

Dirk Talkenberger

Monte-Carlo-Simulationen
von Modellen der Elementarteilchenphysik
mit dynamischen Fermionen

1997

Theoretische Physik

Monte-Carlo-Simulationen
von Modellen der Elementarteilchenphysik
mit dynamischen Fermionen

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich Physik
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

vorgelegt von
Dirk Talkenberger
aus Duisburg
– 1997 –

Dekan:

Erster Gutachter:

Zweiter Gutachter:

Tag der mündlichen Prüfungen:

Tag der Promotion:

Prof. Dr. F.-K. Holtmeier

Prof. Dr. G. Münster

Priv.Doiz. Dr. K. Pinn

Inhaltsverzeichnis

I	Einleitung	1
1	Kurze Geschichte der Teilchenphysik	3
2	Der dritte Zweig der Teilchenphysik	6
2.1	Wilson und das Gitter	6
2.2	QFT auf dem Gitter	6
2.2.1	Parametrisierung des Pfadintegrals	7
2.2.2	Behandlung von Divergenzen	9
2.3	Gittersimulationen in der Praxis	9
2.4	Nicht-physikalische Entwicklungen	13
2.4.1	Neue Algorithmen	13
2.4.2	Neue Rechner	14
3	Überblick	16
II	Higgs-Yukawa-Theorie	21
4	Trivialität im Standardmodell	23
4.1	Das Standardmodell	24
4.2	Trivialität des Higgs-Sektors	27
4.3	Fermionen auf dem Gitter	29
4.4	Bisheriger Stand des Projekts	30
5	Das Higgs-Yukawa-Modell auf dem Gitter	32
5.1	Die Gitterwirkung	32
5.2	Szenario in der gebrochenen Phase	36
5.2.1	Die Teilchen-Propagatoren	37
5.2.2	Die renormierten Größen in der Theorie	38
5.2.3	Die renormierten Größen in der Praxis	42
5.2.4	Ein-Schleifen-Verbesserung des π -Propagators	47
5.3	Die β -Funktion	48
5.4	Kritische Parameter und Kontinuumslices	50

6	Simulationsverfahren: Hybrid-Monte-Carlo	53
7	Implementierung auf der Quadrics	60
7.1	Quadrics Systembeschreibung	60
7.1.1	Hardware	60
7.1.2	Software	65
7.2	Realisation des Programms	69
8	Algorithmische Ergebnisse	74
8.1	Programm-Performance	74
8.2	Einstellung der Parameter im Hybrid-Monte-Carlo	76
8.2.1	Matrixinversion	76
8.2.2	Verbesserung der Inversion	78
8.2.3	Integrationsschrittweite	83
8.2.4	Reversibilität im Hybrid-Monte-Carlo	86
8.3	Autokorrelationszeiten und Fehlerbestimmung	88
8.3.1	Definition	89
8.3.2	Numerische Bestimmung von τ_{int} und $\sigma(x)$	91
8.3.3	Fehlerbestimmung	92
8.3.4	Ergebnisse für die Autokorrelationszeiten	93
9	Physikalische Ergebnisse	96
9.1	Abschätzung des kritischen Hoppingparameters	97
9.2	Finite-Size-Analyse	102
9.3	Skalierungs-Analyse	112
9.4	Massen und Kopplungen	116
9.4.1	Fermionen- und Fermion-Doppler-Zustände	116
9.4.2	Yukawa-Kopplungen	117
9.4.3	Golterman-Petcher-Identitäten	120
10	Zusammenfassung	121
III	$N=1$ SU(2) Super-Yang-Mills-Theorie	125
11	Jenseits des Standardmodells: Supersymmetrie	127
11.1	Geschichte und Definition der Supersymmetrie	127
11.2	Motivation und experimenteller Status	130
11.3	Supersymmetrie auf dem Gitter	136
12	Einführung in die Super-Yang-Mills-Theorie	139
12.1	Das Kontinuumsmodell	139
12.1.1	Konstruktion supersymmetrischer Modelle	139
12.1.2	Das $N = 1$ SU(2) Super-Yang-Mills-Modell	144

12.2 Das Gittermodell	146
12.2.1 Konstruktion der Gitterwirkung	146
12.2.2 Eigenschaften und Meßgrößen	152
13 Simulationsverfahren: Lokale Bosonische Wirkung	158
13.1 Grundlagen	158
13.2 Zwei-Schritt-Approximation	162
13.3 Update der Felder	164
13.4 Noisy-Schätzer	166
13.5 Nicht-Hermitesche Variante	166
14 Implementierung auf der Cray T90	168
14.1 LBA auf der T90	168
14.2 Formulierung der Updates mit Hilfsfeldern	169
14.3 Meßgrößen	170
15 Algorithmische Ergebnisse	173
15.1 Vorbemerkungen	173
15.2 Polynomapproximation und Spektrum von \tilde{Q}^2	174
15.3 Nicht-hermitescher Fall: Spektrum von Q	176
15.4 Autokorrelationszeiten	180
15.5 Programmpformance	181
15.6 Matrixinversion	184
16 Physikalische Ergebnisse	186
16.1 Blocking-Optimierung	187
16.2 Gluonische Meßgrößen und Fermion-Kondensate	188
16.3 Teilchen und Massen	189
16.4 Extrapolation zum kritischen Hoppingparameter	192
16.5 Massensplitting	195
17 Zusammenfassung und Ausblick	197
 IV Anhang	 201
A Higgs-Yukawa-Modell	203
A.1 Tabellen zum Abschnitt 9.1	203
A.2 Plots zum Abschnitt 9.2	206
B Super-Yang-Mills-Modell	210
B.1 Grassmann-Zahlen und wie man mit ihnen rechnet	210
B.2 Tabellen zum Abschnitt 16	212

V	Bibliographie	213
	Literaturverzeichnis	215

Abbildungsverzeichnis

2.1	Das Spektrum des J/Ψ Systems auf dem Gitter	12
4.1	Das Standardmodell	24
5.1	Phasendiagramm des $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -Modells in der (κ, G_ψ) Ebene . . .	51
7.1	Quadrics: Schematischer Aufbau des Basisboards	61
7.2	Quadrics: Prozessor-Kommunikations-Schema	62
7.3	Quadrics: Numerierung der acht FPU-Knoten auf dem Basisboard	63
7.4	Quadrics: Schematischer Aufbau der QH2	64
7.5	Quadrics: Zugriff auf Daten der Nachbarknoten	66
7.6	Quadrics: Kommunikationsbandbreite I	67
7.7	Quadrics: Kommunikationsbandbreite II	68
8.1	CG Pseudocode	77
8.2	Konvergenz des Conjugate-Gradient	78
8.3	Abbruchkriterium für den Conjugate-Gradient	79
8.4	Chronological Inversion Method: Laufzeitgewinn	81
8.5	Chronological Inversion Method: CG-Iterationen	82
8.6	Justierung der Integrationsschrittweite: A und $\langle e^{-\delta H} \rangle$	83
8.7	Justierung der Integrationsschrittweite: CG Iterationen	84
8.8	Justierung der Integrationsschrittweite: Optimierung	85
8.9	Reversibilität des Hybrid-Monte-Carlo: Normdifferenz des Skalarfeldes . . .	86
8.10	Reversibilität des Hybrid-Monte-Carlo: Energiedifferenz	87
9.1	Simulationsmonitor	97
9.2	Justierung von κ auf der Q16	98
9.3	σ Masse als Funktion von κ	100
9.4	Kritisches κ auf $16^3 \cdot 32$ bei $G_\psi = 0.3$	101
9.5	Renormierter Vakuumerwartungswert auf $8^3 \cdot 16$ und $16^3 \cdot 32$	101
9.6	Renormierte ψ Fermionmasse auf $8^3 \cdot 16$ und $16^3 \cdot 32$	102
9.7	Renormierte skalare Selbstkopplung als Funktion von κ	103
9.8	$1/L^2$ Extrapolation I: v_0 , $\mu_{R\psi}$ und m_σ	104
9.9	π -Propagator mit Ein-Schleifen-Korrektur	105
9.10	Ein-Schleifen-Korrektur zum π -Propagator	108
9.11	$1/L^2$ Extrapolation II: v_0 , $\mu_{R\psi}$ und m_σ	111

9.12	Ein-Schleifen- β -Funktion und numerische Daten	115
9.13	Fermionen- und Fermion-Doppler-Massen auf dem $12^3 \cdot 24$ Gitter	118
11.1	Laufende Eichkopplung im SM und im MSSM	134
11.2	Weinbergwinkel im SM und im MSSM	135
11.3	α_s im SM und im MSSM	136
12.1	Eichfelder auf dem Gitter: Skizze	147
12.2	Teper-Blocking der Eichfelder	154
12.3	Graphische Darstellung des a-Eta-Propagators	155
12.4	Graphische Darstellung des Gluino-Glueball-Propagators	156
14.1	BiCGstab Pseudocode	171
15.1	Quadratische Abweichung der Polynomapproximation	175
15.2	Untere Grenze des Eigenwertspektrums von $Q^\dagger Q$	176
15.3	Obere Grenze des Eigenwertspektrums von $Q^\dagger Q$	177
15.4	Beispielspektren von Q und \sqrt{Q}	178
15.5	Grenzen des Eigenwertspektrums von Q	179
15.6	Realteil des kleinsten Eigenwerts von Q und $Q^\dagger Q$	180
15.7	Zeitreihendarstellung der Plaquette	182
15.8	Histogrammdarstellung der Plaquette	183
16.1	Optimierung des Blocking-Level	187
16.2	Datenvergleich quenched - unquenched I	188
16.3	Vergleich der Fermion-Kondensate	189
16.4	Massen des N=1 Multipletts	191
16.5	Phasendiagramm der SU(2)-Eichtheorie mit Gluinos	192
16.6	Abschätzung des kritischen Hoppingparameters	193
16.7	Verbundener und Unverbundener η^- Anteil	194
16.8	Eta-Ratio	195
A.1	$1/L^2$ Extrapolation: g_R und $G_{R\psi}$	206
A.2	$1/L^2$ Extrapolation: v_R und Z_π	207
A.3	$1/L^2$ Extrapolation: g_R und $G_{R\psi}$	208
A.4	$1/L^2$ Extrapolation: v_R und Z_π	209

Tabellenverzeichnis

2.1	Formfaktoren für $D \rightarrow K$ und $D \rightarrow K^*$ Zerfälle	11
2.2	Massen von Baryonen mit einem schweren Quark	11
5.1	Standardabweichung der σ -Zeitscheiben	44
8.1	Hardware-Performance	75
8.2	CG-Konvergenzschranke mit 1% Fehler	78
8.3	Chronological Inversion Method	80
8.4	Reversibilität des Hybrid-Monte-Carlo: Liapunov-Exponenten	88
8.5	Student- versus Normal-Verteilung	93
8.6	Autokorrelationszeiten: Methodenvergleich	94
8.7	Autokorrelationszeiten: Daten	94
9.1	Finite-Size-Daten für $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.26)$	106
9.2	Finite-Size-Daten für $(G_\psi, \kappa) = (0.45, 0.203)$	107
9.3	Finite-Size-Daten für $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.27)$	109
9.4	Finite-Size-Daten für $(G_\psi, \kappa) = (0.45, 0.21)$	110
9.5	Finite-Size-Analyse: Anzahl der Messungen und Blockgrößen	111
9.6	Datenvergleich: 1-Schleifen β -Funktion und Simulation II	114
9.7	Fermion-Doppler-Massen auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter	117
9.8	Fermion-Doppler-Massen auf dem $12^3 \cdot 24$ Gitter	117
9.9	Yukawa-Kopplung: Vergleich verschiedener Definitionen und Meßmethoden	118
9.10	Spiegelfermionmassen	120
9.11	ψ -Fermion-Renormierungskonstante	120
11.1	Teilchenspektrum des minimalen supersymmetrischen Standardmodells	133
15.1	175
15.2	Autokorrelationszeit als Funktion von K	181
15.3	Programmtest auf $8^3 \cdot 16$ Gitter	184
15.4	Programmtest auf $4^3 \cdot 8$ und $6^3 \cdot 12$ Gitter	184
15.5	Testläufe mit verschiedenen Matrix-Invertern auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter	185
15.6	Konvergenz des CGNE/eo als Funktion von K	185
16.1	Datenstatistik beim SYM-Modell	186
16.2	Massen im SU(2) N=1 Super-Yang-Mills-Modell	190

16.3	Eta-Ratio: Δm -Daten	196
A.1	κ Tuning auf $8^3 \cdot 16$ bei $G_\psi=0.3$	203
A.2	κ Tuning auf $8^3 \cdot 16$ bei $G_\psi=0.45$	204
A.3	κ Tuning auf $8^3 \cdot 16$ bei $G_\psi=0.6$	204
A.4	κ Tuning auf $16^3 \cdot 32$ bei $G_\psi=0.3$	205
A.5	κ Tuning auf $16^3 \cdot 32$ bei $G_\psi=0.45$	205
B.1	Vergleich quenched-unquenched: numerische Werte	212
B.2	Fermion-Kondensat: numerische Werte	212

Teil I

Einleitung: Computergestützte Experimente in der Hochenergiephysik

Kapitel 1

Kurze Geschichte der Teilchenphysik

Die elementaren Bestandteile unserer Welt haben die Menschen seit jeher fasziniert. Bereits 400 v. Chr. stellten die griechischen Philosophen DEMOKRIT und LEUKIPP Überlegungen zu der Frage an, ob man einen Gegenstand beliebig oft teilen oder zerschneiden könne. Sie kamen zu dem Schluß, daß dies nicht der Fall sei und alle Stoffe aus einzelnen, voneinander abgegrenzten Teilchen aufgebaut seien, den Atomen (abgeleitet von dem griechischen Wort *átomos* = unzerschneidbar). Dies hätte der frühe Beginn der Elementarteilchenphysik sein können, wäre da nicht ca. 50 Jahre später ARISTOTELES gewesen, dessen Lehre genau das Gegenteil behauptete, daß der Teilungsprozeß, zumindest im Prinzip, unbegrenzt fortgesetzt werden könnte. Beide Aussagen konnten damals nicht bewiesen werden, aber die Aristotelische Lehre war für die nächsten ca. 2000 Jahre die gültige Version.

Erst zu Beginn des 17. Jahrhunderts wurde von Forschern wie PETRUS GASSENDI und GALILEI GALILEO die Aristotelische Lehre ernsthaft in Frage gestellt, und damit kam auch die Hypothese vom Atom wieder in die Diskussion. In der folgenden Zeit bildete sich der Begriff des chemischen Elements als elementarer Bestandteil der Materie heraus. ROBERT BOYLE unternahm 1661 in seinem Buch "The Sceptical Chemist" einen ersten Versuch, und schließlich schaffte JOHN DALTON mit seinen Arbeiten von 1808 und 1827 zu seinem "New System of Chemical Philosophy" den Durchbruch der atomistischen Theorie. DALTON sah darin die Atome als unteilbare Einheiten der chemischen Elemente an, die bei chemischen und physikalischen Prozessen unverändert blieben. Im Gegensatz zu den Hypothesen der griechischen Philosophen konnten DALTONS Voraussagen mit Experimenten sowohl qualitativ als auch quantitativ bestätigt werden.

Wie wir heute wissen, sind auch Atome aus physikalischer Sicht nicht elementar, sondern besitzen eine Substruktur. Die Entdeckung dieser inneren Teilsysteme kennzeichnet den Beginn der Elementarteilchenphysik, der mit der Wende vom 19. zum 20. Jahrhundert stattfand. 1897 veröffentlichte JOSEPH J. THOMSON eine Arbeit, in der er zeigte, daß die Elektrizität von einem Teilchen getragen wird, dessen Masse ein Zweitausendstel der Masse des Wasserstoffatoms beträgt. ROBERT MILIKAN konnte schließlich in seinem berühmten Öltröpfchenversuch nachweisen, daß es eine kleinste Einheit der elektrischen Ladung gibt. Damit war das Elektron gefunden, ein Teilchen, das auch nach heutigen Erkenntnissen als elementar anzusehen ist.

Es folgten die Streuexperimente von ERNEST RUTHERFORD (1911), die zur Entdeckung des Atomkerns und damit zur Klärung des Aufbaus der Atome führten. Zeitgleich dazu wurde in den Arbeiten von MAX PLANCK gezeigt, daß eine theoretische Deutung des Strahlungsgesetzes unter Aufrechterhaltung der beiden Hauptsätze der Thermodynamik zu einer Quantentheorie der elektromagnetischen Strahlung führt. Mit den Arbeiten von Planck begann der theoretische Teil der Elementarteilchenphysik.

In der ersten Hälfte unseres Jahrhunderts kam es dann zu einem regelrechten Boom in diesem Zweig der Physik. Mit dem Nachweis des Neutrons 1932 durch JAMES CHADWICK war der Startschuß zur Entdeckung eines ganzen Teilchenzoos gegeben. Mit verbesserten Nachweismethoden wie Nebelkammern und Kernemulsionen konnte man in der Höhenstrahlung eine Vielzahl von neuen Teilchen nachweisen. Neben dieser eher *passiven* Beobachtung wurde in den dreißiger Jahren mit der Konstruktion und dem Bau von Teilchenbeschleunigern, sogenannten Zyklotronen, begonnen. Damit konnte dann ab Anfang der vierziger Jahre *aktiv* nach neuen Teilchen gesucht werden. Am 9. März 1948 wurde in Berkeley offiziell die künstliche Erzeugung von Pionen bekannt gegeben, einem Teilchen, das bereits 13 Jahre zuvor von HIDEKI YUKAWA aus theoretischen Überlegungen heraus vorhergesagt wurde und 1947 in der Höhenstrahlung nachgewiesen werden konnte.

Mit der Quantenmechanik lieferten in der zweiten Hälfte der zwanziger Jahre die Theoretiker ERWIN SCHRÖDINGER und WERNER HEISENBERG gemeinsam mit MAX BORN und PASCUAL JORDAN die Grundlage zur theoretischen Beschreibung der Beobachtungen und damit gleichzeitig auch die Grundlage einer neuen Physik. Die Verbindung der Relativitätstheorie mit der Quantenmechanik durch PAUL A.M. DIRAC war ein weiterer Meilenstein auf dem Weg zur modernen Beschreibung der Elementarteilchen und führte zur Entwicklung der Quantenfeldtheorie

1955 brachten unter anderem MURRAY GELL-MANN und KAZUHIKO NISHIJIMA Ordnung in das *Teilchenchaos* der Experimentalphysiker, indem sie neue Quantenzahlen und zugehörige Erhaltungssätze postulierten. Ab Mitte der fünfziger Jahre wurde auch mit dem Bau der großen Teilchenbeschleuniger begonnen. Brookhaven und Berkeley in den USA und Genf in Europa waren die ersten Standorte.

