ist, wenn G_χ verschwindet. Entsprechendes gilt für $G_\psi = 0$. Dabei sind $\epsilon, \bar{\epsilon}$ Grassmannvariablen.

Durch Variation des erzeugenden Funktionalen der unverbundenen Greenfunktionen nach diesen Shifts, die dabei von der Raumzeit abhängen (d.h. $\bar{\epsilon}, \epsilon \rightarrow \bar{\epsilon}_x, \epsilon_x$), lassen sich Wardidentitäten ableiten, die bei verschwindender nackter Yukawakopplung G_χ bereits für beliebige Werte von $\mu_{\psi\chi}$ das Verschwinden der renormierten Kopplung $G_{R\chi}$ zur Folge haben [31].

Durch diese Identitäten ergeben sich auch für den Fermionpropagator Einschränkungen. So erhält man für den inversen Propagator im Impulsraum [48]:

$$\tilde{\Delta}_\Psi^{-1}(p) = 2K \begin{pmatrix} -\Gamma_{\psi\psi}(p) & \mu_p \\ \mu_p & i\gamma \cdot \bar{p} \end{pmatrix} \quad (188)$$

mit $\mu_p = \frac{\mu_{\psi\chi}}{2K} + \frac{r}{2}\hat{p}^2$ sowie $\hat{p}_\mu = 2 \sin \frac{p_\mu}{2}$, $\bar{p}_\mu = \sin p_\mu$ und unbestimmtem $\Gamma_{\psi\psi}(p)$. Er unterscheidet sich vom inversen Propagator für freie Fermionen nur in seiner $\psi\psi$ -Komponente. Solange man hinreichend kleine Impulse betrachtet, lautet seine Entwicklung gemäß dem zweiten Kapitel:

$$\tilde{\Delta}_\Psi^{-1}(p) = M + i\gamma \cdot \bar{p} \otimes N + O(\bar{p}^2). \quad (189)$$

Aus (188) folgt dann unmittelbar für N und die ebenfalls im zweiten Kapitel definierte Wellenfunktionsrenormierung Z_Ψ :

$$N = 2K \begin{pmatrix} n_{\psi\psi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad Z_\Psi \equiv \begin{pmatrix} Z_\psi & 0 \\ 0 & Z_\chi \end{pmatrix} = \frac{1}{2K} \begin{pmatrix} \frac{1}{n_{\psi\psi}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (190)$$

Damit ergibt sich für die renormierte Massenmatrix die Gestalt

$$M_R = \begin{pmatrix} Z_\psi \mu_{\psi\psi} & \sqrt{Z_\psi} \mu_0 \\ \sqrt{Z_\psi} \mu_0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (191)$$

so daß gilt: $\mu_R = \frac{\mu_0}{\sqrt{n_{\psi\psi}}}$ und $G_{R\psi} v_R = \mu_{R\psi} = \frac{\mu_{\psi\psi}}{n_{\psi\psi}}$ sowie $G_{R\chi} v_R = \mu_{R\chi} = 0$.

Wie oben bereits angedeutet, muß nun der offdiagonale Teil der Massenmatrix für eine exakte Entkopplung der Spiegelfermionen verschwinden, d.h. also $\mu_0 = 0$ sein.

Da der kleinste Impuls auf einem $L^3 \cdot T$ -Gitter mit $T > L$ und antiperiodischen Randbedingungen in Zeitrichtung durch $p = (0, 0, 0, \frac{\pi}{T})$ gegeben, der Impuls $p = 0$ auf endlichem Gitter also garnicht verwirklicht ist, wählt man nun anstelle von μ_0 die Masse μ_p im kleinsten Impuls. Die renormierte Massenmatrix lautet dann:

$$M_R = \begin{pmatrix} Z_\psi \mu_{\psi\psi} & \sqrt{Z_\psi} \mu_p \\ \sqrt{Z_\psi} \mu_p & 0 \end{pmatrix}, \quad (192)$$

so daß $\mu_R = \frac{\mu_p}{\sqrt{n_{\psi\psi}}}$. Bedingung für die exakte Entkopplung der Spiegelfermionen ist jetzt $\mu_p = 0$, also

$$\frac{\mu_{\psi\chi}}{2K_{eE}} + 2r \sin^2 \frac{\pi}{2T} = 0, \quad (193)$$

d.h. der Wert des fermionischen Hoppingparameters, der für die exakte Entkopplung einzustellen ist, hängt von der Gittergröße ab. Auf dem in dieser Arbeit verwendeten $4^3 \cdot 8$ -Gitter beträgt er $K_{eE} \approx 0.1274$, auf unendlich ausgedehntem Gitter liegt er genau bei $1/8$.

Alle folgenden numerischen Untersuchungen beziehen sich auf die zweite Art der Entkopplung, betrachten also Parametersätze mit $G_\chi = 0$ und $K = 0.1274$.

Die numerischen Resultate zur Trivialitätsschranke

Ein wichtiger Fragenkomplex im Rahmen numerischer Simulationen beschäftigt sich mit dem für die renormierten Kopplungen erlaubten Bereich, der in trivialen Theorien durch Cutoff-abhängige Grenzen eingeschränkt wird. So sagt bei Betrachtung des obengenannten Entkopplungsfalls die Einschleifen-Störungsrechnung für die Yukawakopplung $G_{R\psi}$ eine obere Trivialitätsgrenze voraus.

Für die renormierte Higgskopplung g_R in Abhängigkeit von der renormierten Yukawakopplung $G_{R\psi}$ wird neben der oberen Trivialitätsgrenze eine untere Vakuumstabilitätsschranke gefordert. Diese Grenzen werden in den nackten Higgskopplungen $\lambda = \infty$ bzw. $\lambda = 0$ erreicht.

Ein weiteres Ergebnis der Störungsrechnung ist das Verschwinden des erlaubten Bereiches im Kontinuumslices, d.h. bei Entfernung des Cutoff.

Die nichtperturbativen numerischen Untersuchungen sollen letztlich klären, ob das Verhalten der Grenzen im betrachteten Modell dem soeben beschriebenen, aus der Einschleifen-Störungsrechnung bestimmten Verhalten entspricht, die β -Funktionen also nur einen Fixpunkt bei verschwindenden Kopplungen haben, oder ob es einen weiteren ultraviolett-stabilen Fixpunkt bei nichtverschwindenden Kopplungen gibt, so daß der erlaubte Kopplungsbereich im Kontinuumslices endlich bleibt, möglicherweise sogar den gesamten Parameterraum ausfüllt.

Die im Rahmen des Higgs-Yukawa-Projektes verfügbare Rechenzeit erlaubte mit der Bestimmung der Grenzen für einen festen Cutoff bisher nur den ersten Schritt in diese Richtung. Aussagen über das Verhalten der β -Funktionen im Kontinuumslices sind erst durch ein Studium der Cutoff-Abhängigkeit der Grenzen möglich, ein Projekt, das für die Zukunft geplant ist.

Die vorrangige Zielsetzung der folgenden Rechnungen im Entkopplungsfall des U(1)-Modells für $N_f = 1$ bestand darin, zu prüfen, ob durch Verwendung des HCLA bei hinreichender Rechenzeit prinzipiell die Möglichkeit besteht, Cutoff-abhängige Kopplungsschranken zu bestimmen, wie es für $N_f = 2$ im SU(2)-Modell mit Hilfe des HMCA in [32] bzw. [34] geschehen ist.

Aus Gründen der Rechenzeit konnte in dieser Arbeit nur auf eine der Grenzen, die Trivialitätsschranke der Higgskopplung, eingegangen werden. Hinsichtlich der Durchführbarkeit der Untersuchungen im Fall $N_f = 1$ sollte sie sich allerdings nicht von der Vakuumstabilitätsschranke unterscheiden, da lediglich die nackte Higgskopplung geändert wird, die auf das Phasendiagramm des Modells und damit über das Higgsfeld auf die Fermiondeterminante nur einen schwachen Einfluß hat.

Die Untersuchungen wurden auf eine dem Schema in [32] analoge Weise durchgeführt. Insbesondere wurde das Modell bei sonst konstanten Parameterwerten entlang einer Linie verschiedener κ -Werte studiert, die teils in der FM-, teils in der PM-Phase liegen. Aus Mangel an Rechenzeit ließen sich einige der dort angegangenen Fragestellungen hier allerdings nicht verfolgen. So lag weder eine „finite-size“-Analyse durch Rechnungen bei unterschiedlicher Gittergröße noch die Betrachtung verschiedener Werte für die Yukawakopplung G_ψ im Rahmen des Möglichen. Auch auf eine Studium des Phasenraumes wurde verzichtet.

Für all dies war aber nicht nur die knappe Rechenzeit, sondern auch der ungleich

höhere Aufwand verantwortlich, den die Verwendung des HCLA erfordert. Er kann jetzt, da die Werte für die in den Algorithmen benutzten Schrittweiten vorliegen, mit dem des HMCA verglichen werden:

Die Resultate für das $4^3 \cdot 8$ -Gitter in [32] ergaben sich bei einer Schrittweite von $\delta\tau = 0.115$. Eine HMC-Trajektorie bestand dabei aus dem ersten und letzten Halbschritt der „Leapfrog“-Integration sowie im Mittel sechs ganzen Zwischenschritten. Damit hatte sie eine mittlere Länge von 0.805. Im HCLA wurde eine Schrittweite von $\delta\tau = 0.04$ verwendet. Dieser kleine Wert schien angebracht, da für die Resultate nicht, wie bisher, eine Kontrollmöglichkeit durch Vergleich mit anderen numerischen oder analytischen Ergebnissen gegeben war. Außerdem bestand auch nicht die Möglichkeit, durch Untersuchung desselben Sachverhaltes bei einer zweiten Schrittweite den systematischen Fehler des HCLA abzuschätzen. Desweitern liegt $\delta\tau$ damit durchaus in der für den HCLA üblichen Größenordnung [49].

Um einen groben Eindruck vom relativen Aufwand der Algorithmen zu bekommen, kann man etwa für den HCLA zwischen zwei Zufallsimpulsen im Mittel gerade soviel mit KD berechnete Impulse zulassen, daß die zurückgelegte Strecke ungefähr der Länge einer HMC-Trajektorie entspricht. Beide Verfahren wählen dann die Zufallsimpulse, nachdem ebendiese Strecke auf klassischem Wege zurückgelegt wurde. Das bedeutet für den HCLA ca. zwanzig Schritte zwischen den Zufallsimpulsen. Um dem HMCA möglichst nahe zu kommen, dürfte man eine Messung immer nur nach diesen zwanzig Schritten ausführen. Im HCLA geschieht dies aber nach jedem Schritt, so daß zwar mehr Messungen durchgeführt werden, diese aber bei weitem nicht so unkorreliert sind wie im HMCA. Durch den kleineren dynamischen, kritischen Exponenten des HMCA wird dieser Effekt in der Nähe des Phasenübergangs noch verstärkt. (Bezeichnet ξ die kritische Länge eines Systems auf einem d -dimensionalen Gitter in der Nähe des kritischen Punktes, so divergiert die Autokorrelationszeit im HMCA gemäß $\tau_c \propto \xi^{d+1}$, im HCLA gemäß $\tau_c \propto \xi^{d+2}$.) Die Zahl der Messungen bei Verwendung des HCLA im Vergleich zum HMCA zu verzweifeln, um ähnliche Genauigkeiten zu erreichen, scheint also durchaus angebracht. Da der HMCA für jede Messung im Mittel acht Matrixinversionen durchzuführen hat, der HCLA hingegen $N_B = 10$, bedeutet dies im Blick auf die erforderliche Rechenzeit den 25-fachen Aufwand.

Aus diesem Grunde war eine Simulation ähnlicher Qualität wie in [32] hier nicht möglich. Vielmehr mußte man sich für jeden untersuchten Punkt mit 6000 Updates zur Equilibration gefolgt von ca. 35000 Messungen zufrieden geben. Die daraus gewonnenen Resultate sind in den folgenden Abbildungen zusammengefaßt. Die genaue Definition der einzelnen Meßgrößen findet sich in [32] nebst dortigen Referenzen.

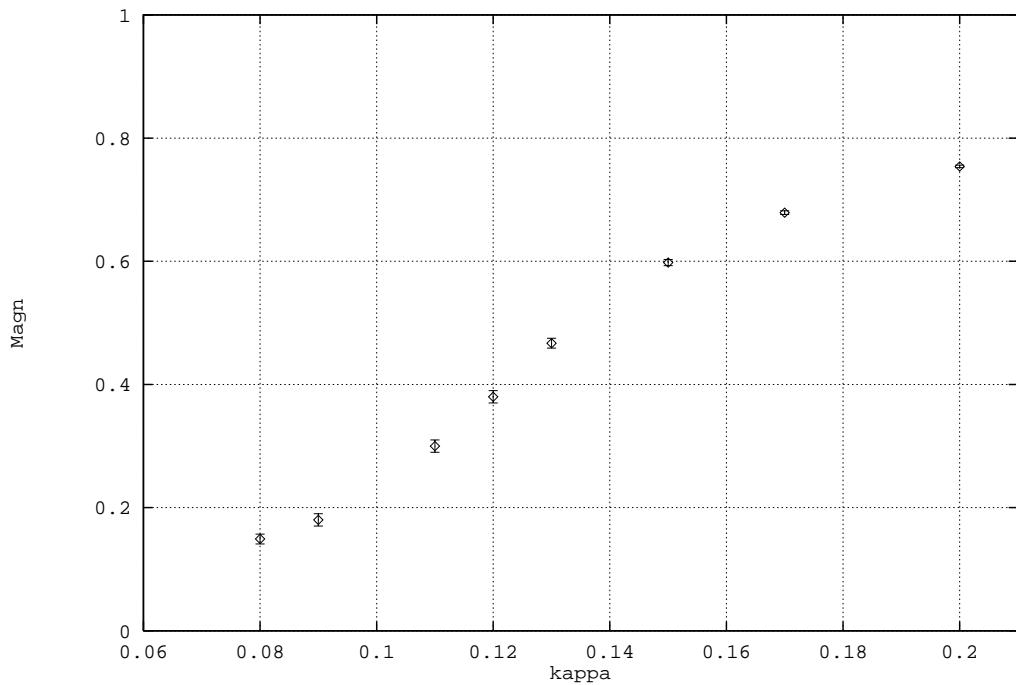


Abbildung 26: Diese Abbildung zeigt die Magnetisierung für verschiedene κ -Werte.

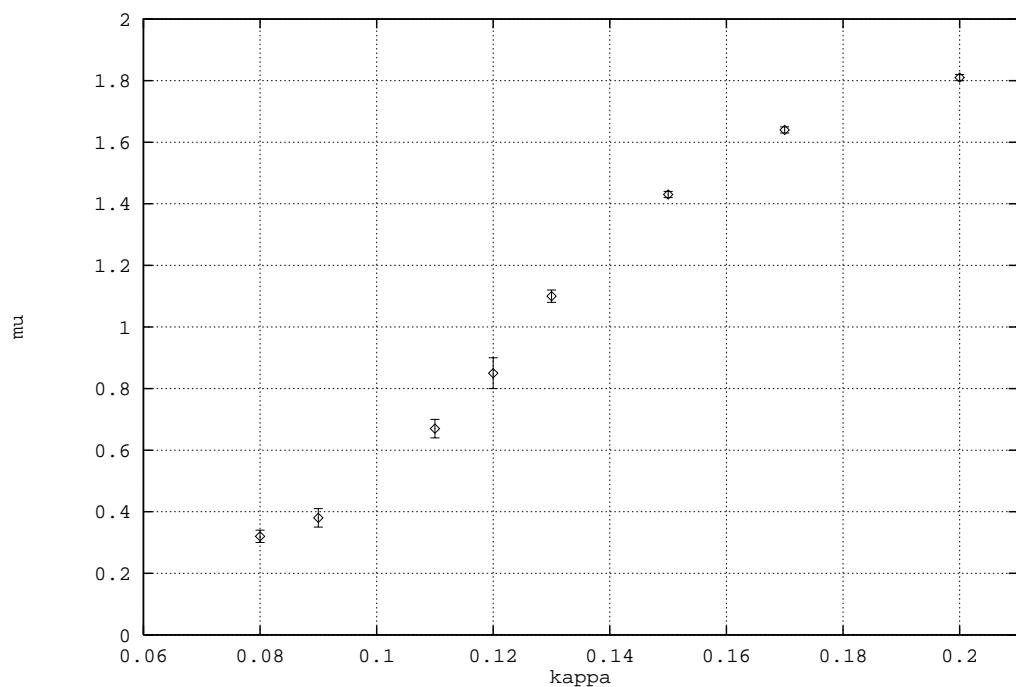


Abbildung 27: Die Fermionmasse $\mu_{R\psi}$ in Abhängigkeit vom skalaren Hoppingparameter κ .

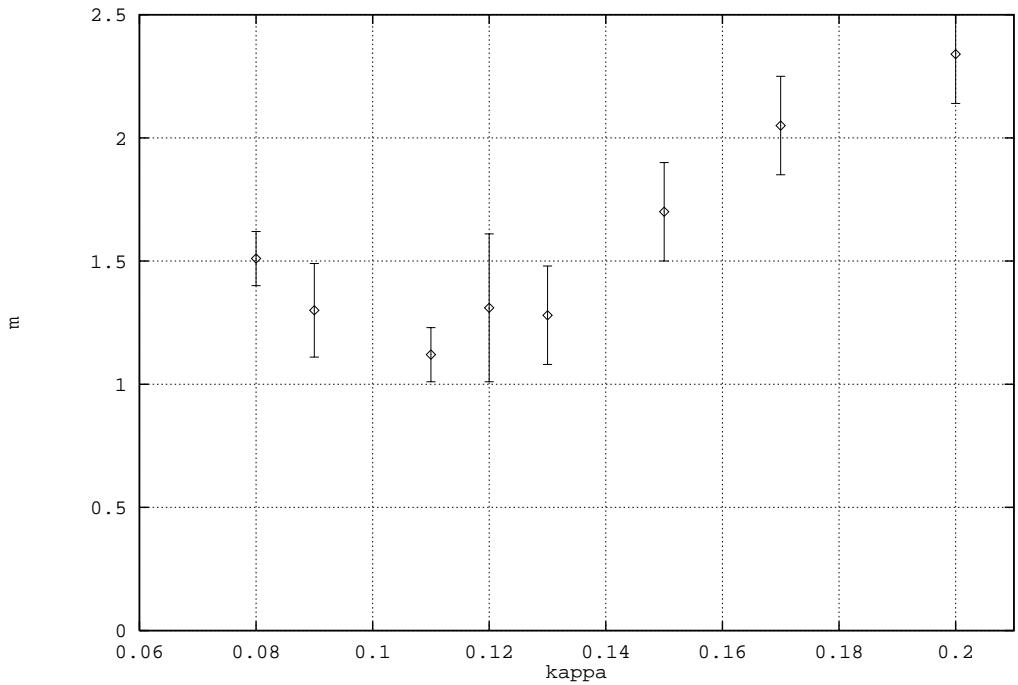


Abbildung 28: Hier ist die skalare Masse $m_{R\sigma}$ gegen κ aufgetragen.

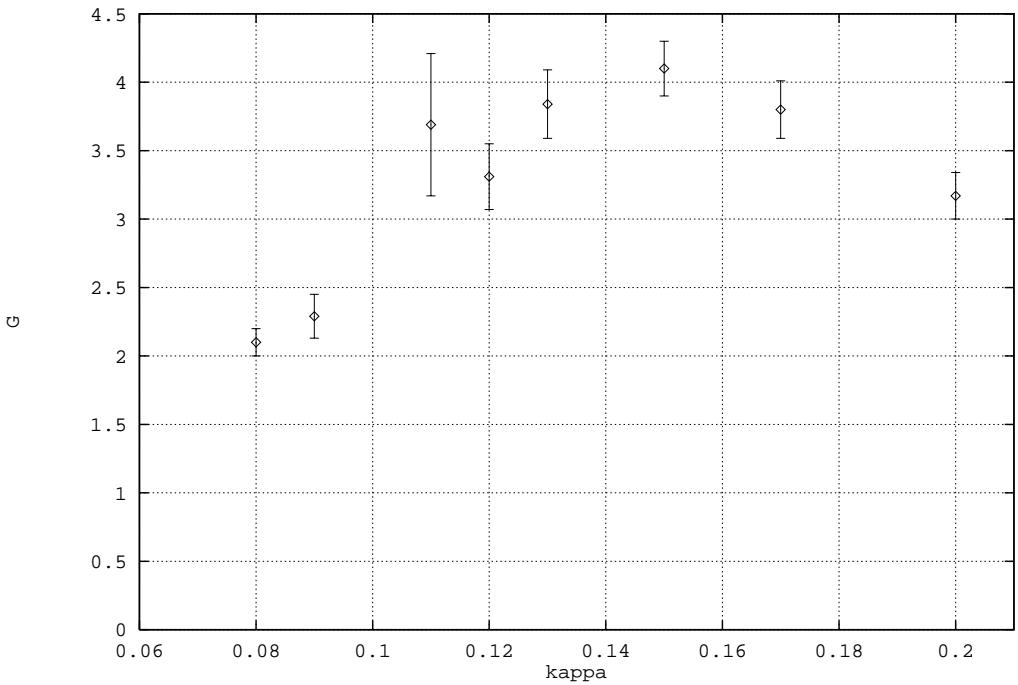


Abbildung 29: In dieser Abbildung sieht man die renormierte Yukawakopplung $G_{R\psi}$ in Abhangigkeit von κ .

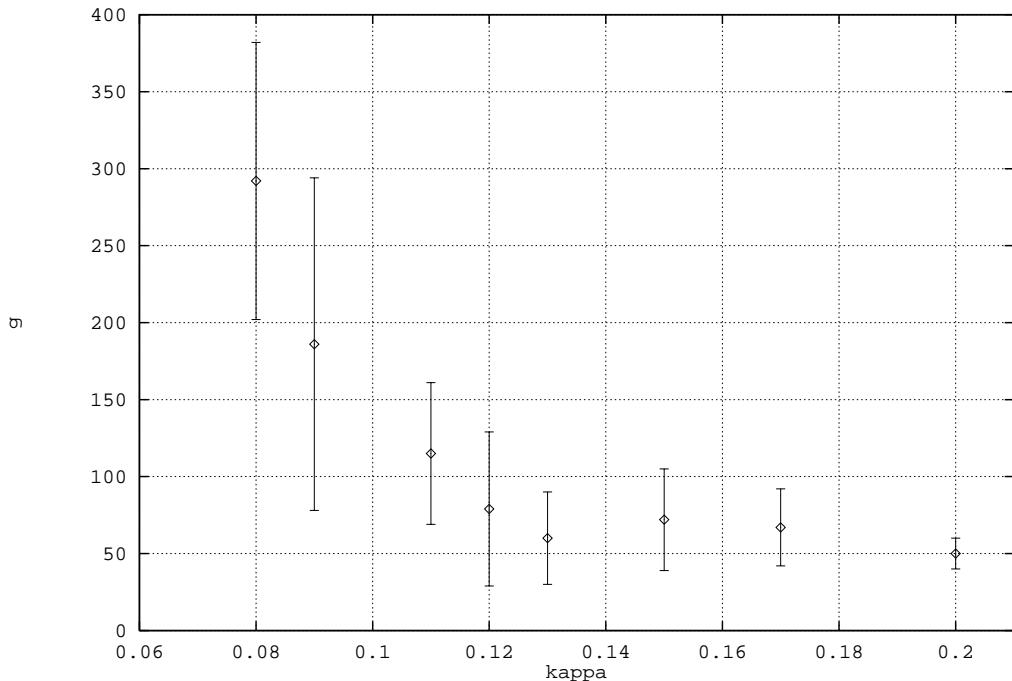


Abbildung 30: Die renormierte Higgskopplung g_R als Funktion von κ .

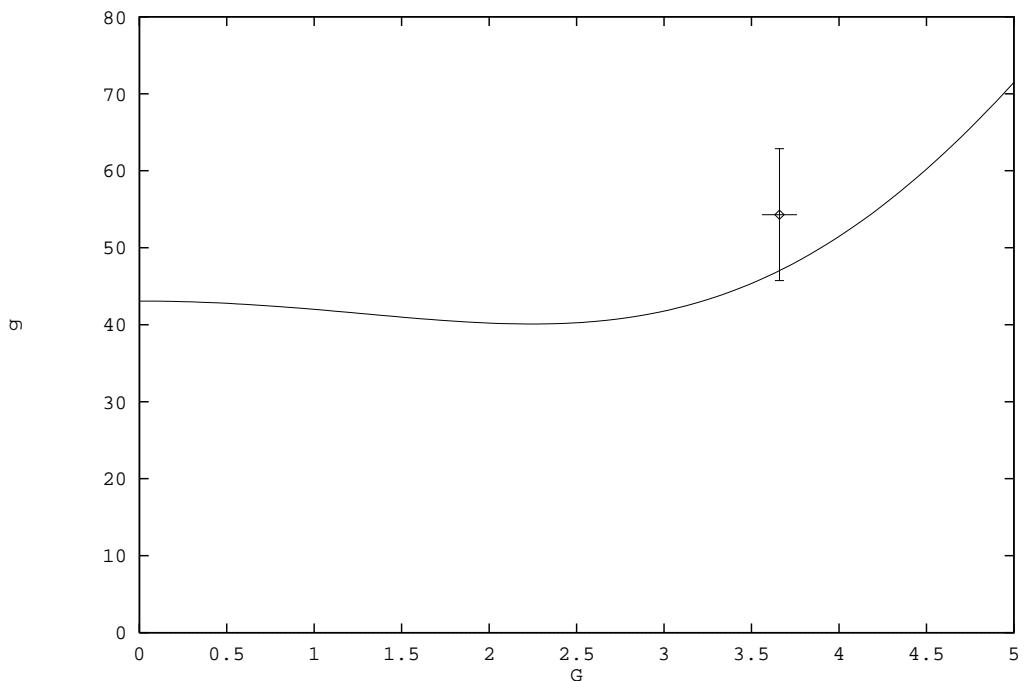


Abbildung 31: Die renormierte Higgskopplung g_R aufgetragen gegen $G_{R\psi}$. Die Kurve zeigt die obere Grenze von g_R aus der Integration der β -Funktion erster Ordnung für ein Skalenverhältnis von $\Lambda/m_{R\sigma} = 3$, was einer Masse von $m_{R\sigma} \approx 1$ in Gittereinheiten entspricht. (Der Wert des Cutoff Λ in Gitterheiten ist π .)

Sämtliche Ergebnisse zeugen von einem Verhalten, das qualitativ mit dem in [32] gefundenen übereinstimmt. Im einzelnen lassen sich die Abbildungen wie folgt interpretieren:

1. Die Magnetisierung in Abbildung 26 zeigt beim Übergang von der FM-Phase ($\kappa > 0.11$) zur PM-Phase ($\kappa < 0.11$) ein stetiges Verhalten. Dies befindet sich im Einklang mit dem erwarteten Phasenübergang zweiter Ordnung.
2. Die Fermionmasse $\mu_{R\psi}$ nimmt mit kleiner werdendem κ monoton ab. Auch dies würde man erwarten, da sie in der PM-Phase wegen $K_{eE} \simeq K_{cr}$ nahezu verschwinden sollte. (Auf unendlichem Gitter, d.h. $K_{eE} = K_{cr}$, sollte sie exakt Null sein.)
In diesem Zusammenhang sei erwähnt, daß die Massen der Doppler von ψ - und χ -Fermion wie in [32] nahezu alle über 1.5 lagen. Die kleinste Masse betrug 1.47.
3. Auch die Higgsmasse zeigt das erwartete Verhalten. Beim Übergang von großen zu kleinen κ -Werten nimmt sie zunächst monoton ab, um in der PM-Phase wieder monoton anzusteigen. Dabei treten die „finite-size“-Effekte sehr deutlich zu Tage, denn auf einem unendlichen Gitter müßte die Higgsmasse am Phasenübergang verschwinden. Hier aber war es nicht einmal möglich, den angestrebten Wert von ungefähr Eins zu erreichen.
Sicherlich sind diese Effekte im Minimum der Higgsmasse am größten, da man sich dort sehr nahe am Phasenübergang befindet. Für eine physikalische Interpretation der Resultate von Gitterrechnungen in der FM-Phase sollte man daher nur Daten verwenden, die in κ -Werten oberhalb dieses Minimums entstanden sind.
4. Die renormierte Yukawakopplung $G_{R\psi}$ in Abhängigkeit von κ zeigt ebenfalls kein außergewöhnliches Verhalten. Im Vergleich zur Higgskopplung g_R variiert sie für die verschiedenen κ -Werte nur wenig.
5. Für die Higgskopplung ist, wie in [32], trotz der großen Fehler, mit sinkenden κ -Werten nach dem Übergang in die PM-Phase ein deutlicher Anstieg zu erkennen, während sie bei einer im Vergleich dazu geringen Variation in der FM-Phase ein Plateau ausbildet.
In den, verglichen mit [32], noch erheblich größeren Fehlern wird erneut die Schwäche des HCLA gegenüber dem HMCA transparent.
6. Sämtliche Rechnungen kulminieren in dem numerisch bestimmten Punkt der letzten Abbildung. Er ergibt sich, wenn man die Plateauwerte von g_R und die dazugehörigen Werte von $G_{R\psi}$ jeweils mittelt, und stellt eine versuchsweise, numerische Abschätzung der oberen Grenze der renormierten Higgskopplung als Funktion der Yukawakopplung dar. Die Übereinstimmung mit der in Abbildung 31 ebenfalls eingezeichneten, störungstheoretischen Abschätzung erster Ordnung ist in Anbetracht der geringen Statistik relativ gut.

Zusammenfassend bleibt festzustellen, daß die obigen Resultate durchaus dafürsprechen, eine ausführlichere Untersuchung der Kopplungsschranken im Higgs-Yukawa-Modell bei $N_f = 1$ mit Hilfe des HCLA anzustellen. Den bisherigen Ergebnissen nach zu urteilen sind bei diesen Studien allerdings keine Überraschungen zu erwarten. Das Verhalten des Higgs-Yukawa-Modells hinsichtlich der physikalisch interessanten Kopplungsschranken scheint bereits durch die Störungsrechnung erster

Ordnung gut beschrieben zu werden. Dies bedeutet insbesondere, daß sich vermutlich auch im Falle einer ungeraden Zahl von Fermionen der Charakter der Theorie bzgl. der Trivialität nicht ändert.

Solche Untersuchungen müssen allerdings neben dem Studium von „finite-size“-Effekten insbesondere eine Extrapolation zu verschwindender Schrittweite enthalten, um den systematischen Fehler der Messungen beurteilen zu können.

Zur Abschätzung der dazu erforderlichen Rechenzeit mögen die folgenden Zahlen dienen:

Die genannten Resultate benötigten etwa 5000 Stunden reine CPU-Zeit auf einem Vektorprozessor der IBM ES/9000-610 des Rechenzentrums in Münster. Dies entspricht einer CPU-Zeit von 500 bis 600 Stunden auf der CRAY Y-MP. Unter gelegentlicher Zuhilfenahme verschiedener IBM RS/6000 Rechner und eines weiteren Vektorprozessors war es möglich, diese Rechnungen in einer Echtzeit von ca. 130 Tagen durchzuführen.

5 Algorithmische Untersuchungen zur Lösung linearer Gleichungssysteme

5.1 Vorbemerkungen

5.1.1 Problemstellung

Der Flaschenhals bei der Verwendung von MC-Algorithmen zur Untersuchung fermionischer Modelle auf dem Gitter ist die Inversion der Fermionmatrix Q bzw. die Berechnung des Ausdrucks $Q^{-1}r$ bei vorgegebenem r und somit die Lösung eines Gleichungssystems $Q\chi = r$. Dies gilt auch für die beiden in dieser Arbeit zum Einsatz gekommenen Algorithmen, den HCLA und den HMCA. Dort tritt obiger Ausdruck jeweils bei der Simulation des fermionischen Anteils mit Hilfe der Verteilung eines Pseudofermionfeldes χ gemäß

$$e^{-\chi^+ Q^+ Q \chi} \quad (194)$$

auf, die durch Lösung des obengenannten Gleichungssystems aus einer Gaußverteilung $e^{-r^+ r}$ zu konstruieren ist. Im HMCA muß eine solche Lösung für jeden „Leapfrog“-Schritt einschließlich des ersten und letzten Halbschrittes jeweils neu gefunden werden. Für den HCLA ist dies pro Update gemäß (178-180) N_B mal erforderlich. In beiden Fällen werden dazu in der Regel über 90 % der gesamten Rechenzeit benötigt. Aus diesem Grunde ist die Suche nach geeigneten Verfahren zur Lösung besagter Gleichungssysteme Gegenstand allgemeiner Bemühungen und wird noch immer intensiv betrieben [50, 51].

Die Leistungsfähigkeit einzelner Verfahren hängt wesentlich vom betrachteten Modell ab. Aber auch innerhalb eines Modells können sich bei verschiedenen Parameterwerten unterschiedliche Vorgehensweisen als vorteilhaft herausstellen. Dieser Vorteil ist nicht immer offensichtlich und kann z.B. auch in einer im Vergleich zu anderen Algorithmen größeren Flexibilität liegen, die es erlaubt, das Problem geeignet umzuformulieren, so daß ein für die ursprüngliche Problemstellung weniger günstiges Verfahren daraufhin vorzuziehen ist. Um einen numerischen Vergleich verschiedener Methoden in den zu untersuchenden Punkten des Parameterraumes kommt man demnach nicht herum.

In diesem Kapitel werden daher einige Inversionsalgorithmen ausführlich getestet und gegenübergestellt. Allen betrachteten Verfahren gemeinsam ist der Versuch, ein Gleichungssystem auf iterativem Wege zu lösen. Sie stehen damit im Gegensatz zu den sogenannten „direkten“ Methoden, die ein solches System durch geeignete Umformung bzw. Zerlegung der dadurch definierten Matrix explizit lösen. Ein Beispiel für ein direktes Verfahren wäre die Cholesky-Methode:

Sei A symmetrisch und positiv definit. Dann läßt sich eine Zerlegung $A = R^T R$ angeben, wobei R eine obere Dreiecksmatrix bezeichnet. Nach Konstruktion dieser Zerlegung werden anstelle von $Ax = b$ dann $R^T y = b$ gefolgt von $Rx = y$ gelöst. Aufgrund der Dreiecksgestalt von R ist dies sukzessive möglich.

Der Verzicht auf ein Studium derartiger Methoden liegt u.a. in der beschränkten Speicherkapazität der genutzten Computer begründet, die deren Verwendung von vorn herein verbietet:

Die Fermionmatrix oder andere Matrizen, die aus der Diskretisierung von Differentialgleichungen hervorgehen, sind in der Regel dünn besetzt, d.h. sie besitzen nur einen kleinen Anteil nichtverschwindender Einträge, die sich ohne Probleme abspeichern lassen. Die Umformung solcher Matrizen im Rahmen direkter Inversionsmethoden

führt aber fast immer auf dicht besetzte Matrizen, für die der verfügbare Speicher nicht ausreicht. (In der Minimalversion des hier untersuchten Higgs-Yukawa-Modells, d.h. dem U(1)-Modell auf einem $4^3 \cdot 8$ -Gitter beträgt der Speicherbedarf einer vollen Matrix $(4^3 \cdot 8^2)^2 \cdot 16$ Byte = 32 MWord)

Die iterativen Verfahren werden unter dem Begriff „Relaxationsmethoden“ zusammengefaßt. Bei ihrer Verwendung tritt die Matrix des Gleichungssystems nur innerhalb von Produkten mit Vektoren auf und ist in dieser Form abzuspeichern. Der Speicherbedarf wächst in unserem Falle daher nur noch linear mit der Größe des betrachteten Systems und nicht mehr, wie bei den direkten Methoden, quadratisch. Man muß dann allerdings eine Unterroutine zur Verfügung stellen, welche die Matrixmultiplikation durchführt, d.h. bei Eingabe eines Vektors x den Vektor Ax zurückgibt, ohne daß dazu die Speicherung aller Matrixelemente inklusive der Nullinträge erforderlich ist.

Bei „gutwilligen“ Matrizen sind die iterativen Verfahren i.a. auch schneller und liefern deshalb einen weiteren Grund, sich mit einer approximativen Lösung zufriedenzugeben.

5.1.2 Relaxationsalgorithmen

Die Grundidee der Relaxationsalgorithmen besteht in der Lösung eines Gleichungssystems durch Minimierung einer geeigneten Funktion. Vor der Ableitung einiger Verfahren aus diesem Prinzip soll sie im folgenden kurz motiviert werden. Zu dem Zweck reicht es aus, sich auf ein reelles Gleichungssystem

$$Ax = b \quad (195)$$

zu beschränken. Im Falle symmetrischer und positiv definiter Matrix A läßt sich eine quadratische Funktion finden, deren Minimum dieses System löst. Sie lautet:

$$f(x) = \frac{1}{2} ((Ax - b), A^{-1}(Ax - b)) . \quad (196)$$

Denn bezeichnet $\bar{x} = A^{-1}b$ die Lösung von (195), so gilt für symmetrisches A :

$$f(x) = \frac{1}{2} ((x - \bar{x}), A(x - \bar{x})) . \quad (197)$$

Ist A zudem positiv definit, so ist dieser Ausdruck größer oder gleich Null und nimmt sein Minimum genau in $x = \bar{x}$ an.

Bei indefiniten Problemen ist (Av, v) nicht unbedingt positiv und damit die Lösung des Gleichungssystems zwar stationärer Punkt von f (Minimum im zu positiven Eigenwerten von A gehörenden Raum und Maximum in dessen Komplement), aber kein Extremum mehr.

In diesem Falle wäre $g(x) = |b - Ax|^2$ eine geeignete Funktion. Wie man leicht sieht, läuft ihre Minimierung jedoch auf die Lösung der Gleichung $A^T Ax = A^T b$ mit positiv definitem $A^T A$ hinaus. Man versucht allerdings ein solches Vorgehen zu vermeiden, da sich, abgesehen von dem doppelten Aufwand pro Iteration, $A^T A$ in der Regel schlechter invertieren läßt als A selbst. In jedem Falle läßt sich so die Lösung eines weder symmetrischen noch definiten Problems auf die eines symmetrischen, positiv definiten zurückführen.

Ausgehend von einem ersten Versuchsvektor x_0 wählt man nun eine Relaxationsrichtung p_0 und minimiert $f(x)$ auf der dadurch definierten Geraden, d.h. man wählt α_0 in $x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0$ so, daß $f(x_1)$ auf diesem Unterraum ein Minimum annimmt.