Die in diesen ersten Großbeschleunigern beobachteten Teilchenreaktionen, die einer bestimmten inneren Ordnung zu folgen schienen, führten 1964 MURRAY GELL-MANN und unabhängig davon GEORGE ZWEIG zur Quark-Hypothese, dem "eightfold way". Demnach sollten die meisten der beobachteten Teilchen nicht elementar, sondern aus noch kleineren Bausteinen, Quarks genannt, aufgebaut sein. Mit dieser Theorie konnten die Beobachtungen erklärt werden und der ganze Teilchenzoo in ein einfaches Schema eingeordnet werden. Daß Quarks nicht nur eine mathematische Hilfskonstruktion sind, konnte in einer Versuchsreihe am Stanford Linear Accelerator Centre (SLAC) in der Zeit von 1968 bis 1972 gezeigt werden. Hier wurden, ähnlich wie bei RUTHERFORD sechzig Jahre zuvor an Atomen, Streuexperimente an Protonen und Neutronen durchgeführt, die auf eine innere Struktur dieser Kernteilchen hinwiesen. Dabei war es unter anderem RICHARD FEYNMAN, der den Zusammenhang zwischen Rechnungen zur Streuung an Nukleonen von J.D. BJORKEN und den experimentellen Daten herstellte.

Die Einführung einer neuen Quantenzahl, Farbe genannt, brachte das Quark-Modell

auch in quantitative Übereinstimmung mit den Experimenten. Mit der Entdeckung des J/Ψ und der daraus resultierenden Erkenntnis der Existenz eines vierten Quarks konnte eine theoretische Vorhersage aus dem Jahr 1964 von SHELDON GLASHOW und J.D. BJORKEN gezeigt werden, die ein viertes Quark postuliert hatten, nachdem Neutrino-Experimente einen Leptonen-Sektor mit vier Teilchen ergeben hatten. Die Vorhersage wurde unterstützt durch den 1970 von SHELDON GLASHOW, JEAN ILIOPOULOS und LUCIANO MAIANI vorgeschlagenen GIM-Mechanismus zur Klärung der Zerfälle im K-Meson-System. Damit waren die letzten Zweifel am Quark-Modell ausgeräumt und die Quanten-Chromo-Dynamik (QCD) als Theorie der starken Wechselwirkung etabliert.

Parallel zu diesen Entwicklungen wurden die theoretischen Konzepte der Quantenfeldtheorie erweitert und ausgebaut. 1967 gelang es STEVEN WEINBERG und unabhängig davon ABDUS SALAM aufbauend auf eine Arbeit von SHELDON GLASHOW, die schwache Wechselwirkung, die unter anderem für den β -Zerfall zuständig ist, und die elektromagnetische Wechselwirkung zu vereinheitlichen. Zusammen mit der QCD bildet die Glashow-Salam-Weinberg (GSW) Theorie heute das Standardmodell der Elementarteilchenphysik. Das GSW-Modell ist in zahlreichen Messungen mit hoher Präzision bestätigt worden. Für die QCD als Modell der starken Wechselwirkung ist die quantitative Übereinstimmung bisher nicht mit so hoher Genauigkeit gezeigt worden. Die Daten geben aber auch keine Hinweise auf eine andere Physik als die durch die QCD beschriebene.

Kapitel 2

Der dritte Zweig der Teilchenphysik

Be wise, discretize!

Marc Kac

2.1 Wilson und das Gitter

Bis zum Jahre 1974 teilte sich die Elementarteilchenphysik in zwei Gebiete. Zum einen waren da die Experimentalphysiker mit ihren Beschleunigern, Speicherringen und Detektoren, und zum anderen die Theoretiker, die mit *Papier und Bleistift* versuchten, die Beobachtungen in physikalische Theorien umzusetzen. Darüber hinaus wurden aus rein theoretischen Überlegungen neue Modelle konstruiert und Vorhersagen über Teilchen und Reaktionen gemacht. Mit der Arbeit von KENNETH WILSON [Wil74] eröffnete sich ein dritter Weg. Die Formulierung einer gitterregularisierten euklidischen Quantenfeldtheorie (QFT) stellte den Zusammenhang zwischen dem euklidischen Pfadintegralformalismus für Quantenfeldtheorien und der statistischen Physik her und machte damit den Gebrauch einer Vielzahl von Methoden aus diesem Gebiet für die Teilchenphysik möglich. Dazu gehörten etablierte Techniken wie Hoch- und Tieftemperaturreihenentwicklungen, und schließlich war es ein naheliegender Schritt, die komplizierten Gittermodelle der Teilchenphysik mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen auf dem Computer zu untersuchen [Bin79].

2.2 QFT auf dem Gitter

Die Idee der Gitterregularisierung stellt sich zunächst ganz einfach dar, aber die Möglichkeiten, die sich daraus ergeben, haben sich als sehr weitreichend herausgestellt. Ich will hier auf zwei Aspekte eingehen.

2.2.1 Parametrisierung des Pfadintegrals

In der Pfadintegralformulierung der euklidischen QFT für ein Feld ϕ ist die Zustandssumme \mathcal{Z} gegeben durch

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\phi \, e^{-S[\phi]}. \quad (2.1)$$

Das Integral erstreckt sich dabei über alle möglichen Feldkonfigurationen von ϕ , und die Wirkung $S[\phi]$ parametrisiert das Modell, das wir zugrundelegen. Dies kann eine reine Eichtheorie sein, eine skalare Theorie oder auch eine Theorie mit skalaren oder fermionischen Feldern gekoppelt an ein Eichfeld usw. Das Feld ϕ steht dann nicht nur für ein Feld, sondern für ein Multiplett von Feldern. Den Erwartungswert einer Größe A bestimmt man nach

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\phi \, A \, e^{-S[\phi]}. \quad (2.2)$$

Zu lösen sind hier unendlich dimensionale Integrale, die durch die obige Definition abstrakt definiert sind. Um sie auszuwerten, muß man eine geeignete Parametrisierung finden. Exakt ist dies bisher nur für das Gaußsche Modell gelungen. Für alle anderen Modelle muß man auf Näherungen zurückgreifen und über diese das Pfadintegral definieren. Eine Möglichkeit besteht darin, das Modell nicht im Kontinuum, sondern auf einem Raum-Zeit-Gitter zu definieren. Die Felder ϕ hängen dann nicht mehr von einem kontinuierlichen Ortsvektor \mathbf{x} ab, sondern von einem Gittervektor \mathbf{n} . Der Wertebereich der Felder bleibt unberührt davon. Ein solches Gitter bildet nun eine abzählbar unendliche Menge von Punkten und das Pfadintegral wird zu einem unendlichen Produkt von einfachen Integralen

$$\mathcal{Z}_{\mathcal{G}} = \int \prod_{\mathbf{n}} \mathcal{D}\phi(\mathbf{n}) \, e^{-S_{\mathcal{G}}[\phi(\mathbf{n})]}. \quad (2.3)$$

Hiermit hat man ein Verfahren definiert, mit dem das Integral gelöst werden kann.

Zur Simulation auf dem Computer ist ein unendlich ausgedehntes Gitter nicht brauchbar. Geht man jedoch zu einem endlichen Gitter der linearen Ausdehnung L über, so wird das Produkt in Gl. 2.3 zu einem endlichen Produkt, und man kann das Gitter bei nicht zu großem L jetzt auch mit Monte-Carlo-Simulationen auf dem Rechner untersuchen. Dieses Verfahren ist in den letzten 20 Jahren intensiv untersucht und eingesetzt worden. Dabei wurden die möglichen Fehler, wie der Einfluß des endlichen Gitterabstands oder des endlichen Volumens, herausgearbeitet, und es wurde erfolgreich versucht, diese Fehlerquellen zu kontrollieren und Verfahren zu ihrer Minimierung anzugeben. Einige Resultate dieser Arbeit werden weiter unten diskutiert.

Eine besondere Bedeutung kommt der Gitterregularisierung bei der Analyse nicht-perturbativer Probleme zu. Die Zahl und Effizienz der analytischen Methoden ist hier sehr eingeschränkt. Mit Monte-Carlo-Simulationen lassen sich solche Phänomene jedoch

aus ersten Prinzipien untersuchen. Dabei werden mittels eines Algorithmus, der gewisse Anforderungen erfüllen muß, Konfigurationen ϕ_i , $i = 1, \dots, N$ der Felder ϕ erzeugt, die gemäß e^{-S_ϕ} verteilt sind. Eine Approximation für den Erwartungswert einer Größe A erhält man dann aus

$$\text{EW}(A) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(\phi_i), \quad (2.4)$$

wobei $A(\phi_i)$ der auf der Konfiguration ϕ_i ausgewertete Meßwert für die Größe A ist.

Wie oben bereits erwähnt, gibt es drei Arten von Feldern, die in den Modellen auftreten können: Fermionfelder, Skalarfelder und Eichfelder.

Die Erstgenannten sind Grassmann-wertige Felder und lassen sich im Rechner nicht als einfache Zahlen darstellen, sondern nur als Matrizen. Für numerische Zwecke sind sie in dieser Form nicht brauchbar. Hier kommt die Tatsache zur Hilfe, daß in allen physikalisch relevanten Modellen die Fermionfelder ausintegriert werden können. Dabei erhält man die sogenannte Fermiondeterminante, die ein Funktional in den übrigen Feldern ist und eines der Kernprobleme in der Simulation darstellt.

Die skalaren Felder sind direkt mit den Methoden aus der statistischen Physik behandelbar. Teilweise werden hier identische Modelle in den beiden Gebieten der Physik unter jeweils nur anderen Fragestellungen betrachtet.

Die Eichfelder bilden eine neue Klasse von Objekten. Sie leben nicht auf den Gitterpunkten, sondern auf den Links zwischen diesen. Mit Links sind dabei die Kanten zwischen Gitterpunkten gemeint. Diese Definition auf dem Gitter ergibt sich aus dem anschaulichen Bild, daß die Eichfelder den kovarianten Transport zwischen den Gitterpunkten bewirken. Aus dem pfadgeordneten Integral über das Eichfeld im Kontinuum wird ein Eichtransporter zwischen zwei Gitterpunkten. Dabei ist das Eichfeld auf dem Gitter eine Abbildung in die Lie-Gruppe und nicht wie im Kontinuum eine Abbildung in die Lie-Algebra. Die Ursache liegt im endlichen Gitterabstand a , der eine endliche Transformation beim Transport erfordert, und diese wird durch ein Lie-Gruppenelement dargestellt. Grundsätzlich unterscheidet man bei den Simulationen mit Eichfeldern zwei Verfahren: quenched und unquenched. Bei ersterem wird die Fermiondeterminante zu eins gesetzt und beim Updating der Felder nicht berücksichtigt. Der Fehler, den man dabei macht, ist die Vernachlässigung von geschlossenen Fermionschleifen, was z.B. anhand der OZI Regeln motiviert werden kann. Diese von OKUBO, ZWEIG und IZUKA aufgestellten Regeln besagen, daß hadronische Zerfälle, die durch unverbundene Quark-Flow-Diagramme beschrieben werden, unterdrückt sind.

Auf die Methoden zur Simulation der drei Feldarten werde ich weiter unten noch eingehen.

2.2.2 Behandlung von Divergenzen

Ein weiteres Problem, bei dem die Einführung eines Gitters hilft, hängt mit dem Auftreten von Divergenzen in Integralen vom Typ

$$I_0 = \int_0^\infty dq f(q) \quad (2.5)$$

zusammen, wobei q eine impulsartige Variable sein soll. Diese Integrale können sowohl am oberen Ende, als auch am unteren Ende des Integrationsbereichs divergieren. Man sagt dann das Integral ist ultraviolett oder infrarot divergent. Diese Integrale treten bei der störungstheoretischen Auswertung des Pfadintegrals Gl. 2.1 auf.

Das Gitter liefert hier einen natürlichen Regularisator. Es ist gekennzeichnet durch einen kleinsten Abstand a und einen größten Abstand aL . a entspricht dabei dem Abstand zwischen zwei Gitterpunkten, und aL gibt die lineare Ausdehnung des Gitters. Betrachten wir zunächst wieder ein unendlich großes Gitter $\mathfrak{G}(a, \infty)$. Mit a ist durch π/a auch der größte mögliche Impuls gegeben, der auf das Gitter paßt. Das Integral wird also zu

$$I_1 = \int_0^{\pi/a} dq f(q). \quad (2.6)$$

Eine ultraviolette Divergenz wäre damit behoben, da das Integral am oberen Rand jetzt abgeschnitten ist. Beschränkt man sich zusätzlich auf ein endliches Gitter $\mathfrak{G}(a, aL)$, so wird durch diese zweite Längenskala das Integral auch am unteren Ende abgeschnitten. Mit $\pi/(aL)$ ist ein kleinster erlaubter Impuls gegeben, der gleichzeitig eine *Impulsquantelung* bewirkt, die aus dem Integral eine Gittersumme macht

$$I_{\mathfrak{G}} = \frac{\pi}{aL} \sum_q f(q), q = n \pi/(aL), n = 1, \dots, L. \quad (2.7)$$

Diese läßt sich numerisch auswerten. Wichtig sind diese Rechnungen, um zum Beispiel Ergebnisse auf dem Gitter mit störungstheoretischen Resultaten aus dem Kontinuum zu vergleichen.

2.3 Gittersimulationen in der Praxis

Die ersten numerischen Simulationen von MICHAEL CREUTZ [Cre80b] in der reinen SU(2)-Eichtheorie sahen sehr erfolgversprechend aus und gaben Anlaß zur Hoffnung, daß nicht-perturbative Probleme, wie das Confinement in der QCD, nun quantitativ untersucht werden können. In den folgenden 17 Jahren hat sich dieser Zweig der Elementarteilchenphysik zu einem dritten Weg neben dem Experiment und der Theorie entwickelt.

Waren die Erfolge zunächst eher qualitativer Art, so sind heute auch quantitative Ergebnisse verfügbar, und es gibt Vorhersagen für die Massen von Teilchenzuständen, nach denen die Experimentatoren ihre Experimente planen und auswerten können. Aus

der Vielzahl der Arbeiten möchte ich hier einige Beispiele aus dem Bereich des QCD-Spektrums zeigen. Für einen umfassenden Überblick empfehlen sich die Proceedings der seit 1987 jährlich stattfindenden Lattice Konferenz [Lat96].

Die QCD ist eines der bevorzugten Gebiete für Monte-Carlo-Simulationen in der Elementarteilchenphysik. Die Gründe hierfür sind zum einen, daß ein wesentliches Merkmal dieser Theorie, das Confinement, ein nicht-perturbatives Phänomen ist und bisher theoretisch nicht verstanden ist. Zum anderen kommen freie Quarks in der Natur nicht vor, was die experimentellen Beobachtungen auf indirekte Methoden beschränkt. Das Gitter liefert hier eine zusätzliche Möglichkeit, die QCD aus ersten Prinzipien zu testen.

Die vorhandenen Hardware-Ressourcen und die bekannten Algorithmen beschränken die Anwendung jedoch teilweise. Das Studium der QCD teilt sich zur Zeit in drei Bereiche

1. leichte Hadronen, bestehend aus den Quarks u , d und s
2. "heavy-light" Systeme, z.B. $\Sigma_c = (uuc)$ oder $\Lambda_b = (udc)$
3. schwere Hadronen, bestehend aus den schweren Quarks c und b

Bei den leichten Hadronen besteht das Problem, nicht bei den physikalischen Quark-Massen simulieren zu können. Typische Werte für die Pionmasse aus Simulationen liegen bei 450-500 MeV, der experimentelle Wert bei 140 MeV. Um dennoch quantitative Aussagen über die reale Welt machen zu können, führt man Simulationen bei verschiedenen Werten der Pionmasse durch und extrapoliert dann zum experimentellen Wert. Die Extrapolation wird mit Hilfe von chiraler Störungstheorie, Potentialmodellen oder anderen theoretischen Ansätzen durchgeführt.

Um überhaupt eine Masse in physikalischen Einheiten zu bekommen, muß man eine Skala setzen, da die Gitterresultate a priori in Einheiten der Gitterkonstante a gemessen werden und diese eine beliebige Skala darstellt. Eine häufig verwendete Methode ist die Fixierung der ρ -Masse, $m_\rho = 770$ MeV. Auf dem Gitter bestimmt man z.B. $m_\rho a = 0.66$ und erhält damit durch Gleichsetzen für a den Wert 0.857 GeV^{-1} . Wir benutzen hier natürliche Einheiten $\hbar = c = 1$. Mit der Beziehung $\hbar c = 0.1973 \text{ GeV fm}$ erhält man für die Gitterkonstante einen Wert von 0.23 fm .

Eine andere Methode besteht darin, sich nur Massenverhältnisse anzusehen. Im Edinburgh-Plot wird z.B. m_N/m_ρ gegen m_π/m_ρ aufgetragen, wobei m_N die als entartet angenommene Nukleonmasse ist. Aus Extrapolationen dieser Plots bekommt man die Massen der leichten Hadronen mit etwa 5-10% Abweichung vom Experiment. Dazu ist zu bemerken, daß die Simulationen mit den kleinsten statistischen Fehlern quenched Rechnungen sind (s.u.), und man erwartet, daß diese Diskrepanz verschwindet, wenn auch die Rechnungen mit dynamischen Quarks in ausreichender Statistik vorliegen. Für einen Überblick und Plots sei auf den Artikel von Steven Gottlieb, "QCD Spectrum – 1996" in [Lat96, S.155] verwiesen.

Bei den heavy-light Systemen interessiert man sich neben dem Spektrum vor allem für Matricelemente und Formfaktoren von semileptonischen Zerfällen. Die Resultate sind hier in guter Übereinstimmung mit den Experimenten, wie Tabelle 2.1 zeigt.

Ref.	$f_+(0)$	$V(0)$	$A_1(0)$
EXP	0.77 ± 0.04	1.16 ± 0.16	0.61 ± 0.05
APE	0.78 ± 0.08	1.08 ± 0.22	0.67 ± 0.11
LANL	0.73 ± 0.05	1.27 ± 0.08	0.66 ± 0.03

Tabelle 2.1: Formfaktoren für $D \rightarrow K$ und $D \rightarrow K^*$ Zerfälle. Die Daten sind dem Artikel “Weak Interactions from Lattice QCD” von GUIDO MARTINELLI in [Lat94, S.127] entnommen, die experimentellen Ergebnisse stammen von der CLEO-Kollaboration.

Tabelle 2.2 zeigt Ergebnisse für die Massen einiger heavy-light Baryonsysteme im Vergleich mit dem Experiment.

Baryon	Quark Content	Experiment	Lattice
Λ_b	udb	5641 $^{+50}_{-50}$	5728 $^{+162}_{-162}$
Λ_c	udc	2285.1 $^{+0.6}_{-0.6}$	2334 $^{+48}_{-57}$
Σ_c	uuc	2453.1 $^{+0.6}_{-0.6}$	2498 $^{+82}_{-83}$
Ξ_c	usc	2465.1 $^{+1.6}_{-1.6}$	2463 $^{+40}_{-51}$

Tabelle 2.2: Vergleich der Massen von Baryonen mit einem schweren Quark aus Gittersimulationen und aus Experimenten. Die experimentellen Daten sind dem Particle Data Book ([AB⁺94]) entnommen, die Daten für die charmed-Baryonen stammen von der UKQCD ([Lat94, S.367]) und die Werte für Λ_b sind aus einer Arbeit von C. Alexandrou et al. ([Lat94, S.297])

Im Bereich der heavy-light und der schweren Quarkzustände gibt es neben dem bisher geschilderten Ansatz noch eine erfolgreiche Approximation, die nicht-relativistische QCD NRQCD. Da die c und b Quarks im Vergleich zu den u, d und s Quarks sehr schwer sind, macht man hier die Näherung, daß sich die schweren Quarks mit einer Geschwindigkeit $v \ll c$ bewegen und daher nicht-relativistisch behandelt werden können. Dies hat zu sehr präzisen Ergebnissen geführt, von denen ich hier das Massensplitting im $c\bar{c}$ -System angeben möchte [Lat94, S.319]. Die Rechnungen, die in Abbildung 2.1 zusammengefaßt sind, wurden quenched durchgeführt. Somit sind beim Übergang zu dynamischen Quarks noch Korrekturen zu erwarten.

Als letzten Punkt möchte ich die Glueball-Zustände in der QCD anführen. Neben den Quark-Bindungszuständen werden von der QCD auch Teilchen vorhergesagt, die nur aus Gluonen oder aus Quarks und Gluonen zusammengesetzt sind. Die ersteren nennt man Gluebälle, die letzteren Hybrid-Zustände. Möglich werden diese Teilchen, weil die Gluonen, anders als die Photonen in der QED, selber Ladungsträger bezüglich der Farbquantenzahl sind.

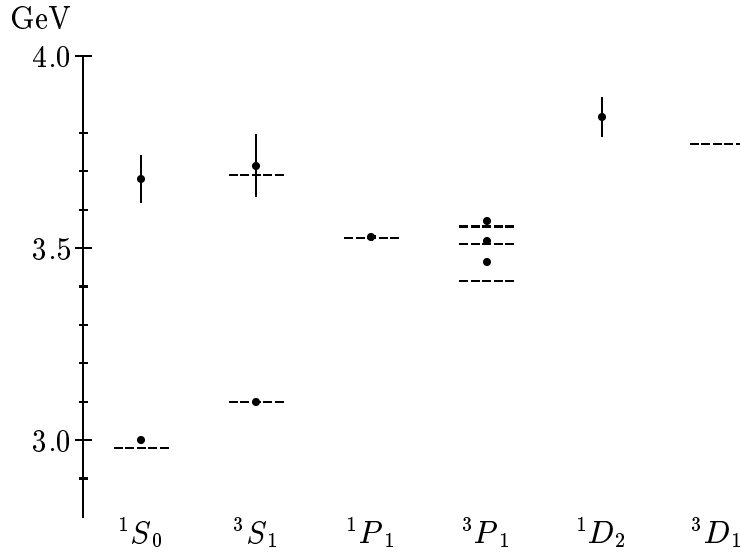


Abbildung 2.1: Ergebnisse aus NRQCD Simulationen des Spektrums des J/Ψ Systems [Lat94, S.319]. Die experimentellen Werte sind durch die gestrichelten Linien angegeben. Die Fehlerbalken der Monte-Carlo-Ergebnisse geben rein statistische Fehler an und sind teilweise kleiner als die Punkte.

Für den leichtesten Glueball, einen Skalar mit den Quantenzahlen $J^{PC} = 0^{++}$, hat man experimentell zwei Kandidaten $f_0(1500)$ und $f_J(1710)$. Aus Gittersimulationen hat man zwei Resultate für den 0^{++} : die IBM GF11-Gruppe hat aus ca. 30 000 Eichfeldkonfigurationen einen Wert von 1740 ± 71 MeV bestimmt [Lat96, S.232,S.236], die UKQCD-Wuppertal-Gruppe hat auf ca. 3 000 Konfigurationen 1625 ± 91 MeV gemessen. Faßt man beide Statistiken zusammen, erhält man $m(0^{++}) = 1707 \pm 64$, womit der $f_J(1710)$ Kandidat favorisiert ist. Beide Gitterrechnungen wurden quenched durchgeführt. Beim Übergang zu dynamischen Quarks erwartet man einen Anstieg der Masse um maximal 5-10%, was das $f_0(1500)$ noch unwahrscheinlicher erscheinen ließe.

Ein mögliches Szenario für dieses Problem ist, daß die beiden Zustände $f_0(1500)$ und $f_J(1710)$ keine reinen Zustände sind, sondern Überlagerungen des 0^{++} Glueballs und des skalaren $s\bar{s}$ Mesons. Zusätzlich muß man noch das skalare $u\bar{u} + d\bar{d}$ Meson hinzunehmen, dessen wahrscheinlichste Messung $f_0(1390)$ ist. Beide Mesonen haben ebenfalls die Quantenzahlen 0^{++} . Man bekommt dann drei Überlagerungszustände, von denen der bei 1500 MeV im wesentlichen $s\bar{s}$ ist und der bei 1710 MeV im wesentlichen der Glueball ist.

Um diese Frage besser entscheiden zu können, hat die GF11-Gruppe begonnen, den skalaren $s\bar{s}$ Zustand zu vermessen. Die Statistik ist zur Zeit noch nicht ausreichend für eine endgültige Aussage, aber aus den bisherigen Messungen sieht man, daß das $s\bar{s}$ Meson eine deutlich niedrigere Masse haben wird als der 0^{++} Glueball. Ein Wert um die 1500 MeV scheint realistisch zu sein und würde das obige Szenario bestätigen.

In allen angeführten Beispielen sind die Gittersimulationen in der Lage, die experi-

mentellen Werte zu bestätigen. Darüber hinaus ist man aber noch in der Lage, gezielte Einzelmessungen zu machen, wie im Beispiel des $s\bar{s}$ Mesons. Die Bestimmung von Matrixelementen ist ein weiterer Punkt, an dem die Experimentalphysiker auf zusätzliche Bestimmungsmethoden angewiesen sind, und auch hier hat sich das Gitter als Methode erster Wahl erwiesen.

Trotz der guten Ergebnisse darf man natürlich nicht darüber hinwegsehen, daß bei den Gittersimulationen auch eine Vielzahl von möglichen Fehlerquellen vorhanden ist. Die Effekte durch zu kleine Gittervolumina (finite size errors) und durch zu große Gitterkonstanten sind in den meisten Fällen verstanden und unter Kontrolle. Beim Extrapolieren zu physikalischen Quark-Massen (chiraler Limes) gibt es noch einige Unsicherheiten bezüglich der Methoden. Hier greift man meist auf störungstheoretische Ansätze zurück. Ein nicht-störungstheoretisches Verfahren wäre hier wünschenswert [Lat96, S.155]. Dies gilt ebenso für die Renormierung von Gitteroperatoren, bei denen man in den letzten Jahren aber gute Fortschritte machen konnte [Lat96, S.883,S.905].

2.4 Nicht-physikalische Entwicklungen

Neben diesen physikalischen Resultaten gibt es zwei weitere Themen der numerischen Simulationen in der Teilchenphysik, die sich mittlerweile als feste Bestandteile etabliert haben. Dies ist zum einen die Rechnerentwicklung und zum anderen die Entwicklung und Optimierung von Algorithmen. Beide Punkte werden in dieser Arbeit eine Rolle spielen, weshalb ich hierauf etwas genauer eingehen möchte.

2.4.1 Neue Algorithmen

Die Verknüpfung von euklidischer QFT auf dem Gitter und der statistischen Physik erlaubt zwar die Anwendung von deren Methoden, aber im einzelnen mußten diese dann doch an die speziellen Belange der QFT angepaßt werden.

Von den drei elementaren Feldtypen (Fermion-, Skalar- und Eichfelder) waren insbesondere für die Eichfelder und zur Behandlung der Fermiondeterminante neue Methoden zu entwickeln. Verfahren mit Einbeziehung der Fermiondeterminante sind ein aktueller Forschungsgegenstand, und in den letzten drei Jahren sind auf diesem Gebiet sowohl neue als auch Verbesserungen bestehender Methoden gefunden worden. Dabei wurde intensiv vom Wissensstand in der numerischen Mathematik Gebrauch gemacht, und dies hat in Teilbereichen zu einer fruchtbaren Zusammenarbeit geführt.

Für die drei wichtigen Eichgruppen $U(1)$, $SU(2)$ und $SU(3)$ stehen leistungsfähige Verfahren mit kurzen Autokorrelationszeiten zur Verfügung. Insbesondere die Kombination von Heatbath- und Overrelaxation-Algorithmen hat sich als optimal erwiesen und ist das Standardverfahren für quenched-Simulationen. Erwartungswerte für fermionische Größen, wie z.B. Massen oder Zerfallskonstanten, können mittels der Fermiondeterminante, die in den so erzeugten Eichfeldkonfigurationen ausgewertet wird, bestimmt werden. Die Fehler, die bei dieser Methode auftreten, liegen bei ca. 10%. Die rein statistischen Fehler sind

kleiner, da auch auf großen Gittern ausreichend viele Konfigurationen erzeugt werden können.

Bei allen bekannten Algorithmen, die die Fermiondeterminante berücksichtigen, also in den unquenched Simulationen, muß man das Inverse der Fermionmatrix bestimmen. Dies führt auf das Problem der Lösung großer, dünn besetzter Gleichungssysteme vom Rang 2000 000 und mehr, die aber, da sie aus einem Modell mit nur nächster-Nachbar-Wechselwirkung resultieren, weniger als 1% von Null verschiedene Einträge haben. Ähnliche Problemstellungen tauchen in allen Bereichen auf, in denen man versucht, Differentialgleichungen durch Diskretisierung zu lösen, so z.B. in der Strömungssimulation oder bei der Berechnung elektromagnetischer Feldverteilungen.

Auch hier konnte zunächst auf Verfahren der numerischen Mathematik zurückgegriffen werden. Iterative Verfahren wie der Conjugate Gradient, der Minimal Residue, bei denen man die fast leere Matrix nicht abspeichern muß und nur die von Null verschiedenen Einträge benutzt, haben sich als Standards etabliert. Darüber hinaus bestand der Bedarf nach schnelleren Verfahren, um auch auf größeren Gittern und bei kleineren Quark-Massen simulieren zu können und so in den physikalisch relevanten Skalierungsbereich zu gelangen. In den letzten zwei Jahren konnten hier wesentliche Verbesserungen erzielt werden. Hier ist insbesondere die Wuppertaler Sesam-Kollaboration zu nennen, die in enger Zusammenarbeit mit der numerischen Mathematik an der Weiter- und Neuentwicklung von Inversionsalgorithmen gearbeitet hat[Lat96, S.120]. Ich werde auf einige dieser Algorithmen und ihre Optimierung im Laufe der Arbeit zurückkommen.

2.4.2 Neue Rechner

Neben der Entwicklung besserer Simulationstechniken kann man natürlich auch versuchen, die Hardware zu optimieren. Die Monte-Carlo-Simulationen wurden von Anfang an auf den jeweils leistungsfähigsten Supercomputern durchgeführt. Die ständig steigende Nachfrage nach Rechenleistung auf diesem Gebiet hat sicherlich zur Weiterentwicklung in dieser Rechnerklasse beigetragen. Da man sich diese recht kostspieligen Anlagen mit einer Vielzahl anderer Benutzer teilen mußte, entstand die Idee von preiswerten, dedizierten Computern, die speziell auf die Belange der Teilchenphysiker abgestimmt waren. Vektorrechner schieden hier aufgrund der aufwendigen Architektur aus. Wollte man dennoch hohe Rechenleistung haben, mußte man also viele preiswerte Recheneinheiten parallel laufen lassen und diese durch ein Verbindungsnetzwerk koppeln. Die Firma Thinking Machines war mit dem Rechner Connection Machine 1 eine der ersten, die einen solchen Computer auf den Markt brachte. Man konnte die Maschine bis auf 2048 Rechenknoten ausbauen oder auch nur einen Teil davon installieren (1/2 CM1, 1/4 CM1, usw.). Die Prozessoren waren als Hyperkubus verdrahtet und konnten in einem speziellen Fortran und C Dialekt programmiert werden. Nachdem sich der Erfolg dieses Konzeptes zeigte, begannen auch andere Gruppen in Italien (APE), in den USA (Columbia) und in Japan (CP-PACS) mit der Entwicklung von Parallelrechnern. Diese Entwicklung hält bis heute an. Neben diesen speziell für die Simulationen in der Elementarteilchenphysik konstruierten Rechnern gibt es inzwischen auch kommerzielle Parallelrechner, wie die CRAY T3D/E, und gemischte

Parallel/Vektorrechner, wie die Fujitsu VPP500, die mit obiger Einschränkung Anwendung finden. Speziell in Japan hat bei der neuesten Generation von Parallelrechnern im Rahmen des CP-PACS Projekts eine enge Zusammenarbeit mit der Industrie, in diesem Fall Hitachi, stattgefunden. In der letzten Ausbaustufe wird der Rechner, der mit 2048 modifizierten HP-PA RISC Prozessoren bestückt ist, über 300 GFLOPS effektive Rechenleistung für QCD-Simulationen liefern, was gut das zehnfache des bisher an Peakleistung für die QCD zur Verfügung stehenden ist.

Ein Teil dieser Arbeit wurde auf einem Rechner, der aus dem italienischen APE Projekt entstanden ist, durchgeführt und wird später noch genauer beschrieben.

Kapitel 3

Überblick

Wie ich im letzten Kapitel gezeigt habe, ist mit der computerbasierten Simulation quantenfeldtheoretischer Modelle der Elementarteilchenphysik ein neuer Zweig neben dem Experiment und der Theorie entstanden. Vom Konzept her liegt er zwischen diesen beiden historisch gewachsenen Bereichen. Die Durchführung der Monte-Carlo-Simulation hat große Ähnlichkeit mit der Durchführung eines Experimentes. Man präpariert ein System, hier durch die Erzeugung von Feldkonfigurationen, und führt dann Messungen physikalisch interessanter Observablen durch, im Experiment mittels Detektoren und im Computer durch die Berechnung von Funktionalen in den Feldern. Im Gegensatz zum Experiment wird man aber in der Simulation niemals etwas messen können, das man nicht hineinsteckt hat. Hinweise auf eine neue Physik erhalte ich im *Computereperiment* nur, wenn ich diese bereits im benutzten Modell eingebaut habe. Wenn die Zahl und die Art der Felder, die in meinem Modell vorkommen, festliegt, dann sind damit auch alle möglichen Teilchenzustände festgelegt, die man messen kann. Effekte, die durch Teilchen zustandekommen, die nicht durch meine Theorie beschrieben werden, können im Experiment vorkommen, in der Simulation nicht. Unter diesem Gesichtspunkt ist das *Computereperiment* lediglich eine geschickte numerische Auswertung des Pfadintegrals. Der Zugang erfolgt in den beiden Bereichen auch von verschiedenen Seiten. Während man im Experiment die Beschleuniger und Detektoren wie ein Mikroskop einsetzt, um die elementaren Bausteine auflösen zu können, geht man in der Simulation den entgegengesetzten Weg. Man definiert einen Satz elementarer Felder bzw. Teilchen und baut aus diesen, durch die Konstruktion geeigneter Observablen, die in der Natur vorkommenden zusammengesetzten Teilchen wie Mesonen und Baryonen zusammen. Die Untersuchung auf verschiedenen Gittern mit unterschiedlichen Gitterkonstanten a entspricht dagegen wieder dem experimentellen Vorgang, da a die Auflösung meiner Messungen festlegt.

In den folgenden Teilen dieser Arbeit möchte ich anhand von zwei Untersuchungen zeigen, was mit den Methoden der computerbasierten Teilchenphysik erreichbar ist. Ich werde dabei im ersten Teil einen Teilbereich des Standardmodells untersuchen, den Higgs-Yukawa-Sektor. Diese Rechnungen wurden auf Parallelrechnern vom Typ Quadrics durchgeführt, die aus dem bereits genannten APE-Projekt entstanden sind. Dabei werde ich neben den physikalischen Grundlagen und Resultaten auch auf die spezielle Problematik bei der Programmierung der Hardware und auf Vergleiche mit konventionellen Rechnern

eingehen. Dieser Teil fällt somit in den Bereich *Neue Rechner*.

Im zweiten Teil werde ich eine Untersuchung vorstellen, der eine Theorie zugrundeliegt, die als Erweiterung des Standardmodells aufgefaßt werden kann. Es geht dabei um supersymmetrische Quantenfeldtheorien, deren einfachste Version, eine $N=1$ $SU(2)$ Super-Yang-Mills-Theorie, hier im Rahmen einer Pilotstudie auf dem Gitter untersucht wird. Dabei wird eine Variante eines Algorithmus benutzt, der von MARTIN LÜSCHER[Lüs94] vorgeschlagen wurde und hier erstmals in einer größeren Simulation verwendet und getestet wird. Dieser Teil gehört folglich in den Bereich *Neue Algorithmen* (und gleichzeitig *Neue Physik*). Die Rechnungen wurden auf einem konventionellen Höchstleistungsrechner CRAY T90 durchgeführt.

Beide Teile finden unter Einschluß der Fermiondeterminante statt und gehören in den Bereich der unquenched-Simulationen. Man spricht hier auch von Simulationen mit dynamischen Quarks, im Gegensatz zu statischen Quarks in der quenched-Approximation. Die verbrauchte Rechenzeit von ca. 1,5 CPU Jahren macht deutlich, daß es sich hier um echte *Large-Scale-Simulationen* handelt.

Teil II

Untersuchung zu Massen- und Kopplungsschranken im Higgs-Yukawa-Sektor

Kapitel 4

Trivialität im Standardmodell

The standard model is a gauge theory of the microscopic interactions.

Paul Langacker

Unser heutiges Verständnis der belegten experimentellen Daten im Bereich der Elementarteilchenphysik wird durch das Standardmodell (SM) beschrieben. Dieses faßt die starke Wechselwirkung und die elektro-schwache Wechselwirkung zusammen. Letztere ist wiederum eine Verbindung von elektromagnetischer und schwacher Wechselwirkung. Abbildung 4.1 zeigt eine Übersicht über die heute als elementar geltenden Bausteine des Standardmodells.

Die Übereinstimmung von berechneten und gemessenen Daten ist in den Jahren seit der Postulierung Anfang der siebziger Jahre durch immer genauere Experimente eindrucksvoll belegt worden. Bisher konnten keine reproduzierbaren signifikanten Abweichungen nachgewiesen werden, die auf eine neue Physik jenseits des Standardmodells hinweisen würden. Zu den genauesten Daten gehören

- die elektromagnetische Feinstrukturkonstante
 $\alpha(Q^2 = 0) = (137.0359895(61))^{-1}$
- die Fermi-Konstante, als Maß der schwachen Wechselwirkung
 $G_F = 1.16639(2) \times 10^{-5} \text{ GeV}^{-2}$
- die Masse des Z-Bosons
 $M_Z = 91.187(7) \text{ GeV}$

(alle Angaben [AB⁺94]). Trotzdem gilt es als sicher, daß das Standardmodell in seiner heutigen Form nicht die grundlegende Theorie zur Beschreibung der Materie ist, sondern nur bis zu einer bestimmten noch nicht bekannten Energie gültig ist. In diesem Sinne kann man das Standardmodell dann als Niederenergie-Limes einer umfassenderen Theorie verstehen.

Einer der Gründe, warum das Standardmodell nicht als fundamentale Theorie in Frage kommt, ist die hohe Zahl von freien Parametern, die durch experimentelle Daten fixiert werden müssen. Je nach Zählweise kommt man auf 19 und mehr unbestimmte Größen.