Dadurch ist der Parameter α_0 eindeutig bestimmt. Bezeichnet r_0 den Restvektor des Gleichungssystems bzgl. x_0 , d.h. $r_0 = b - Ax_0 = -\nabla f(x_0)$, so gilt:

$$\begin{aligned} f(x_0 + \alpha_0 p_0) &= f(x_0) + \frac{\alpha_0^2}{2}(Ap_0, p_0) - \alpha_0(r_0, p_0), \\ \frac{d}{d\alpha_0}f(x_0 + \alpha_0 p_0) &= \alpha_0(Ap_0, p_0) - (r_0, p_0) = 0 \quad \Rightarrow \alpha_0 = \frac{(r_0, p_0)}{(p_0, Ap_0)}, \\ \frac{d^2}{d\alpha_0^2}f(x_0 + \alpha_0 p_0) &= (Ap_0, p_0) > 0 \quad \Rightarrow \text{Minimum}. \end{aligned} \quad (198)$$

Die Relaxationsrichtung p_0 ist dabei beliebig, darf aber aus ersichtlichen Gründen nicht orthogonal zu r_0 sein. x_1 bildet nun den Startpunkt einer weiteren Minimierung entlang einer Richtung p_1 , usw.

Anstatt die Funktion f bei jedem einzelnen Schritt zu minimieren, genügt es indes auch, lediglich für eine Verkleinerung ihres Wertes zu sorgen, d.h.:

$$f(x_i + \alpha_i p_i) - f(x_i) = \frac{\alpha_i^2}{2}(Ap_i, p_i) - \alpha_i(r_i, p_i) < 0. \quad (199)$$

Zu diesem Zweck ist α_i einzuschränken auf:

$$\alpha_i = \omega \frac{(r_i, p_i)}{(p_i, Ap_i)} \quad \text{mit} \quad 0 < \omega < 2. \quad (200)$$

Für $\omega < 1$ spricht man von Unterrelaxation, für $\omega > 1$ von Überrelaxation. Der bisher betrachtete Fall $\omega = 1$ wird als vollständige Relaxation bezeichnet. Er ist bei Betrachtung jedes einzelnen Iterationsschrittes optimal, bei der Durchführung einer großen Zahl von Schritten kann jedoch möglicherweise die unvollständige Relaxation zu schnellerer Konvergenz führen. Für wenige Spezialfälle ist ein optimales ω sogar berechenbar [52].

Die einzelnen Inversionsalgorithmen sind Varianten des soeben dargelegten, allgemeinen Verfahrens, die sich in der Wahl der Relaxationsrichtung p unterscheiden. Dabei hat man nur in bestimmten Fällen die Freiheit, einen von Eins verschiedenen Relaxationsparameter ω zu verwenden.

Die Methoden, welche zur Bestimmung der Relaxationsrichtung p Informationen aus dem momentanen oder sogar früheren Gradienten von $f(x)$ verwenden, faßt man nochmals unter dem Namen „Gradientenverfahren“ zusammen. Das konjugierte Gradientenverfahren (CG) ist im Gegensatz zur Methode des minimalen Restes (MR) in diese Klasse einzuordnen.

Der dritte, in diesem Kapitel ausführlicher untersuchte Algorithmus, die bikonjugierte Gradientenmethode (BCG), gehört zu keiner der beiden Kategorien, da es dort i.a. keine einfache Verbindung zwischen der Lösung eines Gleichungssystems und der Minimierung einer Funktion gibt.

5.2 Vorstellung verschiedener Inversionsverfahren

5.2.1 Die Methode des steilsten Abstiegs (SD)

Zur weiteren Motivation obengenannter Algorithmen sei zunächst das wohl augenscheinlichste Verfahren, die Methode des steilsten Abstiegs (SD), erläutert. Dieses

Gradientenverfahren wählt den negativen Gradienten $-\nabla f(x_i)$ als Relaxationsrichtung p_i und erreicht damit lokal die größtmögliche Minimierung von f , denn

$$f(x + \alpha p) - f(x) = -\frac{1}{2} \frac{(r, p)^2}{(Ap, p)} < 0 \quad (201)$$

ist dann minimal. Eine geometrische Interpretation des SD-Algorithmus verdeutlicht seine Schwächen allerdings schnell:

Der $(i+1)$ -te Iterationsschritt besteht darin, in einer zur Niveaumenge $f(x) = f(x_i)$ orthogonalen Richtung $p_i = -\nabla f(x_i)$ fortzuschreiten, bis man tangential auf eine andere Niveaumenge von f trifft. Dies definiert den Punkt x_{i+1} . Daher sind aufeinanderfolgende Relaxationsrichtungen orthogonal.

Die Niveaumengen von f beschreiben Hyperellipsoide mit gemeinsamem Zentrum in $\bar{x} = A^{-1}b$. Die Eigenwerte $\lambda(A)$ von A sind proportional zur Länge der Halbachsen dieser Ellipsoide. Beschränkt man sich zur besseren Veranschaulichung auf ein Gleichungssystem mit zwei Unbekannten, so erhält man im Falle eines breiten Spektrums, d.h. $\lambda_{max}(A) = \lambda_1(A) \gg \lambda_2(A) = \lambda_{min}(A)$, konzentrische langgestreckte Ellipsen als Niveaulinien. Beginnt man dort die Suche nach \bar{x} in einem ungünstigen Startpunkt (der dortige Gradient schließt mit der langen Halbachse einen Winkel von ca. 45 Grad ein), so nähert man sich dem Zentrum nur sehr langsam, indem man auf einem rechtwinkligen Polygonzug, der bei jeder Iteration die lange Halbachse einmal überquert, fortschreitet. Dieser Vorgang dauert um so länger, je langgestreckter die Ellipse, je breiter also das Spektrum ist.

Denselben Sachverhalt für beliebige Dimensionen beschreibt die nachstehende, leicht einzusehende Abschätzung des Konvergenzverhaltens [53]:

$$f(x_n) \leq \left(1 - \frac{\lambda_{min}(A)}{\lambda_{max}(A)}\right)^n f(x_0). \quad (202)$$

Der SD-Algorithmus besitzt folglich das Konvergenzverhalten einer geometrischen Reihe. Je schmäler das Spektrum von A ist, desto besser die Konvergenz. Im Extremfall $A = c\mathbb{I}$ entarten die Ellipsen zu Kreisen. Dann ist anhand der geometrischen Überlegungen klar, daß der Kreismittelpunkt bereits nach einem Schritt erreicht wird. Auch (202) führt zu diesem Resultat.

5.2.2 Die Methode des konjugierten Gradienten (CG)

Vollzieht man die erste Iteration weiterhin auf obengenannte Weise, führt sie auf den Punkt $x_1; p_0$ bezeichnet dann die Richtung der Tangenten durch x_1 an die durch $f(x) = f(x_1)$ definierte Ellipse. Ausgehend vom Randpunkt x_1 lässt sich das Zentrum der Ellipse bereits nach einem weiteren Schritt erreichen, wenn man entlang der zur Tangenten p_0 bzgl. der Ellipse konjugierten Richtung p_1 fortschreitet. Sie ist gegeben durch $(p_1, Ap_0) = 0$.

Dies definiert die Vorgehensweise im CG-Verfahren und im konjugierten Residuenverfahren (CR) in zwei Dimensionen, die damit in zwei Schritten konvergiert sind. Die Verallgemeinerung für beliebige Dimensionen besteht darin, aufeinanderfolgende Relaxationsrichtungen A -konjugiert zueinander zu wählen. (Für beide Methoden hat das die paarweise A -Konjugiertheit der p_i zur Folge.)

Es zeigt sich analytisch, daß bei dieser Wahl der Suchrichtungen ein N -dimensionales Minimierungsproblem zu N eindimensionalen Problemen entkoppelt. Denn im vorliegenden Fall gilt:

$$\min_{x \in x_0 + \langle p_0, \dots, p_k \rangle} f(x) = \min_{\alpha_k, \dots, \alpha_1} f(x_0 + \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i p_i + \alpha_k p_k)$$

$$\begin{aligned}
&= \min_{\alpha_k, \dots, \alpha_1} \left[f(x_0 + \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i p_i) + \alpha_k (x_0 + \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i p_i, A p_k) + \frac{\alpha_k^2}{2} (p_k, A p_k) - \alpha_k (p_k, b) \right] \\
&= \min_{\alpha_{k-1}, \dots, \alpha_1} f(x_0 + \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i p_i) + \min_{\alpha_k} \left[\alpha_k (x_0, A p_k) + \frac{\alpha_k^2}{2} (p_k, A p_k) - \alpha_k (p_k, b) \right] \\
&= \min_{\alpha_{k-1}, \dots, \alpha_1} f(x_0 + \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i p_i) + \min_{\alpha_k} \left[-\alpha_k (r_k, p_k) + \frac{\alpha_k^2}{2} (p_k, A p_k) \right]. \quad (203)
\end{aligned}$$

Wie man sieht, entfällt der störende, die Minimierung bzgl. α_k und $\alpha_{i < k}$ koppelnde Mischterm gerade dann, wenn die p_i paarweise A -konjugiert zueinander sind. Das letzte Gleichheitszeichen beruht darauf, daß $r_k \equiv b - Ax_k \in r_0 + \langle Ap_0, \dots, Ap_{k-1} \rangle$ und folglich $(r_0, p_k) = (r_k, p_k)$ ist.

Ist das Minimierungsproblem bzgl. des kleineren Unterraumes $\langle p_0, \dots, p_{k-1} \rangle$, d.h. hinsichtlich der $\alpha_{i < k}$ gelöst, wird die Funktion f mit der Wahl von α_k gemäß (198) in $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$ bzgl. des um eine Dimension größeren Unterraumes $\langle p_0, \dots, p_k \rangle$ minimiert. Startend mit dem eindimensionalen Unterraum $\langle p_0 \rangle$ ergibt sich deshalb die Lösung des Minimierungsproblems, indem man sukzessive in A -konjugierten Richtungen fortschreitet und die Schrittweite α nach (198) bestimmt.

Im CG-Verfahren werden die p_i so gewählt, daß sie einerseits die Bedingung der A -Konjugiertheit

$$(Ap_i, p_j) = 0 \quad \forall i < j \quad (204)$$

erfüllen, andererseits dabei so nahe wie möglich am jeweiligen Gradienten der Funktion f liegen, damit die Konvergenz möglichst gut ist. D.h. für $i > 0$ ist p_i die Projektion von $-\nabla f(x_i)$ auf das orthogonale Komplement zu $\langle Ap_0, \dots, Ap_{i-1} \rangle$. Das eigentliche Problem besteht nun in der effizienten Berechnung der Relaxationsrichtungen. Es zeigt sich [53], daß man diesen Vektor als Linearkombination von r_i und p_{i-1} schreiben kann. Mit der Freiheit der Normierung und der Bedingung (204) gilt:

$$p_i = r_i + \beta_i p_{i-1}, \quad \text{mit} \quad \beta_i = -\frac{(p_{i-1}, Ar_i)}{(p_{i-1}, Ap_{i-1})}. \quad (205)$$

Unter diesen Voraussetzungen kann gezeigt werden (Anhang G), daß die Restvektoren $r_i = b - Ax_i$ zueinander orthogonal sind. Aus diesem Grund führt der CG-Algorithmus analytisch nach maximal N Schritten zum Erfolg. Jedoch gilt ebendies aufgrund von Rundungsfehlern leider nicht für numerische Rechnungen.

Dort ist deshalb ein Abbruchkriterium einzuführen. Da die Größe des Restvektors wesentlich von der Inhomogenität b abhängt, fordert man:

$$\frac{|r|^2}{|b|^2} \leq \delta. \quad (206)$$

Sobald ein $r = r_i$ diese Bedingung erfüllt, wird x_i als Lösung akzeptiert.

Nach weiteren vereinfachenden Umformungen lautet der Algorithmus unter Berücksichtigung der vorangegangenen Erläuterungen schließlich wie folgt:

$$\begin{aligned}
\text{Wähle } x_0 &\Rightarrow r_0 = b - Ax_0, p_0 = r_0 \\
\text{Solange } |r_i|^2 &> \delta|b|^2 \text{ wiederhole die Prozedur:} \\
\alpha_i &= \frac{(p_i, r_i)}{(p_i, Ap_i)} = \frac{|r_i|^2}{(p_i, Ap_i)} \\
x_{i+1} &= x_i + \alpha_i p_i \\
r_{i+1} &= r_i - \alpha_i Ap_i
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\beta_{i+1} &= -\frac{(p_i, Ar_{i+1})}{(p_i, Ap_i)} = \frac{|r_{i+1}|^2}{|r_i|^2} \\ p_{i+1} &= r_{i+1} + \beta_{i+1} p_i.\end{aligned}\quad (207)$$

Im Rahmen einer solchen Prozedur ist das CG-Verfahren nicht mehr als Methode zur exakten Lösung eines Gleichungssystems zu verstehen, sondern als ein iterativer Algorithmus zur approximativen Lösung, dessen Iterationszahl sich nicht länger nach der Dimension des Problems richtet. Der Maßstab ist vielmehr die Güte der Approximation. Infolgedessen wird jetzt das Konvergenzverhalten interessant. Man erhält [54]

$$|r_k|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\lambda_{\max}(A)} - \sqrt{\lambda_{\min}(A)}}{\sqrt{\lambda_{\max}(A)} + \sqrt{\lambda_{\min}(A)}} \right)^k |r_0|_A, \quad (208)$$

wenn $|v|_A \equiv \sqrt{(v, A^{-1}v)}$ ist und findet somit das Konvergenzverhalten einer geometrischen Reihe.

5.2.3 Die Methode des konjugierten Restes (CR) und verwandte

Für die Wahl der p_i gibt es trotz der Bedingung der A -Konjugiertheit (204) noch weitere Möglichkeiten; eine davon nutzt die CR-Methode, bei der anstelle von $f(x)$ die Funktion $g(x) = |b - Ax|^2$ minimiert wird. Wie bereits erwähnt, entspricht dies der Lösung des Gleichungssystems $A^T A x = A^T b$ mit nichtsingulärem A . $A^T A$ ist dann positiv definit und symmetrisch, d.h. für den CG-Algorithmus hätte man in (207) einfach A durch $A^T A$ und b durch $A^T b$ zu ersetzen.

Für den Fall positiv definiter, symmetrischer Matrix A ergibt sich das CR-Verfahren, wenn man neben dieser Ersetzung die Relaxationsrichtungen nicht als Projektionen der Gradienten $-\nabla g(x) = A^T(b - Ax)$, sondern der Restvektoren $r = b - Ax$ auf die geeigneten Unterräume wählt. Daraus resultiert die Prozedur:

$$\begin{aligned}&\text{Wähle } x_0 \Rightarrow r_0 = b - Ax_0, p_0 = r_0 \\ &\text{Solange } |r_i|^2 > \delta |b|^2, \text{ wiederhole die Prozedur:} \\ &\alpha_i = \frac{(Ap_i, r_i)}{(Ap_i, Ap_i)} \\ &x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i \\ &r_{i+1} = r_i - \alpha_i Ap_i \\ &\beta_{i+1} = -\frac{(Ar_{i+1}, Ap_i)}{(Ap_i, Ap_i)} \\ &p_{i+1} = r_{i+1} + \beta_{i+1} p_i.\end{aligned}\quad (209)$$

Die so konstruierten Relaxationsrichtungen sind $A^T A$ -konjugiert zueinander, d.h. $(Ap_i, Ap_j) = 0 \forall i \neq j$. Auch diese Methode garantiert im analytischen Fall nach höchstens N Schritten die Lösung des Gleichungssystems $Ax = b$. Eine nähere Untersuchung findet sich in [51, 55]. Das soeben beschriebene Verfahren lässt eine Verallgemeinerung auf den Fall unsymmetrischen A 's zu. Zu diesem Zweck wählt der generalisierte CR-Algorithmus (GCR) anstelle von (209) die nachstehenden Relaxationsrichtungen:

$$\begin{aligned}\beta_{j+1}^{(i+1)} &= -\frac{(Ar_{i+1}, Ap_j)}{(Ap_j, Ap_j)} \quad j \leq i \\ p_{i+1} &= r_{i+1} + \sum_{j=0}^i \beta_{j+1}^{(i+1)} p_j.\end{aligned}\quad (210)$$

Vorangegangene Wahl bürgt für die Konjugiertheit der Suchrichtungen p_i und die Konvergenz nach höchstens N Schritten auch für den Fall nichtsymmetrischer Gleichungssysteme. Der Nachteil der Methode liegt auf der Hand. Zur Berechnung der i -ten Relaxationsrichtung benötigt man alle vorherigen, mit der Konsequenz eines nicht vertretbaren Aufwandes an Speicher und Rechenzeit. Eine deshalb vorgeschlagene Modifikation des GCR-Verfahrens zieht zur Berechnung der aktuellen Suchrichtung nur die k jüngsten p_i heran, d.h. die Summe in (210) startet erst in $j = i+1-k$, so daß nur k Vektoren abzuspeichern sind. Damit verzichtet man natürlich auf Konjugiertheit der Suchrichtungen ebenso wie auf analytische Konvergenz des Verfahrens nach maximal N Schritten. Die soeben dargestellte Methode trägt den Namen Orthomin(k). Der häufig verwendete Spezialfall $k = 0$, d.h. $p_i = r_i$, wird in der Literatur üblicherweise als Methode des minimalen Restes (MR) bezeichnet. Letzterer ist der einzige, in dieser Arbeit ausführlicher untersuchte Algorithmus, der es aufgrund des Verzichts auf die Konjugiertheit der p_i erlaubt, einen von Eins verschiedenen Relaxationsparameter ω einzuführen.

Alle diese Verfahren lassen sich problemlos auf die Lösung von Gleichungssystemen im Komplexen übertragen. Darauf soll an dieser Stelle allerdings verzichtet werden. Stattdessen wird im nächsten Abschnitt der BCG-Algorithmus im Komplexen formuliert und der Zusammenhang mit den voranstehenden Methoden erläutert. Deren Funktionsweise in \mathbb{C} ergibt sich daraus unmittelbar. Auch der Beweis ihrer analytischen Konvergenz in \mathbb{C} läßt sich leicht aus dem Beweis für das BCG-Verfahren (Anhang G) gewinnen.

5.2.4 Die Methode des bikonjugierten Gradienten (BCG)

Zu den bisher vorgestellten Verfahren ist zu sagen, daß für unsymmetrische Probleme mit dem GCR-Algorithmus zwar ein analytisch konvergentes Verfahren vorliegt, es aber zuviel Speicherplatz erfordert. Dahingegen benötigen Orthomin und MR-Methode zwar weniger Speicher, sind jedoch analytisch nicht zwingend konvergent. Nun wäre die Lösung eines unsymmetrischen Problems auch durch einen Umweg über die Gleichung $A^T A x = A^T b$ mit Hilfe des CG-Algorithmus möglich. In der Regel ist aber die Matrix $A^T A$ iterativ schlechter zu invertieren als A selbst, da $\lambda_{\min}(A^T A)/\lambda_{\max}(A^T A) < \lambda_{\min}(A)/\lambda_{\max}(A)$. Zudem erlaubt dieses erweiterte Problem i.a. keine so flexible Handhabung hinsichtlich vereinfachender Umformungen (siehe nächsten Abschnitt).

Einen Ausweg bietet der BCG-Algorithmus [56]. Von Lanczos ursprünglich zur Triagonalisierung unsymmetrischer Matrizen entwickelt [57], ist er das universellste der drei in dieser Arbeit betrachteten Inversionsverfahren, umfaßt die CG- und MR-Methode als Spezialfälle und vereinigt deren Vorteile in sich. Da die Behandlung unsymmetrischer Matrizen eine Verknüpfung mit dem Minimierungsproblem quadratischer Funktionen und damit eine Veranschaulichung ohnehin verhindert, wird der BCG-Algorithmus sofort im Komplexen definiert.

Für eine invertierbare, aber nicht unbedingt hermitesche oder positiv definite Matrix A ist die Vorgehensweise wie folgt:

$$\begin{aligned} \text{Wähle } x_0 &\Rightarrow r_0 = b - Ax_0, \bar{r}_0, p_0 = r_0, \bar{p}_0 = \bar{r}_0 \\ \text{Solange } |r_i|^2 &> \delta|b|^2, \text{ wiederhole die Prozedur:} \\ \alpha_i &= \frac{(\bar{r}_i, r_i)}{(\bar{p}_i, A p_i)} = \frac{(\bar{p}_i, r_i)}{(\bar{p}_i, A p_i)} \\ x_{i+1} &= x_i + \alpha_i p_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
r_{i+1} &= r_i - \alpha_i A p_i \\
\bar{r}_{i+1} &= \bar{r}_i - \alpha_i^* A^+ \bar{p}_i \\
\beta_{i+1} &= \frac{(\bar{r}_{i+1}, r_{i+1})}{(\bar{r}_i, r_i)} = -\frac{(\bar{r}_{i+1}, A p_i)}{(\bar{p}_i, A p_i)} \\
p_{i+1} &= r_{i+1} + \beta_{i+1} p_i \\
\bar{p}_{i+1} &= \bar{r}_{i+1} + \beta_{i+1}^* \bar{p}_i .
\end{aligned} \tag{211}$$

Das Skalarprodukt im Komplexen folgt der üblichen Definition $(a, b) = \sum_i a_i^* b_i$. Die jeweils letzten Ausdrücke von α_i, β_{i+1} in (211) lassen sich aus den ersten unter Verwendung der Beziehungen

$$\begin{aligned}
(\bar{r}_i, r_j) &= (r_i, \bar{r}_j) = 0 \quad \forall j < i , \\
(\bar{p}_i, A p_j) &= (A p_i, \bar{p}_j) = 0 \quad \forall j < i
\end{aligned} \tag{212}$$

herleiten. Mit deren Hilfe gelingt es auch, vorausgesetzt der gerade beschriebene Algorithmus bricht nicht aufgrund verschwindender Nenner in (211) zusammen, zu zeigen, daß die Restvektoren r_i linear unabhängig voneinander sind. Die analytische Konvergenz nach maximal N Iterationen ist daher sichergestellt. (Bei der Verwendung des BCG-Verfahrens in dieser Arbeit trat der Fall eines verschwindenden Nenners nie auf, der Algorithmus war stabil.) Der Beweis für die lineare Unabhängigkeit wie auch für (212) findet sich im Anhang G.

Der Zusammenhang mit einigen obengenannten Verfahren für hermitesche Matrizen läßt sich einfach herstellen. Der Übergang zum CG-Verfahren geschieht durch die Wahl $\bar{r}_1 = r_1$. Ein Blick auf die Prozedur (211) zeigt, daß dann für hermitesch A die Beziehungen $\bar{r}_i = r_i$ und $\bar{p}_i = p_i$ für alle i Gültigkeit besitzen. Die Berechnung der Größen \bar{r}_i und \bar{p}_i ist somit redundant. Unterläßt man diese, so ergibt sich gerade die Prozedur (207), allerdings nun mit komplexem Skalarprodukt. Es fällt auf, daß α_i und β_{i+1} reell bleiben; daher gilt die Konvergenzabschätzung aus (208) mit komplexem Skalarprodukt auch in \mathbb{C} .

Die Funktion, deren Minimierung die Lösung des Gleichungssystems entspricht, ist durch die Fortsetzung von $f(x)$ aus (196) ins Komplexe gegeben.

Zur CR-Methode gelangt man, wenn $\bar{r}_1 = Ar_1$ gesetzt wird. Auch hier ist offensichtlich, daß dann für hermitesch A die Relationen $\bar{r}_i = Ar_i$ und $\bar{p}_i = Ap_i$ für alle i gelten müssen. Nach Entfernung der überflüssigen Größen \bar{r}_i, \bar{p}_i aus der Prozedur (211), folgt das CR-Verfahren mit komplexem Skalarprodukt in Anlehnung an (209). Die minimierte Funktion lautet $g(z) = |b - Az|^2$ mit $z \in \mathbb{C}$.

5.2.5 Die Methode des minimalen Restes (MR)

Über die Verallgemeinerung des CR-Verfahrens ergibt sich analog zum reellen Fall die MR-Methode. Da sie in dieser Arbeit ausführlich getestet und in den numerischen Rechnungen verwendet wurde, sei sie an dieser Stelle nochmals explizit aufgegriffen. Die Prozedur lautet:

$$\begin{aligned}
\text{Wähle } x_0 &\Rightarrow r_0 = b - Ax_0, \\
\text{Solange } |r_i|^2 &> \delta |b|^2, \text{ wiederhole die Prozedur:} \\
\alpha_i &= \frac{(Ar_i, r_i)}{(Ar_i, Ar_i)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_{i+1} &= x_i + \alpha_i r_i \\
r_{i+1} &= r_i - \alpha_i A r_i ,
\end{aligned} \tag{213}$$

Daraus resultiert das folgende Konvergenzverhalten:

$$\frac{|r_{i+1}|^2}{|r_i|^2} = 1 - \frac{|(Ar_i, r_i)|^2}{|Ar_i|^2 |r_i|^2} . \tag{214}$$

Bereits an (214) läßt sich ablesen, daß das MR-Verfahren niemals divergiert, der Betrag des Restvektors kann allenfalls stagnieren. Zerlegt man A in hermiteschen und antihermiteschen Anteil, d.h. $A = A_h + A_a$ mit $A_h = \frac{1}{2}(A + A^+)$ und $A_a = \frac{1}{2}(A - A^+)$, so liefert die Abschätzung den Ausdruck

$$|r_n|^2 \leq \left(1 - \frac{\lambda_{min}^2(A_h) + \lambda_{min}^2(A_a)}{\lambda_{max}(A^+ A)}\right)^n |r_0|^2 , \tag{215}$$

wenn sowohl A_h als auch A_a ein definites Spektrum besitzen. Ist dies für eine der beiden Matrizen nicht der Fall, muß in (215) das Quadrat ihres absolut kleinsten Eigenwertes durch Null ersetzt werden. Sind beide Matrizen indefinit, ist daher eine Abschätzung im Sinne der Konvergenz einer geometrischen Reihe nicht möglich. Wie bereits erwähnt, kann das MR-Verfahren auch analytisch die Konvergenz nach einer maximalen Zahl von Iterationen nicht garantieren.

Sämtliche Konvergenzabschätzungen (202,208,215) zeigen ein qualitativ gleiches Verhalten. In allen Fällen hängt die Konvergenzgeschwindigkeit auf ähnliche Weise von der Breite des Spektrums ab. Je kleiner diese ist, je näher also in diesem Sinne die zu invertierende Matrix der Einheitsmatrix mit der Spektralbreite Null kommt, desto besser die Konvergenz. Der absolute Wert nach n Iterationen und damit die Nähe von x_n zur Lösung wird aber auch, wie jeweils in den letzten Faktoren der Abschätzungen zum Ausdruck kommt, entscheidend durch die Wahl des Startpunktes x_0 bestimmt. Dieser Startvektor darf beliebige Werte annehmen.

Hat man sich einmal für eine Vorgehensweise entschieden, ist in diesen beiden Abhängigkeiten noch immer ein Spielraum für weitere Optimierungen gegeben. Im Lichte der obigen Feststellungen gibt es zwei prinzipielle Möglichkeiten:

1. Die zu invertierende Matrix A wird noch vor Anwendung des Algorithmus auf eine Form \tilde{A} gebracht, die im oben beschriebenen Sinne der Einheitsmatrix näherkommt. D.h. man transformiert die Gleichung $Ax = b$ auf eine andere Gleichung $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$, die sich iterativ schneller lösen läßt. Die gesuchte Lösung x sollte sich dabei leicht aus der Lösung \tilde{x} berechnen lassen. Eine schnellere iterative Lösbarkeit bedeutet in diesem Zusammenhang ein schmales Spektrum. Natürlich wäre es von Vorteil, wenn die neue Matrix \tilde{A} ähnlich dünn besetzt ist wie A selbst, da sonst der Gewinn durch die Reduzierung der Iterationsschritte vom größeren Aufwand für jede einzelne Iteration zunicht gemacht wird. Den Versuch, die zu invertierende Matrix so umzuformen, bezeichnet man als „Preconditioning“.
2. Für eine geeignete Wahl des Startvektors x_0 als eine erste grobe Approximation an die Lösung des Gleichungssystems gibt es je nach Problemstellung verschiedene Vorgehensweisen. Diese Versuche werden i.a. unter dem Begriff „Educated Guess“ zusammengefaßt.

Die nun folgenden Untersuchungen zeigen für beide Fälle unterschiedliche Verfahrensweisen auf.

5.3 „Odd-even-Preconditioning“

Wie bereits angedeutet, ermöglicht die Verwendung des MR- bzw. BCG-Verfahrens ein Preconditioning der zu invertierenden Matrizen. Grund ist die mögliche getrennte Inversion der für sich gesehen i.a. nichthermitischen Fermionmatrizen Q^+ und Q : Die Struktur vieler Matrizen, die aus der Diskretisierung von Differentialgleichungen entstehen, wie z.B. die Fermionmatrix, erlaubt sogenanntes „odd-even“- oder „red-black“-Preconditioning. Dessen Funktionsweise basiert darauf, daß eine solche Matrix nur lokal und zwischen den nächsten Nachbarn eines Diskretisierungsgitters wirkt und sich daher nach einer Transformation, der „odd-even“-Zerlegung des Gitters, aus leicht zu invertierenden Diagonalblöcken und Offdiagonalblöcken, deren Einträge im Vergleich zu denen der Diagonalblöcke relativ klein sind, zusammensetzt. Die Größe der Einträge und damit der durch das Preconditioning zu gewinnende Vorteil ist direkt mit der Stärke einer Nächste-Nachbar-Wechselwirkung, hier repräsentiert durch den fermionischen Hoppingparameter, verknüpft. Beim Matrixprodukt Q^+Q ist eine derartige Zerlegung nicht möglich.

Für Probleme der QCD wurde ein solches Verfahren in [58] untersucht. Mit kleinen Änderungen kann es auch für unsere Problematik verwendet werden:

Eine „odd-even“-Zerlegung des Gitters formt die Fermionmatrix Q , da sie nur Nächste-Nachbar-Wechselwirkung enthält, so um, daß die Diagonalblöcke zum einen rein lokal (sie enthalten den Yukawaanteil, den chiral invarianten Massenanteil und den lokalen Wilsonanteil der fermionischen Wirkung) und zum anderen analytisch invertierbar sind. Die offdiagonalen Blöcke enthalten alle nichtlokalen Anteile der fermionischen Wirkung und sind daher bei Wahl der Normierung gemäß (13) proportional zum Hoppingparameter K. zieht man diesen zur Verdeutlichung aus den offdiagonalen Blöcken heraus, ergibt eine solche Zerlegung also:

$$Q = \begin{pmatrix} Q_{ee} & KQ_{eo} \\ KQ_{oe} & Q_{oo} \end{pmatrix}. \quad (216)$$

Nach einer entsprechenden Aufteilung der Vektoren χ und r ist das folgende Gleichungssystem zu behandeln:

$$\begin{aligned} Q_{ee}\chi_e + KQ_{eo}\chi_o &= r_e \\ KQ_{oe}\chi_e + Q_{oo}\chi_o &= r_o. \end{aligned} \quad (217)$$

Eine Umformung führt dann auf die Gleichungen, wie sie vom Computer gelöst werden:

$$(\mathbb{I} - K^2 Q_{oo}^{-1} Q_{oe} Q_{ee}^{-1} Q_{eo})\chi_o = Q_{oo}^{-1}(r_o - KQ_{oe} Q_{ee}^{-1} r_e) \quad (218)$$

$$\chi_e = Q_{ee}^{-1}(r_e - KQ_{eo}\chi_o). \quad (219)$$

Da, wie erwähnt, Q_{ee}^{-1} und Q_{oo}^{-1} analytisch leicht anzugeben sind, vom Computer also nicht durch Inversion berechnet werden müssen, ist die wesentliche Aufgabe in der Bestimmung von χ_o zu sehen.

Die obige Gleichung für χ_o definiert das Preconditioning 1.Grades. Ein höheres Preconditioning ist nun leicht möglich. Durch Multiplikation der Gleichung (218) mit $(\mathbb{I} + K^2 Q_{oo}^{-1} Q_{oe} Q_{ee}^{-1} Q_{eo})$ ergibt sich der zweite Grad:

$$(\mathbb{I} - K^4(Q_{oo}^{-1} Q_{oe} Q_{ee}^{-1} Q_{eo})^2)\chi_o = (\mathbb{I} + K^2 Q_{oo}^{-1} Q_{oe} Q_{ee}^{-1} Q_{eo})Q_{oo}^{-1}(r_o - KQ_{oe} Q_{ee}^{-1} r_e). \quad (220)$$

Man sieht, daß sich die zu invertierende Matrix mit zunehmendem Preconditioning aufgrund ihrer Abhängigkeit vom fermionischen Hoppingparameter für hinreichend

kleine K immer mehr der Einheitsmatrix nähert. Die Zahl der Iterationen im MR- bzw. BCG-Algorithmus wird also gemäß den Konvergenzeigenschaften in gewissem Maße abnehmen. Da sich jedoch die Zahl der Matrixmultiplikationen pro Iteration mit jedem zusätzlichen Grad verdoppelt, ist ein Laufzeitgewinn durch höheres Preconditioning nur in zwei Fällen zu erwarten:

1. Die Zahl der Iterationen muß sich beim Übergang zum nächsthöheren Preconditioning mehr als halbieren. Dies ist für bestimmte K -Werte tatsächlich der Fall (s.u.).
2. Die Zahl der Iterationen halbiert sich zwar nicht, die Matrixmultiplikationen benötigen aber, bedingt durch die Rechnerarchitektur, in einer Iteration den geringeren Anteil der Rechenzeit.

Wie in [58] angedeutet wird, könnte dies auf Parallelcomputern der Fall sein. Ein solches Verhalten beruht darauf, daß bei Multiplikation eines Vektors mit einer Matrix, welche bereits übernächste Nachbarn auf dem Gitter nicht mehr in Beziehung setzt, der Kommunikationsaufwand zwischen den einzelnen Prozessoren im Vergleich zur eigentlichen Rechenzeit i.a. geringer ist als bei einem globalen Skalarprodukt. Da beide, Matrix- und Skalarprodukte, in allen Inversionsalgorithmen auftreten und für die Schnelligkeit ihrer Ausführung das Verhältnis der Kommunikations- zur Rechengeschwindigkeit von entscheidender Bedeutung ist, muß das Verhalten beim Übergang zu höherem Preconditioning für jeden Rechntyp neu geprüft werden.

Derartige Untersuchungen sollen im folgenden nicht angestrengt werden, da im Rahmen des Higgs-Yukawa-Projektes kein geeigneter Parallelrechner für Produktionsläufe zur Verfügung stand.

5.3.1 Realisierung auf dem Computer

Zu ersetzen ist die Unteroutine CONGRA, die das Gleichungssystem $Q^+Q\chi = r$ mit Hilfe des CG-Algorithmus löst. Bei jedem Aufruf von CONGRA wird r im Inputvektor VECI an die Routine übergeben; nach Durchlaufen der Routine ist VECI unverändert, und das Ergebnis der Inversion χ_m ist in VECO abgespeichert. An die Stelle von CONGRA tritt nun die Routine INVERT, welche die Gleichung $Q^+Q\chi = r$ in die beiden Gleichungen $Q^+\tilde{\chi} = r$ und $Q\chi = \tilde{\chi}$ aufspaltet. Deren Lösung erfolgt dann durch den Aufruf folgender Routinen:

1. NORMOE: zerlegt einen Vektor in „odd-even“-Teile

$$\text{VECI} = r \longrightarrow \begin{pmatrix} r_e \\ r_o \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{VECI1} \\ \text{VECI2} \end{pmatrix},$$

VECI bleibt unverändert.

2. FSTINH(IADJ=1) : berechnet die rechte Seite der Gleichung, welche man analog (218), bzw. der entsprechenden Relation für höheres Preconditioning aus $Q^+\tilde{\chi} = r$ resp. $Q\chi = \tilde{\chi}$ erhält und schreibt sie auf VECI3. IADJ=1(0) bedeutet, daß dabei von der durch Q^+ (Q) definierten Gleichung ausgegangen wird.
3. MINRES(IADJ=1) : berechnet nach dem oben erläuterten Verfahren $\tilde{\chi}_o$ und schreibt das Resultat auf VECI2. Entsprechendes macht BICON(IADJ=1) bei Verwendung der BCG-Methode.

4. SCDEQTN(IADJ=1) : berechnet $\tilde{\chi}_e$ und schreibt es auf VECI1. An dieser Stelle hat man die Gleichung $Q^+ \tilde{\chi} = r$ gelöst.
5. FSTINH(IADJ=0)
6. MINRES(IADJ=0) bzw. BICON(IADJ=0)
7. SCDEQTN(IADJ=0) : Dies löst die Gleichung $Q\chi = \tilde{\chi}$ und daher $Q^+Q\chi = r$
8. OENORM : bringt die Lösung wieder in die gewohnte Form, d.h. macht die „odd-even“-Zerlegung der Vektoren rückgängig:

$$\begin{pmatrix} \text{VECI1} \\ \text{VECI2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_e \\ \chi_o \end{pmatrix} \longrightarrow \chi = \text{VECO} .$$

Die hier genannten Unterprogramme greifen ihrerseits auf die Routinen DIAEI, DIAOI, MULE, MULO, DIAEIA, DAOIA, MULEA, MULOA zurück, welche einen Vektor mit $Q_{ee}^{-1}, Q_{oo}^{-1}, Q_{eo}, Q_{oe}, Q_{ee}^{+-1}, Q_{oo}^{+-1}, Q_{oe}^+, Q_{eo}^+$ multiplizieren. Für die in MINRES bzw. BICON erforderliche Multiplikation mit der zu invertierenden Matrix aus (218) werden diese Routinen der größeren Übersichtlichkeit wegen in einer weiteren Routine MULTM zusammengefaßt. Über eine Schleife ist dort die Option eines höheren Preconditioning gegeben.

Zu Beginn des Programms müssen alle Nächste-Nachbar-Koordinaten für das „odd“- und das „even“-Gitter bestimmt werden. Dies geschieht durch einmaligen Aufruf des Unterprogramms MODEV.

Da im MR- bzw. BCG-Algorithmus für jede Inversion des CG-Algorithmus zwei Inversionen durchgeführt werden müssen, ist ein Vergleich der Genauigkeiten bzw. eine äquivalente Fehlervorgabe δ schwer möglich. Daher wurde im weiteren Verlauf die Abbruchgrenze δ im MR- bzw. BCG-Verfahren um einen Faktor 100 gegenüber denjenigen aus der CG-Methode verringert. Stichprobenartige Tests zeigten, daß dies in allen Fällen ausreichte, um die Genauigkeit des CG-Verfahrens zu übertreffen.