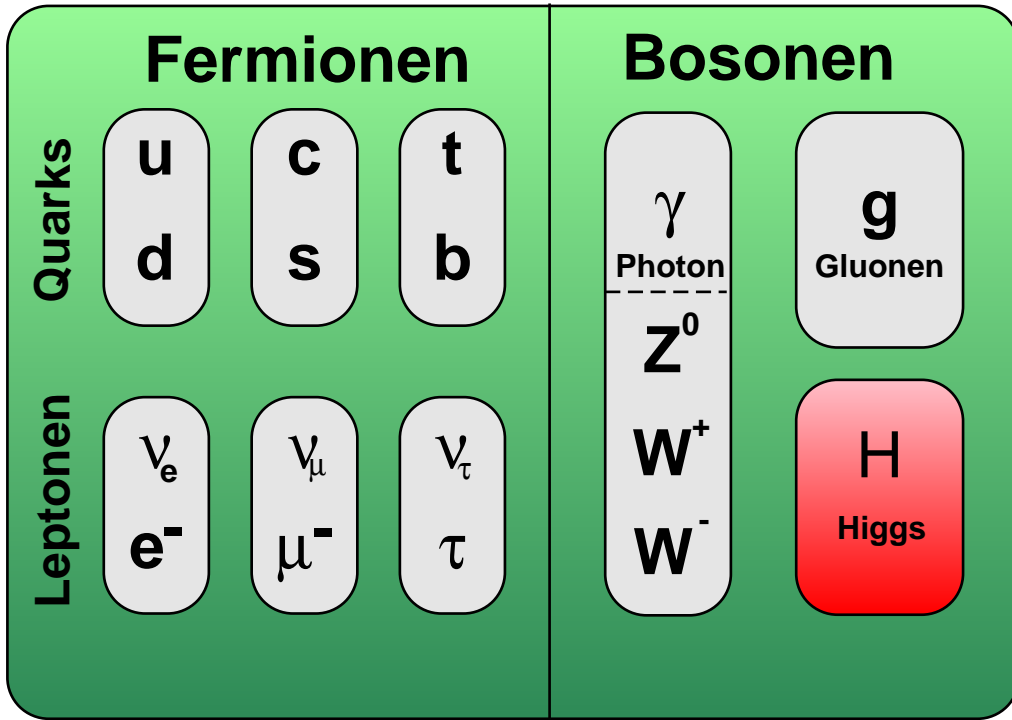


Abbildung 4.1: Das Standardmodell der Elementarteilchen bestehend aus den fermionischen Materiefeldern, den bosonischen Wechselwirkungs-Austauschteilchen und dem bisher experimentell nicht nachgewiesenen Higgs-Boson.

Obwohl wir in der Lage sind, aus dem Standardmodell hochpräzise Vorhersagen zu machen, gibt es doch immer noch Bereiche, in denen ad hoc Annahmen gemacht werden müssen, weil ein echtes Verständnis fehlt.

Eines dieser Probleme, der sogenannte Higgs-Sektor des Standardmodells, der aus rein mathematischen Gründen eingeführt wurde, soll im vorliegenden Teil dieser Arbeit untersucht werden.

Zunächst will ich dazu eine kurze Einführung in die Struktur des Standardmodells geben. Danach werde ich das Problem des Standardmodells aufzeigen, das in dieser Arbeit untersucht wird.

4.1 Das Standardmodell

Das Standardmodell ist eine renormierbare lokale chirale Eichtheorie. Die Eichgruppe ist gegeben durch

$$G_{SM} = \text{SU}(3)_{\text{colour}} \times \text{SU}(2)_L \times \text{U}(1)_Y \quad (4.1)$$

$$= \text{SU}(3)_{\text{colour}} \times G_{GSW}. \quad (4.2)$$

Der erste Faktor beschreibt die starke Wechselwirkung an der die Quarks und die Gluonen teilnehmen. Der zweite und dritte Faktor in Gl. 4.1 stammen aus der Glashow-Salam-Weinberg-Theorie und beschreiben zusammen den elektro-schwachen Sektor. Die Wirkung des Standardmodells ist invariant unter lokalen Transformationen bezüglich der Eichgruppe G_{SM} .

Da der starke Sektor im folgenden keine Rolle mehr spielen wird, werde ich mich in einer ersten Vereinfachung auf das GSW-Modell beschränken.

Das GSW-Modell ist eine chirale Eichtheorie. Die Eigenschaft der Chiralität bezieht sich auf das unterschiedliche Verhalten unter $SU(2)_L$ Eichtransformationen von rechtshändigen und linkshändigen Zuständen. Die linkshändigen verhalten sich wie Doublets und die rechtshändigen wie Singlets, d.h. sie werden gar nicht transformiert. Die Austauschteilchen der elektro-schwachen Wechselwirkung im GSW-Modell sind vier masselose Spin-1 Teilchen W_μ^1 , W_μ^2 , W_μ^3 und B_μ (Eichvektorbosonen). Die Quarks und Leptonen, die zusammen die Materie bilden, sind ebenfalls masselose Teilchen.

Die so aufgebaute Theorie ist perturbativ renormierbar, was es erlaubt, mittels Störungstheorie Ordnung für Ordnung endliche, meßbare Größen auszurechnen.

In unserer beobachtbaren Welt gibt es mit dem gerade Gesagten einige Unstimmigkeiten. Zum einen hat die Materie ganz offensichtlich Masse. Quarks und Leptonen müssen also massive Zustände sein. Weiterhin ist die schwache Wechselwirkung kurzreichweitig, wie die Experimente zeigen. Masselose Feldquanten würden aber eine langreichweitige Wechselwirkung verursachen. Dies wäre nur für den elektromagnetischen Teil mit seinem masselosen Photon richtig.

Explizite Massenterme für die Fermionen sind aber verboten, da die Theorie chiral ist. Ein Massenterm für Dirac-Spinoren koppelt rechts- und linkshändige Anteile und ist somit nicht invariant unter chiralen Transformationen. Aus einem ähnlichen Grund können auch für die Eichbosonen keine Massenterme eingeführt werden. In diesem Fall würde die Eichinvarianz der Wirkung zerstört.

Gesucht ist ein Weg, der die Renormierbarkeit der Theorie erhält, mit der Chiralität verträglich ist und die beobachteten Fermionen- und Bosonenmassen liefert. Der Higgs-Mechanismus kann alle diese Forderungen erfüllen. Dazu werden zwei komplexe Skalarfelder eingeführt, die über minimale Kopplung im kinetischen Term an das $SU(2)_L \times U(1)_Y$ Eichfeld koppeln. Die beiden Felder bilden zusammen ein Doublet bezüglich des schwachen Isospins

$$\varphi = \begin{pmatrix} \phi_1 + i \phi_2 \\ \phi_3 + i \phi_4 \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

mit den vier reellen Feldern ϕ_j , $j = 1, 2, 3, 4$. Das Skalarfeld besitzt ein Potential vom ϕ^4 -Typ

$$V(\phi) = \mu^2 \phi^\dagger \phi + \lambda (\phi^\dagger \phi)^2 \quad (4.4)$$

mit

$$\varphi^\dagger = (\varphi^*)^T, \quad (4.5)$$

das invariant unter $O(4)$ -Transformationen ist. Für $\mu^2 > 0$ liegt das Minimum des Potentials bei 0. Wählt man hingegen $\mu^2 < 0$, so bekommt das Potential ein Minimum bei

$$\phi^\dagger \phi = \frac{-\mu^2}{2\lambda} \quad (4.6)$$

$$= \frac{v^2}{2}. \quad (4.7)$$

Nun ist $\phi^\dagger \phi = \frac{1}{2} (\phi_1^2 + \phi_2^2 + \phi_3^2 + \phi_4^2)$ und mit $\varphi = (0, 0, v, 0)$ sieht man, daß Gl. 4.6 erfüllt wird. Wir haben hier aus den unendlich vielen Zuständen, die Gl. 4.6 erfüllen einen ausgewählt und damit die Symmetrie gebrochen.

Nimmt man jetzt noch die Eichfelder hinzu, entwickelt das Feld φ nach dem ausgezeichneten Vakuumzustand und geht in die unitäre Eichung, so erhält man

$$\varphi = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ v + H(x) \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

wobei $H(x)$ das Higgs-Feld ist, dessen Feldquant, das Higgs-Boson, als einziges Teilchen im Standardmodell noch nicht experimentell nachgewiesen wurde.

Was hat man durch die spontane Symmetriebrechung gewonnen? Man erhält ein massives skalares Teilchen $H(x)$ mit

$$M_H = \sqrt{2\lambda v^2} \quad (4.9)$$

zusätzlich im Spektrum des Standardmodells. Gleichzeitig wurden aber auch Terme in der Wirkung erzeugt, die drei massive und ein masseloses Eichvektorboson beschreiben. Die beiden Zustände W_μ^3 und B_μ werden dabei in einer Linearkombination zu den schwachen Eigenzuständen Z und γ gemischt, wobei das Mischungsverhältnis durch den Weinberg-Winkel θ_W bestimmt wird. W_μ^1 und W_μ^2 werden über $W_\mu^\pm = \frac{1}{2}(W_\mu^1 \mp W_\mu^2)$ zu schwachen Eigenzuständen verknüpft. Damit haben wir die für die kurzreichweitige schwache Wechselwirkung nötigen Austauscheteilchen W_μ^\pm und Z sowie das masselose Photon γ für den elektromagnetischen Sektor.

Das Higgs-Feld kann nun auch benutzt werden, um die Fermionen massiv zu machen. Im leptonischen Teil, wo man ein masseloses Neutrino hat, das nur in einer linkshändigen Version auftritt, kommt man mit dem obigen Feld φ aus. Im Quark-Sektor hat man zu den Isospin $I_3 = +\frac{1}{2}$ Zuständen auch rechtshändige $I_3 = 0$ Zustände, da alle Quarks massiv sind. Dies führt dazu, daß man noch ein zu φ konjugiertes Feld $\tilde{\varphi}$ benötigt mit

$$\tilde{\varphi} = i\tau_2 \varphi^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \phi_3 - i\phi_4 \\ -\phi_1 + i\phi_2 \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Die Fermionen und das Higgs werden über einen Yukawa-Term gekoppelt, der für die erste Quark-Generation (u,d) folgende Form hat

$$-g_d \bar{L}_q \varphi d_R - g_u \bar{L}_q \tilde{\varphi} u_R + \text{h.c.} \quad (4.11)$$

L_q ist hierbei das linkshändige schwache Isospin-Doublett, und d_R und u_R sind die rechtehändigen Singletts. Der Dirac-konjugierte Spinor \bar{L}_q ist im euklidischen Raum als $L_q^\dagger \gamma_4$ definiert (für † s. Gl. 4.5). Wegen der Transformationseigenschaften von φ und $\tilde{\varphi}$, die nach Konstruktion identisch sind, ist die Kombination eichinvariant unter $SU(2)_L$ Transformationen. Die Parameter g_u und g_d heißen Yukawa-Kopplungen und sind durch die Theorie nicht festgelegt. Geht man zum Zustand mit spontan gebrochener Symmetrie über und setzt die entsprechende Form für φ und $\tilde{\varphi}$ ein, so bekommt man aus Gl. 4.11 je einen Massenterm für das u- und das d-Quark sowie eine trilineare Wechselwirkung zwischen den Quarks und dem Higgs-Feld. Für die Quark-Massen erhält man folgenden Zusammenhang mit dem Vakuumerwartungswert v des Higgs-Feldes

$$m_q = \frac{g_q v}{\sqrt{2}}. \quad (4.12)$$

Die Parameter g_q müssen aus dieser Beziehung über die experimentell gemessenen Werte für m_q bestimmt werden.

Der zentrale Parameter in der obigen Formulierung ist der Vakuumerwartungswert v . Dieser kann über die Fermi-Konstante berechnet werden. Es gilt

$$v = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2} G_F}}. \quad (4.13)$$

Mit dem obigen Wert für G_F erhält man $v = 246$ GeV. Die Masse des Higgs, Gl. 4.9, ist dadurch nicht festgelegt, da λ nicht durch die Theorie bestimmt ist.

Damit hat man eine mit dem Experiment übereinstimmende Beschreibung der Elementarteilchen erhalten, die alle obigen Forderungen an die mathematischen Eigenschaften erfüllt. Wie oben bereits angemerkt, hat man aber auch neue unbestimmte Parameter in der Theorie, die Higgs-Masse bzw. die quartische Kopplung und die zwölf Yukawa-Kopplungen.

4.2 Trivialität des Higgs-Sektors

Es gibt deutliche Hinweise darauf, daß die reine ϕ^4 Theorie in vier Dimensionen trivial ist [LW87, LW88, LW89]. Regularisiert man die Theorie auf einem Gitter, so zeigt sich, daß in der Nähe des kritischen Punktes an dem man den Kontinuumslimit durchführt, die renormierte quartische Kopplung λ_R klein bleibt und somit eine störungstheoretische Behandlung möglich ist. Bei der Durchführung sieht man dann, daß im Kontinuumslimit die renormierte Kopplung für beliebige nackte Kopplungen λ_0 gegen Null geht. Das heißt, im Kontinuum erhält man eine nicht wechselwirkende, freie Theorie. Dies bezeichnet man als Trivialität.

Solange man einen endlichen Gitterabstand a hat, ist die Theorie wechselwirkend. Das endliche a ist über die Beziehung $\Lambda = \pi/a$ mit einem maximalen Impuls verknüpft, der wiederum eine Energieskala festlegt. Schickt man a gegen Null, so geht Λ gegen Unendlich. Um den Higgs-Mechanismus wie oben beschrieben einzusetzen, braucht man einen wechselwirkenden Higgs-Sektor. Dies ist offensichtlich nur möglich, wenn $\Lambda < \infty$ ist. Solange

die durch Λ gesetzte Energieskala größer ist als die typische Energie in Teilchenreaktionen, kann man mit der so definierten Λ -abhängigen Theorie wohl definierte Ergebnisse berechnen. Diese Theorie ist dann als Niederenergie-Limes einer allgemeineren Theorie zu verstehen. Die sehr gute Übereinstimmung von Experiment und Standardmodell weist darauf hin, daß die bisher erreichten Reaktionsenergien genügend weit unterhalb der Gültigkeitschwelle liegen.

Bei der Diskussion habe ich bisher stillschweigend vorausgesetzt, daß die Ergebnisse des reinen Higgs-Sektors auf das gesamte Standardmodell übertragbar sind. Dies ist nicht a priori klar und bisher auch nicht bewiesen. Es gibt zwei Einflüsse, die das Verhalten abändern könnten. Dies sind zum einen die Eichfelder über ihre Kopplungen an das Higgs-Feld und zum anderen die Fermionen über die Yukawa-Kopplungen.

Bei den Eichfeldern koppeln nur die zur $SU(2)_L$ und zur $U(1)_Y$ gehörenden Felder direkt an das Higgs. Der starke Sektor koppelt nur indirekt über die Yukawa-Kopplungen an. Da die beiden zugehörigen Eichkopplungen klein sind, kann man zunächst den Einfluß perturbativ untersuchen. Hierbei wurden keine Veränderungen im kritischen Verhalten im skalaren Sektor gefunden. Die Skalengesetze sind die des Gaußschen Fixpunktes, der zur freien Theorie gehört. Die Ankopplung liefert allerdings eine untere Schranke für die Higgs-Masse, da der Übergang von der gebrochenen in die symmetrische Phase in Anwesenheit von Eichfeldern von erster Ordnung ist. Nichtstörungstheoretische Untersuchungen führten zum gleichen Ergebnis. Weitere Informationen zu Eich-Higgs-Systemen findet man in [HN88, HH86, Has90].

Als Ursache für geändertes kritisches Verhalten bleiben somit nur noch die Yukawa-Kopplungen. Mit Ausnahme des t-Quarks sind aber alle Quarks leicht im Vergleich zum Higgs-Vakuumerwartungswert v und somit die Kopplungen nach Gl. 4.12 klein. Der aktuelle Wert für m_t liegt bei 175 GeV, und damit wäre $g_t \simeq 1$, was innerhalb des störungstheoretisch beschreibbaren Bereichs liegt. Dies begründet die nicht-perturbative Untersuchung des Einflusses schwerer Fermionen, wie sie in dieser Arbeit durchgeführt wurde.

Eine vollständige Behandlung des Standardmodells auf dem Gitter wäre aufgrund der benötigten Rechenzeit zur Zeit nicht durchführbar. Auch prinzipiell gibt es hierbei noch nicht gelöste Probleme, wie ich gleich zeigen werde. Wie bei den meisten Modellsimulationen werde ich mich daher auf die wesentlichen Aspekte des Modells, die zur Behandlung der Fragestellung nötig sind, beschränken.

Wie oben bereits gesagt, wird der starke Sektor vollständig vernachlässigt, da er nur indirekt ankoppelt. Da die Eichkopplungen im GSW-Modell klein sind, werde ich auch die Eichfelder vernachlässigen. Es verbleiben im reduzierten Modell die Fermionen und das Higgs. Durch Gleichsetzung der Yukawa-Kopplungen wird die Symmetriegruppe von $SU(2)_L \times U(1)_Y$ auf $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ erweitert. Die Symmetrie ist durch die Vernachlässigung der Eichfelder jetzt eine globale. Weiterhin beschränke ich mich auf ein Quark-Doublett, zum einen wegen des geringeren Rechenaufwandes und zum anderen, weil hier nur das Verhalten des Doubletts mit dem schwersten Quark, dem t-Quark, untersucht werden soll. Da die Motivation zu diesen Untersuchungen mehr vom qualitativen Verständnis des Standardmodells getragen wird, als von dem Ziel, experimentelle Resultate mit hoher Präzision zu verifizieren, sind diese Simplifikationen gerechtfertigt, da sie die wesentlichen

Eigenschaften erhalten.

Numerische und störungstheoretische Studien zu diesem reduzierten Modell sind seit Anfang der neunziger Jahre in einer Kollaboration des DESY Hamburg und der WWU Münster durchgeführt worden. Aufbauend auf diese Vorarbeiten soll in dieser Arbeit das Projekt zu einem (vorläufigen) Abschluß gebracht werden.

4.3 Fermionen auf dem Gitter

Nachdem ich im vorigen Abschnitt das Kontinuumsmodell festgelegt habe, das die Grundlage für diese Untersuchung bildet, will ich jetzt auf Probleme eingehen, die sich bei der Regularisierung auf dem Gitter ergeben.

Die oben geschilderten Erfolge des Standardmodells bei der Beschreibung der Natur beruhen bisher zum größten Teil auf störungstheoretischen Rechnungen. Eine vollständige Beschreibung bedingt aber auch ein darüberhinausgehendes nicht-störungstheoretisches Verständnis der Theorie. Ein Kernproblem hierbei ist die Regularisierung des chiralen Teils des Standardmodells. Zur Zeit ist keine nicht-perturbative Regularisierung chiraler Eichtheorien bekannt. Die „no go“ Theoreme von Karsten und Smit [KS81] sowie Nielsen und Ninomiya [NN81c, NN81a, NN81b, NN82] stellen die Existenz eines solchen Verfahrens sogar ganz in Zweifel. Unter den sehr allgemeinen Forderungen nach

- Hermitizität,
- Lokalität,
- Translationsinvarianz,

der zugrundeliegenden Wechselwirkung zeigen sie, daß es zu jedem Fermion mit gegebener Chiralität ein zweites mit entgegengesetzter Händigkeit gibt. Anders ausgedrückt, man kann nicht ein einzelnes Weyl-Fermion auf dem Gitter haben und gleichzeitig die chirale Eichinvarianz erhalten. Will man die drei Forderungen erfüllen, dann gibt es zu jedem Satz von Quantenzahlen zwei Fermionen mit entgegengesetzter Chiralität. Damit ist die Theorie aber nicht mehr chiral, sondern vektorartig, da links- und rechtshändige Zustände in gleicher Weise an das Eichfeld koppeln. Da die Fermionpaare über die Paritätstransformation verbunden sind, spricht man auch von Fermion-Spiegelfermion Paaren.

Die naiv diskretisierte Wirkung auf einem kubischen Gitter mit Symmetriegruppe O_h ist invariant unter der „Spektrum-Verdopplungs-Symmetrie“ [KS81, CH77]. Im Impulsraum bewirkt die zugehörige Transformation ein Vertauschen der Ecken der Brillouin-Zone. Dies führt zu einer Entartung des Spektrums. Startet man mit einem Fermion in der Kontinuumswirkung und diskretisiert diese naiv, so erhält man in $D = 4$ auf dem Gitter 16 Zustände, die über die Symmetriegruppe O_h verknüpft sind. Naiv meint in diesem Zusammenhang immer ein einfaches Ersetzen der Ableitungsterme durch die entsprechenden Differenzenterme auf dem Gitter.

Hatte das Kontinuums-Fermion eine vorgegebene Händigkeit, so besagen das „no go“ Theorem und die „Spektrum-Verdopplungs-Symmetrie“, daß das resultierende Spektrum auf dem kubischen Gitter acht linkshändige und acht rechtshändige Fermionen beschreibt.

Bei der Diskretisierung der reduzierten Version des Standardmodells treten somit zwei Probleme auf. Zum einen erhält man mehr Fermionen als man möchte, und zum anderen wird das Spektrum vektorartig statt chiral.

Das erste Problem kann man durch Hinzufügen eines Wilson-Terms angehen. Dieser ist von der Struktur her ein Ableitungsterm zweiter Ordnung und bewirkt eine Aufhebung der „Spektrum-Verdopplungs-Symmetrie“. Die 16 Gitter-Fermionen, die zu den 16 Ecken der Brillouin-Zone gehören, bekommen eine zusätzliche Masse, die proportional zur inversen Gitterkonstante mal der Anzahl der Einträge ungleich Null im zugehörigen Impulsraum-Vektor der Ecke ist. Für das Fermion bei $(0, 0, 0, 0)$ heißt das aber, daß kein weiterer Massenterm auftritt. Im Kontinuumslimites $a \rightarrow 0$ gehen die anderen Massen gegen Unendlich, und die Zustände werden auf diese Weise aus dem Spektrum entfernt. Es bleibt nur ein Fermion übrig, wie es vor der Diskretisierung der Fall war. Der Wilson-Term selbst ist irrelevant und verschwindet somit im Kontinuumslimites. Aufgrund seiner Form als Massenterm bricht er explizit eine im masselosen Fall vorhandene chirale Invarianz der Wirkung.

In der QCD, wo die Kopplung vektorartig und asymptotisch frei ist und man den Kontinuumsübergang durchführen kann, ist die Einführung eines Wilson-Terms der Standard. In unserem Fall vermuten wir, daß die Kopplungen trivial sind und somit der Grenzübergang $a \rightarrow 0$ nicht durchgeführt werden kann, wenn man eine effektive wechselwirkende Niederenergie-Theorie behalten will. Das bedeutet aber, daß die Masse der Doppler an den Ecken außerhalb des Ursprungs nicht beliebig groß werden kann und eine vollständige Entkopplung nicht stattfindet. Bei hinreichend kleinem a kann man aber hoffen, daß die Effekte durch die Fermion-Doppler vernachlässigbar sind. Im Rahmen einer „finite a “ Analyse wird dies berücksichtigt werden.

Das zweite Problem betraf die Chiralität. Hier ist kein Vorgehen bekannt, das eine generelle Lösung liefert. Da der Wilson-Term in seiner ursprünglichen Form für jedes endliche a die chirale Symmetrie bricht, diese aber gerade zentraler Bestandteil des Standardmodells ist, muß man einen anderen Weg suchen. In dieser Arbeit wird eine von I. MONTVAY, der einer der Initiatoren dieses Projektes ist, vorgeschlagene Lösung verfolgt. Die zentrale Idee ist dabei, da Spiegelfermionen sowieso im Spektrum auftreten, sie in die Wirkung mit aufzunehmen. Der Wilson-Term kann dann als chiraler, nichtdiagonaler Mischterm in Fermionen $(\psi, \bar{\psi})$ und Spiegelfermionen $(\chi, \bar{\chi})$ geschrieben werden.

Auf diese Weise hat man jetzt aber auf dem Gitter 32 Fermionenzustände bekommen, von denen man nur eins im Kontinuumslimites erhalten möchte.

4.4 Bisheriger Stand des Projekts

Mitte der achtziger Jahre wurde mit umfangreichen Simulationen der reinen ϕ^4 -Theorie begonnen, das Phasendiagramm und die möglichen Kontinuumslimites zu untersuchen. Aus diesen Projekten haben sich Ende der achtziger, Anfang der neunziger Jahre mehrere Gruppen gebildet, die das Ziel hatten, das elektro-schwache Standardmodell auf dem Gitter zu realisieren und zu untersuchen. Eine dieser Kollaborationen wurde von I. MONTVAY und G. MÜNSTER initiiert. Aufbauend auf die von I. MONTVAY vorgeschlagene Formu-

lierung des Higgs-Yukawa-Sektor mit Spiegelfermionen, sind im Lauf der letzten zehn Jahre eine Vielzahl von Arbeiten zu diesen Modellen entstanden. Dabei wurden sowohl störungstheoretische Rechnungen auf dem Gitter und im Kontinuum durchgeführt, als auch nicht-störungstheoretische Monte-Carlo-Simulationen. Das Ziel war es, zunächst eine geeignete Formulierung der Kontinuumstheorie zu finden und mit dieser Formulierung den Higgs-Yukawa-Sektor dann zu testen.

Die Rechnungen wurden mit $U(1)_R \otimes U(1)_L$ - und $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -Modellen gemacht. Die meisten Simulationen wurden mit dem Hybrid-Monte-Carlo-Verfahren durchgeführt. Im $U(1)_R \otimes U(1)_L$ -Modell wurde von M. PLAGGE auch der Langevin-Algorithmus getestet, da dieser im Gegensatz zum vorhergenannten auch eine ungerade Anzahl Fermionflavours zuläßt. Durchgeführt wurden die Rechnungen zum größten Teil auf der CRAY YMP des Höchstleistungsrechenzentrums (HLRZ) am Forschungszentrum (FZ) Jülich. Die Gittergrößen waren durch die Rechenkapazität auf kleine und mittlere Ausdehnungen beschränkt. Die Mehrzahl der Simulationsläufe fanden auf $4^3 \cdot 8$ und $6^3 \cdot 12$ Gittern statt, bei einigen Parametersätzen auch auf $8^3 \cdot 16$. Die aus diesen Läufen erhaltenen Ergebnisse sind die Grundlage für die Wahl der Parameter und Gittergrößen in der vorliegenden Arbeit.

Zur Abschätzung der Finite-Size-Effekte habe ich Gitter der Größen $8^3 \cdot 16$, $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$ verwendet, da das vorhandene Datenmaterial im Bereich kleiner und mittlerer Yukawa-Kopplungen bei diesen Gitterdimensionen nur noch geringe Korrekturen erwarten ließ. Gleichzeitig war es das Ziel, das Skalierungsverhalten des Gittermodells mit den Vorhersagen der störungstheoretischen β -Funktion zu vergleichen. Die typische Skala des Modells wird durch die Higgs-Masse gesetzt. In Gittereinheiten sollte die Masse Werte um 0.5 annehmen und damit im „Scaling“-Bereich liegen. Eine grobe Abschätzung der dafür erforderlichen Gitterausdehnung liefert die empirische Relation $L \gtrsim 6 m^{-1}$, i.e. mit $m = 0.5$ $L \gtrsim 12$. Dies liefert die zweite Begründung für die Wahl der Gittergrößen.

Der relevante Parameterbereich wird durch die Simulationsergebnisse, störungstheoretisch bestimmte Schranken und die letzten Messungen der top-Quark-Masse festgelegt. Die freien Parameter lassen sich auf zwei reduzieren, die Fermion-Yukawa-Kopplung und den skalaren Hoppingparameter, der eine Mischung aus der nackten Masse μ und der nackten quartischen Kopplung λ ist. Da die Yukawa-Kopplung des top-Quark im Vergleich mit störungstheoretischen Schranken im Bereich schwacher bis mittlerer Kopplungen liegt, motiviert die Wahl der nackten Fermion-Yukawa-Kopplung $G_\psi = 0.3$ und $G_\psi = 0.45$. Die zugehörigen renormierten Kopplungen liegen dann im gewünschten Bereich, wie wir aus den vorhergehenden Simulationen wissen. Der skalare Hoppingparameter wird zum einen fixiert durch die Wahl der physikalisch relevanten gebrochenen Phase und zum anderen durch die gewünschte Higgs-Masse.

Kapitel 5

Das Higgs-Yukawa-Modell auf dem Gitter

Nach den einleitenden Erklärungen des letzten Kapitels werde ich jetzt das in dieser Arbeit verwendete $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -symmetrische Modell genauer vorstellen und die bisherigen Erkenntnisse zusammenfassen.

5.1 Die Gitterwirkung

Wie bereits gesagt, ist der Ausgangspunkt das Standardmodell. Wir vernachlässigen die Eichkopplungen und verbleiben mit den Fermionen $\psi, \bar{\psi}$ und dem Skalarfeld φ . Die relevanten Terme in der Wirkung $S(\psi, \bar{\psi}, \varphi)$ sind

- S_B , der bosonische Teil,
- S_F , der fermionische Teil,
- S_Y , der Yukawa-Teil.

Zunächst gebe ich die Wirkung im Kontinuum an. S_B ist die Wirkung für ein komplexes skalares Doublett (s. Gl. 4.3) mit φ^4 Wechselwirkung

$$S_B^{cont} = \int d^4x \left\{ (\partial_\mu \varphi)^\dagger (\partial_\mu \varphi) + m^2 (\varphi^\dagger \varphi) + \frac{g}{6} (\varphi^\dagger \varphi)^2 \right\}. \quad (5.1)$$

Die Ableitungen sind hier nicht kovariant, da keine Eichfelder im Modell enthalten sind. Die Wirkung ist symmetrisch unter $SU(2)$ -Transformationen

$$\varphi \rightarrow \varphi' = U_{SU(2)} \varphi. \quad (5.2)$$

Der rein fermionische Teil der Wirkung hat die Form wie für ein freies Fermionfeld

$$S_F^{cont} = \int d^4x \bar{\psi} i \gamma^\mu \partial_\mu \psi. \quad (5.3)$$

Die Felder werden gekoppelt über den Yukawa-Term, der für die Massenerzeugung benötigt wird

$$S_Y^{cont} = \int d^4x G_\psi \left[(\bar{\psi}_L \varphi) \psi_R + \bar{\psi}_R (\varphi^\dagger \psi_L) \right]. \quad (5.4)$$

G_ψ ist die Yukawa-Kopplung des ψ -Feldes. Die linkshändigen Fermionfelder sind hier wie das Skalarfeld SU(2)-Doublets und die rechtshändigen sind im Standardmodell SU(2)-Singletts.

Bei der Diskretisierung dieser Wirkung werden die Integrale durch Summen ersetzt

$$\int d^4x \rightarrow a^4 \sum_x \quad (5.5)$$

und die Ableitungen durch Vorwärtsdifferenzen

$$\partial_\mu f \rightarrow \frac{1}{a}(f_{x+\hat{\mu}} - f_x). \quad (5.6)$$

Für den skalaren Teil erhält man damit

$$S_B = \sum_x \left\{ \frac{1}{2} \text{Tr}(\varphi_x^\dagger \varphi_x) + \lambda \left[\frac{1}{2} \text{Tr}(\varphi_x^\dagger \varphi_x) - 1 \right]^2 - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \text{Tr}(\varphi_{x+\hat{\mu}}^\dagger \varphi_x) \right\} \quad (5.7)$$

mit dem skalaren Feld jetzt in $2 \otimes 2$ Matrixnotation

$$\varphi = \begin{pmatrix} \phi_4 + i\phi_3 & \phi_2 + i\phi_1 \\ -\phi_2 + i\phi_1 & \phi_4 - i\phi_3 \end{pmatrix} = \phi_0 \mathbf{1} + i \sum_{k=1}^3 \tau_k \phi_k. \quad (5.8)$$

Darin sind ϕ_i , $i = 1, 2, 3, 4$, die vier reellen Komponenten und τ_k , $k = 1, 2, 3$, die Pauli-Matrizen. Der Zusammenhang mit den Parametern m und g der Kontinuumsformulierung ist gegeben durch

$$1 - 2\lambda = (8 - \frac{m^2}{2})\kappa \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{g\kappa^2}{6}. \quad (5.9)$$

Die auf dem Gitter bei der Diskretisierung fermionischer Wirkungen auftretenden Spiegel-Freiheitsgrade werden explizit berücksichtigt. Dazu wird ein weiteres Fermionfeld χ mit eigener Yukawa-Kopplung G_χ eingeführt. Die beiden Felder faßt man in einem neuen Feld Ψ zusammen

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \chi \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \bar{\Psi} = (\bar{\chi}, \bar{\psi}). \quad (5.10)$$

Ein expliziter Massenterm $m_\psi \bar{\psi} \psi$ oder $m_\chi \bar{\chi} \chi$ ist aufgrund der chiralen Symmetrie nicht erlaubt. Hingegen ist ein Term $m_\Psi \bar{\Psi} \Psi$ möglich. Zusammen mit dem kinetischen Term

und einem modifizierten, chiral-invarianten Wilson-Term erhält man

$$\begin{aligned}
S_F = \sum_x \Big\{ & \mu_{\psi\chi} [\bar{\chi}_x \psi_x + \bar{\psi}_x \chi_x] \\
& - K \sum_{\mu=-4}^4 \left[\bar{\psi}_{x+\hat{\mu}} \gamma_\mu \psi_x + \bar{\chi}_{x+\hat{\mu}} \gamma_\mu \chi_x \right. \\
& \left. + r (\bar{\chi}_{x+\hat{\mu}} \psi_x - \bar{\chi}_x \psi_x + \bar{\psi}_{x+\hat{\mu}} \chi_x - \bar{\psi}_x \chi_x) \right] \Big\}.
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Die erste Zeile enthält den gemischten Massenterm mit $\mu_{\psi\chi} = m_\Psi$. Der kinetische Term steht in der zweiten Zeile mit dem fermionischen Hoppingparameter K . Die dritte Zeile enthält den modifizierten Wilson-Term mit Wilson-Parameter r , der den Dopplerfreiheitsgraden im Kontinuumsmlimes $a \rightarrow 0$ eine zusätzliche Masse $\mathcal{O}(1/a)$ verleiht und sie so effektiv aus dem Spektrum entfernt. Bei den γ -Matrizen benutze ich die in [MM94] angegebene Form.

Bleibt noch der Yukawa-Teil der Wirkung, der in der Gitterformulierung die folgende Form hat

$$\begin{aligned}
S_Y = \sum_x \Big\{ & G_\psi [\bar{\psi}_{Rx} \varphi_x^\dagger \psi_{Lx} + \bar{\psi}_{Lx} \varphi_x \psi_{Rx}] \\
& + G_\chi [\bar{\chi}_{Rx} \varphi_x \chi_{Lx} + \bar{\chi}_{Lx} \varphi_x^\dagger \chi_{Rx}] \Big\}.
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Die rechts- und linkshändigen Komponenten sind über die Projektionsoperatoren

$$P_L = \frac{1}{2} (\mathbf{1} + \gamma_5) \quad \text{und} \quad P_R = \frac{1}{2} (\mathbf{1} - \gamma_5) \tag{5.13}$$

definiert

$$\psi_L = P_L \psi \quad \psi_R = P_R \psi \quad \bar{\psi}_L = \bar{\psi} P_R \quad \bar{\psi}_R = \bar{\psi} P_L \tag{5.14}$$

$$\chi_L = P_L \chi \quad \chi_R = P_R \chi \quad \bar{\chi}_L = \bar{\chi} P_R \quad \bar{\chi}_R = \bar{\chi} P_L. \tag{5.15}$$

Der fermionische und der Yukawa-Teil der Wirkung definieren zusammen die Fermionmatrix \mathcal{M}

$$S_{\psi\chi\varphi} = S_F + S_Y = \sum_{xy} \bar{\Psi}_y \mathcal{M}[\varphi]_{yx} \Psi_x. \tag{5.16}$$

Die Wirkung $S = S_B + S_F + S_Y$ ist invariant unter $\text{SU}(2)_R \otimes \text{SU}(2)_L$ -Transformation. Die einzelnen Felder transformieren sich dabei wie folgt

$$\psi'_L = U_L \psi_L \quad \psi'_R = U_R \psi_R \tag{5.17}$$

$$\chi'_R = U_L \chi_R \quad \chi'_L = U_R \chi_L \tag{5.18}$$

$$\varphi' = U_L \varphi U_R^\dagger. \tag{5.19}$$

Die Transformation für φ wird dabei über den Yukawa-Teil festgelegt. Weiterhin gibt es eine zusätzliche U(1)-Flavour-Symmetrie

$$\Psi' = e^{-i\alpha}\Psi, \quad \varphi' = \varphi, \quad (5.20)$$

die mit einer Flavour-Erhaltung verknüpft ist.

Zur Simulation mit dem Hybrid-Monte-Carlo-Verfahren muß eine weitere künstliche Flavour-Verdopplung eingeführt werden. Die resultierende Wirkung $S_{\psi\chi\varphi}$ lautet dann

$$S_{\psi\chi\varphi}^{HMC} = \sum_{f=1}^2 \sum_{xy} \bar{\Psi}_y^{(f)} \mathcal{M}[\varphi]_{yx}^{(f)} \Psi_x^{(f)} \quad (5.21)$$

mit

$$\mathcal{M}[\varphi]_{yx}^{(2)} \equiv \mathcal{M}[\varphi]_{yx}^{(1)\dagger}. \quad (5.22)$$

Die Determinante ist jetzt gegeben durch

$$\det(\mathcal{M}^{(1)} \mathcal{M}^{(2)}) = \det(\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger) \quad (5.23)$$

und folglich positiv definit und als Wahrscheinlichkeitsmaß im Hybrid-Monte-Carlo einsetzbar. Die globale Symmetriegruppe wird hierdurch zu

$$\mathrm{SU}(2)_R \otimes \mathrm{SU}(2)_L \otimes \mathrm{U}(1)_{F_1} \otimes \mathrm{U}(1)_{F_2} \quad (5.24)$$

erweitert, und die beiden Flavours werden einzeln erhalten. Es gibt keine Wechselwirkung zwischen den zwei Flavours und daher auch keine weiteren physikalischen Effekte. Jedes Flavour liefert für sich allein betrachtet die Physik des Modells.