5.3.2 Numerischer Aufwand

Bevor die Ergebnisse der Laufzeittests erläutert werden, ist es sinnvoll, den arithmetischen Aufwand zu vergleichen, den die verschiedenen Algorithmen zur Lösung des relevanten Gleichungssystems treiben müssen:

Diese Systeme sind bei Gebrauch des HMC-Algorithmus durch $Q^+Q\chi = r$ und bei Simulation auf der Basis des HCL-Algorithmus durch $Q\chi = r$ gegeben. Während im ersten Fall aufgrund der Hermitezität und Definitheit von Q^+Q die Verwendung aller oben angesprochenen Inversionsalgorithmen möglich ist, kann man im Rahmen des HCLA nicht ohne weiteres davon ausgehen. Für die drei in dieser Arbeit getesteten Verfahren (CG,MR,BCG) bedeutet das:

1. Innerhalb des HMCA kann die Inversion ohne Einschränkungen mit allen drei Methoden durchgeführt werden. Nutzt man das MR- oder BCG-Verfahren, läßt sich diese Aufgabe allerdings auch in zwei Schritten durchführen, indem man zunächst $y = Q^{+-1}r$ und daraus $\chi = Q^{-1}y$ bestimmt. Trotz des auf den ersten Blick größeren Aufwandes zweier Inversionen kann dies die günstigere Alternative sein, vorausgesetzt die beiden einzelnen Inversionen gestatten, im Gegensatz zur Behandlung des vollen Gleichungssystems, eine Optimierung, die den anfänglichen Laufzeitverlust ausgleicht. Wie sich herausstellen wird, liegt diese Situation in bestimmten Parameterbereichen der Theorie tatsächlich vor.

2. Soll innerhalb des HCLA die CG-Methode genutzt werden, ist der Umweg über das Gleichungssystem $Q^+Q\chi = Q^+r$ zu wählen, während sich das System $Q\chi = r$ direkt mit dem MR- und BCG-Verfahren lösen lässt. Hinsichtlich der Parameterwerte wird der Anwendungsbereich dieser beiden Algorithmen hier also größer sein, da die Möglichkeit einer Optimierung vermöge des Preconditioning nicht durch den Übergang zu zwei Inversionen erkauf werden muß. Vielmehr hat sich jetzt im Vergleich zur MR- bzw. BCG-Methode der Aufwand für das CG-Verfahren wegen der zweifachen Matrixmultiplikation zunächst einmal verdoppelt.

Für eine grobe Abschätzung darf davon ausgegangen werden, daß sich der Aufwand im wesentlichen aus der Zahl der Operationen in Verbindung mit der Matrixmultiplikation errechnet. Letztere wird so ausgeführt, daß nur von Null verschiedene Einträge in die Rechnung Eingang finden. Davon hat die Fermionmatrix im SU(2)-Modell pro Zeile genau 19 Stück. Bezeichnet N wie bisher die Zahl der Zeilen (N ist damit gerade) und $n(A)$ die Zahl der Operationen bei Multiplikation eines Vektors mit der Matrix A , so gilt:

$$\begin{aligned} n(Q) &= n(Q^+) = 19N \text{ skalare Mult.} + 18N \text{ skalare Add.} \equiv (19N, 18N) \\ n(Q_{ee}^{-1}) &= n(Q_{ee}^{+-1}) = n(Q_{oo}^{-1}) = n(Q_{oo}^{+-1}) = (1.5N, N) \\ n(Q_{eo}^{-1}) &= n(Q_{eo}^{+-1}) = n(Q_{oe}^{-1}) = n(Q_{oe}^{+-1}) = (8N, 7.5N). \end{aligned} \quad (221)$$

Die relevante Matrix im CG-Verfahren ist Q^+Q im MR- bzw. BCG-Algorithmus $(\mathbb{I} - K^2 Q_{oo}^{-1} Q_{oe} Q_{ee}^{-1} Q_{eo})$. Für diese ergibt sich:

$$\begin{aligned} n(Q^+Q) &= n(Q^+) + n(Q) = (38N, 36N) \\ n(\mathbb{I} - K^2 Q_{oo}^{-1} Q_{oe} Q_{ee}^{-1} Q_{eo}) &= 2(n(Q_{ee}^{-1}) + n(Q_{eo})) + (0, N) = (19N, 18N). \end{aligned} \quad (222)$$

Da pro Iteration im CG- und MR-Verfahren eine und im BCG-Algorithmus zwei Matrixmultiplikationen durchzuführen sind, ist der oben abgeschätzte Aufwand für eine CG- bzw. BCG-Iteration vergleichbar, während derjenige für eine MR-Iteration nur ungefähr halb so groß ist. Man muß allerdings bedenken, daß die Verwendung des MR- und BCG-Verfahrens bei HMC-Simulation doppelt soviele Inversionen erfordert wie die CG-Methode. Damit wären dort bei vergleichbarer Konvergenz der CG- und MR-Algorithmus halb so aufwendig wie das BCG-Verfahren. Für das U(1)-Modell gilt eine entsprechende Überlegung.

5.3.3 Ergebnisse

Die ersten Tests, die sich vor Beginn der eigentlichen MC-Produktion durchführen lassen, können sinnvollerweise nur auf die Verwendung der Einheitskonfiguration bzw. von Zufallskonfigurationen ϕ in der Fermionmatrix $Q(\phi)$ Bezug nehmen, da typische Gleichgewichtskonfigurationen noch nicht vorliegen. Die meisten der nun folgenden Resultate sind auf diese Weise entstanden. Soweit nicht anders angegeben, sind sie Ergebnis einer Mittelung über zehn verschiedene Zufallskonfigurationen. Nach Beendigung dieser Untersuchungen sollten dann Tests bzgl. der Laufzeitentwicklung während der Equilibrierungsphase sowie im Gleichgewicht folgen. In der Regel, so auch hier, verbietet dies aber die verfügbare Rechenzeit. Daher wurden die Algorithmen während der Equilibrierungsphase nur für einen exemplarischen Fall verglichen. Die Tests im Gleichgewicht selbst wurden auf zwei Fälle

beschränkt. Diese letztgenannten Studien beziehen sich, ebenfalls aus Zeitgründen, auf das U(1)-Modell.

Vor Beginn der Untersuchungen ist es nützlich, eine Unterscheidung zwischen den Parametern hinsichtlich ihrer Wirkungsweise auf die Matrixinversion zu treffen. Es lassen sich drei Arten identifizieren:

1. Die Yukawakopplungen G_ψ, G_χ sowie der fermionischen Hoppingparameter K bilden die direkten Parameter, denn sie treten explizit in der Fermionmatrix auf. Ihre Auswirkungen lassen sich relativ leicht überprüfen.
2. Sehr viel schwerer ist dies bei den indirekten Parametern, der Higgsselbstkopplung λ und dem skalaren Hoppingparameter κ . Sie wirken sich nur über die Higgsfeldkonfiguration auf Q aus und kommen daher erst durch die Einstellung eines Gleichgewichts zum Tragen.
3. Eine dritte Sorte bilden die algorithmischen Parameter. Unter ihnen sind die Gittergröße $V = L^3 \cdot T$, die Ordnung des Preconditioning P , die Fehlergrenze δ und der Relaxationsparameter ω sowie, bei Verwendung des HMCA, die Schrittweite $\delta\tau$. Letztere ist aber nur relevant, wenn man die Laufzeit einer ganzen Trajektorie betrachtet. Dann wirkt sie sich über die Qualität des weiter unten besprochenen „Educated Guess“ auf die iterative Inversion aus. Für die Untersuchung einzelner Inversionen ist sie ohne Bedeutung.

Die Tabellen und Abbildungen dieses Abschnitts enthalten CPU-Zeiten in Sekunden. Die Laufzeiten beziehen sich dabei, soweit nicht anders angegeben, auf eine vollständige Lösung der Gleichung $Q^\dagger Q \chi = r$. MR(P) steht im folgenden für die MR-Methode mit Preconditioning P -ten Grades.

Direkte Parameter

Eine erste Untersuchung des Laufzeitverhaltens sollte einen groben Überblick über die relative Leistungsfähigkeit der einzelnen Algorithmen in den verschiedenen Gebieten des durch die direkten Parameter aufgespannten Raumes liefern. Die auch bei Verwendung von Zufallskonfigurationen systematische Abhängigkeit der Laufzeit aller drei Methoden von den Parameterwerten erlaubt in der Tat, die Grenzen dieser von den jeweiligen Verfahren hinsichtlich der Laufzeit dominierten Gebiete relativ genau zu bestimmen. Dazu wurde G_χ für verschiedene feste Werte von K und G_ψ variiert und durch Intervallschachtelung der Wert für G_χ gesucht, für den zwei Algorithmen ungefähr dieselbe Laufzeit hatten. Unter- bzw. oberhalb dieses Wertes ergab dann jeweils die eine bzw. andere Methode die schnellere Inversion. Dabei wurde eine Symmetrie unter Vertauschung der Rollen von G_χ und G_ψ festgestellt. Diese Rechnungen wurden zum einen mit der Einheitskonfiguration, zum anderen mit zehn Zufallskonfigurationen durchgeführt. Im zweiten Fall wurden die Laufzeiten einfach gemittelt. Es schien nicht erforderlich, dazu eine größere Anzahl von Zufallskonfigurationen zu verwenden. Vielmehr entsprach das Ergebnis aus jeder einzelnen Konfiguration hinsichtlich der Reihenfolge der drei Algorithmen bis auf wenige Ausnahmen dem der Mittelung.

Bei festem K ergibt sich dann durch lineare Verbindung der nach obiger Prozedur für unterschiedliches G_ψ gefundenen Punkten das in den Abbildungen (32) bis (35) gezeigte Verhalten:

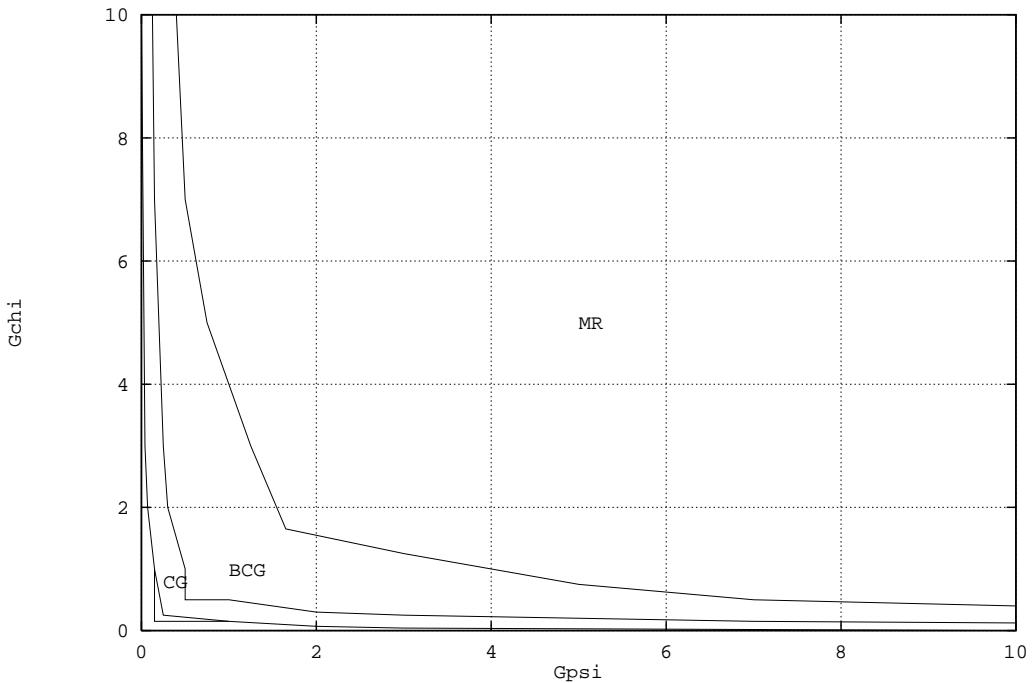


Abbildung 32: Die hier gezeigten Linien gleicher Laufzeit der jeweils angrenzenden Algorithmen ergaben sich durch Mittelung über zehn Zufallskonfigurationen. Verwendet wurde das SU(2)-Modell auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter bei $K = 0.08$. Die übrigen Parameter hatten dabei die folgenden Werte: $\delta = 10^{-8}$, $\lambda = 1.0$, $\kappa = 0.0$. Bis auf die Wahl der Fehlergrenze δ sind sie allerdings für die Laufzeit irrelevant. Entlang der Diagonalen $G_\psi = G_\chi$ erhält man startend im Ursprung die optimalen Algorithmen in der Reihenfolge MR, BCG, CG, BCG, MR.

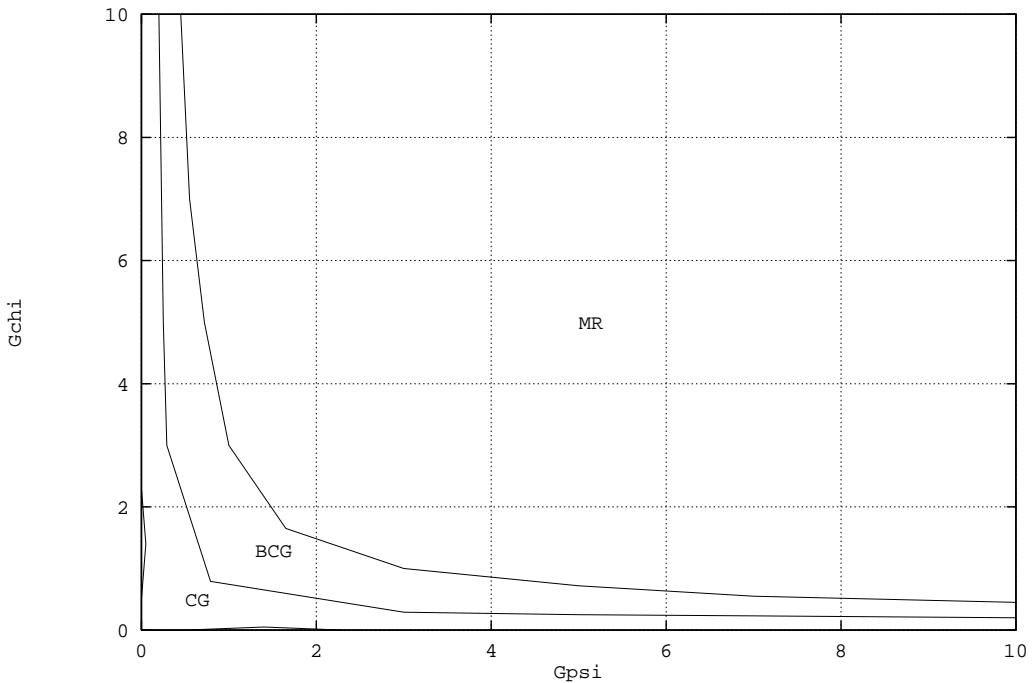


Abbildung 33: Im Vergleich zu Abbildung 32 wurde hier nur der fermionische Hoppingparameter auf den Wert $K = 0.12$ erhöht. An der G_χ - und symmetrisch dazu an der G_ψ -Achse gibt es zwei Bereiche, in denen das BCG-Verfahren vorzuziehen ist. Sie enthalten, in dieser Abbildung nicht mehr sichtbar, zwei noch kleinere Gebiete, die den MR-Algorithmus als beste Wahl erscheinen lassen. Die Präferenz der anderen Gebiete geht aus der Abbildung hervor.

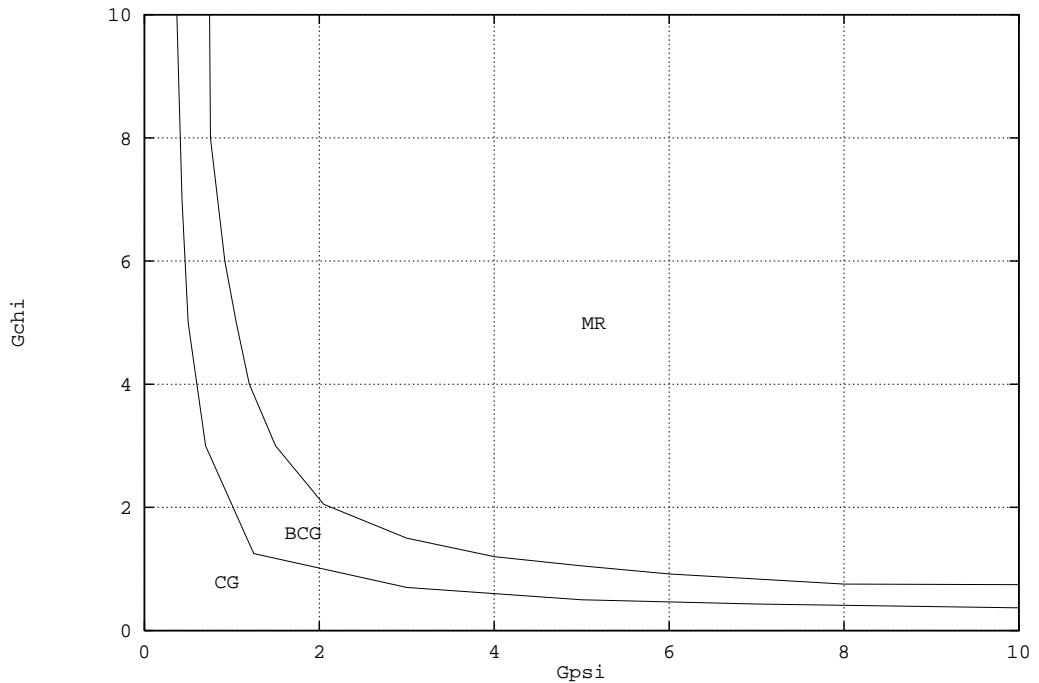


Abbildung 34: Der Wert des Hoppingparameters beträgt hier $K = 0.3$. Für kleine Yukawakopplungen hat der CG-Algorithmus die anderen beiden Verfahren vollständig verdrängt.

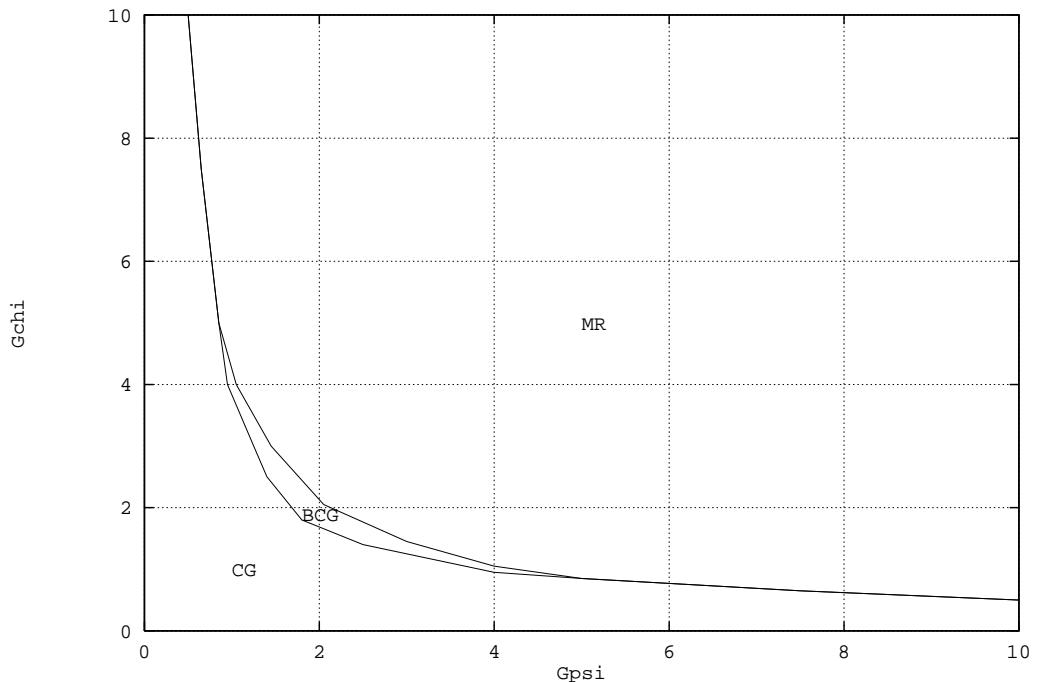


Abbildung 35: Das Verhalten der Algorithmen bei Verwendung der Einheitskonfiguration in $K = 0.12$.

Jede Abbildung weist die folgenden drei Merkmale auf:

1. Für große Produkte der Yukawakopplungen $|G_\psi G_\chi|$ dominiert das MR-Verfahren. Dies ist bei näherer Betrachtung des Preconditioning und der Gestalt der Fermionmatrix nicht verwunderlich. Denn die Diagonalblöcke in Q_{oo}^{-1} und Q_{ee}^{-1} sind proportional zu $(G_\psi G_\chi |\phi_x|^2 - \bar{\mu})^{-1}$, während die Offdiagonalmatrizen die Yukawakopplungen nicht enthalten, so daß sich für große Produkte die zu invertierende Matrix $(\mathbb{I} - K^2 Q_{oo}^{-1} Q_{oe} Q_{ee}^{-1} Q_{eo})$ nur noch wenig von der

Einheitsmatrix unterscheidet. Dafür sorgen auch kleine Werte des Hopping-parameters K . Daher sollte mit wachsendem K eine Verschiebung des für die MR-Methode günstigen Bereichs zu größeren Yukawakopplungen erfolgen. Wie der Vergleich der Abbildungen 32,33,34 zeigt, ist dies tatsächlich der Fall.

2. Sind die Yukawakopplungen etwas zu klein und daher für das Preconditioning weniger geeignet, bricht das MR-Verfahren sehr schnell zusammen. Der BCG-Algorithmus erweist sich, wohl auch aufgrund seiner analytisch zwingenden Konvergenz, als stabiler und kann in solchen Fällen die beste Alternative sein. Gemessen an der Bandbreite der Yukawakopplungen ist sein Gebiet für mittlere K -Werte besonders groß. Bei sinkendem K wird der BCG- zugunsten des MR-Algorithmus, bei wachsenden K -Werten zugunsten des CG-Verfahrens verdrängt.
3. Eine weitere Verkleinerung von G_ψ und G_χ führt in einen hinsichtlich des Preconditioning sehr ungünstigen Parameterbereich. Dort ist das CG-Verfahren am schnellsten, da die „odd-even“-Zerlegung dann durchaus zu einer Verschlechterung der Inversionsbedingungen im Vergleich zur ursprünglichen Matrix Q führen kann.

Für hinreichend kleine K -Werte ergibt sich im Bereich kleiner Kopplungen nochmals eine Änderung, ein Zusammenhang mit den Transformationen des Preconditioning ist allerdings nicht direkt ersichtlich. Es bilden sich dort zwei Regionen, in denen, startend vom Ursprung, das MR- bzw. BCG-Verfahren wieder die bessere Wahl darstellen. Mit wachsendem K werden diese vom CG-Gebiet derart an den Rand gedrängt, daß zunächst der MR-Bereich und schließlich auch die BCG-Zone für kleine Yukawakopplungen gänzlich verschwindet.

Bei Inversion unter Verwendung der Einheitskonfiguration ist das CG-Gebiet deutlich gewachsen und hat den BCG-Bereich fast völlig verdrängt, wie ein Vergleich der Abbildungen 33 und 35 zeigt. Daher spielt auch die Magnetisierung, die bei festen Werten für K, G_ψ, G_χ durch die indirekten Parameter bestimmt wird, eine wichtige Rolle bzgl. des Laufzeitverhaltens. Die bisherigen Verhaltensmuster deuten darauf hin, daß sie tief in der gebrochenen Phase zu einem Laufzeitvorteil des CG-Verfahrens führen können, der bei kleinerer Magnetisierung nicht gegeben ist. Für weitere Untersuchungen wären die Algorithmen in Gleichgewichtskonfigurationen mit verschiedener Magnetisierung zu testen (s.u.).

Die Form der Grenzkurven orientiert sich in gewisser Weise an den Niveaumäßen des Produktes $G_\psi G_\chi$. Plausibel wird dies, wenn man den nichtlokalen, zu K proportionalen Anteil der Fermionmatrix als Störung betrachtet. Dann nämlich ist der Wert der Determinante von Q in nullter Ordnung proportional zu $G_\psi G_\chi |\phi_x|^2 - \bar{\mu}^2$. Daher verschwindet sie z.B. für die Einheitskonfiguration auf der Niveaulinie $G_\psi G_\chi = \bar{\mu}^2$. Eine Inversion ist dort nicht mehr möglich. In der Praxis, d.h. unter Berücksichtigung der Störung, ist sie zwar wieder durchführbar, aber, wie die Laufzeiten der Algorithmen im Zusammenhang mit Abbildung 35 zeigten, in der Umgebung dieser Linie, die mitten im CG-Bereich liegt, am aufwendigsten.

Es war auch ein Charakteristikum der anderen drei untersuchten Fälle, daß in dem Gebiet mit der hinsichtlich ihrer Inversion ungünstigsten Eigenwertverteilung der Fermionmatrix der CG-Algorithmus am besten ist. Insofern bleibt er das wichtigste Inversionsverfahren im Higgs-Yukawa-Modell, da er gerade an den „kritischen“ Stellen die beste Arbeit leistet. Aus diesem Grund wurde die Untersuchung in den späteren Abschnitten über den Ratevektor und das Preconditioning mit Hilfe der schnellen Fouriertransformation auf ihn beschränkt.

Für Studien bei festem fermionischen Hoppingparameter, wie z.B. im Entkopplungsfall, empfiehlt es sich vor Beginn der Produktionsläufe die verschiedenen Algorithmen in obiger Weise gegeneinander abzugrenzen, um jeweils abschätzen zu können, in welchem Gebiet man sich befindet. Erfolgen die Rechnungen in der symmetrischen Phase, ist dies relativ gut möglich, da sich schon bei Verwendung von Zufallskonfigurationen ein gutes Bild ergibt. Liegen die Parameter allerdings nahe an einer Grenze, die Bereiche mit verschiedener Präferenz voneinander trennt, oder wird in der gebrochenen Phase gerechnet, sollte die Abschätzung gelegentlich überprüft werden, indem man für eine momentane Konfiguration die Verfahren gegeneinander laufen lässt.

Eine andere Situation liegt z.B. bei der Bestimmung von Phasengrenzen für feste Yukawakopplungen vor. Geeignete Entscheidungshilfe gibt dann die Untersuchung bei variablem K . Für verschiedene Werte der übrigen Parameter liefert sie das folgende Bild:

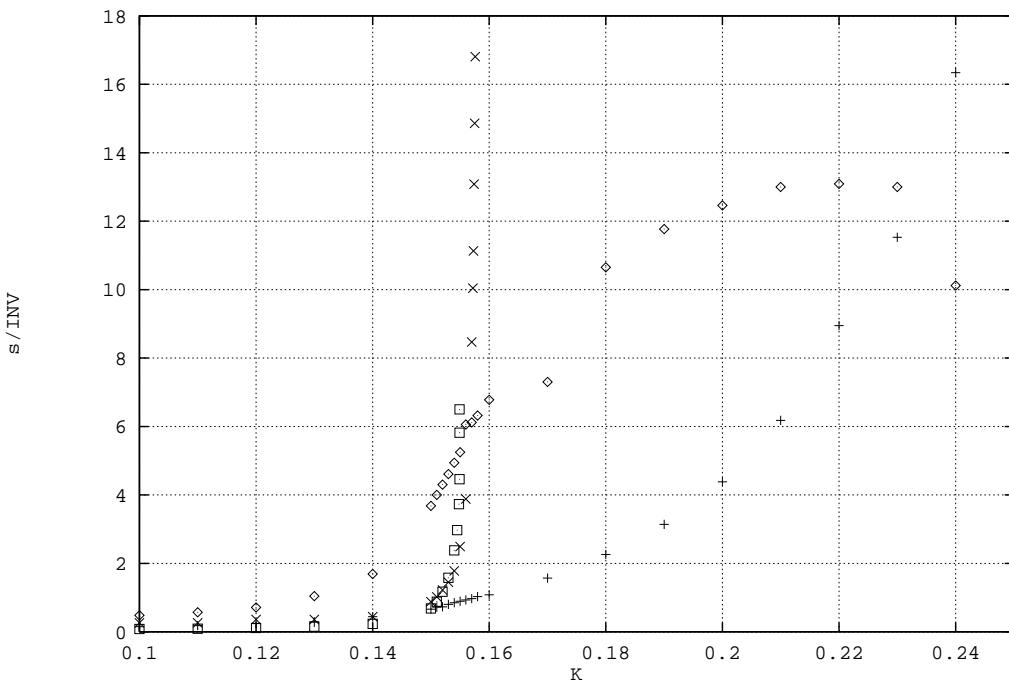


Abbildung 36: Die Datenpunkte zeigen bei festem $G_\psi = 0.1, G_\chi = 1.0, \kappa = 0, \lambda = 1.0$ auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter die Laufzeit der verschiedenen Algorithmen für eine Inversion unter Verwendung einer Zufallskonfiguration in Abhängigkeit von K . Die Fehlergrenze wurde auf $\delta = 10^{-8}$ festgelegt. Dieser Vergleich fand im U(1)-Modell statt. Die Symbole sind: Quadrate für MR(1), „×“ für MR(5), Rauten für CG und „+“ für BCG.

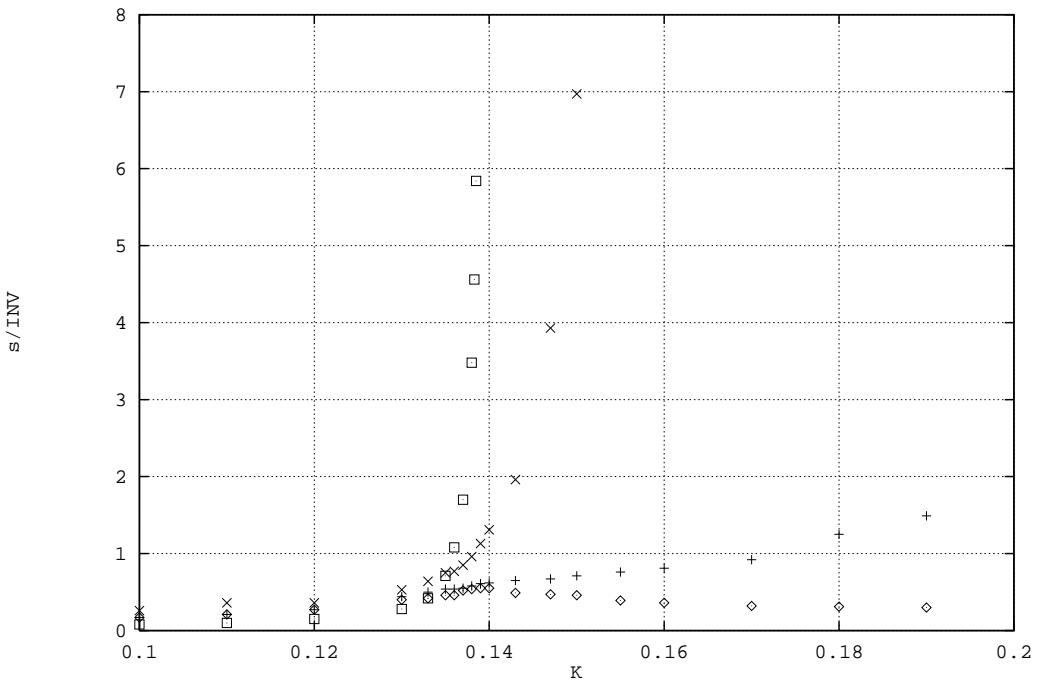


Abbildung 37: Wie Abbildung 36, aber mit $G_\chi = 0.3$.

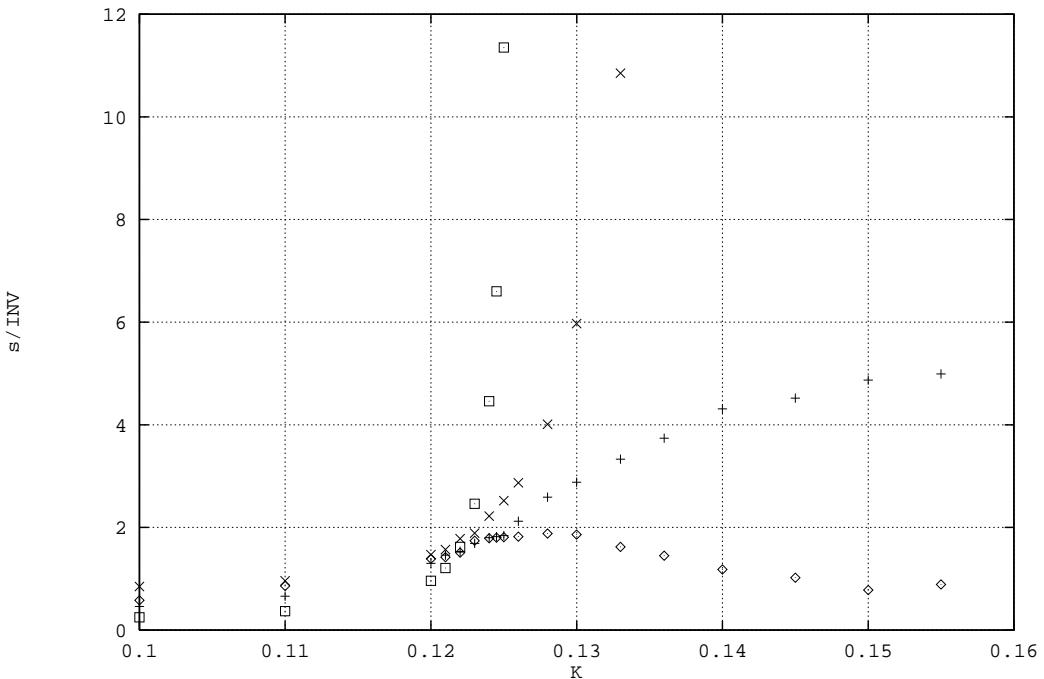


Abbildung 38: Vergleich der Inversionsalgorithmen im $SU(2)$ -Modell in $\lambda = 10^{-6}, \kappa = 0.0, G_\chi = 0.0, G_\psi = 0.3$. Die Symbole sind dieselben wie bisher.

Die vorangegangenen Abbildungen zeigen das Laufzeitverhalten für eine Zufallskonfiguration. Da die Werte der Yukawakopplungen beide jeweils nicht sehr groß sind, also nicht tief im MR-Gebiet liegen, erweisen sich je nach Wert von K unterschiedliche Algorithmen als günstig. In allen drei Fällen ist, wie zu erwarten, für kleine K das MR-Verfahren optimal, für große K die CG-Methode. In Abhängigkeit von den Yukawakopplungen gibt es dann einen breiten (Abbildung 36), einen schmalen (Abbildung. 38) oder überhaupt keinen (Abbildung 37) Bereich mittlerer K -Werte, in dem der BCG-Algorithmus vorzuziehen wäre. Man beobachtet im Einklang mit den

Erwartungen ferner, daß sich der Konvergenzbereich des MR-Verfahrens für wachsendes Produkt $|G_\psi G_\chi|$ ausdehnt. Durch höheres Preconditioning läßt sich dieser Bereich weiter vergrößern.

Da hier ausschließlich mit Zufallskonfigurationen und der Einheitskonfiguration gearbeitet wurde, lassen die Resultate für die Verwendbarkeit der Algorithmen in Produktionsläufen nur Tendenzen erkennen. Um dies bzgl. zu aussagekräftigeren Ergebnissen zu kommen, muß das Verhalten in Abhängigkeit von der Magnetisierung und damit den indirekten Parametern studiert werden.

Indirekte Parameter

Alle bisherigen Untersuchungen bezogen sich auf die Extremfälle verschwindender und maximaler Magnetisierung. Ihre Ergebnisse sind daher nur auf Systeme tief in der gebrochenen und symmetrischen Phase anwendbar. Um die aus den Extremfällen extrapolierten Tendenzen für den dazwischenliegenden Bereich, d.h. insbesondere die physikalisch interessante Region des Phasenübergangs zur FM-Phase, zu prüfen, muß man mit Gleichgewichtskonfigurationen aus dem entsprechenden Parameterbereich arbeiten. Dies kann, wie oben angedeutet, aus Rechenzeitgründen nur exemplarisch im U(1)-Modell auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter geschehen.

Betrachtet man die indirekten Parameter, so ist κ der interessantere, da von λ keine großen Effekte zu erwarten sind, selbst wenn es über einen großen Bereich variiert wird. Letzteres führt in der Regel nur zu kleinen Verschiebungen und Deformationen der Phasengrenzen, d.h. kleinen Änderungen in der Magnetisierung (Kapitel 2). Sind alle anderen Parameter fest, hängt es daher im wesentlichen von κ ab, in welcher Phase sich das System gerade befindet, wie groß also der Wert der Magnetisierung $|\phi| = 1/N \sum_x \phi_x$ ist.

Die Untersuchungen ergaben, daß die erforderliche Zeit für eine Inversion mit Hilfe des BCG-Algorithmus, unabhängig davon, ob ϕ zufällig gewählt wird ($|\phi| \approx 0$) oder als Einheitskonfiguration ($|\phi| = 1$), in derselben Größenordnung liegt. Das Verhalten des CG-Verfahrens hingegen wird stark von der Magnetisierung beeinflußt. Je nach Wahl der anderen Parameter benötigt es bis zu 60 mal länger für eine Zufallskonfiguration als für eine Einheitskonfiguration. (Dies war der größte gefundene Faktor, aber vermutlich nicht der größtmögliche.) Die MR-Methode verhält sich dazu gegensätzlich. Sie benötigt mehr Zeit, wenn eine Einheitskonfiguration vorliegt. Ein Beispiel für ein solches Verhalten zeigt die Tabelle 9:

Tabelle 9: Vergleich verschiedener Magnetisierungen
(zufällig, equilibriert in $\kappa = -0.1, 0.0$ und 0.1 , einheitlich)
($G_\psi = 0.1, G_\chi = -1.0, \lambda = 1, K = 0.125$)

$ \phi $	CG	BCG	MR
≈ 0	0.882	0.255	0.123
0.084	0.67	0.42	0.267
0.275	0.61	0.45	1.05
0.83	0.368	0.443	3.11
1	0.23	0.34	3.67

Für kleine Magnetisierungen, d.h. in der symmetrischen Phase, ist das MR-Verfahren zu bevorzugen, tief in der gebrochenen Phase der CG-Algorithmus. In einem kleinen Zwischenbereich mittlerer Magnetisierung gewinnt die BCG-Methode.

Das Bild ändert sich beim Übergang zu $G_\psi = 0$ drastisch. Da dann eine Situation vorliegt, in der die ψ Fermionen entkoppeln, falls K den passenden Wert annimmt

(auf unendlichem Gitter $\frac{1}{8}$), ist dieser Fall auch physikalisch von Bedeutung. Es ergibt sich das folgende Verhalten:

Tabelle 10: **Vergleich verschiedener Magnetisierungen im Entkopplungsfall**
(zufällig, equilibriert in $\kappa = -0.173, -0.06$ und -0.04 , einheitlich)
 $(G_\psi = 0.0, G_\chi = -1.0, \lambda = 10, K = 0.125)$

$ \phi $	CG	BCG	MR
≈ 0	13.720	1.650	—
0.07	1.040	0.630	1.49
0.168	0.800	0.640	4.50
0.259	0.547	0.622	—
1	0.282	0.379	—

Die beiden größeren κ -Werte liegen in der Nähe des physikalisch relevanten PM-FM-Übergangs, der dritte Wert an der Grenze zwischen PM- und AFM-Phase. Wie man sieht, ist die erforderliche Zeit für alle drei Algorithmen gestiegen. Jetzt gibt es allerdings eine wesentlich breitere κ -Region, in der das BCG-Verfahren vorzuziehen ist.

Startet man einen Produktionslauf mit der Einheitskonfiguration, so wird aber selbst in einem solchen Fall zunächst die CG-Methode günstiger sein. In einer hinsichtlich der CPU-Zeit sehr langen Equilibrierungsphase kann es sich also lohnen, an geeigneter Stelle den Inversionsalgorithmus zu wechseln. Die Laufzeitentwicklung während der Equilibrierung für denselben Parametersatz zeigt nachstehende Tabelle. In ihr sind die Zeiten für n HMC-Trajektorien angegeben, wobei n ausgehend von der Einheitskonfiguration die ersten 100 sowie die folgenden zweimal 300 Trajektorien einer Equilibrierung meint. Die Schrittweite ist mit $\delta\tau = 0.04$ so gewählt, daß die Akzeptanzrate der HMC-Simulation ungefähr bei 75% liegt. $\langle |\phi| \rangle$ ist die mittlere Magnetisierung aus n Messungen:

Tabelle 11: **Zeit für n Trajektorien startend mit Einheitskonfiguration**

κ	$\langle \phi \rangle$	n	CG	BCG
-0.04	0.51	100	176	434
	0.23	300	1270	1470
	0.23	300	1230	1452
-0.06	0.49	100	174	413
	0.205	300	1340	1450
	0.175	300	1510	1480
-0.173	0.37	100	229	407
	0.085	300	2120	1490
	0.068	300	2320	1560

Es ist festzustellen, daß nach einiger Equilibrierung, bedingt durch die dann niedrigere Magnetisierung, der BCG-Algorithmus für $\kappa = -0.06$ und $\kappa = -0.173$ die bessere Wahl darstellt. Das MR-Verfahren zeigte keine Konvergenz oder war deutlich langsamer.

Algorithmische Parameter

Die Untersuchung der Auswirkungen dieser Parameter auf die einzelnen Algorithmen soll nicht in aller Ausführlichkeit vorgenommen werden, da man in der Wahl ihrer Werte zumindest stark eingeschränkt ist.

Die Schrittweite $\delta\tau$ in der HMC-Simulation wird so gewählt, daß die dortige Akzeptanz neuer Konfigurationen bei ungefähr 75 % liegt. Dies entspringt dem Bedürfnis, sich einerseits relativ schnell durch den Phasenraum zu bewegen, andererseits aber auch nicht zu viele Konfigurationen verwerfen zu müssen. Variiert man $\delta\tau$ dennoch, wird die Laufzeit über die Qualität des ersten Ratevektors beeinflußt (s.u.). Während der Tests stellte sich heraus, daß der CG-Algorithmus darauf wesentlich empfindlicher reagiert, als die anderen beiden Verfahren. Da die Schrittweite jedoch durch die Akzeptanzrate festgelegt ist, erübrigen sich in diesem Rahmen weitere Untersuchungen. Die Methoden sind für dasjenige $\delta\tau$ zu vergleichen, welches eine Akzeptanz von ca. 75 % ergibt.

Ein anderer Parameter, der nichts mehr mit der zugrundeliegenden Physik zu tun hat, ist der Grad des Preconditioning P . Er ist im MR- bzw. BCG-Verfahren so zu wählen, daß die optimale Laufzeit erreicht wird. Im obigen Abschnitt über direkte Parameter wurde im Vorgriff auf Ergebnisse dieses Abschnitts für den BCG-Algorithmus kein höheres Preconditioning verwendet und beim MR-Verfahren in einigen Fällen nur zur Illustration der Wirkungsweise $P = 5$ zusätzlich betrachtet. Der Grund dafür wird deutlich, wenn man die Auswirkungen von P auf die Laufzeit genauer studiert:

Wie bereits die obigen Abbildungen zeigen, lohnt sich bei Verwendung der MR-Methode für kleine K -Werte ein höheres Preconditioning nicht, sondern führt i.a. zu einer Verlangsamung. Interessant wird ein Vergleich verschiedener Grade erst in der Nähe der Konvergenzgrenze des einfachen MR-Verfahrens. Für den gleichen Parametersatz wie in Abbildung 38 erhält man das folgende Bild:

Tabelle 12: **Vergleich verschiedener Grade des Preconditioning im SU(2)-Modell bei $K = 0.125$**

$$(\delta_0 = 10^{-8}, \bar{\mu} = 1, G_\psi = 0.3, G_\chi = 0.0, r = 1, \kappa = 0.0, \lambda = 10^{-6}, L^3 \cdot T = 4^3 \cdot 8)$$

	Grad des Preconditioning						
	$P=1$	2	3	4	5	6	7
MR(P)	10.77	8.38	5.85	3.72	2.40	12.44	14.22
BCG(P)	1.77	2.14	2.55	3.41	3.84	15.77	20.43

Der CG-Algorithmus benötigte 1.70 Sekunden, ist also in diesem Fall, wie auch an Abbildung 38 zu erkennen, am schnellsten. Sowohl beim MR als auch beim BCG-Algorithmus reduziert sich die Zahl der erforderlichen Iterationen mit zunehmendem Grad des Preconditioning bis zum fünften Grad einschließlich. Beim MR-Verfahren reicht dies im Gegensatz zur BCG-Methode aus, um die Verdopplung der Matrixmultiplikationen pro Iteration aufzufangen, d.h. die Zahl der Iterationen verringert sich dort um mehr als den Faktor Zwei. Beim Übergang zum sechsten Grad erhöht sich in beiden Fällen nicht nur die erforderliche CPU-Zeit, sondern sogar die Zahl der Iterationen. Weitere Untersuchungen zeigten, daß dieses Verhalten bei größeren K -Werten noch deutlicher wird. Die Zahl der Iterationen nimmt zur siebten Ordnung zwar wieder ab, aber nicht hinreichend stark, so daß erneut eine Verschlechterung eintritt.

Daß das Preconditioning fünften Grades eine Sonderrolle im MR-Algorithmus spielt, zeigt auch die nachstehende Tabelle. Dort ist entweder die Wahl von $P = 1$ oder

$P = 5$ optimal.

Tabelle 13: Verschiedene P bei unterschiedlichen Hoppingparametern
 $(\delta = 10^{-8}, G_\psi = 0.2, G_\chi = 0.0, \kappa = 0.0, \lambda = 1.0, V = 4^3 \cdot 8)$

K	MR(1)	MR(2)	MR(3)	MR(4)	MR(5)	MR(6)	CG
0.120	0.91	1.12	1.34	1.41	1.35	2.12	0.93
0.121	1.13	1.38	1.59	1.59	1.49	2.30	0.97
0.122	1.39	1.79	1.95	1.83	1.57	2.72	1.01
0.123	2.07	2.40	2.47	2.14	1.78	3.16	1.02
0.124	3.48	3.71	3.32	2.58	1.96	4.24	1.05
0.125	7.90	6.64	4.72	3.05	2.23	8.65	1.06

Es ist kein Parametersatz gefunden worden, für den $\text{MR}(P)$ mit $P > 1$ nicht vom CG- oder BCG-Verfahren übertrroffen wurde. Dies ist der Grund für die ausschließliche Verwendung des Preconditioning ersten Grades in Verbindung mit dem MR-Algorithmus.

Wird der in Tabelle 12 gewonnene Eindruck vom MR-Verfahren durch Tabelle 13 bestätigt, so ist er für das BCG-Verfahren irreführend. Denn für diese Methode gibt es durchaus Parameterbereiche, in denen ein höheres Preconditioning vorteilhaft wäre. In solchen Fällen war der MR-Algorithmus allerdings jedesmal schneller und machte die Verwendung einer BCG-Inversion mit $P > 1$ überflüssig. Daher ist im Zusammenhang mit der BCG-Methode im wesentlichen $P = 1$ von Interesse und Gegenstand dieser Arbeit.

Die Auswirkungen der Fehlergrenze δ bei unterschiedlichen Yukawakopplungen sind ebenfalls im Rahmen des SU(2)-Modells untersucht worden. Wie bei allen anderen Ergebnissen erwartet man aber auch hier, daß sie sich qualitativ auf das jeweils andere Modell übertragen lassen. Sie sind in der folgenden Tabelle zusammengefaßt.

Tabelle 14: Vergleich verschiedener Genauigkeiten auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter
 $(G_\psi = 0.1, \kappa = 0.0, K = 0.1, \lambda = 1.0)$

δ	G_χ	CG	MR	BCG
10^{-4}	0.0	0.190	0.155	0.308
10^{-8}	0.0	0.378	0.275	0.450
10^{-16}	0.0	0.736	0.515	0.702
10^{-24}	0.0	1.080	0.755	1.022
10^{-32}	0.0	1.441	1.000	1.290
10^{-4}	0.2	0.278	0.274	0.413
10^{-8}	0.2	0.700	0.560	0.572
10^{-16}	0.2	1.532	1.110	1.030
10^{-24}	0.2	2.320	1.673	1.456
10^{-32}	0.2	3.111	2.223	1.896

Trägt man die für zwei exemplarische Fälle angegebene CPU-Zeit gegen $-\ln \delta$ auf, zeigt sich, daß die Messwerte für jeden Algorithmus und beide G_χ -Werte im Bereich $\delta \leq 10^{-16}$ jeweils nahezu exakt auf einer Geraden liegen. Eine lineare Extrapolation zu höheren Genauigkeiten ist daher ohne weiteres vertretbar. Für größere δ -Werte gibt es kleine Abweichungen von diesem Verhalten.

Hinsichtlich der Steigungen dieser Geraden läßt sich keine einheitliche Aussage treffen. In $G_\chi = 0$ ist sie für die MR-Methode, gefolgt vom BCG-Verfahren, am steilsten;

in $G_\chi = 0.2$ vertauschen MR- und BCG-Algorithmus diesbzgl. ihre Rollen. Ein Fall, in dem die CG-Gerade die größte Steigung aufweist, ist nicht gefunden worden. In den meisten Fällen wächst folglich mit zunehmender Genauigkeitsanforderung die Attraktivität von MR- und BCG-Verfahren.

Für jeden einzelnen Algorithmus verschiebt sich die Gerade beim Übergang von $G_\chi = 0$ zu $G_\chi = 0.2$ in Richtung größerer Zeiten und wird dabei weniger steil.

Wie sich die Gittergröße V auf die Konvergenzgeschwindigkeit der einzelnen Algorithmen auswirken kann, zeigt unter Verwendung von zehn Zufallskonfigurationen die nachstehende Tabelle:

Tabelle 15: Vergleich verschiedener Gittergrößen
 $(\delta = 10^{-16}, G_\chi = 0.0, G_\psi = 0.1, \kappa = 0.15, K = 0.1, \lambda = 1.0)$

V	CG	MR	BCG
$4^3 \cdot 8$	0.74	0.51	0.70
$6^3 \cdot 12$	4.03	2.01	3.60
$8^3 \cdot 16$	12.50	6.30	12.89

Bei fester Fehlergrenze scheint es, daß mit wachsendem Gitter die CG-Methode dem BCG-Verfahren vorzuziehen ist. Der in diesem K -Bereich ungeschlagene MR-Algorithmus kann seinen Laufzeitvorteil bei größeren Gittern noch weiter ausbauen. Diese Problematik wurde im folgenden nicht weiter untersucht, weil zum einen in dieser Arbeit aus Rechenzeitgründen überwiegend das $4^3 \cdot 8$ -Gitter Verwendung fand, und außerdem im Rahmen des Projektes die Rechnungen auf den größeren Gittern zum Zeitpunkt der Tests meist bei höheren K -Werten durchgeführt wurden, für die sich das Bild drastisch ändert und das CG-Verfahren die besten Laufzeiten aufweist.

Ein weiterer algorithmischer Parameter ist der Relaxationsparameter ω . Da sowohl das CG- als auch das BCG-Verfahren auf der Konjugiertheit der Suchrichtungen basieren, ist ω hier nicht frei wählbar, sondern hat den Wert Eins. Anders verhält es sich bei Verwendung der MR-Methode. Im Gegensatz zu [58] konnte dort aber weder eine wesentliche noch eine systematische Verbesserung durch die Wahl $\omega \neq 1$ erzielt werden; die Laufzeit war vielmehr bereits durch $\omega = 1$ optimiert.

Nur am Rande erwähnt werden soll ein Test mit der oben beschriebenen Erweiterung des MR-Verfahrens zur Orthomin(l) Methode. Ein Laufzeitvergleich für $l = 0$ bis $l = 6$ erbrachte mit zunehmendem l keinen Gewinn. Orthomin(0), d.h. das MR-Verfahren selbst, war bereits optimal.

Zusammenfassend lässt sich das Folgende sagen:

Nach Festlegung der algorithmischen Parameter V und δ auf Werte, welche die physikalische Fragestellung erfordert, wird das Verhalten der Algorithmen CG, BCG und MR(1,5) durch die Parameter K, G_ψ, G_χ und κ geprägt. Für deren Zusammenwirken sind im wesentlichen drei Fälle zu unterscheiden:

1. Sind, wie in Tabelle 10 bzw. 11 bei $\kappa < -0.06$, die Werte der Parameter für den BCG-Algorithmus besonders geeignet, so sollte dieser nach einiger Equilibrierung, ausgehend von der Einheitskonfiguration, spätestens aber in den Produktionsläufen, bei der Inversion Verwendung finden.
2. Erweisen sich die Parameter als etwas weniger günstig, kann es immer noch Werte für κ , d.h. für die Magnetisierung, geben, in denen das BCG- dem CG-Verfahren vorzuziehen ist. Wird die Magnetisierung allerdings zu klein, ist die

MR-Methode am besten (Tabelle 9). Das bedeutet für die Produktionsläufe, daß es nur eine schmale κ -Region gibt, in der man den BCG-Algorithmus einsetzt. Sie ist nach oben durch das schnellere CG- und nach unten durch das bessere MR-Verfahren begrenzt. Auch wenn diese Region nicht betrachtet wird, da sie möglicherweise physikalisch uninteressant ist, gibt es dennoch Verwendung für die BCG-Methode. Denn ein System mit κ -Werten in der MR-Region durchläuft während der Equilibrierungsphase einen Bereich der Magnetisierung, der die BCG-Inversion bevorzugt, vorausgesetzt diese wird mit der Einheitskonfiguration gestartet. Man hätte dann also an geeigneter Stelle vom CG- zum BCG- und schließlich zum MR-Verfahren zu wechseln.

3. Im dritten denkbaren Fall sind die direkten Parameter gänzlich ungeeignet für das „odd-even“-Preconditioning, und der CG-Algorithmus ist unabhängig vom κ -Wert zu bevorzugen.

5.4 Preconditioning mit schneller Fouriertransformation

Nachdem für die MR- und BCG-Methode ein Preconditioning untersucht wurde, soll nun ein Verfahren getestet werden, daß sich auch auf den CG-Algorithmus anwenden läßt. In diesem Fall wird ausgenutzt, daß das exakte Inverse von Q bzw. Q^+ für ein konstantes, aber sonst beliebiges Skalarfeld bekannt ist. Bezeichnet man es mit Δ bzw. Δ^+ , so ergibt sich im Ortsraum, der für alle verwendeten Programme die Basis bildet, die Relation

$$\Delta_{xy} = \frac{1}{V} \sum_k e^{ik \cdot (y-x)} \tilde{\Delta}_k , \quad (223)$$

wobei die Fouriertransformierte $\tilde{\Delta}_k$ sich explizit angeben läßt. Die Summe in (223) läuft über die Gitterimpulse aller Raumzeitrichtungen. Nun wird anstelle von

$$Q^+ Q \chi = r \quad (224)$$

das transformierte Gleichungssystem

$$\Delta^+ Q^+ Q \Delta \tilde{\chi} = \tilde{r} \quad (225)$$

mit $\chi = \Delta \tilde{\chi}$ und $\tilde{r} = \Delta^+ r$ betrachtet. Δ , Δ^+ sind die Inversen der Fermionmatrizen Q , Q^+ , in denen das Skalarfeld durch seinen Gittermittelwert ersetzt ist. Die Hoffnung ist, daß auch bei nichtkonstantem Skalarfeld die Matrix $\tilde{A} = \Delta^+ Q^+ Q \Delta$ der Einheitsmatrix sehr nahe kommt (für konstantes Skalarfeld ist $\tilde{A} = \mathbb{I}$) und sich daher die Gleichung (225) mit weit weniger Aufwand lösen läßt, als (224).

Da Δ nur im Impulsraum explizit angegeben werden kann, ist für dieses Preconditioning, das im wesentlichen die Multiplikation von Δ bzw. Δ^+ mit einem Ortsraumvektor verlangt, jeweils eine zweifache Fouriertransformation erforderlich. Nach der Fouriertransformation des Ortsraumvektors in den Impulsraum erfolgt die Multiplikation mit der dort bekannten Inversen $\tilde{\Delta}_k$, danach die Rücktransformation in den Ortsraum.

Die Multiplikation eines Vektors mit der Matrix \tilde{A} im Verlaufe einer CG-Iteration besteht also aus vier Fouriertransformationen, zwei Matrixmultiplikationen im Impulsraum und der bisherigen Multiplikation mit A bzw. $Q^+ Q$ im Ortsraum. Der Erfolg dieses Beschleunigungsversuchs hängt deshalb im wesentlichen davon ab, ob die Zahl der notwendigen CG-Iterationen soweit reduziert werden kann, daß dies die im Vergleich zur Matrixmultiplikation mit A im Ortsraum zeitaufwendigere Multiplikation mit \tilde{A} auffängt.

Die Untersuchung dieser Fragestellung fand im SU(2)-Modell statt. In dem Punkt $G_\chi = 0, K = 0.1, \kappa = 0.3, \lambda = \infty$ wurde auf einem $4^3 \cdot 8$ -Gitter bei zeitlich antiperiodischen Randbedingungen zunächst mit einer Skalarfeldkonfiguration gearbeitet, die nur wenige Trajektorien von einer konstanten Anfangskonfiguration entfernt war, also als relativ „glatt“ angesehen werden kann. Die Fehlergrenze δ für den Abbruch der Inversion wurde auf 10^{-4} festgelegt. Damit ergab sich folgendes Bild:

Tabelle 16: **Zahl der Iterationen im CG-Verfahren, ohne (a) und mit (b) Preconditioning**

a	30	32	33	34	53	77
b	4	5	8	11	23	46
G_ψ	0.05	0.1	0.2	0.3	0.6	1.0

Die Dauer einer Iteration im CG-Verfahren betrug ohne Preconditioning 0.0113, mit Preconditioning 0.4837 Sekunden.

Zwei Dinge lassen sich daran ablesen:

1. In dieser Form gibt es für keines der oben aufgeführten G_ψ einen Zeitgewinn. Im günstigsten Fall minimaler Yukawakopplung $G_\psi = 0.05$ benötigt man ohne Preconditioning 0.34s, mit Preconditioning 1.94s.
2. Mit zunehmendem G_ψ führt die Abweichung des Skalarfeldes von einem konstanten Wert im obigen Sinne zu einer immer größer werdenden Abweichung der Matrix \tilde{A} von der Einheitsmatrix (in $G_\psi = 0$ ist $\tilde{A} = \mathbb{I}$) und damit zu einem immer kleineren „Gewinn“ hinsichtlich der erforderlichen Iterationszahl. Daher ist zu vermuten, daß für eine Skalarfeldkonfiguration im Gleichgewicht, wenn sie nicht gerade sehr tief in der ferromagnetischen Phase bei sehr großem κ und damit weit weg vom physikalisch interessanten Gebiet des Phasenübergangs berechnet wird, dieser „Gewinn“ noch kleiner ausfällt.

Die letzte Aussage konnte durch eine weitere Messung bestätigt werden. Für das $4^3 \cdot 8$ -Gitter mit zeitlich antiperiodischen Randbedingungen wurden in $G_\chi = 0, K = 0.1274, \lambda = \infty$ mit gleicher Abbruchbedingung drei weitere Punkte untersucht. Dabei befand sich das System jeweils in einer Gleichgewichtskonfiguration. Es ergaben sich nachstehende Resultate:

Tabelle 17: **Zahl der Iterationen im CG-Verfahren, ohne (a) und mit (b) Preconditioning**

κ	G_ψ	a	b
-0.23	0.3	64	30
-0.055	0.6	128	115
-0.28	1.0	192	281

Sie lassen klar erkennen, daß in einer derart „rauen“ Gleichgewichtskonfiguration allenfalls auf einen Zeitgewinn zu hoffen ist, wenn die Multiplikation mit der Matrix \tilde{A} noch stark beschleunigt werden kann. Dazu müßte man allerdings erreichen, daß diese Multiplikation weit weniger als doppelt soviel Zeit benötigt wie die ursprüngliche Multiplikation mit A .

Das ist aber nicht nur für das oben beschriebene Preconditioning mit schneller Fouriertransformation aussichtslos, sondern auch für ein Preconditioning mit schneller

Fouriertransformation, das nur die Fouriertransformation in Zeitrichtung ausführt (d.h. in (223) läuft die Summe ausschließlich über die zeitlichen Impulse und ergibt somit nur eine Näherung des Inversen Δ_{xy}). Von einem solchen Preconditioning erhofft man sich die Ausblendung wenigstens der kleinsten Eigenwerte von A und dadurch eine Verbesserung des Konvergenzverhaltens des CG-Algorithmus.

Auch ein Preconditioning durch Multiplikation mit Δ_{xy} im Ortsraum scheint ohne Aussicht auf Erfolg. Denn zunächst müßte dieses Δ_{xy} aufwendig bestimmt werden; man würde es daher für den zu untersuchenden Parametersatz einmal berechnen, und zwar mit einem konstanten Skalarfeld, dessen Wert einer Abschätzung des dortigen Skalarfelderwartungswertes zu entnehmen wäre. Aber selbst wenn ein solches Δ sich als dünne Matrix erweisen sollte, zum einen also die Speicherkapazitäten nicht überfordert und zum anderen die Matrixmultiplikation mit einer ähnlich geringen Zahl arithmetischer Operationen erlaubt, wie die Fermionmatrix selbst, wäre eine Verbesserung des Laufzeitverhaltens dennoch sehr fraglich. Eine Beschleunigung gelänge nämlich auch unter diesen sehr günstigen Umständen nur unter der Voraussetzung, daß die Zahl der Iterationen durch besagtes Verfahren wenigstens halbiert wird. Da man jedoch nicht wie oben den Mittelwert des aktuellen Skalarfeldes nutzen kann, ist dies sehr unwahrscheinlich.

5.5 „Educated“ Guess

Dieser Abschnitt befaßt sich mit der neben dem Preconditioning zweiten Möglichkeit, die Inversion zu beschleunigen, der Wahl eines geeigneten Startvektors. Drei grundverschiedene Verfahren werden im folgenden analysiert.

Der „Gottliebtrick“ [49] nutzt Informationen aus vorangegangenen Skalarfeldkonfigurationen. Im Gegensatz dazu verwenden die beiden anderen Methoden nur die aktuelle Konfiguration des Skalarfeldes. Während das HPE-Verfahren jedoch die volle Konfiguration benötigt, nutzt die Methode mit schneller Fouriertransformation nur ihren Mittelwert.

5.5.1 Der „Gottliebtrick“

Um eine erste Lösung der Gleichung $Q^\dagger Q \chi = r$ zu erraten, werden hier im Sinne einer Extrapolation Lösungen dieses Gleichungssystems herangezogen, die zu einem früheren Zeitpunkt, aber noch innerhalb derselben HMC-Trajektorie, d.h. für das gleiche r , erzielt worden sind. Dies macht die Verwendung des „Gottliebtricks“ in der MC-Simulation mit Hilfe des HCL-Verfahrens unmöglich, da dort vor jeder Inversion das r neu und zufällig gewählt wird. Der Grund für die Verwendung im Rahmen der HMC-Simulation liegt in der Annahme einer stetigen Entwicklung des Skalarfeldes und somit der Fermionmatrix Q bzw. der Lösung des Gleichungssystems innerhalb einer solchen Trajektorie. Da nach Durchlaufen einer Trajektorie im HMC-Verfahren ein neuer Impuls erwürfelt wird, endet mit der Trajektorie auch die stetige Entwicklung, und das Rateverfahren ist neu aufzubauen.

Je nach Zahl der herangezogenen, früheren Ergebnisse spricht man von konstanter, linearer, quadratischer, etc. Extrapolation bzw. von Extrapolation 0ter, 1ter, 2ter, etc. Ordnung.

Die Güte des auf diese Weise erzielten ersten Ratevektors hängt nicht nur vom Grad der Extrapolation, sondern auch entscheidend von der Schrittweite ab, die bei der HMC-Simulation benutzt wird. Ein solches Verhalten zeigen die weiter unten besprochenen Verfahren nicht. Da aber die Schrittweite so zu wählen ist, daß die

Akzeptanzrate für die Konfigurationsvorschläge bei ca. 75 % liegt, machte sich diese Abhängigkeit bisher noch nicht negativ bemerkbar, d.h. die Verwendung eines nach diesem Verfahren bestimmten ersten Ratevektors stellte, verglichen mit dem Fehlen eines solchen, immer eine Verbesserung dar. Zur Illustration zeigen die beiden folgenden Tabellen für einen festen Parametersatz die Anzahl I der notwendigen CG-Iterationen bei verschiedenen Schrittweiten bzw. Extrapolationen unterschiedlicher Ordnung. G – ein Maß für die Güte des Ratevektors – ist dabei definiert als:

$$G = \frac{|x_{guess} - x_{num}|^2}{|x_{num}|^2}. \quad (226)$$

x_{num} steht für die numerische Lösung mit dem CG-Algorithmus. Zur Erstellung der Tabellen wurde eine Trajektorie der Länge Sechs betrachtet, d.h. es waren sieben Inversionen durchzuführen, jeweils eine für den ersten und letzten Halbschritt und je eine für die dazwischenliegenden, fünf ganzen Schritte. Unter diesen Voraussetzungen zeigt die Entwicklung der Anzahl nötiger Iterationen bei einer Extrapolation zweiter Ordnung das nachstehende Verhalten:

Tabelle 18: **Zahl der Iterationen im CG bei verschiedenen Schrittweiten und quadratischer Extrapolation**

$\delta\tau = 0.02$	I	46	26	9	7	6	11	11
	G	1	$6 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-6}$	10^{-6}	10^{-6}	$5 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-6}$
$\delta\tau = 0.04$	I	46	31	18	13	11	16	8
	G	1	$2 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-5}$	$9 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-6}$
$\delta\tau = 0.20$	I	46	41	40	39	39	40	40
	G	1	$6 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-2}$				
$\delta\tau = 0.40$	I	46	46	52	57	57	56	57
	G	1	0.2	0.6	1.6	2.0	2.4	1.8

Ohne Verfahren zur Bestimmung eines Ratevektors, würde man den Startvektor der CG-Iteration auf einen konstanten Wert, z.B. auf Null, setzen und erhält so eine Güte von 1. Die Zahl der Iterationen bleibt dann gegenüber der ersten Inversion innerhalb einer Trajektorie, für die grundsätzlich kein Raten möglich ist, in der Regel unverändert. Demgegenüber zeigt sich in der Meßreihe mit $\delta\tau = 0.40$ die erwähnte Verschlechterung durch den „Gottliebtrick“. Die Schrittweite ist allerdings so groß gewählt, daß die entsprechende Akzeptanzrate der HMC-Simulationen weit unter 75% liegt. Für Schrittweiten $\delta\tau \leq 0.2$ führt der „Gottliebtrick“ bei vorliegendem Parametersatz zu einer Verbesserung.

Durch Verwendung verschiedener Ordnungen O des „Gottliebtricks“ ergibt sich für die Zahl der Iterationen folgendes Bild:

Tabelle 19: **Zahl der Iterationen im CG bei $\delta\tau = 0.04$ für Extrapolationen verschiedener Ordnung**

$O = 2$	I	46	31	18	13	11	16	8
	G	1	$2 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-5}$	$9 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-5}$	$3 \cdot 10^{-6}$
$O = 1$	I	46	31	18	20	18	20	17
	G	1	$2 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-5}$	$7 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$	$6 \cdot 10^{-5}$	$5 \cdot 10^{-5}$
$O = 0$	I	46	31	31	31	31	32	31
	G	1	$2 \cdot 10^{-3}$					

Extrapolationen höherer Ordnung zeigen wieder ein schlechteres Laufzeitverhalten

und weisen somit die quadratische Extrapolation als die günstigste aus. Sie benutzt die Ergebnisse der drei vorangegangenen Inversionen innerhalb einer Trajektorie (d.h. implizit auch die Skalarfelder der drei vorherigen „Leapfrog“-Schritte). Vermutlich ist es daher auf den Fehler der Ordnung $\delta\tau^3$ in der „Leapfrog“-Integration [42] zurückzuführen, daß die Verwendung höherer Polynome keine Laufzeitvorteile mehr einbringt. Denn die dann zusätzlich berücksichtigten, noch „älteren“ Skalarfelder weichen möglicherweise zu stark von der Lösung ab, die bei exakter Rechnung auf das aktuelle Skalarfeld führen würde.

Im Gegensatz zu diesem Extrapolationsverfahren, das in allen relevanten Fällen zu einer Beschleunigung führte, lassen sich für die beiden unten diskutierten Vorgehensweisen keine so allgemeinen Aussagen treffen. Der Grund liegt in der starken Abhängigkeit ihrer Wirkungsweise von den Werten der direkten Parameter. Wie schon bei der Wahl geeigneter Inversionsalgorithmen muß demzufolge auch über ihre Verwendung der Einzelfall entscheiden.

Ein wesentlicher Vorteil der folgenden Rateverfahren ist ihre Unabhängigkeit von der Information über frühere Konfigurationen und die damit verbundene Anwendbarkeit in Fällen unstetiger Entwicklung, wie sie z.B. im HCLA auftreten.

5.5.2 Ratevektor durch Hoppingparameterentwicklung (HPE)

Der im folgenden geschilderten Methode zur Konstruktion eines guten ersten Startvektors für die Matrixinversion liegt die Idee zugrunde, daß für genügend kleinen Hoppingparameter K eine konvergente Taylorentwicklung der inversen Fermionmatrix existiert. Trennt man die Fermionmatrix bzgl. der Ortskoordinaten in Diagonalteil D und Offdiagonalteil M , letzterer ist proportional zu K , so schreibt sich die Taylorentwicklung in Potenzen des Hoppingparameters K bis zu einer Ordnung n als:

$$Q^{-1} \approx Q_n^{-1} = D^{-1} \left(1 + \sum_{i=1}^n (-MD^{-1})^i \right). \quad (227)$$

Der Vorteil einer solchen Entwicklung liegt darin, daß M im Ortsraum bekannt und D^{-1} analytisch explizit angebbar ist. Mit Hilfe der nachstehenden Umformung dieses Ausdrucks, läßt sich dann die Berechnung von $Q_n^{-1} \cdot v$ für einen beliebigen Vektor v leicht vermöge einer Schleife programmieren, die zur Bestimmung der n -ten Ordnung genau n mal zu durchlaufen ist:

$$Q_n^{-1} \cdot v = (v - MD^{-1}(v - MD^{-1}(v - \dots(v - MD^{-1} \cdot v)\dots))). \quad (228)$$

Infolgedessen beschränkt sich der arithmetische Aufwand für jede weitere Ordnung im wesentlichen auf eine Multiplikation mit MD^{-1} , die in etwa soviel Zeit benötigt wie die Multiplikation mit Q selbst (statt mit D ist nun mit D^{-1} zu multiplizieren, und die Struktur beider Matrizen bzgl. der Besetzung mit von Null verschiedenen Elementen ist identisch). Der CPU-Bedarf für jede zusätzliche Ordnung der HPE ist demnach mit demjenigen für eine CG-Iteration vergleichbar.

Für die Messungen in den drei folgenden Tabellen wurde unabhängig vom dortigen Wert für K und G_ψ eine Gleichgewichtskonfiguration in $K = 0.1274, G_\chi = 0.0, G_\psi = 1.0$ für das SU(2)-Modell auf dem $4^3 \cdot 8$ -Gitter bei unendlicher Selbstkopplung λ herangezogen, da andere nicht zur Verfügung standen. Die Fehlervorgabe betrug $\delta = 10^{-8}$. Zunächst wird die HPE in erster Ordnung (b) verglichen mit dem Fehlen eines Ratevektors, d.h. $x_{guess} = 0$ (a). Daraufhin werden verschiedene Ordnungen der HPE für $K = 0.1$ gegenübergestellt. In beiden Fällen geschah die Inversion unter

Zuhilfenahme des CG-Algorithmus.

Tabelle 20: **Zahl der Iterationen im CG-Verfahren, ohne (a) und mit (b) Ratevektor**

K	0.0	0.01	0.02	0.04	0.1
a	2	8	10	16	69
b	1	4	6	11	66

Tabelle 21: **Zahl der Iterationen im CG-Verfahren, ohne (a) und mit Ratevektor**

Ordnung	a	1	4	10	20	30
Iterationen	69	66	58	41	21	3

Um in der zweiten Tabelle die Zahl der bzgl. des CPU-Bedarfs effektiven Iterationen abzulesen, sind die Ordnungen, wie oben angedeutet, als eine Iteration zu zählen. D.h. für $K = 0.1$, $G_\psi = 1.0$, $G_\chi = 0.0$ ist die erforderliche CPU-Zeit von 69 Iterationen (ohne Ratevektor) auf 33 (in 30. Ordnung HPE) verringert worden.

Es bleibt zu erwähnen, daß auch für $K = 0.11$ noch eine Verbesserung erreicht wurde, wenn sie auch erheblich geringer ausfiel. In dem darüberhinausgehenden interessanten Wert von $K = 0.1274$ trat, bedingt durch die vermutlich bei diesem Wert nicht mehr gegebene Konvergenz, eine Verschlechterung des Laufzeitverhaltens ein.

Die nächste Tabelle zeigt bei $K = 0.1$ für verschiedene G_ψ die wahrscheinlich günstigste Wahl der Ordnung in K , bis zu der die Bestimmung des Ratevektors durchzuführen ist. Verglichen wird erneut mit dem Fall ohne Ratevektor:

Tabelle 22: **Zahl der Iterationen im CG-Verfahren bei günstigster Ordnung HPE für verschiedene Yukawakopplungen**

G_ψ	0.3	0.6	1.0	2.0	2.4	2.4
a	34	45	69	216	539	539
b	1	2	3	4	304	206
Ordnung	25	25	30	70	200	300

Wie zu erwarten, wird der Gewinn durch die HPE mit zunehmender Yukawakopplung zunächst immer größer, beginnend in $G_\psi = 0.3$ bei 23.5 Prozent bis zu fast 66 Prozent in $G_\psi = 2.0$. Der Tabelle läßt sich ferner entnehmen, daß es nicht nur in K , sondern auch in G_ψ einen im Bezug auf die Beschleunigung durch Wahl eines geeigneten Ratevektors „kritischen“ Wert gibt. Dieser liegt ungefähr bei 2.4. Für größere Werte der Yukawakopplung trat analog zum Verhalten in K sogar eine Verschlechterung ein. So überstieg die Zahl der erforderlichen Iterationen mit HPE in $G_\psi = 3.0$ die der Iterationen ohne Ratevektor in allen untersuchten Ordnungen wenigstens um den Faktor 3.

Das mit Hilfe der einen Gleichgewichtskonfiguration gewonnene Bild von der Leistungsfähigkeit dieses Rateverfahrens wird durch die Verwendung von Zufallskonfigurationen bestätigt und nimmt dort schärfere Konturen an. Nutzt man wie bisher wieder zehn verschiedene Zufallskonfigurationen zur Bestimmung einer mittleren Laufzeit, ergibt sich in sehr günstigen Fällen eine mehr als vierzigfache Beschleunigung im Vergleich zum Fehlen eines Ratevektors, ein mit aller Wahrscheinlichkeit vermöge des Gottliebtricks niemals erreichbarer Wert. Parametersätze, für die der

HPE-Ratevektor eine Beschleunigung der Inversion bedeutete, erfüllten eine der folgenden Eigenschaften:

1. Das Produkt der Yukawakopplungen $|G_\psi G_\chi|$ verschwindet gänzlich oder ist wenigstens sehr klein:

So ergab die HPE bis zur fünfzigsten Ordnung in $K = 0.1$ für die Werte $G_\psi = 0.6, G_\chi = 0.0$, aber auch $G_\psi = 0.6, G_\chi = 0.01$ eine ca. dreifache Beschleunigung, für $G_\psi = 0.6, G_\chi = 0.1$ allerdings eine wenigstens vierfache Verschlechterung gegenüber fehlendem Ratevektor. Je mehr man sich für $G_\chi = 0$ dem Wert $G_\psi = 0$ näherte, desto kleiner wurde der Gewinn durch den HPE-Ratevektor. In $G_\psi = G_\chi = 0$ war er nahezu aufgebraucht.

- (a) Dabei darf allerdings auch der Abstand zwischen G_ψ und G_χ nicht zu groß werden:

War durch eine HPE bis zur hundersten Ordnung in $K = 0.1$ für $G_\psi = 1.0, G_\chi = 0.0$ noch eine ca. sechsfache Beschleunigung zu erreichen, so brachte die HPE beliebiger Ordnung in $G_\psi = 3.0, G_\chi = 0.0$ keine Vorteile mehr.