Eine mögliche Eichung dieser Wirkung wird in [MM94, Kap. 6.2.1] diskutiert.

Die Wirkung hat sieben Parameter $G_\psi, G_\chi, \mu_{\psi\chi}, \kappa, K, \lambda$ und r . Die Wahlfreiheit bei der Normierung der Fermionfelder kann man benutzen, um $\mu_{\psi\chi}$ festzulegen

$$\bar{\mu} = \mu_{\psi\chi} + 8Kr = 1. \quad (5.25)$$

Der Wilson-Parameter r wird konventionsgemäß auf 1 gesetzt. Eine weitere Reduzierung der Parameter hängt von der betrachteten physikalischen Situation ab.

Eine Festlegung der Spiegelfermion-Yukawa-Kopplung ist über das Golterman-Petcher Theorem[GP89] möglich. Dieses beruht auf einer Symmetrie der Wirkung unter einer globalen Shift-Transformation

$$\chi'_{0x} = \chi_{0x} + \varepsilon \quad \bar{\chi}'_{0x} = \bar{\chi}_{0x} + \bar{\varepsilon} \quad (5.26)$$

für $G_\chi = 0$. Die Null gibt hier an, daß es sich um die nackten Größen handelt. Die Transformationsparameter ε und $\bar{\varepsilon}$ sind Grassmann-Variablen (s. B.1).

Das Theorem garantiert in diesem Fall, daß das Spiegelfermion vom restlichen Teilchenspektrum entkoppelt. Dies bedeutet, daß die renormierte, physikalische Spiegelfermion-Yukawa-Kopplung $G_{R\chi}$ identisch Null ist. Dies folgt aus der Tatsache, daß die Dreipunkt-Vertexfunktion (s. Gl. 5.69) und auch alle höheren Vertexfunktionen verschwinden. Eine Entkopplung des χ -Feldes ist aber gerade eines der Ziele gewesen. Die explizite Einführung der zusätzlichen Spiegel-Freiheitsgrade erweist sich unter diesem Aspekt als sinnvoll.

Eine weitere Anwendung des Golterman-Petcher-Theorems ist die Entkopplung masseloser rechtshändiger Neutrinos des Gittermodells im Kontinuumsimes. Dies ist wichtig, da man im Standardmodell bisher davon ausgeht, daß diese Zustände nicht auftreten.

5.2 Szenario in der gebrochenen Phase

Die physikalisch interessante Phase ist die, in der das Skalarfeld einen nicht verschwindenden Vakuumerwartungswert hat. Dies ist nach gängiger Meinung die Phase, in der unser Universum sich zur Zeit befindet. Über den in der Einleitung besprochenen Higgs-Mechanismus haben die Materiefelder und die Eichfelder der schwachen Wechselwirkung ihre Masse erhalten.

Aufgrund der spontanen Symmetriebrechung wird die Symmetriegruppe von $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ auf $SU(2)_{L+R}$ reduziert, da jetzt im Yukawa-Teil die vier skalaren Freiheitsgrade unterschiedlich an die Fermionen koppeln und somit über die Transformation des Skalarfeldes nicht mehr die Chiralität erhalten werden kann. Die vier skalaren Freiheitsgrade teilen sich in dieser Phase in einen massiven Skalar σ und drei masselose Goldstonebosonen π_k , $k = 1, 2, 3$.

Bevor ich die Propagatoren in der gebrochenen Phase angebe, stelle ich noch einige Definitionen und Abkürzungen zusammen. Hier und im folgenden ist immer implizit $a = 1$ angenommen. Für die Gitterimpulse treten folgende Terme auf

$$\hat{p}_\mu = 2 \sin \frac{p_\mu}{2}, \quad \bar{p}_\mu = \sin p_\mu \quad (5.27)$$

mit

$$p_\mu = \frac{2\pi}{L_\mu} n_\mu, \quad n_\mu = 0, 1, \dots, L_\mu - 1 \quad (5.28)$$

bei gegebenem Volumen $L_1 \cdot L_2 \cdot L_3 \cdot L_4$. Die Impulse sind damit auf die erste Brillouin-Zone $-\pi \leq p_\mu < \pi$ beschränkt.

Je nach Situation gilt, immer bei endlichem Gitterabstand a ,

$$\int_p f(p) = \begin{cases} \frac{1}{L^3 \cdot T} \sum_p f(p) & \text{beim endlichen Gitter } L^3 \cdot T \\ \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p & \text{im unendlichen Volumen } L = T = \infty, \end{cases} \quad (5.29)$$

wobei hier $L = L_1 = L_2 = L_3$ und $T = L_4$ angenommen wurde.

5.2.1 Die Teilchen-Propagatoren

Bei den folgenden Ergebnissen beziehe ich mich auf [Wit92]. In den Gleichungen treten neben den Parametern des Gittermodells auch die dem Kontinuumsmodell entsprechenden Parameter auf. Diese sind durch einen Index 0 gekennzeichnet. Der Unterschied in den Parametern resultiert aus der Reskalierung der Felder, die man konventionsgemäß durchführt

$$\psi_0(x) \rightarrow \sqrt{2K} \psi_x \quad (5.30)$$

$$\chi_0(x) \rightarrow \sqrt{2K} \chi_x \quad (5.31)$$

$$\varphi_0(x) \rightarrow \sqrt{2\kappa} \varphi_x. \quad (5.32)$$

In der gebrochenen Phase teilen sich die vier skalaren Freiheitsgrade in zwei Felder auf. Zum einen das massive Higgs- oder σ -Feld und zum anderen die drei masselosen Goldstone-Bosonen $\vec{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \pi_3)$. Die freien Propagatoren für die skalaren Teilchen σ und $\vec{\pi}$ lauten

$$\Delta_\sigma(x, y) = \int_p e^{ip \cdot (x-y)} (\hat{p}^2 + m_0^2)^{-1} \quad (5.33)$$

und

$$\Delta_{\pi,kl}(x, y) = \delta_{kl} \int_p e^{ip \cdot (x-y)} (\hat{p}^2)^{-1}, \quad i, j = 1, 2, 3. \quad (5.34)$$

Für den freien Fermionpropagator erhält man

$$\Delta_\Psi(x, y) = \int_p e^{ip \cdot (x-y)} \tilde{\Delta}_\Psi(p) \quad (5.35)$$

mit

$$\tilde{\Delta}_\Psi(p) = \begin{pmatrix} i\gamma \cdot \bar{p} + G_{0\psi} s_0 & \mu_p \\ \mu_p & i\gamma \cdot \bar{p} + G_{0\psi} s_0 \end{pmatrix}. \quad (5.36)$$

Darin ist s_0 der Vakuumerwartungswert des Higgs-Feldes auf Baumgraphenniveau und

$$\mu_p = \mu_0 + \frac{r}{2} \hat{p}^2 \quad \text{mit} \quad \mu_0 = \frac{\mu_{\psi\chi}}{2K}. \quad (5.37)$$

Die Terme $G_{0\psi} s_0$ und $G_{0\chi} s_0$ geben die Massen des Fermions $\mu_{0\psi}$ und des Spiegelfermions $\mu_{0\chi}$ ebenfalls auf Baumgraphenniveau an. Die Matrix $\tilde{\Delta}_\Psi(p)$ hat die Dimension $16 \otimes 16$.

Aus Gl. 5.36 folgt durch Matrixinversion der Impulsraumpropagator

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}_\Psi^{-1}(p) = \tilde{D}(p)^{-1} & \begin{pmatrix} (\bar{p}^2 + \mu_{0\chi}^2) \mu_{0\psi} - \mu_p^2 \mu_{0\chi} & (\bar{p}^2 + \mu_p^2 - \mu_{0\psi} \mu_{0\chi}) \mu_p \\ (\bar{p}^2 + \mu_p^2 - \mu_{0\psi} \mu_{0\chi}) \mu_p & (\bar{p}^2 + \mu_{0\psi}^2) \mu_{0\chi} - \mu_p^2 \mu_{0\psi} \end{pmatrix} \\ & - i\gamma \cdot \bar{p} \tilde{D}(p)^{-1} \begin{pmatrix} \bar{p}^2 + \mu_p^2 + \mu_{0\chi}^2 & -(\mu_{0\psi} + \mu_{0\chi}) \mu_p \\ -(\mu_{0\psi} + \mu_{0\chi}) \mu_p & \bar{p}^2 + \mu_p^2 + \mu_{0\psi}^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.38)$$

mit der Determinante von Gl. 5.36

$$\tilde{D}(p) = (\vec{p}^2 + \mu_p^2 - \mu_{0\psi}\mu_{0\chi})^2 + \vec{p}^2 (\mu_{0\psi}^2 + \mu_{0\chi}^2). \quad (5.39)$$

5.2.2 Die renormierten Größen in der Theorie

In diesem Abschnitt werde ich die renormierten Größen in der gebrochenen Phase angeben. Darauf aufbauend folgen dann im nächsten Abschnitt die bei der Simulation eingesetzten Verfahren zur Messung der Größen. Alle mit Index R bezeichneten Größen sind renormierte, die mit Index 0 die nackten Größen.

Relationen für die Skalarfelder

Beim σ -Propagator muß der Einfluß der masselosen Goldstone-Bosonen, die sich durch Infrarotdivergenzen bemerkbar machen, berücksichtigt werden. Die Zweipunkt-Funktion für das σ -Teilchen lautet

$$Z_\sigma^{-1} \Gamma_{R\sigma}^{(2,0)}(p) = \Gamma_{0\sigma}^{(2,0)}(p) \quad (5.40)$$

$$= -Z_\sigma^{-1} (p^2 + m_{R\sigma}^2 + \mathcal{O}(p^4)), \quad \text{für } p \rightarrow 0. \quad (5.41)$$

Unter Benutzung der Renormierungsbedingungen

$$\Gamma_R^{(2,0)}(p) \Big|_{p=0} = -m_R^2 \quad (5.42)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial p^2} \Gamma_R^{(2,0)}(p) \Big|_{p=0} = -1 \quad (5.43)$$

folgt für die Renormierungskonstante Z_σ und die renormierte Masse $m_{R\sigma}$

$$Z_\sigma = -\frac{\partial^2}{\partial p^2} \Gamma_{0\sigma}^{(2,0)}(p) \Big|_{p=p_0} \quad (5.44)$$

$$m_{R\sigma}^2 = -Z_\sigma \Gamma_{0\sigma}^{(2,0)}(p) \Big|_{p=p_0}. \quad (5.45)$$

Aufgrund der Divergenzen in $\Gamma_{R\sigma}^{(2,0)}(p)$ bei $p = 0$ definieren wir Z_σ und $m_{R\sigma}$ beim kleinsten möglichen Gitterimpuls $p_0 = \frac{2\pi}{T}$.

Die physikalische σ -Masse ist durch den Pol der Zweipunkt-Funktion in der komplexen Ebene gegeben

$$\Gamma_{0\sigma}^{(2,0)}(\tilde{p}) = 0, \quad \tilde{p} = (0, 0, 0, i m_{\sigma;phys}). \quad (5.46)$$

In der Nähe des kritischen Punktes sollten die beiden Massen übereinstimmen. Für die praktische Auswertung in numerischen Simulationen ist Gl. 5.41 vorzuziehen. Im Rahmen der Störungstheorie kommt auch Gl. 5.46 zur Anwendung.

Die renormierte $\vec{\pi}$ -Zweipunkt-Funktion ist gegeben durch

$$Z_\pi^{-1} \Gamma_{R\pi,ij}^{(2,0)}(p) = \Gamma_{0\pi,ij}^{(2,0)}(p) \quad (5.47)$$

$$= -Z_\pi^{-1} \delta_{ij} (p^2 + \mathcal{O}(p^4)), \quad \text{für } p \rightarrow 0 \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (5.48)$$

und Z_π ergibt sich demnach zu

$$Z_\pi = -\frac{\partial^2}{\partial \hat{p}^2} \Gamma_{0\pi,ij}^{(2,0)}(p) \Big|_{p=0} = -\frac{1}{8} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \Gamma_{0\pi,ij}^{(2,0)}(p) \Big|_{p=0}. \quad (5.49)$$

Hier bereitet die Definition bei $p = 0$ keine Probleme.

Der renormierte Vakuumerwartungswert des Higgs-Feldes ist mit der Renormierungskonstante Z_π definiert als

$$v_R = \frac{v_0}{\sqrt{Z_\pi}} \quad \text{mit} \quad v_0 = s_0 + \langle \sigma_0 \rangle. \quad (5.50)$$

s_0 ist der bereits genannte Vakuumerwartungswert auf Baumgraphenniveau und $\langle \sigma_0 \rangle$ faßt die höheren Beiträge zusammen.

Für die quartische Selbstkopplung des Skalarfeldes lautet die Renormierungsbedingung

$$g_R = -\Gamma_R^{(4,0)}(0). \quad (5.51)$$

Dies kann gleichzeitig als Definition von g_R genommen werden. Eine andere Definition ist

$$g_R = \frac{3 m_{R\sigma}}{v_R^2}. \quad (5.52)$$

Die Gleichung ist analog zur entsprechenden Relation der nackten Größen auf Baumgraphenniveau gebildet und gilt in 1. Ordnung Störungstheorie. Für die praktische Durchführung ist die zweite Version besser geeignet. Ich werde mich daher im folgenden immer auf die Definition Gl. 5.52 beziehen.

Relationen für die Fermionfelder

Wie aus Gl. 5.38 ersichtlich ist, hat der Fermionpropagator für kleine Impulse die allgemeine Struktur

$$-\Gamma_{0,\alpha,\beta}^{(0,2)}(p) = M_0 + i\gamma \cdot p N_0 + \mathcal{O}(p^2), \quad p \rightarrow 0, \quad \alpha, \beta = \psi, \chi \quad (5.53)$$

mit den Matrizen

$$M_0 = \begin{pmatrix} m_{\psi\psi} & m \\ m & m_{\chi\chi} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad N_0 = \begin{pmatrix} n_{\psi\psi} & n \\ n & n_{\chi\chi} \end{pmatrix}. \quad (5.54)$$

Die Wellenfunktionsrenormierung für die Fermionfelder muß die Matrix N_0 in die Einheitsmatrix transformieren

$$\mathbf{1} = Z_\Psi^{1/2 T} N_0 Z_\Psi^{1/2}. \quad (5.55)$$

Dazu sind zwei Transformationen nötig. Zunächst wird N_0 auf Diagonalgestalt gebracht. Anschließend muß diese Matrix noch in die Einheitsmatrix transformiert werden.

$$Z_\Psi^{1/2} = \begin{pmatrix} \cos \zeta & -\sin \zeta \\ \sin \zeta & \cos \zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{Z_\psi} & 0 \\ 0 & \sqrt{Z_\chi} \end{pmatrix}. \quad (5.56)$$

Zusammen mit Gl. 5.55 erhält man

$$\sin 2\zeta = \text{sign}(n_{\psi\psi} - n_{\chi\chi}) \frac{2n}{\sqrt{4n^2 + (n_{\psi\psi} - n_{\chi\chi})^2}} \quad (5.57)$$

sowie

$$Z_\psi^{-1} = \frac{1}{2} \left[n_{\psi\psi} + n_{\chi\chi} + \text{sign}(n_{\psi\psi} - n_{\chi\chi}) \sqrt{4n^2 + (n_{\psi\psi} - n_{\chi\chi})^2} \right] \quad (5.58)$$

$$Z_\chi^{-1} = \frac{1}{2} \left[n_{\psi\psi} + n_{\chi\chi} - \text{sign}(n_{\psi\psi} - n_{\chi\chi}) \sqrt{4n^2 + (n_{\psi\psi} - n_{\chi\chi})^2} \right]. \quad (5.59)$$

Der renormierte Propagator ergibt sich damit zu

$$\Gamma_{R,\alpha\beta}^{(0,2)}(p) = Z_\Psi^{1/2 T} \Gamma_{0,\alpha,\beta}^{(0,2)}(p) Z_\Psi^{1/2}, \quad (5.60)$$

woraus direkt die renormierte Massenmatrix

$$M_R = \begin{pmatrix} \mu_{R\psi} & \mu_R \\ \mu_R & \mu_{R\chi} \end{pmatrix} \quad (5.61)$$

mit den Einträgen

$$\mu_R = \sqrt{Z_\psi Z_\chi} \left[m \cos 2\zeta - \frac{m_{\psi\psi} - m_{\chi\chi}}{2} \sin 2\zeta \right] \quad (5.62)$$

$$\mu_{R\psi} = Z_\psi \left[\frac{m_{\psi\psi} + m_{\chi\chi}}{2} + \frac{m_{\psi\psi} - m_{\chi\chi}}{2} \cos 2\zeta + m \sin 2\zeta \right] \quad (5.63)$$

$$\mu_{R\chi} = Z_\chi \left[\frac{m_{\psi\psi} + m_{\chi\chi}}{2} - \frac{m_{\psi\psi} - m_{\chi\chi}}{2} \cos 2\zeta + m \sin 2\zeta \right] \quad (5.64)$$

folgt. Die Diagonaleinträge der renormierten Massenmatrix können zusammen mit dem renormierten Vakuumerwartungswert Gl. 5.50 benutzt werden, um die Yukawa-Kopplungen der Fermionen und Spiegelfermionen zu definieren

$$\mu_{R\psi} = G_{R\psi} v_R \quad \text{und} \quad \mu_{R\chi} = G_{R\chi} v_R. \quad (5.65)$$

Auch die Massenmatrix kann mittels einer $SO(2)$ -Transformation analog zur Transformation von N_0 auf Diagonalgestalt gebracht werden. Der Mischungswinkel ist gegeben durch

$$\sin \alpha_R = \frac{\sqrt{2} \mu_R}{\sqrt{v_R^2 (G_{R\psi} - G_{R\chi})^2 + 4 \mu_R^2 + v_R |G_{R\psi} - G_{R\chi}| \sqrt{v_R^2 (G_{R\psi} - G_{R\chi})^2 + 4 \mu_R^2}}}. \quad (5.66)$$

Die beiden so definierten Massen lauten

$$\mu_{1R} = \frac{1}{2} \left[v_R (G_{R\psi} - G_{R\chi}) + \text{sign}(G_{R\psi} - G_{R\chi}) \sqrt{v_R^2 (G_{R\psi} - G_{R\chi})^2 + 4 \mu_R^2} \right] \quad (5.67)$$

$$\mu_{2R} = \frac{1}{2} \left[v_R (G_{R\psi} - G_{R\chi}) - \text{sign}(G_{R\psi} - G_{R\chi}) \sqrt{v_R^2 (G_{R\psi} - G_{R\chi})^2 + 4 \mu_R^2} \right]. \quad (5.68)$$

Alternativ zu Gl. 5.65 kann man die Yukawa-Kopplungen auch über die Dreipunkt-Funktion definieren

$$-\Gamma_{R,\pi_j,\alpha\beta}^{(1,2)}(p) \Big|_{p=p_0} = \begin{pmatrix} G_{R\psi}^{(3)} \Gamma_j & 0 \\ 0 & G_{R\chi}^{(3)} \Gamma_j^\dagger \end{pmatrix}, \quad (5.69)$$

dabei ist die renormierte Dreipunkt-Funktion durch

$$\Gamma_{R,\pi_j,\alpha\beta}^{(1,2)}(p) = Z_\pi^{1/2} Z_\Psi^{1/2 T} \Gamma_{R,\pi_j,\alpha\beta}^{(1,2)}(p) Z_\Psi^{1/2} \quad (5.70)$$

gegeben. Die Matrizen Γ_j sind definiert als

$$\Gamma_j = -i\gamma_5 \tau_j, \quad j = 1, 2, 3. \quad (5.71)$$

Die Benutzung der π -Felder hat gegenüber dem σ -Feld den Vorteil, daß man keine Vakuumerwartungswerte subtrahieren muß, was in numerischen Simulationen eine Fehlerquelle sein kann.

Im Rahmen von Ein-Schleifen-Rechnungen kann man bei Impuls $p = 0$ zeigen, daß die beiden Definitionen der Yukawa-Kopplungen übereinstimmen. Bei der Auswertung der Daten werde ich auf diesen Punkt zurückkommen.

Die Golterman-Petcher Symmetrie, Gl. 5.26, garantierte, daß die renormierte Yukawa-Kopplung $G_{R\chi}$ für $G_{0\chi} = 0$ verschwindet. Dadurch ergeben sich bei der Behandlung des Fermionpropagators in diesem Spezialfall einige Vereinfachungen. Die beiden Matrizen in Gl. 5.53 vereinfachen sich zu

$$M_0 = \begin{pmatrix} m_{\psi\psi} & \mu_0 \\ \mu_0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad N_0 = \begin{pmatrix} n_{\psi\psi} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.72)$$

mit μ_0 aus Gl. 5.37. Da N_0 diagonal ist, entfällt die Transformation mit der Drehmatrix, d.h. $\zeta = 0$. Die Renormierungskonstanten ergeben sich somit sofort zu

$$Z_\psi = \frac{1}{n_{\psi\psi}} \quad \text{und} \quad Z_\chi = 1, \quad (5.73)$$

und die renormierte Massenmatrix lautet in diesem Fall

$$M_R = \begin{pmatrix} Z_\psi m_{\psi\psi} & \sqrt{Z_\psi} \mu_0 \\ \sqrt{Z_\psi} \mu_0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu_{R\psi} & \mu_R \\ \mu_R & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.74)$$

Die Eigenwerte ergeben sich zu

$$\mu_{1R} = \frac{1}{2} \left[\mu_{R\psi}^2 + \sqrt{\mu_{R\psi}^2 - 4\mu_R^2} \right] \quad (5.75)$$

$$\mu_{2R} = \frac{1}{2} \left[\mu_{R\psi}^2 - \sqrt{\mu_{R\psi}^2 - 4\mu_R^2} \right]. \quad (5.76)$$

Die Mischmasse μ_R ist hier direkt proportional μ_0 . Setzt man zusätzlich zu $G_\chi = 0$ auch $\mu_0 = 0$, so hat man eine exakte Entkopplung von Fermion und Spiegelfermion. Über Gl. 5.25 wird der fermionische Hoppingparameter dann auf $K = \frac{1}{8}$ festgelegt.

5.2.3 Die renormierten Größen in der Praxis

Bei der Messung der im vorigen Abschnitt behandelten Größen sind einige Punkte zu beachten, die ich in diesem Abschnitt anführen werde. Im folgenden lege ich ein Gitter $V = L^3 \cdot T$ zugrunde.

Im endlichen Volumen gibt es keine spontane Symmetriebrechung. Dies hat zur Konsequenz, daß der Vakuumerwartungswert des φ -Feldes in seinem Wertebereich S^3 keine feste Richtung hält, sondern wandert. Dies bezeichnet man auch als „rotational diffusion“. Ein Konfigurationsmittel über eine hinreichend lange Meßreihe würde einen verschwindenden Vakuumerwartungswert liefern.

Eine Möglichkeit besteht darin, ein kleines externes Feld einzuführen. Dies hat aber den Nachteil, daß man mit der Feldstärke einen weiteren Parameter erhält, den man einstellen muß. Zur Kontrolle müßte man bei mindestens zwei Werten der Magnetfeldstärke messen, um den Einfluß des externen Feldes abzuschätzen.

Im Isingfall betrachtet man zur Messung der Magnetisierung den Absolutwert der Magnetisierung der einzelnen Konfigurationen. In unserem Fall kann man einen analogen Ansatz verfolgen. Dazu nutzt man die Symmetrie des Modells aus, indem man eine Richtung im \mathbf{R}^4 auszeichnet, in die man den Vakuumerwartungswert der einzelnen Konfigurationen mittels einer Symmetrietransformation aus $O(4)$ rotiert[HJL⁺87].

Die mittlere Magnetisierung bestimmt sich aus

$$|\varphi| = \sqrt{\sum_{i=1}^4 \phi_i^2}. \quad (5.77)$$

Der Vektor der Mittelwerte

$$\phi_i = \frac{1}{V} \sum_x \phi_{i,x} \quad (5.78)$$

legt eine Richtung in $O(4)$ fest. Unsere fest gewählte Richtung liegt entlang der ϕ_4 -Achse. Wir suchen also eine Transformation

$$\varphi'_x = U_L \varphi_x U_R^\dagger, \quad (5.79)$$

so daß

$$|\phi_4| = |\varphi|. \quad (5.80)$$

Damit ist der skalare Freiheitsgrad ϕ_4 mit dem σ -Teilchen verknüpft, da nur dieses einen nicht verschwindenden Vakuumerwartungswert hat.

Für U_R kann man die Einheitsmatrix wählen. Dann muß bis auf ein Vorzeichen gelten

$$\begin{aligned} \varphi' &= \frac{1}{V} \sum_x \varphi'_x \\ &= \begin{pmatrix} \phi_4 & 0 \\ 0 & \phi_4 \end{pmatrix} = U_L \begin{pmatrix} \phi_4 + i\phi_3 & \phi_2 + i\phi_1 \\ -\phi_2 + i\phi_1 & \phi_4 - i\phi_3 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (5.81)$$

Mit der Parametrisierung

$$\begin{aligned} \phi_4 &= |\varphi| \cos \alpha \cos \beta & \phi_3 &= |\varphi| \cos \alpha \sin \beta \\ \phi_2 &= |\varphi| \sin \alpha \cos \theta & \phi_1 &= |\varphi| \sin \alpha \sin \theta \end{aligned} \quad (5.82)$$

erhält man hieraus

$$U_L = \begin{pmatrix} e^{-i\beta} \cos \alpha & -e^{i\theta} \sin \alpha \\ e^{i\theta} \sin \alpha & e^{i\beta} \cos \alpha \end{pmatrix}. \quad (5.83)$$

Die Winkel α, β und θ bzw. ihr Sinus und Cosinus ergeben sich aus Gl. 5.82 und den auf der Konfiguration gemessenen Wert für ϕ_i , $i = 1, 2, 3, 4$.

Die durch das Skalarfeld festgelegte Transformation muß auch auf den Fermionfeldern durchgeführt werden. Da $U_R = \mathbf{1}$ ist, reicht es, ψ_L und χ_R gemäß

$$\psi'_L = U_L \psi_L \quad \chi'_R = U_L \chi_R \quad (5.84)$$

zu transformieren. Die Matrix U_L wirkt dabei im $SU(2)$ Isospin-Raum.

Die Festlegung des Vakuumerwartungswerts in ϕ_4 -Richtung liefert gleichzeitig die Aufteilung in longitudinale und transversale Freiheitsgrade, wobei letztere die Goldstone-Bosonen darstellen. Bei der Berechnung der Zeitscheibenkorrelationsfunktion des σ -Teilchens muß der Vakuumerwartungswert subtrahiert werden. Dazu werden zwei Methoden eingesetzt

$$\tilde{C}_L(t) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{x}} \left\{ \langle \phi_{L\mathbf{x}t} \phi_{L\mathbf{x}0} \rangle - v^2 \right\}, \quad v = \langle \phi_4 \rangle = \langle \varphi \rangle \quad (5.85)$$

und

$$C_L(t) = \frac{1}{L^3} \sum_{\mathbf{x}} \left\{ \langle \phi_{L\mathbf{x}t} \phi_{L\mathbf{x}0} \rangle - \langle \phi_{L\mathbf{x}t} \rangle \langle \phi_{L\mathbf{x}0} \rangle \right\}. \quad (5.86)$$

Die erste Version wurde in den früheren Arbeiten benutzt. Auf den größeren Gittern, die in dieser Arbeit untersucht werden, trat bei Parameterwerten, die etwas weiter vom kritischen Punkt entfernt liegen, der Effekt auf, daß $\tilde{C}_L(t)$ für große t wieder einen Anstieg hat. Dieser war deutlich größer als die Fehlerbalken es zugelassen hätten. Die zweite Form geht auf einen Hinweis von K. JANSEN zurück, der ähnliche Effekte auf großen Gittern in der reinen φ^4 -Theorie beobachtet hat, und behebt diesen Fehler. Außerdem hat die zweite Form im Gegensatz zur ersten den Vorteil, Bias-frei zu sein [BB89].

$G_\psi = 0.3$		$G_\psi = 0.45$	
$\kappa = 0.26$	$\kappa = 0.27$	$\kappa = 0.203$	$\kappa = 0.21$
0.0015(2)	0.0029(4)	0.0015(2)	0.0023(3)

Tabelle 5.1: Standardabweichung der σ -Zeitscheibenerwartungswerte. $\kappa = 0.26$ und $\kappa = 0.203$ liegen jeweils dichter am Wert für $\kappa_{cr}(G_\psi)$.

Für Punkte nahe dem kritischen Punkt trat dieser Effekt nicht auf oder war zumindest im Rahmen der statistischen Fehler nicht aufzulösen. Dies legt nahe, daß die Korrelationslänge hier einen Einfluß hat. In der Tat sind die Schwankungen in den Zeitscheibenerwartungswerten größer, je weiter man vom kritischen Punkt entfernt ist, wie Tabelle 5.1 zeigt. Darum führt die Subtraktion eines über alle Zeitscheiben gemittelten Vakuumernwartungswerts offensichtlich zu den beschriebenen Auswirkungen.

Erfahrungen mit den beiden Methoden im SU(2)-Super-Yang-Mills-Modell zeigen, daß auch bei kleinen Gittern, wie $4^3 \cdot 8$, der Bias groß sein kann, wenn das Signal wie bei Gluebällen sehr klein gegenüber dem Vakuumernwartungswert ist.

Beim transversalen $\vec{\pi}$ -Propagator hat man diese Probleme nicht, da der Vakuumernwartungswert des $\vec{\pi}$ -Feldes verschwindet. Er wird daher aus

$$C_T(t) = \frac{1}{L^3} \sum_{j=1}^3 \sum_{\mathbf{x}} \left\{ \langle \phi_{Tj,\mathbf{x}t} \phi_{Tj,\mathbf{x}0} \rangle \right\} \quad (5.87)$$

bestimmt.

Die physikalische σ -Masse m_σ wird aus einem Fit an

$$C_L(t) = a \cosh \left(m_\sigma \left(t - \frac{T}{2} \right) \right) + b, \quad t \gg 0 \quad (5.88)$$

bestimmt. Der Offset b ist ein Finite- T -Effekt und verschwindet mit e^{-T} [MW87].

Die skalaren Renormierungskonstanten Z_L und Z_T werden aus dem Impulsraumpropagator berechnet. Dabei muß bei Z_T mehr Wert auf die Auswertung gelegt werden, da

dieser Wert in diverse andere renormierte Größen eingeht. Z_L kann, wie oben bereits gesagt, nicht bei $p = 0$ ausgewertet werden, darum nehmen wir den kleinsten möglichen Gitterimpuls. Der Impulsraum-Propagator, Gl. 5.41, ergibt sich zu

$$-\Gamma_{0\sigma}^{(2,0)}(p) = G_L^{-1}(p) \quad (5.89)$$

$$G_L(p) = \sum_t \cos(pt) C_L(t), \quad p = \frac{2\pi k}{T}, \quad k = 1, \dots, T, \quad (5.90)$$

damit ist unter Benutzung von Gl. 5.41

$$Z_L = \left(m_{R\sigma}^2 + 4 \sin^2 \frac{\pi}{T} \right) G_L \left(\frac{2\pi}{T} \right). \quad (5.91)$$

Darin wird $m_{R\sigma} \approx m_{\sigma;phys}$ aus dem Zeitscheibenfit Gl. 5.88 genommen. $G_T(p) = G_\pi(p)$ erhält man analog zu Gl. 5.90 aus $C_T(t)$. Zur Bestimmung von Z_T wurde hier aber ein Least-Square-Fit an $-\Gamma_{0\pi}^{(2,0)}(p)$ auf den vier kleinsten Gitterimpulsen durchgeführt. Die Fit-Funktion habe ich linear in \hat{p}^2 angesetzt. Z_T ergibt sich dann als Inverses der Steigung. Auf dem Gitter ist im allgemeinen auch $m_{R\pi} \neq 0$ und folgt hier als Wurzel des Produkts aus y-Achsenabschnitt und Z_T .

Die renormierte skalare Selbstkopplung und der renormierte Vakuumerwartungswert werden unter Benutzung von $Z_T = Z_\pi$ nach Gl. 5.52 und Gl. 5.50 bestimmt.

Bei der Auswertung der fermionischen Propagatoren ist der inverse Impulsraum-Propagator nützlich, da sich dieser mittels Fouriertransformation aus dem leicht zu bestimmenden Ortsraum-Propagator ermitteln läßt. Aus der Form von Gl. 5.36 ergibt sich der Ansatz

$$\tilde{\Delta}_\Psi(p) = A - i\gamma \cdot p B + \mathcal{O}(p^2), \quad p \rightarrow 0. \quad (5.92)$$

Setzt man in diese Gleichung den kleinsten Gitterimpuls ein, so kann man die Matrizen A und B bestimmen

$$A = \frac{1}{2} \left\{ \tilde{\Delta}_\Psi(p_{min}) + \tilde{\Delta}_\Psi(-p_{min}) \right\} \quad (5.93)$$

$$\gamma_4 \bar{p}_{min} B = \frac{i}{2} \left\{ \tilde{\Delta}_\Psi(p_{min}) - \tilde{\Delta}_\Psi(-p_{min}) \right\} \quad (5.94)$$

und

$$\tilde{\Delta}_\Psi(p) = \sum_x e^{-ip \cdot (y-x)} \Delta_{\Psi;yx}. \quad (5.95)$$

$\Delta_{\Psi;yx}$ ist dabei eine $16 \otimes 16$ Matrix, die sich aus den Erwartungswerten der Matrix $< \bar{\Psi}_y \bar{\Psi}_x >$ bestimmt. Bei der praktischen Berechnung wird zunächst über die Zeitscheiben gemittelt, was $\Delta_\Psi(t)$ ergibt und davon die Fouriertransformierte bestimmt. Da für die Fermionfelder antiperiodische Randbedingungen in Zeitrichtung benutzt werden, ist $p_{min} = \frac{\pi}{T}$ und damit einen Faktor zwei kleiner als bei den Skalarfeldern.

Die Matrizen M und N in Gl. 5.53 erhält man durch Invertierung von

$$\tilde{\Delta}_\Psi(p_{min}) = A - i\gamma \cdot \bar{p}_{min} B. \quad (5.96)$$

Um Beiträge bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\bar{p}_{min}^2)$ zu berücksichtigen, wird das Schema

$$M = (A + \bar{p}_{min}^2 B A^{-1} B)^{-1} \quad (5.97)$$

$$N = A^{-1} B M \quad (5.98)$$

benutzt. Auch hier kann man wieder die durch die Golterman-Petcher-Symmetrie gegebenen Einschränkungen an den Propagator ausnutzen und einzelne Matrixelemente auf ihren theoretischen Wert fixieren. Dieses Vorgehen sollte den Fehler bei der Bestimmung der Größen verringern. Eine ausführliche Diskussion dazu findet man in [Wit92, S.78].

Die Auswertung der Yukawa-Kopplungen erfolgt zum einen über die Baumgraphen-niveau-Relation Gl. 5.65 und zum anderen über die Dreipunkt-Funktion Gl. 5.69. Für letztere ist folgender Ausdruck zu berechnen

$$\begin{pmatrix} G_{R\psi}^{(3)} & 0 \\ 0 & G_{R\chi}^{(3)} \end{pmatrix} \delta_{k,q-p} = \frac{\hat{k}_4^2}{24 \sqrt{Z_T}} \sum_{j=1}^3 \text{Tr}_{\text{SU}(2)} \text{Tr}_{\text{Dirac}} \left\{ \Gamma_j \Gamma_{R\Psi}^{(0,2)}(p_4) Z_\Psi^{-1/2} G_j^{(c)} Z_\Psi^{-1/2 T} \Gamma_{R\Psi}^{(0,2)}(q_4) \right\}. \quad (5.99)$$

Die Matrizen Γ_j sind in Gl. 5.71 definiert worden.

$$\Gamma_{R\Psi}^{(0,2)}(p_4) \approx M_R + i\gamma_4 \cdot \bar{p}_4 \quad (5.100)$$

ist die fermionische Zweipunkt-Vertexfunktion unter Vernachlässigung höherer Terme. Schließlich ist

$$G_j^{(c)} = \frac{1}{V} \sum_{x,y,z} e^{-ik_4 x_4} e^{-ip_4 y_4} e^{-iq_4 z_4} \langle \pi_j(x) \Psi(y) \bar{\Psi}(z) \rangle_c \quad (5.101)$$

der verbundene Teil der $\pi_j - \Psi - \bar{\Psi}$ Dreipunkt-Vertexfunktion. Aufgrund der masselosen Goldstone-Bosonen in der gebrochenen Phase ist auch hier eine Auswertung bei $p = 0$ nicht möglich. Darum werden in der Simulation die Impulse auf

$$k_4 = \frac{2\pi}{T}, \quad p_4 = \frac{-\pi}{T} \quad \text{und} \quad q_4 = \frac{\pi}{T} \quad (5.102)$$

festgelegt.

5.2.4 Ein-Schleifen-Verbesserung des π -Propagators

Die Form des transversalen skalaren Propagators Gl. 5.48 entspricht dem Baumgraphen-niveau. Bei stärkeren Yukawa-Kopplungen kommt es zu deutlichen Abweichungen von dieser Form. Um diese Abweichungen besser beschreiben zu können, hat CH. FRICK im Rahmen seiner Dissertation die Korrekturen zum Propagator in Ein-Schleifen-Ordnung bestimmt[Fri93]. Die so erhaltene verbesserte Form stimmt mit den Daten auch bei größeren Kopplungen sehr gut überein und konnte auch Details des numerisch bestimmten, nicht-perturbativen Propagators reproduzieren. Diese Analyse wurde in einem Modell mit reduzierten Untergitterfermionen durchgeführt. Für unser Modell hat B. NOTTELMANN die Ein-Schleifen-Korrekturen bestimmt[Not95].