- (b) Auch der fermionische Hoppingparameter darf einen bestimmten Wert nicht überschreiten:

Hier ist diese Bedingung sogar besonders restriktiv, denn bereits in $K = 0.11$ war für das Wertepaar $G_\psi = 1.0, G_\chi = 0.0$ keine Verbesserung mehr zu erreichen. Für größere K -Werte verstärkte sich diese Tendenz.

2. Das Produkt $|G_\psi G_\chi|$ ist hinreichend groß:

So erhält man z.B. durch die HPE bis zur zehnten Ordnung in $K = 0.1$ für $G_\psi = G_\chi = 2$ eine fast vierzigfache Beschleunigung gegenüber fehlendem Ratevektor.

Jetzt darf auch der fermionische Hoppingparameter größere Werte annehmen. In $G_\psi = G_\chi = 5$ z.B. bedeutet die HPE zehnter Ordnung noch in $K = 1.0$ eine Verbesserung.

Die obigen Resultate legen es nahe, daß in gewissen Situationen, d.h. für bestimmte Werte der direkten Parameter, diesem Verfahren gegenüber dem „Gottliebtrick“ der Vorzug zu geben ist, falls sich letzterer überhaupt anwenden läßt. Der Raum der direkten Parameter scheint sich diesbzgl. in ganz ähnlicher Weise aufteilen zu lassen wie bei der Untersuchung der verschiedenen Inversionsalgorithmen. Die Bereiche, in denen die Anwendung des HPE-Verfahrens Erfolg verspricht, sind im wesentlichen diejenigen, für die der CG-Algorithmus hinter die MR- bzw. BCG-Methode zurücktritt. In Kombination mit diesem Rateverfahren könnte sich daher die Verteilung der Inversionsalgorithmen im Raum der direkten Parameter, insbesondere für den Bereich großer Yukawakopplungen, zugunsten des CG-Verfahrens verschieben. Da der in dieser Hinsicht interessante Parameterbereich nicht Gegenstand numerischer Studien war, soll die Untersuchung des HPE-Rateverfahrens mit dem beschriebenen, groben Bild beendet sein.

Das gute Abschneiden des Rateverfahrens in Teilbereichen des Parameterraumes mit $K \leq 0.1$ ließ zunächst auch eine Variation obiger Methode attraktiv erscheinen, die hier nur am Rande erwähnt werden soll: So besteht die Möglichkeit, vor der Matrixinversion mit großem K ($K = 0.1274$) die Inversion für mehrere kleine K ($K \leq 0.1$) unter Zuhilfenahme der HPE sehr schnell auszuführen, und diese dann zu dem gewünschten Hoppingparameter zu extrapolieren, in der Hoffnung,

daß der so gewonnene Ratevektor die Inversion dann auch für das wirkliche K drastisch verkürzt. Mit der bisherigen Gleichgewichtskonfiguration ergab sich in $G_\psi = 1.0, G_\chi = 0.0$ folgendes Bild für die Inversion bei $K = 0.1274$ (aufgezählt werden die vom CG-Algorithmus benötigten Iterationen):

- ohne Extrapolation :
192 Iterationen
- Extrapolation 0. Ordnung mit $K = 0.1$:
69 + 183 Iterationen
- Extrapolation 1. Ordnung mit $K = 0.075, 0.1$:
31 + 60 + 171 Iterationen
- Extrapolation 2. Ordnung mit $K = 0.05, 0.075, 0.1$:
21 + 27 + 60 + 168 Iterationen
- Extrapolation 4. Ordnung mit $K = 0.0, 0.025, 0.05, 0.075, 0.1$:
15 + 13 + 16 + 27 + 60 + 166 Iterationen

Offensichtlich kann die Zahl der für den eigentlichen K -Wert notwendigen Iterationen zwar immer weiter verringert werden; der Gewinn steht jedoch in keinem Verhältnis zum Aufwand. Angesichts der mit höherem Extrapolationsgrad steigenden Zahl insgesamt erforderlicher Iterationen scheint eine Fortführung dieser Strategie in relevanten Parameterbereichen sinnlos.

5.5.3 Das Rateverfahren mit schneller Fouriertransformation

Das Rateverfahren mit schneller Fouriertransformation stellt nach gescheitertem Preconditioning mit schneller Fouriertransformation einen weiteren Versuch dar, die Kenntnis der inversen Fermionmatrix Δ bzw. Δ^+ für konstantes Skalarfeld doch noch zu nutzen. Dazu verwendet man für die Lösung der Gleichung $Q^+ Q \chi = r$ den Ausdruck $\chi_0 = \Delta \Delta^+ r$ als Startvektor (b). Die Inversen Δ^+ bzw. Δ wurden mit dem Mittelwert des aktuellen Skalarfeldes berechnet. Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle zusammengefaßt. Sie ergaben sich für eine Gleichgewichtskonfiguration in $G_\psi = 0.3, G_\chi = 0.0, K = 0.1$. Verglichen wird dieses Verfahren mit dem „Gottliebtrick“ nullter Ordnung (a). Die angegebenen Werte stellen die in der betrachteten Trajektorie mittlere erforderliche Zahl der CG-Iterationen dar.

Tabelle 23: Zahl der Iterationen im CG

G_ψ	0.0	0.1	0.2	0.3	0.6	1.0
a	6.2	31.4	37	53	104.4	328
b	1	47	55	75	132.2	329

Im Lichte der Resultate und des erforderlichen Rechenzeitaufwandes zur Bestimmung des Ratevektors ist wohl zumindest im Parameterbereich, der für das Higgs-Yukawa-Projekt relevant ist, von dieser Methode keine Verbesserungen zu erwarten. Auch eine Beschleunigung für „exotischere“ Werte der direkten Parameter ist danach eher unwahrscheinlich.

5.6 Rechneranpassungen

Etwas abseits der bisherigen Thematik dieses Kapitels stehen programmimmanente Optimierungsversuche, die sich in erster Linie mit der Abstimmung vorhandenen Quellcodes auf vorgegebene Rechnerarchitekturen befassen.

Eine derartige Anpassung ist oft mit großem Zeitaufwand verbunden und wird daher in der Regel nur an den Programmteilen vorgenommen, die maßgeblich zum Verbrauch von CPU-Zeit beitragen. Wie bereits mehrfach erwähnt, bestehen diese Programmteile in unserem Fall aus Routinen zur Matrixmultiplikation mit der ursprünglichen, der adjungierten oder einer durch Zerlegung abgewandelten Fermionmatrix. Zwar lag für sie schon eine hinsichtlich der Anzahl erforderlicher arithmetischer Operationen nahezu „perfekte“ Programmversion vor – die Optimierung bestand darin, sämtliche Multiplikationen mit Null, die in ihrer Gesamtheit bei den hier vorliegenden dünnen Matrizen die Zahl der relevanten Multiplikationen bei weitem übertreffen, zu vermeiden –; aber nicht nur die dadurch reduzierte Zahl der Speicherzugriffe, sondern auch die Art und Weise des Zugriffs ist für den Zeitbedarf entscheidend. Das optimale Zugriffsverfahren hängt natürlich vom verwendeten Rechnertyp ab.

5.6.1 Anpassung an die CRAY Y-MP

Obwohl die Programme schon für Vektorrechner dieses Typs geschrieben waren, gab es noch kleine Verbesserungsmöglichkeiten. Sie basierten im wesentlichen darauf, die Zahl der Feldaufrufe im „Gather-Scatter“-Betrieb [59] möglichst gering zu halten. Qualitativ entsprach die im Programm vorgefundene Situation dem folgenden Beispiel:

```

DO 10      i = 1,imax
DO 10      j = 1,jmax
DO 10      k = 1,kmax
            RES(k,j) = RES(k,j) + a · A(F(k,i),G(j)) + b · B(F(k,i),j)
10  ENDDO .                                     (229)

```

Die i, j, k sind Feldindices und die F, G Indexfunktionen, die in einem zu Beginn aufgerufenen Unterprogramm einmal festgelegt werden. Da auf der CRAY Y-MP nur die innerste DO-Schleife vektorisiert, wurde die Schleifenanordnung so gewählt, daß $kmax$ größer als $imax$ bzw. $jmax$ war. Dies führte zunächst zu der Idee, ein Unterprogramm zur Berechnung modifizierter Indexfunktionen f, g, h zu erstellen, welches nach einmaligem Aufruf anstelle von (229) zu schreiben erlaubt:

```

DO 10      l = 1,imax · jmax · kmax
            RES(f(l)) = RES(f(l)) + a · A(g(l)) + b · B(h(l))
10  ENDDO .                                     (230)

```

Das Ziel, die Vektorisierung aller Operationen, wurde so zwar erreicht, allerdings ergab sich daraus kein Laufzeitgewinn. Die Begründung liegt in dem unterschiedlichen Zugriff auf die Feldelemente: Während in (229) durch die Indices k und j wenigstens noch teilweise eine lineare Indizierung gegeben ist, unterliegt (230) vollständig einer nichtlinearen Indizierung. Ersteres bedeutet für den Computer einen einfachen Zugriff auf die Feldelemente, wohingegen die nichtlineare Feldindizierung einen so genannten „Gather-Scatter“-Zugriff erfordert. Die „Gather-Scatter“-Vektorisierung ist aber in der Regel bis zu einem Faktor zwei langsamer als die Vektorisierung beim

Gebrauch linear indizierter Felder [59]. Diese Erkenntnis führte zu folgendem Beschleunigungsversuch:

Zur Vermeidung von „Gather-Scatter“ wird zunächst die Schleife

```
DO 10      j = 1, jmax
DO 10      m = 1, imax · kmax
            C(m, j) = a · A(m, G(j)) + b · B(m, j)
10  ENDDO ,
```

(231)

gefolgt von

```
DO 10      i = 1, imax
DO 10      j = 1, jmax
DO 10      k = 1, kmax
            RES(k, j) = RES(k, j) + C(F(k, i), j)
10  ENDDO
```

(232)

durchlaufen. In diesem Beispiel spart man sich so einen „Gather-Scatter“-Zugriff. Für das eigentliche Programm resultierte daraus je nach Gittergröße ein Laufzeitgewinn von zehn bis fünfzehn Prozent.

5.6.2 Anpassung an die CM-2

Hardware

Ohne zu sehr ins Detail gehen zu wollen, sollen nun einige Informationen zum Parallelrechner CM-2 gegeben werden, die für das Verständis des Folgenden unbedingt erforderlich sind. Genauere und ausführliche Darstellungen finden sich u.a. in [60, 61, 62].

Bei der CM-2 handelt es sich um einen Daten-parallel-Rechner, nicht also um einen Rechner, der Prozeduren parallelisiert. Die CM-2 spaltet das Programm demnach nicht in viele Teilaufgaben auf, die dann parallel ausgeführt werden, sondern verarbeitet, wie der Name sagt, viele Daten synchron und in gleicher Weise. So kann in günstigen Fällen z.B. die Addition zweier Matrizen auf der CM-2 mit einer skalaren Operation auf einfachen Computern verglichen werden.

Zudem ist die CM-2 ein „Single Instruction Multiple Data“-Computer, d.h. alle Prozessoren arbeiten im Gleichschritt.

Eine volle CM-2 (in Bonn stand uns eine Achtel, im Los Alamos National Laboratory (LANL) eine Viertel CM-2 zur Verfügung) besteht aus 64K ein-bit-Prozessoren. Sie befinden sich, zusammengefaßt in Gruppen zu 32, in den 2K SPRINT-Knoten, den eigentlichen Arbeitseinheiten des Computers. Ein solcher Knoten enthält zudem einen 1MB Speicher und eine FPU (floating-point unit). In Bonn war dies ein 32-bit-Prozessor, in LANL ein 64-bit-Prozessor.

Zwei verschiedene Arbeitskonzepte sind auf der CM-2 verwirklicht. Sie basieren auf unterschiedlichen Speichermodi in den SPRINTs. Deren Speicher sind 32 bit breit, d.h. ein Speicherzugriff geschieht auf ein Wort von 32 bit Länge. Die zu verarbeitenden Fließkommazahlen lassen sich dann prinzipiell auf zwei Arten anordnen:

1. Eine Option besteht im „fieldwise“-Modus, d.h. ein Wort enthält von jedem der 32 Prozessoren jeweils ein bit. Dies hat den Vorteil, daß bei der bitseriellen Datenübertragung zwischen den Knoten ein Wort als Ganzes auf die dafür vorgesehene Pipeline geschoben werden kann. Allerdings hat man dabei

einen schwerwiegenden Nachteil in Kauf zu nehmen, insoweit als bei dieser Anordnung 32 Worte aus dem Speicher gelesen werden müssen, um eine 32-bit-Fließkommazahl in die FPU zu übertragen. Man liest also unter Umständen 31 Zahlen, die man garnicht benötigt.

2. Die Alternative dazu ist der „slicewise“-Zugriff. Dieser Modus vermeidet das überflüssige Lesen, da in der dann gegebenen Anordnung ein 32-bit-Wort eine vollständige Fließkommazahl enthält. Dadurch wird ein großer Teil an Datenübertragungen eingespart. Besagter Arbeitsmodus ist nur auf den 64-bit-FPUs verwirklicht.

Ein weiterer, in unserem Fall gravierender Nachteil des „fieldwise“-Modus ist dessen geringe Flexibilität im Hinblick auf verschiedene Gittergrößen. Er erlaubt nur Felder, deren Ausdehnung für jede Dimension eine Potenz von Zwei ist. Von dieser Form abweichende Felder werden dahingehend erweitert. So wird z.B. ein $10^3 \cdot 24$ -Feld auf ein $16^3 \cdot 32$ -Feld vergrößert. Die leeren Feldelemente werden dann überflüssigerweise mitverarbeitet, und die CM-2 wird in einem solchen Fall folglich maximal zu 18% ausgenutzt. Der „slicewise“-Modus stellt keine so restriktiven Bedingungen, sondern lässt Felder zu, deren Gesamtgröße ein Vielfaches von viermal der Anzahl der Knoten ist. Für die 256 Knoten der CM-2 in Bonn bedeutet dies bei einem $10^3 \cdot 24$ -Feld eine Erweiterung auf $10 \cdot 12^2 \cdot 32$, also einen Nutzungsgrad von 52%.

Ein zweiter wichtiger Punkt neben der Anordnung der Daten im Speicher ist die Abbildung des Gitters auf die Prozessorstruktur. Günstig ist es natürlich, wenn auf dem Gitter benachbarte Punkte auch auf benachbarten Prozessoren plaziert sind. Da aufgrund der Wechselwirkung in dem von uns untersuchten physikalischen Modell nur eine Kommunikation zwischen nächsten Nachbarn stattfindet, würde sich der Datenaustausch dann auf benachbarte Prozessoren beschränken. Übersteigt die Zahl der Gitterplätze die der physikalischen Prozessoren, werden mehrere Plätze auf einen Prozessor abgebildet; alternativ kann man sich vorstellen, daß eine den Gitterplätzen entsprechende Anzahl von virtuellen Prozessoren erzeugt wird. Da der Datenaustausch innerhalb eines physikalischen Prozessors (memory-to-memory) viel schneller abläuft als zwischen denselben, ist eine solche Abbildung dann günstig, wenn auf einem physikalischen Prozessor ein Gitterbereich Platz findet, der ein großes Verhältnis von Volumen (memory-to-memory) zu Oberfläche (Austausch zwischen den physikalischen Prozessoren) aufweist, also ein Hypercube. Dies war z.B. für das von uns in LANL verwendete $8^3 \cdot 16$ -Gitter der Fall. Von den dortigen 512 Prozessoren erhält jeder einen 2^4 -Hypercube. In Bonn hätte man bei gleichem Gitter eine wesentlich ungünstigere Situation vorliegen.

Software

Der vorherige Abschnitt zeigt, daß die Vorgehensweise bei Durchnumerierung des Gitters, die sich auf der CRAY Y-MP wegen der dann längeren, innersten Schleife empfiehlt, auf der CM-2 nicht günstig ist, da sie der Rechnerarchitektur widerspricht. Die erste Aufgabe bestand also darin, den im ersten Fall verwendeten einen Gitterindex in vier Indices, einen für jede Dimension, aufzuspalten. Da die meisten im ursprünglichen Programm verwendeten Felder neben dem Gitterindex noch durch vier weitere Indices gekennzeichnet sind, wären sie dann achtdimensional. Dies erlaubt weder FORTRAN77 noch das an FORTRAN90 angelehnte und teilweise darüberhinaus gehende CM-FORTRAN, die alle nur maximal siebendimensionale Felder verarbeiten können. Die Trennung der Raumzeitindices, war also durch Zusammenfassung anderer Indices vorzubereiten. Nach vollzogener Separation mußten

die Felder in der oben angesprochenen Weise auf der CM-2 positioniert werden. Dafür standen mehrere Compilerdirektiven zur Verfügung.

Die Lösung dieser Probleme erlaubte die Nutzung des ersten mächtigen Befehls im CM-FORTRAN. CSHIFT ist in der Lage, Felder auf der CM-2 in die gewünschte Richtung um die gewünschte Strecke zu verschieben. Dies erwies sich insbesondere wegen der Nächste-Nachbar Wechselwirkung als günstig. Um ein Feld A mit einem Feld B so zu verknüpfen, daß die Feldelemente von A jeweils mit denen von B, die z.B. um eine Gittereinheit in x-Richtung verschoben sind, wechselwirken, verschiebt man das Feld A um +1 oder B um -1 in Richtung x, so daß die zusammengehörigen Elemente aufeinanderliegen. Erst dann erfordert z.B. die Addition beider Felder keine Kommunikation mehr unter den Prozessoren und ist tatsächlich ein einziger Rechenschritt, vergleichbar mit der Addition zweier Skalare. CSHIFT verhindert also genau das, was sich auf der CRAY als ungünstig erwies: die indirekte Adressierung und den damit verbundenen „Gather-Scatter“-Zugriff.

Ein weiterer Unterschied zum CRAY-Programmierstil besteht darin, daß man auf der CM-2 die kürzeren Schleifen, wenn sie zusammen mit Schleifen über die Raumzeit auftreten, als innere Schleifen schreibt. Da die Indices der kurzen Schleifen auf Elemente verweisen, die auf ein und demselben Prozessor plaziert sind, ergibt sich dadurch eine Einsparung hinsichtlich der Kommunikation zwischen den Prozessoren.

Derartige Umstrukturierungen wurden zunächst nur an dem Programmteil vorgenommen, der die Matrixmultiplikation beinhaltet, da er der zeitaufwendigste ist. Als Ergebnis der Bemühungen kann man festhalten, daß besagter Programmteil auf der CM-2 in Bonn, bedingt durch die Leistungsfähigkeit der einzelnen Prozessoren, um einen knappen Faktor Drei langsamer läuft als auf der CRAY Y-MP in Jülich.

In LANL erbrachte allein die Verwendung des dortigen „slicewise“-Compilers gegenüber dem „fieldwise“-Modell für diese Version eine Beschleunigung um den Faktor 1.8. Ein ausführliches „Timing“ zeigte das große Gewicht der Kommunikation im vorliegenden Programm, sie benötigte etwa 70% der gesamten Laufzeit. Ein von R.G. Brickner zur Verfügung gestellter Befehl, der zu der Zeit noch nicht im CM-FORTRAN enthalten war, konnte dort Abhilfe schaffen. PSHIFT ermöglichte gleichzeitiges CSHIFT in alle gewünschten Richtungen um beliebige Strecken. Die zu diesem Zweck einzuführenden Hilfsfelder verursachen allerdings einen erheblichen Speichermehraufwand. Die Wirksamkeit des Befehls hängt sehr stark davon ab, wie das Gitter auf die Prozessoren abgebildet wird. Eine hyperkubische Abbildung bedeutet eine gleiche Belastung für alle Richtungen. Bei einer stark asymmetrischen Verteilung bestimmt die bzgl. PSHIFT langsamste Richtung die Zeitspanne des gesamten Befehls. Auf dem günstigen $8^3 \cdot 16$ -Gitter führt dies zu einer erneuten Beschleunigung der Kommunikation um das 2.7-fache. Eine Abschätzung ergab, daß damit die Grenze des unter solchen Bedingungen Machbaren erreicht war [63].

Nicht unerwähnt bleiben soll eine für die Zukunft interessante, weitere Verbesserungsmöglichkeit. Sie besteht in der Verwendung des sogenannten „stencil“-Compilers, der zum damaligen Zeitpunkt allerdings nur für zweidimensionale Gitter zur Verfügung stand. Durch Verwendung einer Schablone für Standardkommunikationsstrukturen, wie z.B. der Nächste-Nachbar-Wechselwirkung, ist dieser Compiler in der Lage, auch die memory-to-memory Umspeicherungen innerhalb eines Prozessors zu vermeiden. Positiv kann sich so etwas aber erst auswirken, wenn größere Untergitter auf einem physikalischen Prozessor liegen. Für das 2^4 -Untergitter war daher keine Verbesserung zu erwarten [63].

Auch der arithmetische Anteil des Programms konnte noch wesentlich beschleunigt

werden. Dazu waren viele Änderungen auf CM-FORTRAN-Ebene erforderlich. Allerdings werden dort immer wieder Optimierungen nötig sein. So war es bei der damaligen Compilerversion von Vorteil, Schleifen über serielle Dimensionen zu „unrollen“, was sich beim nächsten Compiler release schon wieder ändern kann. Die vermutlich weitestgehend optimierte Version war schließlich um einen Faktor Zwei schneller als die CRAY-Version. Sie wies immer noch einen Kommunikationsanteil von 63% auf. Angesichts dieser Tatsache schien es wenig sinnvoll, die Arithmetik durch Verwendung der CM-2 Maschinensprache CMIS weiter zu beschleunigen, zumal dies mit erheblichem Aufwand verbunden gewesen wäre.

Die immer wieder erwähnte Dominanz der Kommunikation in unserem Programm ist auch der Grund für die deutlich größere Beschleunigung von QCD-Programmen bei Verwendung der CM-2 [58, 61]. Dort nimmt die Kommunikation im Verhältnis zur Arithmetik, bedingt durch die Verarbeitung der SU(3) Eichfelder, einen wesentlich kleineren Raum ein. Zudem lassen sich aus diesem Grunde auch größere Gitter (16^4 und mehr) behandeln. Das bedeutet größere Untergitter, also mehr memory-to-memory Kommunikation, und in zwei Dimensionen einen deutlichen Vorteil durch den „stencil“-Compiler.

6 Kopplungsgrenzen im $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -symmetrischen Higgs-Yukawa-Modell

Einige der im Abschnitt 4.5.3 für das $U(1)_R \otimes U(1)_L$ -Modell mit $N_f = 1$ Fermionen bereits angedeuteten Fragestellungen wurden im Rahmen des Higgs-Yukawa-Projektes am $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -symmetrischen Modell mit $N_f = 2$ ausführlicher untersucht. Das betrifft insbesondere die Kopplungsschranken, also die extremalen Werte der renormierten Higgskopplung g_R in Abhängigkeit von der renormierten Yukawakopplung $G_{R\psi}$ sowie die maximal erreichbaren Yukawakopplungen $G_{R\psi}$ für den Fall der im Golterman-Petcher-Mechanismus entkoppelnden Spiegelfermionen [32, 34].

Zu diesem Zweck durchgeführte numerische Untersuchungen stützten sich hinsichtlich der verwendeten Matrixinversionsalgorithmen wesentlich auf die in Kapitel 5 dargestellten Resultate.

Die Simulation einer geraden Anzahl von Fermiondubletts, in der Minimalversion also von $N_f = 2$, d.h. einem Fermion- und einem dazu entarteten Spiegelfermiondublett, wird, wie bereits mehrfach erwähnt, durch die Verwendung des Hybrid-Monte Carlo-Algorithmus erzwungen. Zwar entfernt man sich damit zunächst von den physikalisch relevanten Modellen, die Spiegelfermionen in dieser Form nicht enthalten, aber wegen des Fehlens von Eichfeldern im vorliegenden Modell lässt sich mit Hilfe der Ladungskonjugation eine Transformation des „technischen“ Spiegelfermiondubletts in ein gewöhnliches Fermiondublett durchführen, was einem möglichen Kontinuums-limes von zwei entarteten $SU(2)$ -Dubletts entspricht. Ein solches Modell sollte sich, wie auch die Resultate der „mean-field“-Rechnungen zeigen, qualitativ nicht von demselben Modell mit $N_f = 4$, welches dem Auftreten einer vierten, schweren Fermionengeneration Rechnung trägt, unterscheiden.

Die Wirkung des Modells $S = S_B + S_F$ wurde für ein $SU(2)$ -Dublett bereits während der „mean-field“-Rechnungen definiert. Der $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -symmetrische, rein skalare Anteil lautete:

$$S_B = \sum_x \left\{ \frac{1}{2} \text{Tr}(\varphi_x^+ \varphi) + \lambda \left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\varphi_x^+ \varphi) - 1 \right]^2 - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \text{Tr}(\varphi_{x+\mu}^+ \varphi) \right\}$$

mit einem $2 \otimes 2$ Skalarfeld $\varphi_x \in SU(2)$. Der fermionische Anteil, in Kapitel 2 in der A-B-Formulierung angegeben, stellt sich in chiraler Form wie folgt dar:

$$\begin{aligned} S_F = & \sum_x \left\{ \mu_{\psi\chi} [(\bar{\chi}_x \psi_x) + (\bar{\psi}_x \chi_x)] \right. \\ & - K \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} [(\bar{\chi}_{x+\hat{\mu}} \gamma_\mu \psi_x) + (\bar{\psi}_{x+\hat{\mu}} \gamma_\mu \chi_x) + r ((\bar{\chi}_{x+\hat{\mu}} \psi_x) - (\bar{\chi}_x \psi_x) + (\bar{\psi}_{x+\hat{\mu}} \chi_x) - (\bar{\psi}_x \chi_x))] \\ & \left. + G_\psi [(\bar{\psi}_{Rx} \varphi_x^+ \psi_{Rx}) + (\bar{\psi}_{Lx} \varphi_x \psi_{Rx})] + G_\chi [(\bar{\chi}_{Rx} \varphi_x \chi_{Rx}) + (\bar{\chi}_{Lx} \varphi_x^+ \chi_{Rx})] \right\}. \end{aligned} \quad (233)$$

Wie bisher sind κ bzw. K der skalare bzw. fermionische Hoppingparameter, λ die Higgsselbstkopplung und $\mu_{\psi\chi}$ die Fermion-Spiegelfermion-Mischmasse, die in der vorliegenden Normierung den Wert $1 - 8rK$ annimmt. Der Wert des Wilsonparameters r betrug in allen Rechnungen Eins, da nur in diesem Fall die Osterwalder-Schrader-Positivität bewiesen werden konnte. Die Indices L, R bezeichnen die chiralen Komponenten der Fermionfelder.

Die im Rahmen dieses Modells erzielten numerischen Ergebnisse für die Trivialitätsschranke [32] entsprechen einschließlich ihrer Deutung den in Abschnitt 4.5.3 für das U(1)-Modell aufgezeigten Tendenzen und bedürfen daher keiner detaillierteren Erläuterung. Mit einer aufgrund der Verwendung des Hybrid-Monte Carlo-Verfahrens im Vergleich zu den Untersuchungen des U(1)-Modells deutlich größeren Statistik gewinnen die in 4.5.3 nur als Trend formulierbaren Resultate hier allerdings an Aussagekraft.

Letzlich ergab sich eine akzeptable Übereinstimmung der numerisch bestimmten Trivialitätsgrenze mit der analytisch auf Basis der Einschleifen- β -Funktion gewonnenen. Die Ursache für die dabei noch auftretenden Diskrepanzen bei größeren Yukawakopplungen liegt vermutlich in „finite-size“-Effekten. Eine aufgrund der verfügbaren Rechenzeit mögliche Betrachtung verschiedener G_ψ -Werte zeigte, daß diese Effekte mit wachsender Yukawakopplung zunehmen. Die wichtigsten Meßergebnisse finden sich in der weiter unten folgenden Tabelle.

Auch für das Studium der Vakuumstabilitätsgrenze waren die im Golterman-Petcher-Entkopplungsfall verbliebenen, freien Parameter κ , G_ψ zunächst wieder so einzustellen, daß sich das System innerhalb der physikalisch relevanten FM-Phase dem PM-FM-Phasenübergang nähert.

Wesentlich für die Interpretation dieses Vorganges als Kontinuumslijmes bei unendlich ausgedehntem Gitter, also für die Divergenz der Korrelationslänge, ist das Vorliegen eines Phasenübergangs zweiter Ordnung. Dieser unterscheidet sich vom Phasenübergang erster Ordnung durch die stetige Entwicklung des Ordnungsparameters, in diesem Fall also der Magnetisierung. Während die Messungen bei divergenter Higgskopplung λ auf eine solche stetige Entwicklung hindeuten, war für endliche λ -Werte im U(1)-Modell bei $K = 0$, $G_\psi G_\chi > 0$ ein Phasenübergang erster Ordnung gefunden worden [26] und daher auch im qualitativ gleichen SU(2)-Modell zu erwarten.

Im hier vorliegenden Fall verschwindenden Produktes $G_\psi G_\chi$ sind die numerischen Resultate jedoch mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung konsistent, ein Bild, welches durch eine $1/N_f$ -Entwicklung des effektiven Potentials in führender Ordnung bestätigt wurde, da letzteres wegen fehlender quartischer Terme keine Doppelwallstruktur besitzt [34].

Nach dieser Feststellung konnte mit der Einstellung der Parameter κ und G_ψ begonnen werden. Sie ist sehr sorgfältig vorzunehmen, denn einerseits sollte das System wenn möglich so nahe an den PM-FM-Phasenübergang gebracht werden, daß es sich im Skalengebiet befindet, um für den Kontinuumslijmes relevante Informationen liefern zu können; andererseits muß es auf endlichem Gitter weit genug vom Phasenübergang entfernt sein, um zu große „finite-size“-Effekte zu vermeiden, die in der gebrochenen Phase wegen der Existenz masseloser Goldstone-Bosonen noch verstärkt werden.

Ziel war bei den verwendeten Gittergrößen von $6^3 \cdot 12$ und $8^3 \cdot 16$ eine Higgsmasse $m_{R\sigma}$ von 0.6 bis 0.8 bei gleichzeitig nicht zu kleiner Fermionmasse. Dazu wurde sowohl κ bei festem G_ψ als auch G_ψ bei festem κ variiert.

Um auch große Yukawakopplungen zu untersuchen, geschah letzteres in $\kappa = 0$: Will man den Bereich bewiesener Osterwalder-Schrader-Positivität [29] nicht verlassen, d.h. soll κ nicht negativ werden, ist $\kappa = 0$ der Wert, der die größte Yukawakopplung zuläßt, wie auch ein Blick auf die Abbildungen 7 bzw. 9 zeigt, die ein typisches Phasendiagramm wiedergeben. Die Resultate dieser Untersuchungen sowie des Studiums der oberen Grenze zeigt die folgende Tabelle:

Tabelle 24: Kopplungsschranken für g_R in Abhängigkeit von $G_{R\psi}$

	G_ψ	κ	$\langle \sigma \rangle$	v_R	$m_{R\sigma}$	$\mu_{R\psi}$	g_R	$G_{R\psi}$
a	0.25	0.095	0.251(7)	0.196(11)	0.79(7)	0.271(8)	42(11)	1.38(4)
b	0.25	0.099	0.393(7)	0.241(10)	0.59(9)	0.407(9)	18(3)	1.69(4)
c	0.25	0.101	0.525(6)	0.304(9)	0.57(3)	0.59(3)	10(2)	1.68(10)
d	0.3	0.090	0.438(6)	0.27(1)	0.75(7)	0.55(6)	23(3)	2.04(10)
e	0.3	0.095	0.754(4)	0.417(11)	0.76(7)	0.91(6)	10(1)	2.19(11)
f	0.3	0.100	1.260(5)	0.67(2)	0.84(6)	1.503(12)	4.8(8)	2.24(7)
g	0.62	0.0	0.424(3)	0.29(2)	1.23(9)	1.23(3)	53(11)	4.2(1.2)
h	0.63	0.0	0.469(3)	0.351(11)	1.65(13)	1.25(16)	63(16)	3.5(4)
i	0.65	0.0	0.523(3)	0.34(2)	1.39(14)	1.6(3)	53(18)	4.6(4)
A	0.3	0.30	0.439(1)	0.400(13)	1.17(7)	0.55(2)	26(7)	1.36(6)
BB	0.3	0.27	0.270(2)	0.25(1)	0.77(3)	0.342(2)	31(4)	1.35(6)
C	0.6	0.18	0.3524(18)	0.36(2)	1.36(10)	0.86(8)	36(6)	2.4(3)
DD	0.6	0.18	0.3389(13)	0.339(16)	1.31(7)	0.86(11)	38(4)	2.5(3)

Dort finden sich die wichtigsten renormierten Größen und die nackte Magnetisierung $\langle \sigma \rangle = \langle |\phi| \rangle$ für verschiedene nackte Kopplungen G_ψ und κ -Werte. Die durch Kleinbuchstaben gekennzeichneten Punkte zeigen Meßergebnisse für $\lambda = 10^{-6}$ auf dem $6^3 \cdot 12$ -Gitter. (Der Wert von λ wurde etwas größer als Null gewählt, um die Konvergenz des Pfadintegrals sicherzustellen.) Großbuchstaben bezeichnen die Daten für die Trivialitätsschranke, d.h. für $\lambda = \infty$, auf einem $6^3 \cdot 12$ -Gitter (einfache Großbuchstaben) bzw. einem $8^3 \cdot 16$ -Gitter (doppelte Großbuchstaben). Den Ergebnissen in den Punkten a,i,A,C liegen 5000, den übrigen Punkten ungefähr 10000 Messungen zugrunde.

Zu diesen Resultaten sei folgendes angemerkt:

1. Die Forderung nach nicht zu kleinen Fermionmassen μ_R zur Vermeidung großer „finite-size“-Effekte verhindert das Studium sehr kleiner Yukawakopplungen $G_\psi \ll 1$.
2. Bei der Analyse der Daten machen sich „finite-size“-Effekte u.a. dadurch bemerkbar, daß die skalare Masse $m_{R\sigma}$ auf dem FM-PM-Phasenübergang positive Werte annimmt und nicht, wie es auf unendlichem Gitter der Fall ist, verschwindet. Das geht so weit, daß der angestrebte Wertebereich $0.6 \leq m_{R\sigma} \leq 0.8$ zum Teil nicht erreicht werden konnte. Letzteres gilt, ähnlich wie für $\lambda = \infty$, für alle untersuchten Punkte bei $\kappa = 0$. Der kleinste Wert der skalaren Masse lag dort über Eins.
Da in den minimalen Werten der skalaren Masse ein sehr großer „finite-size“-Effekt zu vermuten ist, sollten für eine Interpretation der Daten, wie bereits in Abschnitt 4.5.3 erwähnt, immer nur Punkte betrachtet werden, die in der FM-Phase oberhalb dieses Minimums liegen.
3. Aber nicht nur in von Null verschiedenen Minima der skalaren Masse, sondern auch in ihrem Verhalten bei Annäherung an den Phasenübergang sind die Effekte endlichen Gittervolumens erkennbar. Sie führen in den Punkten c,b,a zu einem Anstieg der skalaren Masse, während auf unendlichem Gitter ein Rückgang zu erwarten ist. Ursache dafür ist ein Anwachsen der Volumeneffekte nahe des Phasenübergangs. Punkte, die in der FM-Phase zwischen dem Punkt kleinster skalarer Masse und dem Phasenübergang liegen, sind daher ebenfalls zu verwerfen.
4. Unter Berücksichtigung dieser Vorschriften kristallisieren sich schließlich die Punkte c,d,h für den Bereich kleiner Higgskopplung λ als optimal heraus. (Der

Punkt g wird wegen des großen Fehlers in $G_{R\psi}$ nicht weiter einbezogen.) Zusammen mit den Simulationsergebnissen für die Trivialitätsschranke und den analytischen Grenzen aus der Einschleifen- β -Funktion der Störungsrechnung finden diese Daten Eingang in die nachstehende Abbildung.

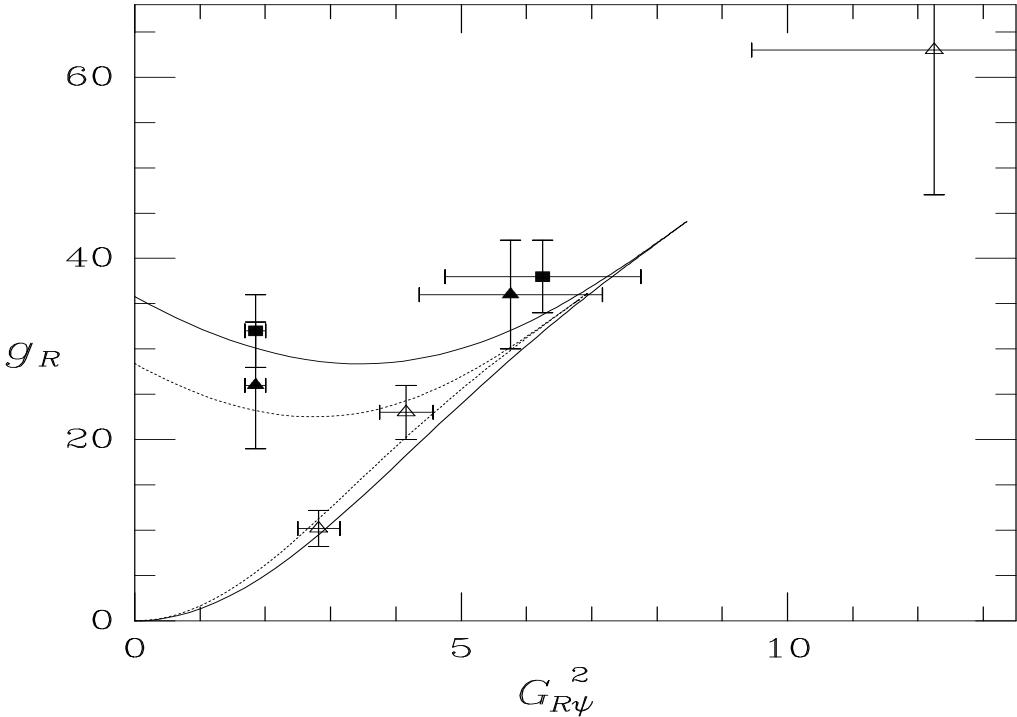


Abbildung 39: Daten für die obere und untere Grenze von g_R als Funktion von $G_{R\psi}^2$ zusammen mit den Einschleifen-Abschätzungen der Störungsrechnung bei einem Skalenverhältnis von $\Lambda/m_{R\sigma} = 3$ (durchgezogene Kurve) und $\Lambda/m_{R\sigma} = 4$ (gepunktete Kurve). Offene Symbole bezeichnen Datenpunkte der unteren Grenze (Punkte c,d,h aus Tabelle 24), ausgefüllte Symbole repräsentieren die Daten der oberen Schranke. Dreiecke stehen für Resultate auf $6^3 \cdot 12$ -Gittern, Quadrate für solche auf $8^3 \cdot 16$ -Gittern.

Die Übereinstimmung zwischen den Resultaten der numerischen Simulation und den Ergebnissen der Einschleifen-Störungsrechnung ist bemerkenswert gut und kann die in Abschnitt 4.5.3 gefundene Tendenz bestätigen, daß die Einschleifen-Störungsrechnung auch in Gegenwart schwerer Fermionen (der Punkt h liegt oberhalb und die Punkte d,C,DD knapp unterhalb der Unitaritätsschranke von $G_{R\psi} \leq \sqrt{2\pi} \simeq 2.5$) ihre Gültigkeit behält. Insbesondere zeigen die Punkte d und h, in denen die nackte Higgskopplung λ verschwindet, daß die Yukawakopplung alleine in der Lage ist, eine große renormierte Higgskopplung zu erzeugen.

Die Resultate für $G_{R\chi}$ sind innerhalb der Fehlergrenzen mit dem theoretischen Wert $G_{R\chi} = 0$ konsistent und werden in Tabelle 24 nicht gesondert aufgeführt. Sie stellen im Vergleich zu [31] eine Verbesserung der numerischen Simulation dar, welche auf der Berücksichtigung von Termen höherer Ordnung im inversen Fermionpropagator beruht:

In die Definition der renormierten Yukawakopplung mit Hilfe der zugehörigen, trunzierten, Einteilchen-irreduziblen 3-Punkt-Greenfunktion findet über das Abschneiden der äußeren Beine auch der inverse Fermionpropagator Eingang. Im Gegensatz zum Kontinuum ist auf dem Gitter daher eine Definition im fermionischen Impuls Null nicht möglich. Verwendet man stattdessen den kleinstmöglichen Impuls $k = (0, 0, 0, \pi/T)$, so lautet der inverse Fermionpropagator im Impulsraum bis zur ersten Ordnung:

$$\tilde{\Gamma}_R(k) \simeq i\gamma_4 \bar{k}_4 + M_R, \quad \bar{k}_4 \equiv \sin k_4 = \sin\left(\frac{\pi}{T}\right), \quad M_R = \begin{pmatrix} 0 & \mu_R \\ \mu_R & 0 \end{pmatrix} \quad (234)$$

mit der renormierten fermionischen Masse μ_R . Die Vernachlässigung des Terms $i\gamma_4 \bar{k}_4$ in [31] ist dort Ursache für große „finite-size“-Effekte. Erst auf größeren Gittern oder unter Hinzunahme dieses Terms werden die Effekte für die Yukawakopplungen so klein, daß die Werte von $G_{R\chi}$ mit Null verträglich sind.

Neben der in $\lambda = \infty$ bestimmten, oberen Grenze für die renormierte Higgskopplung, d.h. für die Higgsmasse, ist auch die Obergrenze der renormierten Yukawakopplung $G_{R\psi}$, also die maximale Masse der Fermionen, von Interesse. Das Vorgehen beim Studium dieses Aspektes stützt sich auf Beobachtungen in der reinen ϕ^4 -Theorie [10]. Diese lassen erkennen, daß dort die renormierte Kopplung in der Skalenregion zu beiden Seiten des PM-FM-Phasenübergangs einen maximalen Wert von $g_R \leq \frac{2}{3} \cdot g_U$ annimmt, wenn g_U die Unitätsschranke bezeichnet. Auch in ihrem Verhalten bei Annäherung an den Phasenübergang konnte im wesentlichen Übereinstimmung zu beiden Seiten des Übergangs festgestellt werden. Geht man für die Yukawakopplung in dem hier betrachteten Higgs-Yukawa-Modell von einem ähnlichen Verhalten aus, lassen sich Anhaltspunkte über deren Obergrenze in der physikalisch relevanten FM-Phase bereits durch Untersuchungen in der PM-Phase gewinnen.

Der Wunsch, in der PM-Phase zu arbeiten, entspringt der dort wesentlich einfacheren Einstellung der renormierten Yukawakopplung $G_{R\psi}$:

Während letztere in der gebrochenen Phase aufgrund der Beziehungen

$$g_R \equiv \frac{3m_{R\sigma}^2}{v_R^2}, \quad G_{R\psi} \equiv \frac{\mu_{R\psi}}{v_R} \quad (235)$$

durch die Forderung nach hinreichend kleinen, fermionischen und skalaren Massen bereits nahezu festgelegt ist, ist sie in der symmetrischen Phase allein von ihrem nackten Wert G_ψ abhängig.

(Die soeben angegebene Definition der Yukawakopplung ist eine andere als die weiter oben erwähnte Definition mit Hilfe der trunkierten, Einteilchen-irreduziblen 3-Punkt-Greenfunktion. Die auf beiden Wegen in den Simulationen gewonnenen Werte unterscheiden sich allerdings innerhalb der Fehlergrenzen nicht. Die Werte in Tabelle 24 beziehen sich auf die Definition in (235), die folgenden Daten auf diejenige über die 3-Punkt-Greenfunktion. Zur Unterscheidung wird für die mittels der 3-Punkt-Greenfunktion definierte Yukawakopplung die Bezeichnung $G_{R\psi}^{(3)}$ eingeführt.)

Wie bereits oben angedeutet, sollte sich der maximale Wert für $G_{R\psi}^{(3)}$ im Gebiet bewiesener Osterwalder-Schrader-Positivität durch Einstellung von G_ψ entlang der Achse $\kappa = 0$ ergeben. Diese Einstellung wurde zur Vermeidung großer „finite-size“-Effekte so vorgenommen, daß die physikalische skalare Masse m_ϕ auf dem $6^3 \cdot 12$ -Gitter bei ungefähr 0.7 lag. Derselbe Punkt wurde auch bei anderen Gittergrößen betrachtet, um das Volumenverhalten der interessierenden Größen abschätzen zu können. Die Resultate sind in der folgenden Tabelle zusammengefaßt:

Tabelle 25: **Maximale renormierte Yukawakopplung in der PM-Phase**
(Werte der nackten Größen: $\lambda = \infty$, $G_\chi = 0$, $G_\psi = 1.09$, $\kappa = 0$ and $K = 2/19$)

Size	m_R	Z_R	μ_R	$G_{R\psi}^{(3)}$
$6^3 \cdot 12$	0.60(17)	1.11(38)	0.664(5)	5.84(16)
$8^3 \cdot 12$	0.56(11)	1.36(57)	0.654(9)	6.04(37)
$8^3 \cdot 16$	0.51(11)	1.44(73)	0.63(1)	5.87(54)

Grundlage für die Daten auf dem $6^3 \cdot 12$ -Gitter sind 20000 Messungen, auf den großen Gittern jeweils 6000 Messungen.

Den Resultaten läßt sich zweierlei entnehmen:

1. $G_{R\psi}^{(3)}$ ändert seinen Wert beim Übergang zu größeren Gittern kaum; die Abweichungen bewegen sich innerhalb der Fehlergrenzen. Im Limes eines unendlichen Volumens sind demzufolge ähnliche Werte zu erwarten.
2. Der schließlich erreichte Wert für $G_{R\psi}^{(3)}$ liegt deutlich über der Unitaritätsschranke von $\sqrt{2\pi}$. Der Unterschied zum maximalen Wert in der gebrochenen Phase (Punkt h in Tabelle 24) ist dabei nicht sehr groß, läßt sich aber auch nicht vernachlässigen. Ein Grund für diese Diskrepanz mag sein, daß, wie der Wert der skalaren Masse im Punkt h andeutet, die dort verwendete Gittergröße nicht ausreicht, um in die Skalenregion vorzustoßen.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß die Einschleifen-Störungsrechnung in der Lage ist, die numerisch gefundenen Schranken der Higgskopplung zu beschreiben. Die nichtperturbativen Studien stützen demnach das störungstheoretische Scenario, die Trivialität des Higgs-Yukawa-Modells im Kontinuumslimes. Die Yukawakopplung erreicht allerdings Werte, die deutlich über der Unitaritätsschranke liegen und sich damit einer störungstheoretischen Behandlung entziehen. Dazu ist anzumerken, daß ihr Wert in der physikalisch relevanten FM-Phase auf vermutlich noch zu kleinen Gittern bestimmt wurde, also weitere Untersuchungen erforderlich sind. Der CPU-Bedarf für die bisherigen Studien betrug nach groben Schätzungen ungefähr 4000 Stunden auf der CRAY Y-MP.

7 Zusammenfassung

Das Hauptinteresse der vorangegangenen Untersuchungen galt der Ermittlung und Erprobung geeigneter, über die im Higgs-Yukawa-Modell bisher verwendeten Methoden hinausgehender Verfahren zum Studium physikalisch relevanter Fragestellungen. Die Nennung der wesentlichen Ergebnisse und einiger, sich daraus ergebender Empfehlungen für zukünftige Untersuchungen gitterregularisierter, fermionischer Theorien mögen diese Arbeit abschließen:

Im Bereich der analytischen Untersuchungen wurde die „mean-field“-Approximation (MFA) betrachtet:

Es zeigte sich, daß sie für das $U(1)_L \otimes U(1)_R$ -symmetrische Higgs-Yukawa-Modell in ihrem Gültigkeitsbereich trotz zum Teil grober Näherungen bei der analytischen Inversion der Hoppingmatrix brauchbare Resultate liefert, die in Teilen des Parameterraumes auch quantitativ korrekt sind. So können ihre Vorhersagen hinsichtlich der Lage von Phasenübergängen in Bereichen großer und kleiner, fermionischer Hoppingparameter K eine wertvolle Unterstützung bei der Erkundung des Phasenraumes durch numerische Simulationen sein und unter Umständen zu einer erheblichen Einsparung von Rechenzeit führen.

In Bereichen mittlerer K -Werte läßt die quantitative Genauigkeit der Vorhersagen zwar deutlich nach, aber auch dort werden viele numerisch festgestellte Sachverhalte in ihren Tendenzen korrekt reproduziert. Dies betrifft insbesondere die Existenz, Lage und Breite der ferrimagnetischen Phase bei Variation der Yukawakopplungen G_ψ, G_χ sowie des Hoppingparameters K .

Auch für das Higgs-Yukawa-Modell mit SU(2)-Symmetrie sind die MF-Daten mit den vorhandenen Resultaten im obigen Sinne verträglich; allerdings standen keine sehr ausführlichen numerischen Ergebnisse für einen Vergleich zur Verfügung.

Sämtliche Rechnungen werden aufwendiger, wenn man den Isinglimes verläßt und endliche Werte für die Higgskopplung λ wählt. In diesem Fall ist zur Bestimmung der Phasengrenzen neben der Entwicklung nach K noch eine zusätzliche Entwicklung im Produkt der Yukawakopplungen $G_\psi G_\chi$ erforderlich. Ein Vergleich der dann vorliegenden Doppelreihe mit Resultaten aus einer Entwicklung vierzehnter Ordnung nach dem skalaren Hoppingparameter κ für den Grenzfall $K = 0$ zeigte erneut die qualitative Gültigkeit der MF-Daten in bestimmten Parameterbereichen.

Die Untersuchungen für beliebige λ ergaben, gemessen an der Variation von λ , jedoch kaum Änderungen im Verhalten des gesamten Modells. So erhält man im $U(1)$ -Modell bis zur betrachteten, sechsten Ordnung der MFA lediglich eine geringe Parallelverschiebung der Phasengrenzen.

Diese Modifikationen sind im SU(2)-Modell etwas größer, obwohl sie für $\lambda > 1$ immer noch unter zehn Prozent liegen. Dazu kommt bereits in niedriger Ordnung der MFA noch eine, wenn auch sehr geringe Verformung der Phasengrenzen für $\lambda < \infty$. Das Gesamtbild der Ergebnisse scheint aber dennoch auch hier mit der vermuteten Universalität des Higgs-Yukawa-Modells bzgl. der Variation von λ im Einklang zu stehen.

Schließlich wurde die MFA zur Untersuchung des Fermionpropagators und -kondensats herangezogen. Dort ist, im Gegensatz zur Situation bei Bestimmung der Phasengrenzen, teilweise eine vollständige Summation aller für die MFA relevanten Beiträge, d.h. aller Terme führender Ordnung in der Dimension d , möglich. Auch in diesem Fall gilt das oben Gesagte: die MFA liefert in ihrem Gültigkeitsbereich qualitativ, in einigen Fällen sogar quantitativ verwertbare Vorhersagen.

Die Konsequenz dieser Untersuchungen drängt sich auf. In Zukunft sollten die Be trachtungen ähnlicher Modelle wenn möglich mit MF-Methoden begonnen oder we-

nigstens von Beginn an durch begleitende MF-Studien unterstützt werden.

Der zweite Schwerpunkt dieser Arbeit bestand darin, die Verwendbarkeit einer numerischen Methode zu prüfen, die es im Gegensatz zum Hybrid-Monte Carlo-Algorithmus (HMCA) erlaubt, eine ungerade Zahl von Fermionen auf dem Gitter zu simulieren; es handelt sich um das Hybrid-Classical-Langevin-Verfahren (HCLA). Zunächst war festzustellen, wie sich das dabei auftretende Integralmaß, d.h. insbesondere die Fermiondeterminante $\det Q$, im Verlauf einer MC-Simulation entwickelt. Speicherplatzprobleme, die in diesem Zusammenhang auftraten, konnten durch eine vorbereitende analytische Zerlegung der Fermionmatrix umgangen werden. Die daraufhin erzielten Resultate machen deutlich, daß die Fermiondeterminante im physikalisch interessanten Parameterbereich durch ihren Betrag approximierbar ist, da sie dort immer einen positiven Realteil und einen im Vergleich dazu vernachlässigbaren Imaginärteil besitzt. Unter bestimmten Voraussetzungen ($|G_\psi| = |G_\chi|$) verschwindet der Imaginärteil sogar exakt. Somit war der Weg für die MC-Simulation mit Hilfe des HCLA geebnet.

Durch einen Vergleich mit HMC-Resultaten für eine gerade Anzahl von Fermionen ($N_f = 2$) wurde zunächst die korrekte Implementation des HCLA auf dem Computer überprüft und im Anschluß eine Einstellung seiner algorithmischen Parameter auf günstige Werte vorgenommen.

Bei zukünftiger Verwendung des HCLA sollten gerade in diesem letztgenannten Bereich ausführlichere Untersuchungen stattfinden, um die Wahl der Parameterwerte weiter zu optimieren. So ließe sich die günstigste Wahl von β , d.h. des Verhältnisses zwischen klassischer Dynamik und Langevinalgorithmus, für einfache Modelle analytisch und in komplizierteren Fällen approximativ durch Messung der Korrelation interessierender Observablen bestimmen. Eine Optimierung hinsichtlich der Schrittweite $\delta\tau$ hingegen wäre nur erforderlich, wenn die Rechenzeit die Verwendung eines zweiten Wertes für $\delta\tau$ und damit eine Extrapolation $\delta\tau \rightarrow 0$ nicht erlaubt. Insbesondere bei sehr langen Produktionsläufen kann sich der Aufwand, den eine Optimierung der Parameterwahl mit sich bringt, durch ein günstigeres Laufzeitverhalten während der Produktion auszahlen.

Sämtliche, in diesem Rahmen gefundenen Resultate zeigen allerdings klar die Überlegenheit des HMCA, die auch bei optimaler Parameterwahl im HCLA noch bestehen wird. Der HCLA sollte daher nur dort Anwendung finden, wo der Gebrauch des HMCA an den Rahmenbedingungen scheitert.

Im Anschluß an diese Tests wurde der HCLA dazu herangezogen, die Lage einiger Phasengrenzen für den Fall $N_f = 1$ zu bestimmen. Dies geschah, um festzustellen, ob eine Vermutung aus der MFA über die Lage der Phasengrenzen und die Ergebnisse der numerischen Simulation mit dem HCLA miteinander verträglich sind und sich dadurch gegenseitig stützen können. Besagter Vergleich verlief ähnlich zufriedenstellend wie der vorangegangene mit den HMC-Ergebnissen für $N_f = 2$ und lieferte damit eine Bestätigung sowohl für die Verwendbarkeit des HCLA als auch für die MF-Vermutung über die Verschiebung der Phasengrenzen bei Änderung des Fermioninhaltes der Theorie.

Schließlich konnte festgestellt werden, daß der HCLA zur Berechnung der physikalisch interessanten Kopplungsschranken ebenfalls zu gebrauchen ist, wenn auch die Nachteile gegenüber dem HMCA, insbesondere hinsichtlich der für einen hinreichend kleinen, statistischen Fehler erforderlichen Zahl von Messungen noch deutlicher zu Tage treten. Trotz der im Vergleich zum HMCA vor diesem Hintergrund verhältnismäßig kleinen Statistik in den durchgeführten Rechnungen deuten alle Meßergebnisse darauf hin, daß auch für $N_f = 1$ die Trivialitätsschranke durch Störungsrechnung erster Ordnung bereits gut beschrieben wird.

Mehr Statistik sowie Extrapolation der Schrittweite nach Null, Abschätzung der „finite-size“-Effekte durch Verwendung verschiedener Gittergrößen und die Betrachtung unterschiedlicher G_ψ -Werte sind zu einer Konkretisierung dieser Aussage allerdings noch erforderlich. Auch die Eignung des HCLA zur numerischen Untersuchung der Vakuumstabilitätsschranke [29] bleibt zu prüfen, wenngleich keine Anzeichen dagegensprechen.

Begleitend zu den analytischen und numerischen Untersuchungen der Arbeit fanden ausführliche algorithmische Studien zur Beschleunigung iterativer Matrixinversionen statt. In diesem Zusammenhang wurde ein Inversionsalgorithmus, das bikonjugierte Gradientenverfahren (BCG), für den Bereich gitterregularisierter Theorien mit Fermionen wiederentdeckt.

Für die Verwendung der dann im wesentlichen drei untersuchten Algorithmen, des Verfahrens des minimalen Restes (MR), der Methode des konjugierten Gradienten (CG) und der BCG-Inversion, war zunächst von Interesse, in welchen Gebieten des von den direkten Parametern G_ψ, G_χ und K aufgespannten Raumes sie jeweils die beste Alternative darstellen. Im Verlaufe dieser Studien und der anschließenden Untersuchungen der Abhängigkeit ihrer Laufzeiten vom Wert des skalaren Hoppingparameters κ wurde klar, daß sämtliche Resultate vor Beginn der eigentlichen MC-Produktionsläufe, d.h. Resultate unter Verwendung nichtequilibrierter „Phantasiekonfigurationen“, in Bezug auf den besten Algorithmus nur grobe Anhaltspunkte liefern können und daher auch während der Produktion ein gelegentlicher Vergleich der Verfahren sinnvoll ist. Eine solche Gegenüberstellung ließe sich fest in die MC-Programme installieren und könnte somit automatisiert erfolgen. Nur in Fällen, die eine der Inversionsmethoden eindeutig und für alle κ -Werte favorisieren, ist damit ein Verlust an Rechenzeit verbunden. Wie derartige Fälle gelagert sind, kann aber bereits durch das Studium vor Beginn der Produktionsläufe abgeschätzt werden, so daß sich eine solche Einbuße vermeiden ließe: So sprechen etwa große Produkte der Yukawakopplungen $|G_\psi G_\chi|$ und kleine K -Werte für die Verwendung des MR-Algorithmus. An dieses Gebiet grenzt im obengenannten Parameterraum in der Regel ein Bereich, für den die BCG-Inversion vorzuziehen ist. In der verbleibenden Region ist dann das CG-Verfahren optimal. Für sehr kleine K -Werte kann die Verwendung von BCG- bzw. MR-Algorithmus auch bei sehr kleinen $|G_\psi G_\chi|$ nochmals von Vorteil sein. Befindet man sich aufgrund der Wahl der direkten Parameter inmitten eines dieser mit Hilfe von Zufalls- und Einheitskonfigurationen festgelegten Gebiete, ist davon auszugehen, in dem dort favorisierten Algorithmus auch für den gesamten Produktionslauf die geeignete Wahl getroffen zu haben.

Hinsichtlich der algorithmischen Parameter sei hier nur erwähnt, daß weder die Wahl eines höheren Preconditioning im MR- oder BCG-Verfahren noch die Über- bzw. Unterrelaxation im MR-Algorithmus einen entscheidenden Vorteil bringen.

Von Bedeutung für die Geschwindigkeit der Matrixinversion ist neben dem Inversionsalgorithmus selbst auch die Qualität eines ersten Ratevektors für $x = A^{-1}b$. Die aus diesem Grunde untersuchten Rateverfahren zeigen unterschiedliche Vor- und Nachteile. Der „Gottliebtrick“ versagt bei zu großen Schrittweiten im MC-Algorithmus, d.h. einem zu großen Abstand aufeinanderfolgender Konfigurationen. Derartige Schrittweiten sind allerdings bereits aus anderen Gründen zu verwerfen und damit nur von akademischem Interesse, so daß der „Gottliebtrick“ bei jedem, in diesem Rahmen betrachteten, relevanten Fall zu einer Beschleunigung führt. Völlig unabhängig von der Schrittweite ist die Qualität eines Ratevektors, wenn dieser mit Hilfe der Hoppingparameterentwicklung (HPE) der inversen Fermionmatrix konstruiert wird. Ein weiterer Vorteil gegenüber dem „Gottliebtrick“, der die Nutzung dieser Methode auch in Verbindung mit dem HCLA gestattet, liegt in der alleinigen

Bezugnahme auf die aktuelle Feldkonfiguration. Die Güte dieses Verfahrens wird jedoch auf ähnliche Weise wie die der MR- bzw. BCG-Inversion, durch die Werte der Yukawakopplungen und des fermionischen Hoppingparameters bestimmt. Bereiche, in denen dieses Verfahren Erfolg verspricht, werden gerade auch vom MR- bzw. BCG-Algorithmus bevorzugt.

Berechnungen eines Ratevektors oder Preconditioning der Fermionmatrix mit einer FFT-Methode führten aufgrund des hohen Zeitbedarfs der Fouriertransformationen nicht zu einer Verbesserung.

Im Verlauf dieser Studien konnten bei weitem nicht alle Möglichkeiten zur Beschleunigung der Matrixinversion getestet werden. So wurde der Frage unterschiedlicher Konvergenzgeschwindigkeiten der einzelnen Verfahren innerhalb einer Inversion nicht nachgegangen: Würde z.B. einer der Algorithmen, startend von einem ersten Ratevektor, zu Beginn der Inversion besonders schnell, im weiteren Verlauf aber immer langsamer konvergieren, wäre gegebenenfalls ein Wechsel der Methoden an geeigneter Stelle der Inversion von Vorteil.

Die sehr gute Konvergenz des CG-Verfahrens für die Einheitskonfiguration kann darauf hindeuten, daß es in den bevorzugten Bereichen dieses Algorithmus möglicherweise günstiger ist, vor der eigentlichen Inversion einen Ratevektor durch CG-Inversion einer Fermionmatrix zu erzeugen, in der ϕ_x durch $\langle \phi \rangle$ ersetzt ist. Auch dies wurde nicht untersucht. Dasselbe gilt für die Konstruktion eines Ratevektors durch HPE im MR- bzw. BCG-Algorithmus.

Als Folgerung aus obigen Resultaten wäre festzuhalten, daß neben unterschiedlichen Inversionsmethoden auch verschiedene Rateverfahren in Programmen mit iterativer Matrixinversion implementiert sein sollten. Diese sind in zweifelhaften Fällen – um welche es sich handelt, ist vor Beginn der MC-Simulationen abzuschätzen – gelegentlich mit Hilfe eines automatisierten Verfahrens zu vergleichen, damit immer die jeweils optimale Methode Anwendung finden kann. Insbesondere bei Verwendung unterschiedlicher Rechnerarchitekturen empfiehlt sich eine derartige Vorgehensweise, da auch diese in Kombination mit den einzelnen Rateverfahren die Laufzeitverhältnisse zwischen den verschiedenen Inversionsalgorithmen nicht unerheblich beeinflussen könnten.

Schließlich wurden in Kapitel 6 Ergebnisse aus dem Higgs-Yukawa-Projekt vorgestellt. Auf der Basis einer deutlich größeren Statistik als im vierten Kapitel stützen sie ebenfalls die Annahme, daß bereits die Einschleifen-Störungsrechnung die Cutoff-abhängigen Schranken der renormierten Kopplungen auch in Gegenwart schwerer Fermionen beschreiben kann.

A Erwartungswerte und deren Grenzverhalten in der MFA

Zunächst wird ausgenutzt, daß die für die Berechnung von Erwartungswerten relevante Zustandssumme bzgl. der Gitterpunkte faktorisiert. (Dies ist das Charakteristikum der MFA). In unserem Fall heißt das

$$Z_H = \prod_{x=1}^N \left(\int d\mu_x f(H, \lambda, \phi_x, \phi_x^+) \right) = F(H, \lambda)^N \quad (236)$$

mit einem geeigneten Maß $d\mu$, und folglich

$$\begin{aligned} \langle g(\phi_y) \rangle_H &= \frac{1}{Z_H} \left(\int d\mu_y g(\phi_y) f(H, \lambda, \phi_y, \phi_y^+) \right) \prod_{x \neq y}^N \left(\int d\mu_x f(H, \lambda, \phi_x, \phi_x^+) \right) \\ &= \frac{1}{F(H, \lambda)} \left(\int d\mu g(\phi) f(H, \lambda, \phi, \phi^+) \right) . \end{aligned} \quad (237)$$

Nun lassen sich sowohl für endliche als auch für divergente Selbstkopplung beliebige ϕ -Faktoren im Integral durch geeignetes Ableiten von $f(H, \lambda, \phi, \phi^+)$ nach H erzeugen. Man verbleibt daher schließlich mit

$$\langle g(\phi_y) \rangle_H = \frac{1}{F(H, \lambda)} g \left(\frac{H}{|H|} \frac{\partial}{\partial |H|} \right) F(H, \lambda) . \quad (238)$$

Die Funktion F hängt von der genauen Gestalt der Zustandssumme ab. Im U(1)-Modell, in dessen Rahmen die weiteren Betrachtungen angestellt werden, ist sie die modifizierte Besselfunktion nullter Ordnung I_0 für $\lambda = \infty$ und die in (61) definierte Funktion F_0 für endliches λ . (Für das SU(2)-Modell finden sich alle diesbezgl. relevanten Angaben im Text.)

I_n ist die modifizierte Besselfunktion n -ter Ordnung:

$$I_n(|H|) = \left(\frac{1}{2} |H| \right)^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{4} |H|^2 \right)^k}{k! \Gamma(n+k+1)} . \quad (239)$$

F_0 besitzt eine der Besselfunktion nullter Ordnung ähnelnde Struktur und ist bis auf einen konstanten Faktor, der vernachlässigt wird, da er sich bei der Berechnung von Erwartungswerten herauskürzt, gegeben durch

$$F_0(|H|, \lambda) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1}{4} |H|^2 \right)^k}{k!} (2\lambda)^{-\frac{k}{2}} D_{-k-1} \left(\frac{1-2\lambda}{\sqrt{2\lambda}} \right) . \quad (240)$$

Die dabei auftretenden parabolischen Zylinderfunktionen stehen in Zusammenhang mit der Fehlerfunktion. Mit

$$\text{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty e^{-t^2} dt \quad (241)$$

und

$$I^n \text{erfc}(z) \equiv \int_z^\infty I^{n-1} \text{erfc}(t) dt \quad \forall n \geq 0 \quad (242)$$

gilt die folgende Relation:

$$D_{-k-1}(z\sqrt{2}) = \sqrt{2^{k-1}\pi} e^{\frac{z^2}{2}} I^k \text{erfc}(z) . \quad (243)$$

Mit (238) lassen sich jetzt Erwartungswerte berechnen.

A.1 Erwartungswerte bei divergentem λ

Auf Grundlage der vorangestellten Erläuterung resultiert für die n -te Potenz des komplexen Skalarfeldes unter Verwendung der Abkürzung $\partial_H = \frac{1}{|H|} \frac{\partial}{\partial |H|}$ der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} <(\phi)^n>_H &= \frac{1}{I_0(|H|)} (H \partial_H)^n I_0(|H|) = \frac{1}{I_0(|H|)} H^n (\partial_H)^n I_0(|H|) \\ &= \frac{1}{I_0(|H|)} H^n |H|^{-n} I_n(|H|) = \left(\frac{H}{2} \right)^n \left(\frac{1}{n!} + O(|H|^2) \right). \end{aligned} \quad (244)$$

Die Gültigkeit des zweiten Gleichheitszeichens folgt induktiv. Weitere Erwartungswerte treten bei $\lambda = \infty$ nicht auf.

A.2 Erwartungswerte bei endlichem λ

Mit den obigen Definitionen ergibt sich nun die Beziehung:

$$<(\phi)^n>_H = \frac{1}{F_0(|H|, \lambda)} H^n (\partial_H)^n F_0(|H|, \lambda) = \left(\frac{H}{2} \right)^n \frac{I^n \operatorname{erfc}(z)}{\sqrt{\lambda^n} \operatorname{erfc}(z)} \cdot \left(1 + O(|H|^2) \right). \quad (245)$$

z steht dabei, wie auch im folgenden, für $\frac{1-2\lambda}{2\sqrt{\lambda}}$.

Bezeichnet ϕ^a die a -te Komponente des realen ϕ -Feldes, so ist unmittelbar klar, daß die Relation

$$<\phi^a>_H = \frac{1}{F_0(|H|, \lambda)} (H^a \partial_H) F_0(|H|, \lambda). \quad (246)$$

gelten muß. Daraus folgt für Betragsquadrate sofort der Ausdruck:

$$<|\phi|^{2i}>_H = \frac{1}{F_0(|H|, \lambda)} (2\partial_H + |H|^2 \partial_H^2)^i F_0(|H|, \lambda). \quad (247)$$

Erneut vermöge vollständiger Induktion ergibt sich daraus der Zusammenhang:

$$<|\phi|^{2i}>_H = \frac{1}{F_0(|H|, \lambda)} (2i)!! \left[\sum_{l=0}^i \frac{1}{(2l)!!} \binom{i}{l} |H|^{2l} \partial_H^{i+l} \right] F_0(|H|, \lambda). \quad (248)$$

Seine weitere Aufschlüsselung bis zur Ordnung $|H|^2$ lautet

$$\begin{aligned} <|\phi|^{2i}>_H &= i! \frac{I^i \operatorname{erfc}(z)}{\sqrt{\lambda^i} \operatorname{erfc}(z)} \\ &+ \frac{i!}{4\sqrt{\lambda^i}} \left[(i+1) \frac{I^{i+1} \operatorname{erfc}(z)}{I^1 \operatorname{erfc}(z)} - \frac{I^i \operatorname{erfc}(z)}{\operatorname{erfc}(z)} \right] f(\lambda) |H|^2 \\ &+ O(|H|^4). \end{aligned} \quad (249)$$

$f(\lambda)$ hat dabei dieselbe Bedeutung wie im Text.

Bei der Entwicklung für große GG nach GG^{-1} ist folgender Erwartungswert von Bedeutung:

$$<|\phi|^{-2i}>_H = \frac{1}{F_0(|H|, \lambda)} \left(\frac{1}{4} \int \int dH dH^+ \right)^i F_0(|H|, \lambda). \quad (250)$$

Macht man zur Bedingung, daß diese Erwartungswerte im Falle divergenter Selbstkopplung Eins sind, kann man die bei der Integration auftretenden freien Konstanten festlegen und erhält induktiv

$$\langle |\phi|^{-2i} \rangle_H = 1 + \frac{1}{4} (1 - f(\lambda)) |H|^2 + O(|H|^4). \quad (251)$$

Im allgemeinsten Fall endlicher Selbstkopplung und gleichzeitig kleinem fermionischen Hoppingparameter tritt noch ein weiterer Erwartungswert auf. Er lautet:

$$\langle (\phi)^n |\phi|^{2i} \rangle_H = \frac{H^n}{F_0(|H|, \lambda)} (2i)!! \left[\sum_{l=0}^i \frac{1}{(2l)!!} \binom{i}{l} \partial_H^n |H|^{2l} \partial_H^{i+l} \right] F_0(|H|, \lambda) \quad (252)$$

und ist daher, wie man leicht sieht, von der Ordnung H^n . Von diesen Erwartungswerten ist deshalb nur derjenige bei $n = 1$ relevant. Eine Rechnung ergibt

$$\langle \phi |\phi|^{2i} \rangle_H = \frac{(i+1)!}{\sqrt{\lambda}^{i+1}} \frac{I^{i+1} \operatorname{erfc}(z)}{\operatorname{erfc}(z)} \frac{H}{2} (1 + O(|H|^2)) \quad (253)$$

und eine entsprechende Beziehung für $\langle \phi^+ |\phi|^{2i} \rangle_H$.

A.3 Das Grenzverhalten einiger Erwartungswerte

Die Bestimmung des Grenzverhaltens von Erwartungswerten ist durch die Betrachtung der auftretenden Fehlerfunktionsintegrale und ihrer Quotienten vorzubereiten. Gilt weiterhin $z = \frac{1-2\lambda}{2\sqrt{\lambda}}$ so ergibt sich aus [38] mit Hilfe der Relationen

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} I^n \operatorname{erfc}(z) = 0 \quad \forall n \geq 0, \quad (254)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} I^n \operatorname{erfc}(z) = -I^{n-1} \operatorname{erfc}(z) \quad \forall n \geq 0 \quad (255)$$

das asymptotische Verhalten (für kleine λ , d.h. große z) in der Form:

$$\frac{I^{n+l} \operatorname{erfc}(z)}{I^l \operatorname{erfc}(z)} \sim \frac{I^{n-1} \operatorname{erfc}(z)}{I^{-1} \operatorname{erfc}(z)} \sim \frac{1}{(2z)^n} \left(1 + O\left(\frac{1}{z^2}\right) \right). \quad (256)$$

Für große λ , d.h. $z \rightarrow -\infty$, läßt sich das folgende Verhalten induktiv zeigen:

$$I^n \operatorname{erfc}(z) \sim \left(2 \frac{z^n}{n!} + \frac{z^{n-2}}{2(n-2)!} + O(z^{n-4}) \right) \quad (257)$$

und daraus die nachstehende Beziehung ableiten:

$$\frac{I^n \operatorname{erfc}(z)}{\sqrt{\lambda}^n} \sim \frac{2}{n!} \left(\frac{2\lambda - 1}{2\lambda} \right)^n \left(1 + \frac{n(n-1)}{4z^2} \right). \quad (258)$$

Die genannten Ausdrücke enthalten als Spezialfälle u.a.:

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} F_0(|H|, \lambda) = I_0(|H|) \quad (259)$$

sowie:

$$f(\lambda) \sim \frac{2\lambda - 1}{2\lambda} \quad (260)$$

und für kleine λ :

$$f(\lambda) \sim \frac{1}{1 - 2\lambda}. \quad (261)$$

Nun läßt sich auch das Grenzverhalten für die Erwartungswerte schnell ablesen. So gilt z.B. für großes λ

$$\begin{aligned} <(\phi)^n>_H &\sim \frac{1}{n!} \left(\frac{H}{2}\right)^n \left(\frac{2\lambda - 1}{2\lambda}\right)^n, \\ <|\phi|^{-2i}>_H &\sim 1 + \frac{1}{8\lambda}|H|^2, \\ <|\phi|^{2i}>_H &\sim \left(\frac{2\lambda - 1}{2\lambda}\right)^i + \frac{i}{8\lambda} \left(\frac{2\lambda - 1}{2\lambda}\right)^{i-1} |H|^2. \end{aligned} \quad (262)$$

Dabei wurden nur die für die durchgeführten Rechnungen relevanten Ordnungen berücksichtigt.

A.4 Erwartungswerte im $SU(2)$ -Modell

Sei $P(\{1, \dots, 2l\}) = \{p_1, \dots, p_{2l}\}$ die Menge aller Permutationen der Indices 1 bis $2l$, so ist

$$<\phi_x^1 \cdots \phi_x^{2l}>_H = \frac{1}{F(|H|)} \sum_P \left\{ \sum_{i=0}^l \frac{1}{(2l-2i)!!} \frac{1}{(2i)!} H^{p_1} \cdots H^{p_{2i}} \delta_{p_{2i+1}, p_{2i+2}} \cdots \delta_{p_{2l-1}, p_{2l}} \partial_H^{l+i} \right\} F(|H|) \quad (263)$$

bzw. für ungerade ϕ -Potenzen

$$<\phi_x^1 \cdots \phi_x^{2l+1}>_H = \frac{1}{F(|H|)} \sum_P \left\{ \sum_{i=0}^l \frac{1}{(2l-2i)!!} \frac{1}{(2i+1)!} H^{p_1} \cdots H^{p_{2i+1}} \delta_{p_{2i+2}, p_{2i+3}} \cdots \delta_{p_{2l}, p_{2l+1}} \partial_H^{l+i+1} \right\} F(|H|). \quad (264)$$

$F(|H|)$ steht dabei für $I_0(|H|) - I_2(|H|)$. Damit wäre $<\phi^1 \cdots \phi^n>_H$ für gerade n von nullter Ordnung in H und für ungerade n von erster Ordnung. Gezeigt werden soll hier, wie man vom ersten zum zweiten Ausdruck gelangt. Der Weg vom zweiten Ausdruck zur nächsten, dann wieder geraden ϕ -Potenz verläuft analog. Der Induktionsanfang ist trivial. Die zweite Relation muß sich ergeben, wenn eine zusätzliche Ableitung nach H ausgeführt wird, die wie bisher nicht auf den Faktor $1/F(|H|)$ wirkt. Dann bekommt man

$$<\phi_x^1 \cdots \phi_x^{2l} \phi_x^a>_H = \frac{1}{F(|H|)} \sum_P \frac{\partial}{\partial H^a} \left\{ \right\} F(|H|) \quad (265)$$

mit der geschweiften Klammer aus (263). Ausdifferentieren führt auf die Relation:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H^a} \left\{ \right\} &= \left\{ \sum_{i=1}^l \frac{1}{(2l-2i)!!} \frac{1}{(2i)!} H^{p_1} \cdots H^{p_{2i}} \delta_{p_{2i+1}, p_{2i+2}} \cdots \delta_{p_{2l-1}, p_{2l}} \left[\sum_{j=1}^{2i} \frac{\delta_{a, p_j}}{H^{p_j}} \right] \partial_H^{l+i} \right\} \\ &+ \left\{ \sum_{i=0}^l \frac{1}{(2l-2i)!!} \frac{1}{(2i)!} H^{p_1} \cdots H^{p_{2i}} \delta_{p_{2i+1}, p_{2i+2}} \cdots \delta_{p_{2l-1}, p_{2l}} H^a \partial_H^{l+i+1} \right\}. \end{aligned} \quad (266)$$

Wird über alle Permutationen summiert, spielt es keine Rolle, wie man die Indices p_1 bis p_{2l} verteilt. Da dies bzgl. der j -Summe für jeden einzelnen Summanden der Fall ist, kann man die Verteilung insbesondere so vornehmen, daß jeweils $p_j = p_{2i}$ genannt wird. Damit läßt sich die j -Summe in (266) vorbehaltlich der späteren Summation über alle Permutationen durch den Ausdruck $2i \frac{\delta_{a,p_{2i}}}{H^{p_{2i}}}$ ersetzen.

Nimmt man anschließend Index a in die Permutationen der δ -Indices auf, schreibt also statt $\delta_{a,p_{2i}}$ jetzt $\delta_{p_a,p_{2i}}$, so findet eine Mehrfachzählung statt. Es ist leicht einzusehen, daß sich so genau das $2(l-i+1)$ -fache der Ausgangssituation ergibt. Das Einbeziehen von a in die Permutation der H-Indices bedeutet für die zweite Summe in (266) entsprechend eine Mehrfachzählung um den Faktor $2i+1$. Diese Überlegungen führen demzufolge auf die Gleichung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H^a} \left\{ \right\} &= \left\{ \sum_{i=1}^l \frac{H^{p_1} \cdots H^{p_{2i-1}}}{(2l-2i+2)!!(2i-1)!} \delta_{p_a,p_{2i}} \delta_{p_{2i+1},p_{2i+2}} \cdots \delta_{p_{2l-1},p_{2l}} \partial_H^{l+i} \right\} \\ &+ \left\{ \sum_{i=0}^l \frac{H^{p_a} H^{p_1} \cdots H^{p_{2i}}}{(2l-2i)!!(2i+1)!} \delta_{p_{2i+1},p_{2i+2}} \cdots \delta_{p_{2l-1},p_{2l}} \partial_H^{l+i+1} \right\}. \end{aligned} \quad (267)$$

Umbenennung des ersten Summationsindex durch $i \rightarrow i+1$ und Zusammenfassung der beiden Summen ergibt den gesuchten Ausdruck in (264), wenn man bedenkt, daß der Index a dort $2l+1$ genannt wird und somit Aufnahme in die Permutationen sowohl der δ -Indices als auch der H-Indices gefunden hat.

Das bisher Gesagte gilt, da es unabhängig von der Gestalt der Funktion $F(|H|)$ ist, natürlich genauso für das U(1)-Modell, findet in dem Fall aber keine Verwendung, da dort nur Erwartungswerte auftreten, welche die hier Besprochenen zu einfacheren Ausdrücken kombinieren, wie das nachstehende Beispiel zeigen wird. Diese Vereinfachung hat ihre Ursache darin, daß sich im U(1)-Fall schreiben läßt: $\phi = S^k \phi^k$ mit $S = (1, i)$, während im SU(2)-Fall gilt: $\varphi = T^k \phi^k$ mit $T = (\mathbb{I}_2, i\vec{\sigma})$. Aufgrund der verschiedenen Relationen

$$S^l \bar{S}^k S^l = \bar{S}^l S^k \bar{S}^l = 0 \quad (268)$$

und

$$T^l \bar{T}^k T^l = -2T^k \quad \bar{T}^l T^k \bar{T}^l = -2\bar{T}^k \quad (269)$$

ergibt sich infolgedessen bzgl. der Erwartungswerte z.B. für den Graphen

$$\text{---} \bullet \text{---} \quad (270)$$

der nachstehende Zusammenhang in niedrigster Ordnung von H :

$$\begin{aligned} \langle \varphi^+ \rangle^2 \langle \varphi^2 \rangle &= \text{tr}_{\text{SU}(2)}(\bar{T}^a T^b \bar{T}^c T^d) \langle \phi^a \rangle \langle \phi^b \phi^d \rangle \langle \phi^c \rangle \\ &= \text{tr}_{\text{SU}(2)}(\bar{T}^a T^b \bar{T}^c T^d) \frac{H^a}{4} \frac{\delta_{bd} + O(H^2)}{4} \frac{H^c}{4} \\ &= -\text{tr}_{\text{SU}(2)}(\bar{T}^a T^c) \frac{H^a H^c}{32} + O(|H|^4) = -\frac{|H|^2}{16} + O(|H|^4), \end{aligned} \quad (271)$$

während im U(1)-Fall gilt:

$$\begin{aligned} \langle \phi^+ \rangle^2 \langle \phi^2 \rangle &= \text{tr}_{\text{U}(1)}(\bar{S}^a S^b \bar{S}^c S^d) \langle \phi^a \rangle \langle \phi^b \phi^d \rangle \langle \phi^c \rangle \\ &= \bar{S}^a S^b \bar{S}^c S^d \frac{H^a}{2} \frac{\delta_{bd} + O(H^2)}{2} \frac{H^c}{2} = 0 + O(|H|^4). \end{aligned} \quad (272)$$

Demzufolge kann der Graph (270) nur im SU(2)-Modell einen Beitrag zur Ordnung $|H|^2$ liefern.

B Vereinfachung der Spur in der A-B-Darstellung der MFA

Da \bar{H} und M_x in der A-B-Darstellung blockdiagonal sind, d.h. nur in den beiden $4 \otimes 4$ -Diagonalblöcken von Null verschiedene Einträge aufweisen, setzt sich nach Durchführung der Spur im Ortsraum die noch verbleibende Spur aus Summanden mit der Struktur

$$< \text{tr} \left[\begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & (G_\alpha - \gamma_5 G_\beta) \phi_{x_1} \\ (G_\alpha + \gamma_5 G_\beta) \phi_{x_1}^+ & 0 \end{pmatrix} \dots \right. \\ \left. \begin{pmatrix} A_{2n} & 0 \\ 0 & A_{2n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & (G_\alpha - \gamma_5 G_\beta) \phi_{x_{2n}} \\ (G_\alpha + \gamma_5 G_\beta) \phi_{x_{2n}}^+ & 0 \end{pmatrix} \right] >_H \quad (273)$$

zusammen, wenn $2n$ die Zahl der G-Faktoren dieses speziellen Summanden ist. (Sie muß gerade sein, da sonst die Spur verschwindet). Faßt man nun jeweils vier aufeinanderfolgende Matrizen zusammen, so ist das Ergebnis wieder blockdiagonal, und die oberen Blöcke haben die Form:

$$(G_\alpha^2 A_1 A_2 + A_1 [A_2, \gamma_5] G_\alpha G_\beta - A_1 \gamma_5 A_2 \gamma_5 G_\beta^2) \phi_{x_1} \phi_{x_2}^+ . \quad (274)$$

In den unteren Blöcken trägt G_β umgekehrtes Vorzeichen und die ϕ nehmen jeweils die zum oberen Block konjugierten Werte an. Diese Aussage gilt dann natürlich auch für die beiden Blöcke, die man erhält, wenn die nunmehr n Matrizen zu einer zusammengefaßt werden.

Interessant sind für alle Rechnungen nur die Terme der Ordnung $|H|^2$. Aus diesem Grunde sind die Wege auf dem Gitter so zu wählen, daß sich alle ϕ bis auf genau zwei kompensieren. Für diese Terme enthält demnach in allen Summanden der eine Diagonalblock einen Faktor $< \phi_x \phi_y^+ >_H$ und der andere den Faktor $< \phi_x^+ \phi_y >_H$. In der MFA gilt aber

$$< \phi_x \phi_y^+ >_H = < \phi_x >_H < \phi_y^+ >_H = \frac{|H|^2}{4} = < \phi_x^+ >_H < \phi_y >_H = < \phi_x^+ \phi_y >_H . \quad (275)$$

Der Erwartungswert läßt sich folglich aus der Spur herausziehen und es bleibt eine Spur über zwei $4 \otimes 4$ -Blöcke, die sich nur im Vorzeichen von G_β voneinander unterscheiden. Aus diesem Grund enthält das Endresultat nur gerade Potenzen in G_β und somit in G_α . Unter Berücksichtigung dieses Sachverhaltes, kann man sich darauf beschränken, nur einen Block zu betrachten, und dadurch den Aufwand halbieren.

Für endliches λ ist diese Tatsache weniger offensichtlich. Denn jetzt kommt in jedem Gitterpunkt ein Faktor $h(|\phi|^2)$ (siehe Text) hinzu. Ferner heben sich die mit dem Auftreten der G-Faktoren verbundenen ϕ nicht mehr auf, sondern bilden ihrerseits Potenzen von $|\phi|^2$. Für Terme der Ordnung $|H|^2$ haben die ϕ -Faktoren der beiden Blöcke daher jetzt die Struktur

$$< \phi_x g_x(|\phi|^2) >_H < \phi_y^+ g_y(|\phi|^2) >_H < F(|\phi|^2) >_H \quad (276)$$

bzw.

$$< \phi_x^+ g_x(|\phi|^2) >_H < \phi_y g_y(|\phi|^2) >_H < F(|\phi|^2) >_H , \quad (277)$$

wenn man Wege betrachtet, die zwei getrennte ϕ -Faktoren aufweisen. Alle anderen, relevanten Beiträge enthalten ϕ nur als Potenzen der Betragsquadrate, so daß bereits

die ϕ -Faktoren selbst für beide Blöcke identisch sind (nicht nur ihre Erwartungswerte).

Mit den Definitionen

$$g_x(|\phi_x|^2) = \sum_{i=0}^{\infty} \xi_i |\phi_x|^{2i}, \quad g_y(|\phi_y|^2) = \sum_{j=0}^{\infty} v_j |\phi_y|^{2j} \quad (278)$$

ergibt sich unter Verwendung von (253):

$$\begin{aligned} <\phi_x g_x(|\phi|^2) \phi_y^+ g_y(|\phi|^2)>_H &= \sum_{i,j=0}^{\infty} \xi_i v_j <\phi_x|\phi_x|^{2i}>_H <\phi_y^+|\phi_y|^{2j}>_H \\ &= \sum_{i,j=0}^{\infty} \xi_i v_j \frac{H}{H^+} <\phi_x^+|\phi_x|^{2i}>_H \frac{H^+}{H} <\phi_y|\phi_y|^{2j}>_H \\ &= \sum_{i,j=0}^{\infty} \xi_i v_j <\phi_x^+|\phi_x|^{2i}>_H <\phi_y|\phi_y|^{2j}>_H \\ &= <\phi_x^+ g_x(|\phi|^2) \phi_y g_y(|\phi|^2)>_H . \end{aligned} \quad (279)$$

Die Erwartungswerte lassen sich also in jedem Fall wieder aus der Spur herausziehen und erlauben daher dasselbe Vorgehen wie im Fall divergenter Selbstkopplung.

Im SU(2)-Modell gestaltet sich die Untersuchung dieses Problems schwieriger und soll deshalb nur exemplarisch anhand eines einfachen Graphen geschehen. Betrachtet man die Doppelkette der Länge zwei, die an allen vier Gitterpunkten einen G-Faktor trägt (270), findet sich im oberen Block: $<\text{tr}_{\text{SU}(2)}(\varphi_x \varphi_y^+ \varphi_x \varphi_z^+)>_H$, im unteren die Spur des komplex-konjugierten Ausdrucks. Die Spurbildung im SU(2)-Raum derart von der Restspur abzutrennen ist möglich, da sich die Matrizen als direktes Produkt des SU(2)-Anteils mit dem Rest schreiben lassen. Nun gilt in niedrigster Ordnung von H der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} &<\text{tr}_{\text{SU}(2)}(\varphi_x \varphi_y^+ \varphi_x \varphi_z^+)>_H \\ &= <\phi_x^{k_1} \phi_x^{k_3}>_H <\phi_y^{k_2}>_H <\phi_z^{k_4}>_H \text{tr}_{\text{SU}(2)}(T^{k_1} \bar{T}^{k_2} T^{k_3} \bar{T}^{k_4}) \\ &= \left(\left(\frac{1}{4} + \frac{|H|^2}{48} \right) \delta_{k_1, k_3} + \frac{H^{k_1} H^{k_3}}{24} \right) \frac{H^{k_2}}{4} \frac{H^{k_4}}{4} \text{tr}_{\text{SU}(2)}(T^{k_1} \bar{T}^{k_2} T^{k_3} \bar{T}^{k_4}) . \end{aligned} \quad (280)$$

Betrachtet man im weiteren nur die Ordnung H^2 und berücksichtigt die Relation $\bar{T}^l T^k \bar{T}^l = -2 \bar{T}^k$, führt dies auf die Beziehung:

$$\begin{aligned} <\text{tr}_{\text{SU}(2)}(\varphi_x \varphi_y^+ \varphi_x \varphi_z^+)>_H &= -\frac{H^{k_2} H^{k_4}}{32} \text{tr}_{\text{SU}(2)}(T^{k_2} \bar{T}^{k_4}) = -\frac{1}{32} \text{tr}_{\text{SU}(2)}(\mathcal{H} \mathcal{H}^+) \\ &= -\frac{|H|^2}{16} = <\text{tr}_{\text{SU}(2)}(\varphi_x^+ \varphi_y \varphi_x^+ \varphi_z)>_H . \end{aligned} \quad (281)$$

Auch hier sind daher die Erwartungswerte in beiden Diagonalblöcken gleich. Dies konnte für alle betrachteten Graphen gezeigt werden. Ein Vorgehen analog dem U(1)-Fall war daher möglich.

C Explizite Berechnung der ersten Koeffizienten der HPE

C.1 $\lambda = \infty$

Betrachtet wird im folgenden nur der zu $|H|^2$ proportionale Anteil.

$$A_1$$

Dem allgemeinen Ausdruck für A_i aus (36) entnimmt man den Spezialfall:

$$A_1 = \frac{1}{2}|H|^2 \sum_{x_1, x_2} \left[G_\alpha^2 \text{tr}(h_{x_1, x_2} h_{x_2, x_1}) - 2G_\beta^2 \cdot 0 - G_\beta^2 \text{tr}(\gamma_5 h_{x_1, x_2} \gamma_5 h_{x_2, x_1}) \right]. \quad (282)$$

Es erweist sich insbesondere bei höherer Ordnung von K als günstig, die jeweiligen Summen über die Spuren graphisch zu verdeutlichen. Da die Matrix $h_{x,y}$ für einen Schritt der Länge Eins von x nach y steht, liegt folgende Veranschaulichung nahe:

$$\sum_{x_1, x_2} G_\alpha^2 \text{tr}(h_{x_1, x_2} h_{x_2, x_1}) = \text{---} \quad (283)$$

und

$$\sum_{x_1, x_2} G_\beta^2 \text{tr}(\gamma_5 h_{x_1, x_2} \gamma_5 h_{x_2, x_1}) = \text{---}. \quad (284)$$

d.h. das Auftreten von $\gamma_5 G_\beta$ kennzeichnet ein ausgefüllter Kreis, das von G_α ein leerer Kreis. Dem vorigen Abschnitt entnimmt man, daß deren Anzahl jeweils gerade sein muß. Mit $h_{xy} = \sum_\mu (\gamma_\mu + 1) \delta_{x,y+\mu}$ folgt aus (282) der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{2}|H|^2 \sum_{x, \mu} \left[G_\alpha^2 \text{tr}((\gamma_\mu + 1)(\gamma_{-\mu} + 1)) - G_\beta^2 \text{tr}(\gamma_5(\gamma_\mu + 1)\gamma_5(\gamma_{-\mu} + 1)) \right] \\ &= -\frac{1}{2}|H|^2 G_\beta^2 \sum_{x, \mu} 2\text{tr}(\gamma_\mu + 1) = -|H|^2 G_\beta^2 2^{d/2} \sum_{x, \mu}. \end{aligned} \quad (285)$$

Der jetzt offensichtliche Wegfall des zu G_α^2 proportionalen Terms unterliegt einer allgemeinen Regel: In einem Appendix, d.h. zwischen $\gamma_\mu + 1$ und $\gamma_{-\mu} + 1$, muß ein $\gamma_5 G_\beta$ auftreten, damit der Graph nicht verschwindet, ein leerer Kreis ist also in einem Appendix nicht erlaubt. Graphisch lautet Gleichung (285) demzufolge

$$A_1 = \frac{1}{2}|H|^2 (\text{---} + \text{---}) = \frac{1}{2}|H|^2 (\text{---}). \quad (286)$$

Die letzte Summe in (285) beschreibt den Einbettungsfaktor des verbleibenden Graphen, d.h. die Zahl der Möglichkeiten, ihn auf dem Gitter zu plazieren. In einem d -dimensionalen Gitter aus N Punkten beträgt er $2dN$ und führt auf

$$A_1 = -2|H|^2 G_\beta^2 2^{d/2} dN. \quad (287)$$

Aus der graphischen Darstellung läßt sich daher dieser Einbettungsfaktor sowie die Potenzen der Yukawakopplungen „direkt“ ablesen. Was bleibt, ist die Berechnung der Spur für einen einzelnen Graphen, d.h. Summanden der Summe über die Gitterpunkte und Richtungen, in unserem Fall also von

$$\text{tr}(\gamma_5(\gamma_\mu + 1)\gamma_5(\gamma_{-\mu} + 1)) = 2 \cdot 2^{d/2}. \quad (288)$$

A_2

ist gegeben durch die Gleichung:

$$A_2 = \frac{1}{2} \bar{\mu}^2 |H|^2 \sum_{x_1, \dots, x_4} \left[\begin{array}{l} 6 G_\alpha^2 \text{tr}(h_{x_1, x_2} \cdots h_{x_4, x_1}) - \\ 4 G_\beta^2 \text{tr}(\gamma_5 h_{x_1, x_2} \gamma_5 h_{x_2, x_3} h_{x_3, x_4} h_{x_4, x_1}) - \\ 2 G_\beta^2 \text{tr}(\gamma_5 h_{x_1, x_2} h_{x_2, x_3} \gamma_5 h_{x_3, x_4} h_{x_4, x_1}) \end{array} \right]. \quad (289)$$

Zur Konstruktion der graphischen Darstellung ist jetzt zu beachten, daß allein Terme der Ordnung $|H|^2$ gesucht sind. D.h. im U(1)-Modell bei divergenter Selbstkopplung müssen genau zwei ϕ -Faktoren auftreten. Aus diesem Grunde darf es nur zwei „einsame“ Kreise geben, ansonsten sind alle Gitterpunkte in geeigneter Weise von einer geraden Zahl von Kreisen (inclusive Null) zu besetzen. Die Eigenschaft „geeignet“ muß hier nicht genau spezifiziert werden. Bis zur Ordnung K^6 bedeutet sie, daß Null die einzige erlaubte gerade Anzahl ist, erst ab der Ordnung K^8 sind auch zwei Kreise an einem Gitterpunkt möglich (33). Unter Berücksichtigung dieser Regeln kommt man zu nachstehender Beziehung:

$$A_2 = \frac{1}{2} |H|^2 \left[\text{□} + \text{□} + \left(\text{□}^\bullet + \text{---} + \text{---} \right) \right]. \quad (290)$$

Wieder lassen sich an den verschiedenen Graphentypen die Einbettungsfaktoren und die Potenzen der Yukawakopplungen leicht ablesen. (Die kreisfreien Gitterpunkte liefern pro Durchlauf einen Faktor $\bar{\mu}$.) Aber auch die Vorfaktoren aus (289) erkennt man graphisch: Da die Matrizen in einer Spur zyklisch permutiert werden können, ist das Resultat für einen Graphen unabhängig von der absoluten Position der Kreise. Allerdings vertauschen die γ_5 in der Spur nicht mit den anderen γ -Matrizen. Während also in Graphen mit leeren Kreisen das Ergebnis von deren relativer Position unbeeinflußt ist, hängt es bei Graphen mit vollen Kreisen davon ab. Genau dies führt zur Unterscheidung des zweiten und dritten Graphen. Im ersten Graphen aus (290) gibt es demzufolge sechs mögliche Anordnungen für das Kreispaar, im zweiten Graphen vier, im dritten zwei.

Für den dritten Graphentypen ist, nachdem die Kreise festliegen, eine weitere Differenzierung möglich und erforderlich. Er zerfällt seinerseits in drei Graphen (Graph ohne Appendix, gestreckte und geknickte Doppelkette) mit verschiedenen Einbettungsfaktoren und unterschiedlicher Spur. Nach der Berechnung der Spur für alle Graphentypen erhält man :

$$A_2 = -\frac{1}{2} \bar{\mu}^2 |H|^2 \left[\begin{array}{l} 48 G_\alpha^2 N d (d-1) 2^{d/2} + 32 G_\beta^2 N d (d-1) 2^{d/2} + \\ (16 G_\beta^2 N d (d-1) 2^{d/2} + 32 G_\beta^2 N d (d-1) 2^{d/2} + 32 G_\beta^2 N d 2^{d/2}) \end{array} \right]. \quad (291)$$

C.2 $\lambda < \infty$

Wie schon im Text ausgeführt, gibt es verschiedene Typen von Beiträgen:

1. Die Beiträge nullter Ordnung in K enthalten keine Hoppingmatrizen $h_{x,y}$, womit eine graphische Darstellung entfällt.

2. Beiträge, bei denen sich alle mit den G-Faktoren verbundenen ϕ 's zu Betragsquadraten kompensieren (dies erfordert an jedem Gitterpunkt eine gerade Anzahl von Kreisen) treten bis zur hier betrachteten vierten Ordnung von K noch nicht auf.
3. Einen Beitrag ohne G-Faktoren gibt es erstmals bei Graphen der Länge Vier. Er entsteht dadurch, daß an jedem Gitterpunkt ein Faktor $h(|\phi|^2)$ auftritt. Bei einer Entwicklung bis zur ersten Ordnung in GG kommt dieser Faktor nicht voll zum Tragen, sondern bewirkt in der Ordnung $|H|^2$ das Auftreten des Faktors $GG|\phi|^2$ an genau einem Punkt des Graphen. Für die Wahl dieses Punktes gibt es vier Möglichkeiten. Daher lautet der Beitrag schließlich (Spur und Einbettungsfaktor sind dieselben wie beim entsprechenden Graphen im Fall divergenter Selbstkopplung, der keine G_β -Faktoren enthält):

$$- 8N d(d - 1) 2^{d/2} 4GG < |\phi|^2 >_H . \quad (292)$$

4. Die Beiträge mit zwei getrennten ϕ -Faktoren ergeben sich aus denen für $\lambda = \infty$ durch einfaches Ersetzen der Erwartungswerte, so daß

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{A_1}{\frac{1}{4}|H|^2} \left(< \phi h(|\phi|^2) >_H < \phi^+ h(|\phi|^2) >_H \right) \\ &= \frac{A_1}{\frac{1}{4}|H|^2} \left(< \phi >_H < \phi^+ >_H + GG < \phi |\phi|^2 >_H < \phi^+ >_H + \right. \\ &\quad \left. GG < \phi >_H < \phi^+ |\phi|^2 >_H \right), \end{aligned} \quad (293)$$

bei Entwicklung bis zur Ordnung $(GG)^1$. Ebenso erhält man die Relation:

$$\begin{aligned} a_2 &= \frac{A_2}{\frac{1}{4}|H|^2} \left(< \phi h(|\phi|^2) >_H < \phi^+ h(|\phi|^2) >_H < h(|\phi|^2) >_H^2 \right) \\ &= \frac{A_2}{\frac{1}{4}|H|^2} \left[< \phi >_H < \phi^+ >_H + GG \left(< \phi |\phi|^2 >_H < \phi^+ >_H + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + < \phi >_H < \phi^+ |\phi|^2 >_H + < \phi >_H < \phi^+ >_H < 2|\phi|^2 >_H \right) \right]. \end{aligned} \quad (294)$$

D Inversion der Hoppingmatrix

D.1 Formale Inversion

Da die Hoppingmatrix in der A-B-Darstellung blockdiagonal ist, lassen sich die beiden identischen Blöcke einzeln invertieren. Man beginnt infolgedessen mit

$$H_{x,y} = K \sum_{\mu} (\gamma_{\mu} + 1) \delta_{x,y+\mu} \quad (295)$$

und macht den Ansatz:

$$H_{x,y}^{-1} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \tilde{\Delta}(k) e^{ik(x-y)} . \quad (296)$$

Dann ergibt die Identität

$$\sum_y H_{x,y}^{-1} H_{y,0} = \delta_{x,0} \quad (297)$$

im Fourieraum die Relation:

$$\tilde{\Delta}(k) = \frac{\sum_{\nu>0} \cos k_{\nu} + i \gamma_{\nu} \sin k_{\nu}}{2K \left((\sum_{\mu>0} \cos k_{\mu})^2 + \sum_{\mu>0} \sin^2 k_{\mu} \right)} . \quad (298)$$

Daraus folgt für die inverse Hoppingmatrix der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} H_{x,y}^{-1} &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{ik(x-y)} \frac{\sum_{\nu>0} e^{ik_{\nu}} + e^{-ik_{\nu}} + \gamma_{\nu} (e^{ik_{\nu}} - e^{-ik_{\nu}})}{4K \left((\sum_{\mu>0} \cos k_{\mu})^2 + \sum_{\mu>0} \sin^2 k_{\mu} \right)} \\ &\equiv \sum_{\nu>0} (G_{x,y-\nu} + G_{x,y+\nu}) + \gamma_{\nu} (G_{x,y-\nu} - G_{x,y+\nu}) \\ &= \sum_{\nu} (1 - \gamma_{\nu}) G_{x,y+\nu} . \end{aligned} \quad (299)$$

Zu berechnen ist daher noch $G_{x,y+\nu} = G_{0,y+\nu-x} \equiv G_{0,t}$, d.h. der Ausdruck:

$$G_{0,t} = \frac{1}{4K} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{e^{-ikt}}{(\sum_{\mu>0} \cos k_{\mu})^2 + \sum_{\mu>0} \sin^2 k_{\mu}} . \quad (300)$$

Störend ist die Tatsache, daß das Impulsintegral nicht faktorisiert. Ursache dafür ist zum einen das Auftreten des Impulses im Nenner des Integranden, zum anderen das Quadrat der Cosinussumme. Beides läßt sich allerdings durch Einführung von Parameterintegralen beheben. Im ersten Schritt erhält man

$$G_{0,t} = \frac{1}{4K} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{-ikt} \int_0^{\infty} d\omega \exp\{-\omega [(\sum_{\mu>0} \cos k_{\mu})^2 + \sum_{\mu>0} \sin^2 k_{\mu}]\} . \quad (301)$$

Auf Kosten eines weiteren Parameters läßt sich der Cosinusanteil als Gaußintegral schreiben und es ergibt sich:

$$G_{0,t} = \frac{1}{4K} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{-ikt} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\sqrt{4\pi\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{y^2}{4\omega}} \exp\{iy \sum_{\mu>0} \cos k_{\mu} - \omega \sum_{\mu>0} \sin^2 k_{\mu}\} . \quad (302)$$

Jetzt faktorisiert die Impulsintegration, so daß daraus die Gleichung

$$G_{0,t} = \frac{1}{4K} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\sqrt{4\pi\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-\frac{y^2}{4\omega}} \prod_{\mu=1}^d \left\{ \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_{\mu}}{2\pi} e^{-ik_{\mu} t_{\mu}} e^{iy \cos k_{\mu} - \omega \sin^2 k_{\mu}} \right\} \quad (303)$$

resultiert. Nutzt man die Relation $\sin^2 x = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos 2x$ zusammen mit der Beziehung $e^{z \cos \theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} I_n(z) e^{in\theta}$, in der $I_n(z)$ wieder die modifizierte Besselfunktion n -ter Ordnung bezeichnet, ergibt sich für das Integral in geschweiften Klammern der Ausdruck:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_{\mu}}{2\pi} e^{-ik_{\mu} t_{\mu}} e^{iy \cos k_{\mu} - \omega \sin^2 k_{\mu}} = e^{\frac{\omega}{2}} \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_{\mu}}{2\pi} e^{-ik_{\mu} t_{\mu}} e^{in2k_{\mu}} e^{imk_{\mu}} \right] I_n\left(\frac{\omega}{2}\right) I_m(iy). \quad (304)$$

Das verbleibende Impulsintegral ist also im wesentlichen eine δ -Funktion. Mit der Besselfunktion $J_{\nu}(y) = i^{-\nu} I_{\nu}(iy)$ und nach einer Substitution $\frac{y^2}{\omega} \rightarrow \frac{z^2}{2}$ sowie $\frac{\omega d}{2} \rightarrow x$ bekommt man schließlich das Resultat:

$$G_{0,t} = \frac{1}{2Kd} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{8\pi}} e^{-x} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{-\frac{z^2}{8}} \prod_{\mu=1}^d \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^{|t_{\mu}-2n|} I_n\left(\frac{x}{d}\right) J_{|t_{\mu}-2n|}\left(\sqrt{\frac{x}{d}} z\right) \right\}. \quad (305)$$

D.2 Analyse der d -Abhängigkeit

In (305) treten die d -Potenzen nur noch in dem Produkt:

$$f\left(\sqrt{\frac{x}{d}}, z\right) = \prod_{\mu=1}^d \left\{ \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^{|t_{\mu}-2n|} I_n\left(\frac{x}{d}\right) J_{|t_{\mu}-2n|}\left(\sqrt{\frac{x}{d}} z\right) \right\} \quad (306)$$

auf und ändern sich auch durch die Integration über x bzw. z nicht mehr, lassen sich also an $f(\sqrt{x/d}, z)$ ablesen.

Beiträge zur d -Potenz ergeben sich auf zwei verschiedene Weisen:

Einerseits gibt es den Beitrag aus der Betrachtung eines einzelnen Summanden von $f(\sqrt{x/d}, z)$, andererseits kann sich ein von d abhängiger, kombinatorischer Faktor ergeben, der die Häufigkeit eines bestimmten Summanden in $f(\sqrt{x/d}, z)$ wiedergibt. Bei der nun folgenden Untersuchung des dadurch festgelegten d -Verhaltens sei der Gittervektor $t = (t_1, \dots, t_d)$ beliebig, aber fest. Die Länge eines solchen Gittervektors ist die Summe der Beträge seiner Komponenten, also $|t| = \sum_{j=1}^d |t_j|$.

Betrachtet man zunächst einen einzelnen Summanden, so hat er die Gestalt:

$$\propto \prod_{j=1}^d I_{|n_j|}\left(\frac{x}{d}\right) J_{|t_j-2n_j|}\left(\sqrt{\frac{x}{d}} z\right). \quad (307)$$

Seine niedrigste $1/d$ -Potenz ist folglich $|n| + \frac{1}{2}|t - 2n|$. Bei festem t nimmt diese ihr Minimum $|t|/2$ genau dann an, wenn $0 \leq n_j \leq t_j/2$ bzw. $t_j/2 \leq n_j \leq 0$, für alle j . Liegt n_j außerhalb dieses im folgenden mit I_j bezeichneten „Minimum“-Intervalls und beträgt die Entfernung zu nächstgelegenen Intervallgrenzen $|p_j|$ so ist die kleinste $1/d$ -Potenz eines solchen Summanden $|t|/2 + 2|p_j|$.

Für die Anzahl dieser Summanden lässt sich die folgenden Aussage treffen:
Liegen alle n_j in ihren jeweiligen Minimumsintervallen I_j , so umfaßt

$$\propto \prod_{j=1}^d \left(\sum_{n_j \in I_j} I_{|n_j|}\left(\frac{x}{d}\right) J_{|t_j-2n_j|}\left(\sqrt{\frac{x}{d}} z\right) \right) \quad (308)$$

gerade sämtliche Summanden, welche, einzeln betrachtet, die höchste d -Potenz enthalten. Dies läßt sich für große d umformen zu

$$\left(\frac{x}{d}\right)^{\frac{1}{2}|t|} (1 + O(\frac{x}{d}))^d = \left(\frac{x}{d}\right)^{\frac{1}{2}|t|} e^{O(x)}, \quad (309)$$

denn der Vorfaktor von $\frac{x}{d}$ hängt hier nicht von d ab, sondern von den t_j . D.h. auch der zusammengefaßte Beitrag aller Summanden mit $n_j \in I_j, \forall j$ hat $|t|/2$ als niedrigste Ordnung in $1/d$.

Wählt man nun m der n_j außerhalb der Intervalle I_j , so läßt sich der kombinatorische Faktor wie folgt abschätzen. Wären die Summanden unabhängig davon, welche der d möglichen n_j nicht in den Minimumsintervallen liegen, gäbe es jeweils $\frac{d!}{m!(d-m)!}$ identische Beiträge. Ist diese Unabhängigkeit nicht gegeben, wird ihre Anzahl kleiner. Ausgehend von einem Summanden mit $n_j \in I_j, \forall j$ erhält man also für große d jetzt maximal $\propto d^m$ identische Beiträge, bei denen m der n_j nicht in I_j liegen. Verfährt man bei festem t mit allen Summanden aus (308) auf diese Weise, ändert sich die d -Abhängigkeit des kombinatorischen Faktors aufgrund von (309) nicht. Solche Ausdrücke weisen daher gegenüber denen mit minimaler $1/d$ -Potenz noch einen Zusatzfaktor $d^{m-2|p|}$ auf. Da m der p_j von Null verschieden sind, also $|p| \geq m$, bedeutet dies, daß sie wenigstens um einen Faktor d^{-m} unterdrückt sind.

Zusammenfassend läßt sich also bis hierher sagen, daß es bei festem t zur jeweils führenden Ordnung in $1/d$ nur Beiträge durch die Summanden gibt, welche die Minimumsbedingung erfüllen. Die führende Ordnung ist dann gegeben durch $d^{-|t|/2}$.

Bevor nun für einige t eine explizite Berechnung erfolgt, läßt sich eine weitere allgemeine Feststellung treffen, wenn man die Potenzen von z betrachtet.

Da $J_{|n|}(x) = x^{|n|} F_{|n|}(x)$ mit einer in x geraden Funktion $F_{|n|}$, lauten in (307) die z -Potenzen: $|t - 2n| + 2q$, mit $q \in \mathbb{N}_0$. Diese müssen, damit der Ausdruck die z -Integration in (305) überlebt, gerade sein, d.h. nur Terme mit geradem $|t|$ liefern nichtverschwindende Beiträge. Erinnert man sich an die Definition von t , bedeutet dies, daß die inverse Hoppingmatrix $(\bar{H}^{-1})_{x,y}$ nur dort von Null verschiedene Einträge hat, wo die Punkte x, y auf dem Gitter eine ungerade Wegstrecke trennt. Diese Aussage konnte durch den Vergleich mit einer numerischen Inversion von \bar{H} exakt bestätigt werden. Insbesondere hat also $(\bar{H}^{-1})_{x,y}$ keinen lokalen Beitrag $\propto \delta_{x,y}$. Für einen geschlossenen Weg auf dem Gitter ist daher weiterhin eine gerade Anzahl von (jetzt inversen) Hoppingmatrizen erforderlich.

D.3 Explizite Berechnung von \bar{H}^{-1} in führender Ordnung von d

Gemäß den Resultaten des vorangegangenen Abschnitts für beliebiges, aber festes t , ist in führender Ordnung von d zunächst nur der Fall $t = 0$ interessant. Führende Ordnung in d bedeutet dann zugleich $n_j = 0, \forall j$. Demzufolge besteht jetzt der Zusammenhang:

$$G_{0,t} = \frac{1}{2Kd} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{8\pi}} e^{-x} \int_{-\infty}^\infty dz e^{-\frac{z^2}{8}} \left(I_0\left(\frac{x}{d}\right) J_0\left(\sqrt{\frac{x}{d}}z\right) \right)^d \prod_{\mu=1}^d \delta_{0,t_\mu}. \quad (310)$$

Um die Konsistenz zu wahren, sind auch hier die höheren Ordnungen von $1/d$ zu vernachlässigen. Aufgrund der Beziehung

$$\begin{aligned} \left(I_0\left(\frac{x}{d}\right) J_0\left(\sqrt{\frac{x}{d}}z\right) \right)^d &= \left(1 - \frac{1}{4} \frac{x}{d} z^2 + O\left(\left(\frac{x}{d}\right)^2\right) \right)^d = \exp\left\{-d \left(\frac{1}{4} \frac{x}{d} z^2 + O\left(\left(\frac{x}{d}\right)^2\right)\right)\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{x}{4} z^2\right\} \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} d^n O\left(\left(\frac{x}{d}\right)^{2n}\right) \right] \end{aligned} \quad (311)$$

verbleibt man also mit dem Ausdruck:

$$G_{0,t} = \frac{1}{2Kd} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{8\pi}} e^{-x} \int_{-\infty}^\infty dz e^{-(\frac{1}{8} + \frac{x}{4})z^2} \delta_{0,t} + O\left(\frac{1}{d^2}\right). \quad (312)$$

Daraus ergibt sich nun leicht, die Relation:

$$G_{0,t} = \frac{\sqrt{e}}{2Kd} \left[\sqrt{\frac{\pi}{2}} - \int_0^1 dy e^{-\frac{y^2}{2}} \right] \delta_{0,t} + O\left(\frac{1}{d^2}\right) = \frac{0.6556}{2Kd} \delta_{0,t} + O\left(\frac{1}{d^2}\right). \quad (313)$$

Wegen der z -Integration ist die nächste Ordnung in $1/d$ durch $|t| = 2$ charakterisiert, ist also d^{-1} . Das Produkt über die Besselfunktionen reduziert sich bei diesem $|t|$ in führender Ordnung $1/d$ auf den folgenden Ausdruck (die Argumente der Funktionen sind die üblichen):

$$\begin{aligned} & (I_0 J_0)^{d-1} (I_1 J_0 - I_0 J_1) \sum_\nu \delta_{t,2\nu} - (I_0 J_0)^{d-2} (I_0 J_1)^2 \frac{1}{2} \sum_{|\lambda| \neq |\rho|} \delta_{t,\hat{\lambda}+\hat{\rho}} \\ &= (I_0 J_0)^d \left[\left(\frac{I_1}{I_0} - \frac{J_2}{J_0} \right) \sum_\nu \delta_{t,2\nu} - \left(\frac{J_1}{J_0} \right)^2 \frac{1}{2} \sum_{|\lambda| \neq |\rho|} \delta_{t,\hat{\lambda}+\hat{\rho}} \right]. \end{aligned} \quad (314)$$

Der erste Faktor ist zu behandeln wie in (311). Die Entwicklung des zweiten Faktors für große d ergibt in führender Ordnung von $1/d$

$$[] = \frac{x}{d} \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{z^2}{8} \right) \sum_\nu \delta_{t,2\nu} - \frac{z^2}{8} \sum_{|\lambda| \neq |\rho|} \delta_{t,\hat{\lambda}+\hat{\rho}} \right] + O\left(\frac{x}{d}\right)^2. \quad (315)$$

Das bedeutet für $G_{0,t}$:

$$\begin{aligned} G_{0,t} &= \frac{0.6556}{2Kd} \delta_{0,t} + \\ &\quad \frac{1}{2Kd^2} \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{8\pi}} x e^{-x} \int_{-\infty}^\infty dz e^{-(\frac{1}{8} + \frac{x}{4})z^2} \left[\frac{4-z^2}{8} \sum_\nu \delta_{t,2\nu} - \frac{z^2}{8} \sum_{|\lambda| \neq |\rho|} \delta_{t,\hat{\lambda}+\hat{\rho}} \right]. \end{aligned} \quad (316)$$

Die z -Integration lässt sich explizit ausführen. Die Berechnung der verbleibenden x -Integrale mit MAPLE liefert schließlich

$$G_{0,t} = \frac{a}{2Kd} \delta_{0,t} + \frac{1-a}{4Kd^2} \sum_\nu \delta_{t,2\nu} - \frac{2a-1}{8Kd^2} \sum_{|\lambda| \neq |\rho|} \delta_{t,\hat{\lambda}+\hat{\rho}} \quad (317)$$

mit $a = 0.6556$.

E Rechnungen zum Fermionpropagator in der MFA

E.1 Summationen über alle Wege

A

Zunächst lässt sich die Summe über alle Wege umformen zu

$$\begin{aligned} a_i^{(q)} &\equiv \sum_x e^{-iq \cdot x} \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} \prod_{j=1}^i (\gamma_{\mu_j} + 1) \delta_{x, 0 + \hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i} \\ &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i)} \prod_{j=1}^i (\gamma_{\mu_j} + 1). \end{aligned} \quad (318)$$

Dabei nehmen die μ_j die Werte ± 1 bis $\pm d$ an und $\hat{\mu}$ ist der Einheitsvektor in Richtung μ . Man berechnet nun leicht die folgende Rekursion:

$$\begin{aligned} a_{i+1}^{(q)} &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_{i+1}} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_{i+1})} \prod_{j=1}^{i+1} (\gamma_{\mu_j} + 1) = \sum_{\mu_{i+1}} e^{-iq \cdot \hat{\mu}_{i+1}} a_i^{(q)} (\gamma_{\mu_{i+1}} + 1) \\ &= \sum_{\mu_{i+1} > 0} [e^{-iq \cdot \hat{\mu}_{i+1}} (\gamma_{\mu_{i+1}} + 1) + e^{iq \cdot \hat{\mu}_{i+1}} (\gamma_{-\mu_{i+1}} + 1)] a_i^{(q)} \\ &= 2 \sum_{\mu_{i+1} > 0} [\cos(q \cdot \hat{\mu}_{i+1}) - i \gamma_{\mu_{i+1}} \sin(q \cdot \hat{\mu}_{i+1})] a_i^{(q)} \\ &= 2 \left(\sum_{\mu_{i+1} > 0} \cos(q \cdot \hat{\mu}_{i+1}) \right) \mathbb{1}_4 a_i^{(q)} \\ &= 2(d - 2n_q) a_i^{(q)}, \end{aligned} \quad (319)$$

wobei n_q die Zahl der von Null verschiedenen Komponenten von q und $q_i \in \{0, \pi\}$ ist. Mit dem Rekursionsanfang $a_0^{(q)} = \mathbb{1}_4$ gilt demnach

$$a_i^{(q)} = (2(d - 2n_q))^i \mathbb{1}_4. \quad (320)$$

B

Hier folgt ebenso die Beziehung

$$\begin{aligned} b_i^{(q)} &\equiv \sum_x e^{-iq \cdot x} \left(\sum_{k=1}^d x_k \gamma_k \right) \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} \prod_{j=1}^i (\gamma_{\mu_j} + 1) \delta_{x, 0 + \mu_1 + \dots + \mu_i} \\ &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i)} \left(\sum_{k=1}^i \gamma_{\mu_k} \right) \prod_{j=1}^i (\gamma_{\mu_j} + 1). \end{aligned} \quad (321)$$

Die Rekursionsformel ergibt sich nun wie folgt:

$$\begin{aligned} b_{i+1}^{(q)} &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_{i+1}} \left(\sum_{k=1}^{i+1} \gamma_{\mu_k} \right) e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_{i+1})} \prod_{j=1}^{i+1} (\gamma_{\mu_j} + 1) \\ &= \sum_{\mu_{i+1}} e^{-iq \cdot \hat{\mu}_{i+1}} \left[\left(\sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i)} \left(\sum_{k=1}^i \gamma_{\mu_k} \right) \prod_{j=1}^i (\gamma_{\mu_j} + 1) \right) (\gamma_{\mu_{i+1}} + 1) \right. \\ &\quad \left. + \gamma_{\mu_{i+1}} \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i)} \prod_{j=1}^i (\gamma_{\mu_j} + 1) (\gamma_{\mu_{i+1}} + 1) \right] \\ &= \sum_{\mu_{i+1}} e^{-iq \cdot \hat{\mu}_{i+1}} \left[b_i^{(q)} (\gamma_{\mu_{i+1}} + 1) + \gamma_{\mu_{i+1}} a_i^{(q)} (\gamma_{\mu_{i+1}} + 1) \right] \\ &= 2(d - 2n_q) (b_i^{(q)} + a_i^{(q)}). \end{aligned} \quad (322)$$

Mit dem Rekursionsansfang $b_0^{(q)} = 0$ erhält man daher

$$b_i^{(q)} = i(2(d - 2n_q))^i \mathbb{1}_4 . \quad (323)$$

Der Vorfaktor von B lautet

$$\frac{2}{2d - \hat{q}^2} = \left(d - 2 \sum_{k=1}^d \sin^2\left(\frac{q_k}{2}\right) \right)^{-1} = \frac{1}{d - 2n_q} . \quad (324)$$

E.2 Einbinden irreduzibler Bausteine

Die Einbindung appendixfreier geschlossener Wege, die mit einer G-Matrix beginnen und enden, lässt sich einfach handhaben, da es sich dabei lediglich um das Einfügen von Zahlen I_2, I_3 etc. handelt, die keinen Einfluss auf die Struktur der Koeffizienten $a_i(q)$ oder $b_i(q)$ haben. Etwas aufwendiger ist die Berücksichtigung der Bausteine aus (128). Da sie γ -Matrizen enthalten, ändern sie möglicherweise die Diracstruktur der Koeffizienten:

Mit $\bar{\mu}(\bar{\mu}^2 - (G_\alpha^2 - G_\beta^2))^{-1} \equiv I_0$ gilt ohne die Berücksichtigung weiterer irreduzibler Bausteine nach (116) der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} A(q) \otimes \mathbb{1}_4 &= I_0 \sum_{i=0}^{\infty} I_0^i K^i a_i(q) , \\ B_\alpha(q) - \gamma_5 B_\beta(q) &= \frac{1}{d - 2n_q} I_0 \sum_{i=0}^{\infty} I_0^i K^i b_i(q) . \end{aligned} \quad (325)$$

Ersetzt man nun an beliebigen Stellen I_0 durch irgendeinen anderen irreduziblen Baustein, führt dies auf die Ausdrücke:

$$\begin{aligned} A(q) \otimes \mathbb{1}_4 &= I_0 \sum_{i=0}^{\infty} I_0^i K^i \sum_{j=0}^{i+1} \binom{i+1}{j} I_0^{-j} (a_i(q) \circ B^j) , \\ B_\alpha(q) - \gamma_5 B_\beta(q) &= \frac{1}{d - 2n_q} I_0 \sum_{i=0}^{\infty} I_0^i K^i \sum_{j=0}^{i+1} \binom{i+1}{j} I_0^{-j} (b_i(q) \circ B^j) . \end{aligned} \quad (326)$$

Dabei meint \circ eine irgendwie geartete Verknüpfung, die i.a. sogar von der Stelle abhängen könnte, an der die Bausteine B eingefügt werden. Da dies bei allen hier betrachteten Bausteinen nicht der Fall ist, ist die obige Schreibweise wohldefiniert. Ist B_g nun einer oder mehrere der hier betrachteten geschlossenen Graphen, so lässt es sich durch eine Zahl ohne Diracstruktur ausdrücken, die Verknüpfung \circ ist daher rein multiplikativ. Man erhält auf diese Weise die Beziehungen:

$$\begin{aligned} A(q) \otimes \mathbb{1}_4 &= (I_0 + B_g) \sum_{i=0}^{\infty} (I_0 + B_g)^i K^i a_i(q) , \\ B_\alpha(q) - \gamma_5 B_\beta(q) &= \frac{1}{d - 2n_q} (I_0 + B_g) \sum_{i=0}^{\infty} (I_0 + B_g)^i K^i b_i(q) . \end{aligned} \quad (327)$$

Berücksichtigung solcher Bausteine erfolgt also einfach durch Addition in den irreduziblen Anteilen. In der Ordnung K^6 treten erstmals irreduzible Bausteine auf, bei denen dies nicht mehr der Fall ist. Um sie einzubeziehen, ist zunächst die Verknüpfung durchzuführen.

A

Fügt man den Baustein $B_{\nu,\mu} \equiv a(G_\alpha - \gamma_5 G_\beta)(\gamma_\nu + 1)(\gamma_\mu + 1)(G_\alpha + \gamma_5 G_\beta)$ in einen Graphen, der bisher nur aus L und I_0 bzw. B_g aufgebaut ist, an die l -te Stelle ein, so folgt mit den Abkürzungen $(\gamma_\mu \pm 1) \equiv \gamma_\mu^\pm$ und $(G_\alpha \pm \gamma_5 G_\beta) = G^\pm$ die Relation:

$$\begin{aligned} a_i(q) \circ B_{\nu,\mu} &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i)} \prod_{j=1}^l \gamma_{\mu_j}^+ \left(\sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} B_{\nu,\mu} \right) \prod_{r=l+1}^i \gamma_{\mu_r}^+ \\ &\equiv S(q) a_i(q). \end{aligned} \quad (328)$$

Dabei gilt mit $q_i \in \{0, \pi\}$ \forall_i

$$\begin{aligned} S(q) &= \left(\sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} B_{\nu,\mu} \right) \\ &= 4aG^- \left(\sum_{\nu > \mu > 0} \cos(q_\nu + q_\mu) + \cos(q_\nu - q_\mu) - i(\gamma_\nu + \gamma_\mu) \sin(q_\nu + q_\mu) \right. \\ &\quad \left. - i(\gamma_\nu - \gamma_\mu) \sin(q_\nu - q_\mu) \right) G^+ \\ &= 8aG^- \left(\sum_{\nu > \mu > 0} \cos q_\nu \cos q_\mu \right) G^+ \\ &= [2d(2d-2) - 16n_q(d-n_q)] a(G_\alpha^2 - G_\beta^2) \mathbb{I}_4. \end{aligned} \quad (329)$$

B

Für b_i ergibt sich

$$\begin{aligned} b_i(q) \circ B_{\nu,\mu} &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i)} \sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} \left(\sum_{k=1}^i \gamma_{\mu_k} + \gamma_\nu + \gamma_\mu \right) \\ &\quad \prod_{j=1}^l \gamma_{\mu_j}^+ B_{\nu,\mu} \prod_{r=l+1}^i \gamma_{\mu_r}^+ \\ &= \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i)} \left(\sum_{k=1}^i \gamma_{\mu_k} \right) \prod_{j=1}^l \gamma_{\mu_j}^+ \left(\sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} B_{\nu,\mu} \right) \prod_{r=l+1}^i \gamma_{\mu_r}^+ \\ &\quad + \sum_{\mu_1, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_i)} \sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} (\gamma_\nu + \gamma_\mu) \prod_{j=1}^l \gamma_{\mu_j}^+ B_{\nu,\mu} \prod_{r=l+1}^i \gamma_{\mu_r}^+ \\ &= S(q) b_i(q) + \sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} (\gamma_\nu + \gamma_\mu) \sum_{\mu_1, \dots, \mu_l} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_1 + \dots + \hat{\mu}_l)} \prod_{j=1}^l \gamma_{\mu_j}^+ \\ &\quad B_{\nu,\mu} \sum_{\mu_{l+1}, \dots, \mu_i} e^{-iq \cdot (\hat{\mu}_{l+1} + \dots + \hat{\mu}_i)} \prod_{r=l+1}^i \gamma_{\mu_r}^+ \\ &= S(q) b_i(q) + \sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} (\gamma_\nu + \gamma_\mu) a_l(q) B_{\nu,\mu} a_{i-l}(q) \\ &\equiv S(q) b_i(q) + T(q) a_i(q) \end{aligned} \quad (330)$$

mit

$$\begin{aligned} T(q) &= \sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} (\gamma_\nu + \gamma_\mu) B_{\nu,\mu} = 2aG^+ \left(\sum_{\nu, \mu, \nu \neq \pm \mu} e^{-iq \cdot (\hat{\nu} + \hat{\mu})} \gamma_\mu^+ \right) G^+ \\ &= 2[2d(2d-2) - 16n_q(d-n_q)] a(G_\alpha^2 + G_\beta^2 + 2\gamma_5 G_\alpha G_\beta) \equiv T_\alpha + \gamma_5 T_\beta. \end{aligned} \quad (331)$$

Das bedeutet für das Einfügen von n Bausteinen dieser Art

$$\begin{aligned} a_i(q) \circ (B_{\nu,\mu})^n &= S^n(q)a_i(q), \\ b_i(q) \circ (B_{\nu,\mu})^n &= S^n(q)b_i(q) + nS^{n-1}(q)T(q)a_i(q), \end{aligned} \quad (332)$$

was sich leicht induktiv zeigen lässt. Damit ist das Resultat insbesondere unabhängig von der Stelle, an der der Baustein $B_{\nu,\mu}$ eingefügt wurde. Demzufolge erhält man die Beziehungen:

$$\begin{aligned} A(q) \otimes \mathbb{1}_4 &= (I_0 + B_g) \sum_{i=0}^{\infty} (I_0 + B_g)^i K^i \sum_{j=0}^{i+1} \binom{i+1}{j} (I_0 + B_g)^{-j} (a_i(q) \cdot S^j(q)) \\ &= (I_0 + B_g + S(q)) \sum_{i=0}^{\infty} (I_0 + B_g + S(q))^i K^i a_i(q) \end{aligned} \quad (333)$$

und

$$\begin{aligned} B_\alpha(q) - \gamma_5 B_\beta(q) &= \frac{1}{d - 2n_q} (I_0 + B_g) \sum_{i=0}^{\infty} (I_0 + B_g)^i K^i \sum_{j=0}^{i+1} \left\{ \right. \\ &\quad \left. \binom{i+1}{j} (I_0 + B_g)^{-j} (S^j(q) \cdot b_i(q) + j S^{j-1}(q) T(q) \cdot a_i(q)) \right\} \\ &= \frac{1}{d - 2n_q} \sum_{i=0}^{\infty} K^i \left[(I_0 + B_g + S(q))^{i+1} b_i(q) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial S(q)} (I_0 + B_g + S(q))^{i+1} T(q) a_i(q) \right]. \end{aligned} \quad (334)$$

Das Einsetzen der Koeffizienten $a_i(q)$ und $b_i(q)$ ergibt dann

$$\begin{aligned} A(q) &= \frac{I_0 + I_2 + I_3 + S(q)}{1 - L(q)(I_0 + I_2 + I_3 + S(q))}, \\ B_\alpha &= \frac{1}{d - 2n_q} \frac{T_\alpha(q) + L(q)(I_0 + I_2 + I_3 + S(q))^2}{(1 - L(q)(I_0 + I_2 + I_3 + S(q)))^2}, \\ B_\beta &= -\frac{1}{d - 2n_q} \frac{T_\beta(q)}{(1 - L(q)(I_0 + I_2 + I_3 + S(q)))^2}. \end{aligned} \quad (335)$$

Es lässt sich eine Abweichung vom bisherigen Verhalten erkennen, die in dem allein zu B gehörigen irreduziblen Anteil T liegt. Er ist auch für den ersten nichtverschwindenden Beitrag zu B_β verantwortlich.

F Ähnlichkeitstransformation der Fermionmatrix für $|G_\psi| = |G_\chi|$

1. Bereits im Falle beliebiger Yukawakopplungen ergibt sich für die Fermiondeterminante ein reeller Erwartungswert, da die Wahrscheinlichkeiten für $\det Q$ und $\det Q^*$ gleich sind. Letzteres folgt mit Hilfe der Beziehung

$$\mathbb{I}_2 \otimes \gamma_5 \cdot Q^+(\phi)_{xy} \cdot \mathbb{I}_2 \otimes \gamma_5 = Q(\phi^+)_{xy} \quad (336)$$

aus der Relation

$$\begin{aligned} \det Q(\phi^+) &= \det (\mathbb{I}_{2N} \otimes \gamma_5) \det Q^+(\phi) \det (\mathbb{I}_{2N} \otimes \gamma_5) = \det Q^+(\phi) \\ &= \det Q(\phi)^*. \end{aligned} \quad (337)$$

\mathbb{I}_2 ist dabei die $2 \otimes 2$ Einheitsmatrix in der chiralen ψ - χ -Basis und N die Zahl der Gitterpunkte. Da nun die Konfigurationen ϕ und ϕ^+ mit gleicher Wahrscheinlichkeit auftreten (die skalare Wirkung ist für beide gleich), gilt dies auch für Q , Q^+ und ihre Determinanten.

2. Vertauscht man in $Q(\phi^+)_{xy}$ gemäß der Schreibweise (15) die Reihen 1,2 mit 3,4 und ebenso die Spalten, so bewirkt dies

$$Q^{ex}(\phi^+)_{xy} = Q_{G_\psi \leftrightarrow G_\chi}(\phi)_{xy} = Q(\phi)_{xy}, \quad (338)$$

wenn $G_\psi = G_\chi$ ist. Mit 1. ist dann $\det Q^{ex}(\phi^+) = \det Q(\phi^+) = \det Q(\phi)$. Daher ist im Falle gleicher Yukawakopplungen die Determinante in jeder Messung reell.

3. Mit $\bar{\mathbb{I}} = \gamma_5 \otimes \mathbb{I}_2$ hat für den Fall $G_\psi = -G_\chi$ folgende Beziehung Gültigkeit:

$$\begin{aligned} \det Q(\phi) &= \det Q^{ex}(\phi) = \det (\mathbb{I}_N \otimes -\bar{\mathbb{I}}) \det Q^{ex}(\phi) \det (\mathbb{I}_N \otimes \bar{\mathbb{I}}) \\ &= \det Q^+(\phi) = \det Q(\phi)^*, \end{aligned} \quad (339)$$

also ist auch hier die Determinante reell.

G Konvergenzbeweis für das BCG-Verfahren

Zu zeigen ist der Zusammenhang:

$$\begin{aligned} (\bar{r}_i, r_j) &= (r_i, \bar{r}_j) = 0 \quad \forall_{j < i}, \\ (\bar{p}_i, Ap_j) &= (Ap_i, \bar{p}_j) = 0 \quad \forall_{j < i}. \end{aligned} \quad (340)$$

Dies geschieht durch Induktion nach i . Die Gültigkeit für $i = 1$ rechnet man mit Hilfe der Definitionsgleichungen der BCG-Methode leicht nach. Für den Induktionsschritt ergibt sich

$$\begin{aligned} (r_{i+1}, \bar{r}_j) &= (r_i, \bar{r}_j) - \alpha_i^*(Ap_i, \bar{r}_j) \\ &= (r_i, \bar{r}_j) - \alpha_i^*(Ap_i, \bar{p}_j) + \beta_j^* \alpha_i^*(Ap_i, \bar{p}_{j-1}). \end{aligned} \quad (341)$$

Falls $j < i$, verschwinden alle drei Terme der rechten Seite nach Voraussetzung (340). Falls $j = i$, verschwindet nur der letzte Term, die beiden anderen Terme kompensieren sich jedoch durch die Wahl von α_i . Ganz analog verläuft der Beweis für die Relation $(\bar{r}_i, r_j) = 0 \quad \forall_{j < i}$.

Der entsprechende Induktionsschritt für die Suchrichtungen lautet:

$$\begin{aligned} (\bar{p}_{i+1}, Ap_j) &= (\bar{r}_{i+1}, Ap_j) + \beta_{i+1}(\bar{p}_i, Ap_j) \\ &= \frac{1}{\alpha_j} [(\bar{r}_{i+1}, r_j) - (\bar{r}_{i+1}, r_{j+1})] + \beta_{i+1}(\bar{p}_i, Ap_j). \end{aligned} \quad (342)$$

Da die erste Beziehung in (340) bereits gezeigt ist, verschwinden nach Voraussetzung für $j < i$ erneut alle drei Terme der rechten Seite. Im Falle $j = i$ verschwindet nur (\bar{r}_{i+1}, r_j) . Diesmal sorgt die geeignete Wahl von β_{i+1} für eine Kompensation der beiden übrigen Terme. Auch hier läßt sich der Beweis auf die verbleibende Relation $(Ap_i, \bar{p}_j) = 0 \quad \forall_{j < i}$ problemlos übertragen.

Fordert man zusätzlich die Stabilität des Algorithmus, d.h. ein Nichtverschwinden aller auftretenden Nenner – in den Spezialfällen der BCG-Methode mit hermitescher Matrix A ergibt sie sich aus der Definitheit von A –, so folgt die für die Konvergenz des BCG-Verfahrens zentrale Beziehung aus (340):

Stabilität bedeutet u.a. $(\bar{r}_i, r_i) \neq 0$. Da aber $(\bar{r}_i, r_j) = 0 \quad \forall_{j < i}$ ergibt sich daraus

$$r_i \notin \langle r_1, \dots, r_{i-1} \rangle. \quad (343)$$

Die Restvektoren r_i sind also linear unabhängig, so daß in einem N -dimensionalen Problem spätestens der Vektor r_N der Nullvektor sein muß.

Für hermitesche Matrizen folgt der Übergang zum CG-Verfahren, wie im Text erwähnt, durch die Wahl $\bar{r}_1 = r_1$. Da dann auch $\bar{r}_k = r_k$ und $\bar{p}_k = p_k$ für alle k , bedeuten die Relationen (340) hier

$$\begin{aligned} (r_i, r_j) &= 0 \quad \forall_{j < i}, && \text{d.h. Orthogonalität der } r_i, \\ (p_i, Ap_j) &= 0 \quad \forall_{j < i}, && \text{d.h. A-Konjugiertheit der } p_i. \end{aligned} \quad (344)$$

Aus der ersten Beziehung folgt sofort die analytische Konvergenz nach maximal N Schritten. Da der Algorithmus erfolgreich abbricht, sobald $r_i = 0$ ist, kann nur das Verschwinden des Nenners (p_i, Ap_i) die Stabilität des CG-Verfahrens gefährden. Letzteres verbietet aber die positive Definitheit von A .

Wählt man stattdessen $\bar{r}_1 = Ar_1$ definiert dies den CR-Algorithmus. Erneut setzt sich diese Relation für Restvektoren und Suchrichtungen über alle Iterationen fort, und man erhält aus (340)

$$\begin{aligned} (Ar_i, r_j) &= 0 \quad \forall_{j < i}, & \text{d.h. } A\text{-Konjugiertheit der } r_i, \\ (Ap_i, Ap_j) &= 0 \quad \forall_{j < i}, & \text{d.h. } A^T A\text{-Konjugiertheit der } p_i. \end{aligned} \quad (345)$$

Auch hier folgt aus der ersten Beziehung die lineare Unabhängigkeit der r_i und damit die analytische Konvergenz. Bei Verwendung des geeigneten Ausdrucks für β_{i+1} tritt nur (Ap_i, Ap_i) als Nenner auf. Daher gibt es auch für indefinites A keine Stabilitätsprobleme, solange es invertierbar ist.

Literatur

- [1] S.L.Glashow, **Partial-symmetries of weak interactions.** *Nucl. Phys.* **22** (1961) 579;
S.Weinberg, **A model of leptons.** *Phys. Rev. Lett.* **19** (1967) 1264
- [2] F.J.Hasert et al., **Observation of neutrino-like interactions without muon or electron in the Gargamelle neutrino experiment.** *Phys. Lett.* **46B** (1973) 138
- [3] J.E.Augustin et al., **Discovery of a narrow resonance in e^+e^- annihilation.** *Phys. Rev. Lett.* **33** (1974) 1406
- [4] G.Arnison et al., **Experimental observation of isolated large transverse energy electrons with associated missing energy at $\sqrt{s} = 540$ GeV.** *Phys. Lett.* **122B** (1983) 103; **Experimental observation of lepton pairs of invariant mass around 95 GeV/c^2 at the Cern SPS collider.** *Phys. Lett.* **126B** (1983) 398
- [5] J.R.Carter, Vortrag auf der LP-HEP '91 Konferenz, Genf,
Juli 1991
- [6] G.L.Fogli, E.Lisi, **Bounds on a fourth generation of quarks and leptons from electroweak radiative correction effects.** *Phys. Lett.* **B228** (1989) 389
- [7] A.Djouadi et al., **Extended gauge model in: e^+e^- collisions at 500 GeV: the physics potential,** Proceedings of the workshop - Munich, Annecy, Hamburg (1991), Part B
- [8] I.Montvay, **Mirror fermions in chiral gauge theories.** *Nucl. Phys. B* (Proc.Suppl.) **29** (1992) 159
- [9] K.G.Wilson, **Confinement of quarks.** *Phys. Rev. D* **10** (1974) 2445
- [10] M.Lüscher, P.Weisz, **Scaling laws and triviality bounds in the lattice ϕ^4 -theory: I. One-component model in the symmetric phase.** *Nucl. Phys.* **B290** (1987) 25; **II. One-component model in the phase with spontaneous symmetry breaking.** *Nucl. Phys.* **B295** (1988) 65; **III. n-component model.** *Nucl. Phys.* **B318** (1989) 705; **Is there a strong interaction in the standard lattice Higgs model?.** *Phys. Lett.* **B212** (1988) 472
- [11] C.Frick, K.Jansen, J.Jersak, I.Montvay, G.Münster P.Seuferling, **Numerical simulations of the O(4)-symmetric ϕ^4 -model in the symmetric phase.** *Nucl. Phys.* **B331** (1990) 515;
A.Hasenfratz, K.Jansen, C.B.Lang, T.Neuhaus, H.Yoneyama, **The triviality bound of the four-component ϕ^4 -model.** *Phys. Lett.* **B199** (1987) 531
- [12] J.Shigemitsu, **Higgs-Yukawa-chiral models** *Nucl. Phys. B* (Proc.Suppl.) **20** (1991) 515
- [13] A.Hasenfratz, P.Hasenfratz, **Continuum limit of an SU(2) gauge theory with a scalar doublet.** *Phys. Rev. D* **34** (1986) 3160;
A.Hasenfratz, T.Neuhaus, **Upper bound estimate for the Higgs mass from the lattice regularized Weinberg-Salam model.** *Nucl. Phys.* **B297** (1988) 205

- [14] J.Ellis, G.L.Fogli, **The implications of recent electroweak data for m_t and M_H .** *Phys. Lett.* **B232** (1989) 139
- [15] S.L.Adler, **Axial-vector vertex in spinor electrodynamics.** *Phys. Rev.* **177** (1969) 2426;
J.S.Bell, R.Jackiw, **A PCAC-puzzle: $\pi_0 \rightarrow \gamma\gamma$ in the sigma-model.** *Nuovo Cim.* **A60** (1969) 47
- [16] D.Gross, R.Jackiw, **Effect of anomalies on quasi-renormalizable theories.** *Phys. Rev.* **D6** (1972) 477;
H.Georgi, S.L.Glashow, **Gauge theories without anomalies.** *Phys. Rev.* **D6** (1972) 429
- [17] H.B.Nielsen, M.Ninomiya, **Absence of neutrinos on the lattice; I. Proof by homotopy theorie.** *Nucl. Phys.* **B185** (1981) 20; **Absence of neutrinos on the lattice; II. Intuitive topological proof.** *Nucl. Phys.* **B193** (1981) 173; **Errata.** *Nucl. Phys.* **B195** (1982) 541
- [18] L.H.Karsten, J.Smit, **Lattice fermions: species doubling, chiral invariance and the triangle anomalie.** *Nucl. Phys.* **B183** (1981) 103
- [19] J.Smit, **Fermions on the lattice.** *Acta Phys. Polon.* **B17** (1986) 531
- [20] P.V.D.Swift, **The electroweak theory on the lattice.** *Phys. Lett.* **B145** (1984) 256
- [21] M.F.L.Golterman, D.N.Petcher, J.Smit, **Fermion interactions in models with strong Wilson-Yukawa couplings.** *Nucl. Phys.* **B370** (1992) 51;
W.Bock, Dissertation, Aachen 1991
- [22] I.Montvay, **A chiral $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ gauge model on the lattice.** *Phys. Lett.* **B199** (1987) 89; **Non-perturbative approach to scalar-fermion theories.** *Nucl. Phys.* **B4** (Proc. Suppl.) (1988) 443
- [23] I.Montvay, **Three mirror pairs of fermion families.** *Phys. Lett.* **B205** (1988) 315; **The sigma-model with Wilson lattice fermions.** *Nucl. Phys.* **B307** (1988) 389
- [24] M.F.L.Golterman, D.N.Petcher, **The decoupling of right-handed neutrinos in chiral lattice gauge theories.** *Phys. Lett.* **B225** (1989) 159; **Decoupling of right-handed neutrinos in the lattice standard model.** *Nucl. Phys.* **B** (Proc.Suppl.) **17** (1990) 470
- [25] J.E.Hirsch, R.L.Sugar, D.J.Scalapino, R.Blanckenbecler, **Monte Carlo simulations of one-dimensional fermion systems.** *Phys. Rev.* **B26** (1982) 5033;
I.Morgenstern, **Quantum-Monte-Carlo simulations for fermionic systems.** *Z. Phys.* **B77** (1989) 267
- [26] L.Lin, J.P.Ma, I.Montvay, **A scalar-fermion model in the limit of infinitely heavy fermions.** *Z. Phys.* **C48** (1990) 355
- [27] L.Lin, I.Montvay, H.Wittig, **Phase structure of a $U(1)_L \otimes U(1)_R$ symmetric Yukawa model.** *Phys. Lett.* **B264** (1991) 407
- [28] K.Farakos, G.Koutsoumbas, L.Lin, J.P.Ma, I.Montvay, G.Münster, **$U(1)_L \otimes U(1)_R$ symmetric Yukawa model in the symmetric phase.** *Nucl. Phys.* **B350** (1991) 474

- [29] L.Lin, I.Montvay, H.Wittig, G.Münster, **A $U(1)_L \otimes U(1)_R$ symmetric Yukawa model in the phase with spontaneously broken symmetry.** *Nucl. Phys. B* **355** (1991) 511
- [30] L.Lin, I.Montvay, H.Wittig, G.Münster, **Scalar-fermion models with mirror pairs of fermion fields.** *Nucl. Phys. B* (Proc.Suppl.) **20** (1991) 601
- [31] L.Lin, H.Wittig, **An $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ symmetric Yukawa model in the symmetric phase.** *Z. Phys. C* **54** (1992) 331
- [32] C.Frick, L.Lin, I.Montvay, G.Münster, M.Plagge, T.Trappenberg, H.Wittig, **Numerical simulation of heavy fermions in an $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ symmetric Yukawa model.** *Nucl. Phys. B* **397** (1993) 431
- [33] L.Lin, G.Münster, M.Plagge, I.Montvay, H.Wittig, C.Frick, T.Trappenberg, **Mass spectrum and bounds on the couplings in Yukawa models with mirror-fermions.** *Nucl. Phys. B* (Proc.Suppl.) **30** (1993) 647
- [34] L.Lin, G.Münster, M.Plagge, I.Montvay, H.Wittig, **Bounds on the Renormalized Couplings in an $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ symmetric Yukawa model.** MS-TPI-93-01; wird veröffentlicht in *Phys. Lett. B*
- [35] I-H.Lee, R.E.Shrock, **Chiral symmetry-breaking phase transition in lattice gauge-Higgs theories with fermions.** *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 14; R.E.Shrock, **Lattice Higgs models.** *Nucl. Phys. B* (Proc. Suppl.) **4** (1988) 373; I-H.Lee, J.Shigemitsu, R.E.Shrock, **Lattice study of a Yukawa theory with a real scalar field.** *Nucl. Phys. B* **330** (1990) 225; A.Hasenfratz, W.Liu, T.Neuhaus, **Phase structure and critical points in a scalar-fermion model.** *Phys. Lett. B* **236** (1990) 339
- [36] M.A.Stephanov, M.M.Tsypin, **Phase diagram for the lattice scalar-fermion model.** *Phys. Lett. B* **236** (1990) 344; **The phase structure of the $U(1)$ Higgs-fermion lattice theory.** *Phys. Lett. B* **242** (1990) 432; **The phase diagram of the $O(4)$ Higgs-fermion lattice model in the mean field approximation.** *Phys. Lett. B* **261** (1991) 109
- [37] T.Ebihara, K-I.Kondo, **Phase diagram of strongly coupled lattice Yukawa theories.** CHIBA-EP-55
- [38] M.Abramowitz, I.A.Stegun, **Handbook of mathematical functions.** Dover Publications, Inc., New York
- [39] I.S. Duff, A.D. Erisman, J.K.Reid, **Direct methods for sparse matrices.** Oxford University Press 1986
- [40] A.D.Sokal, **Bosonic algorithms**, in Quantum Fields On The Computer, ed. by M.Creutz, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong; **How to beat critical slowing-down: 1990 update.** *Nucl. Phys. B* (Proc.Suppl.) **20** (1990) 55
- [41] N.Metropolis, A.W.Rosenbluth, M.N.Rosenbluth, A.H.Teller, E.Teller, **Equation of State Calculations by Fast Computing Machines.** *J.Chem.Phys.* **21** (1953) 1087; G.Bhanot, **The Metropolis algorithm.** *Rep.Prog.Phys.* **51** (1988) 429

- [42] A.D.Kennedy, **Higher order Hybrid Monte Carlo.** *Nucl. Phys. B* (Proc. Suppl.) **9** (1989) 457
- [43] A.D.Kennedy, B.Pendleton, **Acceptances and autocorrelations in Hybrid Monte Carlo.** *Nucl. Phys. B* (Proc. Suppl.) **20** (1990) 118
- [44] I.Montvay, G.Münster, **Quantum Fields on a Lattice.** Cambridge University Press 1993
- [45] I.Montvay, private Mitteilung
- [46] S.Duane, J.B.Kogut, **The theorie of hybrid stochastic algorithms.** *Nucl. Phys. B* **275** (1986) 398
- [47] U.Wolff, **Dynamics of hybrid overrelaxation in the gaussian model.** CERN-TH 6408/92
- [48] H.Wittig, Dissertation, Hamburg 1992
- [49] S.Gottlieb, W.Liu, D.Toussaint, R.L.Renken, R.L.Sugar **Hybrid-molecular-dynamics algorithm for the numerical simulation of quantum chromodynamics.** *Phys. Rev. D***35** (1987) 2531
- [50] S.C.Eisenstat, H.C.Elman, M.H.Schultz, **Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations.** *Siam J. Numer. Anal.* **20** (1983) 345;
P.Rossi, C.T.H.Davies, G.P.Lepage, **A comparison of a variety of matrix inversion algorithms for Wilson fermions on the lattice.** *Nucl. Phys. B***297** (1988) 287;
G.M.Hockney, **Comparison of inversion algorithms for Wilson fermions.** *Nucl. Phys. B* (Proc.Suppl.) **17** (1990) 301
- [51] Y.Oyanagi, **An incomplete LDU decomposition of lattice fermions and its application to conjugate residual method.** *Comp. Phys. Comm.* **42** (1986) 333
- [52] H.R.Schwarz, H.Rutishauser, E.Stiefel, **Matrizen Numerik.** B.G. Teubner, Stuttgart(1968)
- [53] G.H. Golub, C.F. v.Lean, **Matrix Computations.** John Hopkins University Press 1989.
- [54] J.Stoer, R.Burlisch, **Introduction To Numerical Analysis.** Springer-Verlag, New York Heidelberg Berlin, 1980
- [55] E.L.Stiefel, *Comment. Math. Helv.* **29** (1955) 157
- [56] W.H.Press, S.A.Teukolsky, **Biconjugate gradient method for sparse linear systems.** *Comp. in Phys.,* Vol.6, No.4, (1992) 400;
R.Fletcher, **Conjugate gradient methods for indefinite systems.** Lecture Notes in Mathematics, Vol.506, ed. A.Dold, B.Eckmann (Springer-Verlag, Berlin, 1976) 73
- [57] C.Lanczos, *J. Res. Nat. Bur. Standards* **45**(1950) 255
- [58] R.Gupta, A.Patel, C.F.Baillie, G.Guralnik, G.W.Kilcup, S.R.Sharpe, **QCD with dynamical Wilson fermions.** *Phys. Rev. D***40** (1989) 2072

- [59] **Einführung in das Betriebssystem UNICOS.** KFA-ZAM-BHB-0093 (5. Auflage)
- [60] Handbücher der Thinking machine corporation
- [61] R.G.Brickner, **QCD with dynamical fermions on the Connection Machine.** *Nucl. Phys. B* (Proc. Suppl.) **17** (1990) 255; **CMIS arithmetic and multiwire news for QCD on the Connection Machine.** *Nucl. Phys. B* (Proc. Suppl.) **20** (1991) 145;
W.C.Liu, **Fast QCD conjugate gradient solver on the Connection Machine.** *Nucl. Phys. B* (Proc. Suppl.) **20** (1991) 149
- [62] A.D.Kennedy, **Hybrid Monte Carlo algorithm on the Connection Machine** in Fermion Algorithms, ed. by H.J.Herrmann, F.Karsch
- [63] R.G.Brickner, private Mitteilung