Der Ansatz für den $\vec{\pi}$ -Propagator auf dem Gitter lautet in dieser Näherung

$$-\Gamma_{0\pi}^{(2,0)}(p) = Z_{\pi,L}^{-1} (\hat{p}^2 + m_{R\pi,L}^2 + \Sigma_{R\pi,L}(p)) . \quad (5.103)$$

Der Selbstenergieanteil hängt von den Parametern $g_R, m_\sigma, G_{R\psi}^{(3)}, v_R$ und μ_R ab. Sollen die Renormierungsbedingungen, Gl. 5.42 und Gl. 5.43, erhalten bleiben, so folgt

$$\Sigma_{R\pi,\infty}(p) \big|_{p=0} = 0, \quad (5.104)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial \hat{p}^2} \Sigma_{R\pi,\infty}(p) \big|_{p=0} = 0, \quad (5.105)$$

wobei die eingehenden Parameter durch ihre Werte im unendlichen Volumen bestimmt sind. Die endliche π -Masse ist ein Finite-Size-Effekt und verschwindet für $V \rightarrow \infty$.

Die Selbstenergie besteht aus einem bosonischen und einem fermionischen Anteil

$$\Sigma'_{R\pi,L}(p) = g_{R,L} \frac{\tilde{m}_{3\sigma,L}^4}{m_{\sigma,L}^2} I_{\pi,B}(p) + 8N_f (G_{R\psi,L}^{(3)})^2 I_{\pi,F}(p) \quad (5.106)$$

$$I_{\pi,B}(p) = \int_q \left[((\overline{p+q})^2 + \tilde{m}_{\sigma,L}^2) \hat{q} \right]^{-1} \quad (5.107)$$

$$I_{\pi,F}(p) = \int_q \frac{\mu_{R\psi,L}^2 (\overline{p+q})^2 \bar{q}^2 + \overline{p+q} \bar{q} ((\overline{p+q})^2 + \mu_{Rp+q}^2) (\bar{q}^2 + \mu_{Rq}^2)}{[(\overline{p+q})^2 + \mu_{Rp+q}^2 + \mu_{R\psi,L}^2 (\overline{p+q})^2][(\bar{q}^2 + \mu_{Rq}^2)^2 + \mu_{R\psi,L}^2 \bar{q}^2]} \quad (5.108)$$

mit den Bezeichnungen

$$\mu_{Rq} = \frac{1}{2} \hat{q}^2 \quad \text{und} \quad \tilde{m}_{\sigma,L} = 2 \sinh \frac{m_\sigma}{2}. \quad (5.109)$$

Der Strich am Σ gibt an, daß dies noch die unnormierte Funktion ist, die aber von den renormierten Größen abhängt. Man kann aus dieser unter Berücksichtigung der Renormierungsbedingungen die normierte Selbstenergie konstruieren

$$\Sigma_{R\pi,L}(p) = \Sigma'_{R\pi,L}(p) - \Sigma'_{R\pi,\infty}(p) \big|_{p=0} - \hat{p}^2 \frac{\partial^2}{\partial \hat{p}^2} \Sigma'_{R\pi,\infty}(p) \big|_{p=0}. \quad (5.110)$$

Bei den Anteilen mit Index ∞ sind wieder die Werte der Parameter im unendlichen Volumen einzusetzen.

Mit der so definierten Selbstenergie kann der numerisch bestimmte Propagator jetzt an die Form Gl. 5.103 angepaßt werden. Die Zahl der freien Parameter ist mit sieben für praktische Zwecke jedoch viel zu groß. Auf Baumgraphenniveau ergibt sich g_R aus m_σ und v_R . Da die Bestimmung in der Simulation nur über diese Relation erfolgt, kann g_R in dieser Approximation eliminiert werden. v_R ergibt sich nach Gl. 5.50 aus v_0 und Z_π . Den Faktor Z_π^{-1} kann man herausziehen, und es bleibt v_0 übrig. Die Yukawa-Kopplung in Σ ist die durch die Dreipunkt-Funktion definierte Kopplung. In Ein-Schleifen-Ordnung stimmt diese bei äußerem Impuls $p = 0$ mit der durch die Baumgraphen-Relation, Gl. 5.65, definierten überein. Die numerischen Ergebnisse bestätigen dieses Ergebnis, so daß man $G_{R\psi}^{(3)}$ durch $G_{R\psi}$ ersetzen kann. $G_{R\psi}$ ist aber wiederum über Gl. 5.65 mit v_R bzw. v_0 und $\mu_{R\psi}$ verknüpft. Faßt man alle diese Relationen zusammen, so lautet der minimale Satz an Parametern

$$m_\sigma, \quad \mu_{R\psi} \quad \text{und} \quad v_0. \quad (5.111)$$

Als Ergebnis des Fits erhält man

$$Z_\pi \quad \text{und} \quad m_{R\pi}. \quad (5.112)$$

Je nach Struktur des in der Simulation gemessenen Propagators kann man die Zahl der Parameter erhöhen, um eventuell vorhandene Feinheiten zu modellieren. Die in Gl. 5.111 angegebenen Parameter haben den Vorteil, daß sie in der Simulation aus unabhängigen Messungen hervorgehen und darüberhinaus v_0 und $\mu_{R\psi}$ nur sehr geringe Schwankungen zeigen. Eine genaue Bestimmung von m_σ ist etwas schwieriger, aber mit der erreichten Statistik lassen sich auch für diese Größe verlässliche Werte mit geringem Fehler angeben.

5.3 Die β -Funktion

Die β -Funktion beschreibt den Fluß der Kopplungen in Abhängigkeit von einer Renormierungsskala μ . Die Kenntnis der vollen β -Funktion liefert dadurch Aussagen über die Kopplungen im Kontinuumslimit und somit über die Kontinuumstheorie. Insbesondere die Fixpunkte der β -Funktion sind hierfür wichtig.

Die Studien von M. LÜSCHER und P. WEISZ [LW87, LW88, LW89] in der reinen φ^4 -Theorie haben gezeigt, daß es in $D = 4$ Dimensionen nur einen Fixpunkt bei verschwindender Selbstkopplung des Skalarfeldes gibt, d.h. $g_R^{cont} = 0$. Damit ist die Theorie aber nicht mehr wechselwirkend und kann z.B. keinen Vakuum Erwartungswert ausbilden.

In dieser Arbeit soll der Einfluß der Fermionen auf den skalaren Sektor untersucht werden. Die Frage ist, ob eine hinreichend starke Yukawa-Kopplung die Trivialität der reinen φ^4 -Theorie beheben kann. Dabei ist zu berücksichtigen, daß im Standardmodell selbst das t -Quark nach den letzten Messungen eine Yukawa-Kopplung $0.5 < G_t < 1$ hat. Somit ist der Bereich mittlerer Kopplungen von besonderem Interesse.

Im allgemeinen ist die volle β -Funktion nicht bekannt. Dies ist auch in unserem Modell der Fall. Störungstheoretisch kann man die Funktion Ordnung für Ordnung in einer Schleifenentwicklung angeben. Für unser Modell ist diese bis zur zweiten Ordnung durchgeführt worden [Mon, Mon87, LW92]. Dabei zeigt sich, daß die β -Funktion in erster Ordnung nur den trivialen Gaußschen Fixpunkt aufweist, während in der Zwei-Schleifen-Ordnung ein nicht-trivialer Fixpunkt auftritt. Dieser Fixpunkt liegt bei $(G_{R\psi}, g_R) \approx (5.21486, 81.1686)$ und damit sicherlich außerhalb des Gültigkeitsbereiches der Störungstheorie. Eine Klärung zwischen den beiden sich hieraus ergebenden Szenarien soll in dieser Arbeit mit Hilfe der Monte-Carlo-Simulation erreicht werden.

Wie in der Einleitung zu diesem Kapitel erklärt, ist im Fall des trivialen Szenarios ein Kontinuumslimites nicht möglich, ohne die physikalische Modellklasse zu verlassen. Da der Cutoff Λ nicht entfernt werden kann, sind alle renormierten Kopplungen Funktionen von Λ und gehen für $\Lambda \rightarrow \infty$ gegen Null. D.h. zu gegebenem Cutoff gibt es immer eine obere Grenze für die erlaubten physikalischen Werte der Kopplungen.

Neben dieser oberen Grenze gibt es in Higgs-Yukawa-Modellen auch eine untere Schranke, die Vakuum-Stabilitäts-Schranke für g_R [DPS85, LMWM91]. Sie ist definiert als Menge aller Kopplungen $\{g_R(\mu)\}$, die bei festem Cutoff Λ , bei Integration mittels der β -Funktion von der Skala μ zur Skala Λ den Wert $g_R(\Lambda) = 0$ haben. Der Wert von g_R bei der Skala Λ entspricht dem nackten Wert g_0 . Die Aussage ist damit gleichbedeutend mit der Aussage, daß die nackten Kopplungen positiv sein müssen.

Im $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -Modell gibt es drei Kopplungen: die Selbstkopplung des Skalarfeldes und die beiden Yukawa-Kopplungen. Die allgemeine Form der β -Funktionen lautet

$$\beta_{g_R} = m_R \frac{\partial g_R}{\partial m_R} + \mu_R \frac{\partial g_R}{\partial \mu_R} \quad (5.113)$$

$$\beta_{G_{R\psi}} = m_R \frac{\partial G_{R\psi}}{\partial m_R} + \mu_R \frac{\partial G_{R\psi}}{\partial \mu_R}. \quad (5.114)$$

m_R ist renormierte skalare Masse, in der gebrochenen Phase die des σ -Teilchens, und μ_R ist die renormierte Fermionmasse. Führt man eine neue Variable $\tau = \log(\Lambda/\mu)$ mit einer beliebigen Massenskala μ ein, so lauten die Gleichungen in Ein-Schleifen-Näherung

$$\begin{aligned} \beta_{g_R} &= -\frac{\partial g_R}{\partial \tau} = \frac{1}{16\pi^2} \left\{ 4g_R^2 + 16N_F g_R (G_{R\psi}^2 + G_{R\chi}^2) - 96N_F (G_{R\psi}^4 + G_{R\chi}^4) \right\} \\ \beta_{G_{R\psi}} &= -\frac{\partial G_{R\psi}}{\partial \tau} = \frac{1}{16\pi^2} 4N_F G_{R\psi} (G_{R\psi}^2 + G_{R\chi}^2) \\ \beta_{G_{R\chi}} &= -\frac{\partial G_{R\chi}}{\partial \tau} = \frac{1}{16\pi^2} 4N_F G_{R\chi} (G_{R\psi}^2 + G_{R\chi}^2). \end{aligned} \quad (5.115)$$

Dabei sind hier nur die universellen Skalenbeiträge ohne Terme mit expliziter Massenabhängigkeit angegeben.

Von besonderem Interesse für diese Arbeit ist noch das Verhältnis

$$x = \frac{G_{R\chi}}{G_{R\psi}}, \quad (5.116)$$

für das man

$$\frac{\partial x}{\partial \tau} = 0 \quad (5.117)$$

erhält. Folglich ist das Verhältnis der Yukawa-Kopplungen unabhängig von der Skala. Insbesondere bleibt im Fall $G_{R\chi} = 0$ dieser Wert bei allen Skalen und unabhängig von $G_{R\psi}$ Null. Dies kann bei starken Yukawa-Kopplungen anders aussehen, da man dann den Gültigkeitsbereich der Ein-Schleifen-Näherung verläßt.

5.4 Kritische Parameter und Kontinuums limites

Wie ich oben angegeben habe, hat das Modell noch fünf freie Parameter, wenn man den Wilson-Parameter $r = 1$ setzt und $\mu_{\psi\chi}$ gemäß Gl. 5.25 wählt. Diese fünf müssen entsprechend der zu untersuchenden physikalischen Situation eingestellt werden.

Wie im vorigen Abschnitt beschrieben, ist das Hauptziel die Untersuchung des Kontinuums limites des $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -Modells. Die bisherigen Arbeiten zu diesem Modell legen den Schluß nahe, daß das Trivialitäts-Szenario zutrifft. Deshalb wird dies meine Arbeitshypothese sein. Um die größtmöglichen renormierten Kopplungen nicht-störungstheoretisch zu bestimmen, wählt man $g_0 = \infty$. Dies fixiert die Länge des Skalarfeldes auf Eins. Man hat dann nicht mehr vier unabhängige skalare Freiheitsgrade, sondern nur noch drei. Der vierte ist über die Normierungsbedingung

$$\sum_{i=1}^4 \phi_{i,x}^2 = 1 \quad (5.118)$$

mit diesen verknüpft. Man beachte den Unterschied zur Definition des Vakuumerwartungswerts $v = |\varphi|$ in Gl. 5.77, der hierdurch nicht auf eins fixiert wird.

Die Yukawa-Kopplung des Spiegelfermions wird wie bereits angekündigt auf $G_\chi = 0$ gesetzt. Die Golterman-Petcher-Ward-Identitäten garantieren dann, daß auch die renormierte Kopplung $G_{R\chi} = 0$ ist und die Spiegelfreiheitsgrade entkoppeln.

Damit bleiben noch κ, K und G_ψ zu Verfügung. Über die beiden Hoppingparameter κ und K kontrolliert man die zwei Massen der Theorie, die skalare m_R und die fermionische Mischmasse μ_R . Die durch $m_R = 0$ und $\mu_R = 0$ definierten kritischen Werte κ_c und K_c definieren im κ, K, G_ψ Raum eine kritische Linie (κ_c, K_c, G_ψ) , entlang derer man den Kontinuums limites durchführen kann. In der Phase mit spontan gebrochener Symmetrie kann man die beiden Massen im Gegensatz zur symmetrischen Phase nicht getrennt voneinander einstellen, was die Einstellung der Parameter erschwert.

Bei der Wahl von K hilft die Struktur des Propagators und das Ziel einer exakten Entkopplung von Fermionen und Spiegelfermionen. Dazu muß neben $G_\chi = 0$ auch μ_0 (s. Gl. 5.25) auf Null gesetzt werden, um eine Mischung über den Propagator zu verhindern (s. Gl. 5.72). Daraus folgt sofort $K_c^\infty = \frac{1}{8}$. Auf dem Gitter wird dies leicht modifiziert.

Da der Propagator nicht bei $p = 0$ ausgewertet wird, sondern bei $p = p_{min}$, lautet die Forderung hier $\mu_{p_{min}} = 0$, woraus

$$K_c^T = \frac{1}{8 - 4 \sin^2 \frac{\pi}{2T}} \quad \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \quad K_c^\infty \quad (5.119)$$

folgt. Mit dieser Wahl der Parameter erhält man für $N_F = 2$, wie beim Hybrid-Monte-Carlo nötig, im Kontinuumslimit zwei entartete $SU(2)$ -Doublets.

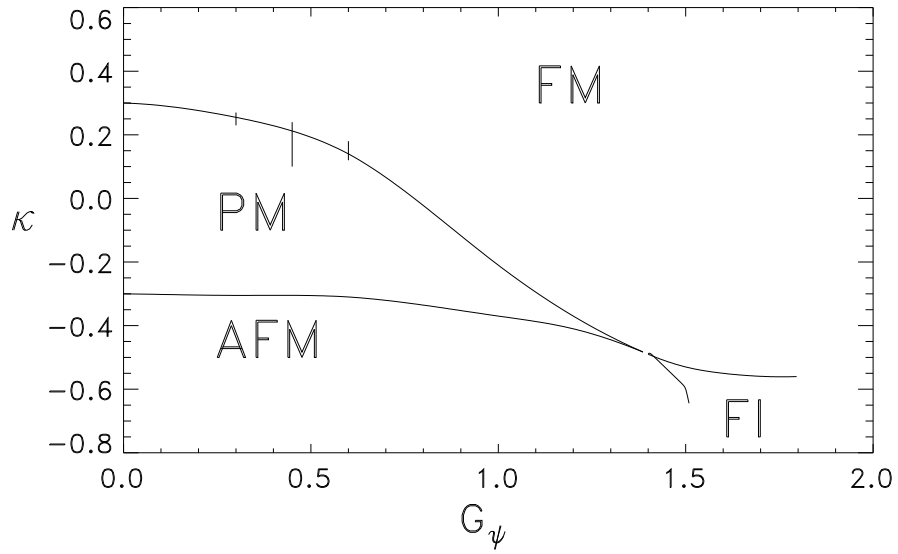


Abbildung 5.1: Phasendiagramm des $SU(2)_R \otimes SU(2)_L$ -Modells in der (κ, G_ψ) -Ebene. Die senkrechten Linien markieren die Parameterbereiche, die in dieser Arbeit untersucht wurden. Die Phasengrenzlinien sind aus Mean-Field-Rechnungen und Monte-Carlo-Simulationen bestimmt worden. Für $G_\psi > 1.0$ gibt es nicht genügend Monte-Carlo-Ergebnisse, um die genaue Form der Linien zu bestätigen.

Letztlich verbleiben κ und G_ψ . Abbildung 5.1 zeigt die (κ, G_ψ) -Ebene mit den Phasen und Phasengrenzlinien. Die vier Phasen sind in Analogie zu den Phasen eines Magneten bezeichnet. In der paramagnetischen Phase (PM) ist der Vakuumerwartungswert $v = 0$. Dies ist die Phase mit ungebrochener Symmetrie. In der antiferromagnetischen Phase (AFM) ist die sogenannte staggered Magnetisierung

$$v_{staggered} = \sqrt{\sum_{i=1}^4 \phi_i^2}, \quad \phi_i = \frac{1}{V} \sum_{x1, x2, x3, x4} \phi_{i,x} (-1)^{x1+x2+x3+x4} \quad (5.120)$$

ungleich Null. Die ferrimagnetische Phase (FI) bei großen Werten von G_ψ ist bisher nur wenig erforscht worden, da dort die Matrixinversion wegen der großen Kopplung sehr aufwendig ist. Diese Phase ist gekennzeichnet durch

$$v \neq 0 \quad \text{und} \quad v_{staggered} \neq 0. \quad (5.121)$$

Die physikalisch interessanteste Phase ist die ferromagnetische (FM) mit $v \neq 0$. Der Kontinuumslikes kann entlang der Phasengrenzlinie zwischen FM- und PM-Phase durchgeführt werden. Dabei wählt man $\kappa > \kappa_c(G_\psi)$ um die FM-Phase zu selektieren.

Diese Arbeit bezieht sich hauptsächlich auf die beiden Punkte $G_\psi = 0.3$ und $G_\psi = 0.45$. Bei $G_\psi = 0.6$ wurden nur auf dem $8^3 \cdot 16$ Gitter Rechnungen durchgeführt.

Kapitel 6

Simulationsverfahren: Hybrid-Monte-Carlo

Im ersten Teil dieser Arbeit habe ich als einen wesentlichen Punkt der Diskretisierung die Möglichkeit angeführt, mittels numerischer Verfahren die Zustandssumme bzw. Erwartungswerte zu berechnen. Dabei wurde eine Observable A auf einer Menge von Konfigurationen $\{\phi_i\}$ ausgewertet. Wie diese erzeugt werden, wurde offengelassen. In diesem Abschnitt werde ich jetzt den zur Zeit am meisten benutzten Algorithmus zur Erzeugung von Konfigurationen unter Einbeziehung dynamischer Fermionen, den Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus, vorstellen.

Ziel ist es, die Felder ϕ gemäß der Verteilung

$$W_S(\phi) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp[-S(\phi)], \quad (6.1)$$

wobei

$$\mathcal{Z} = \int [\phi] e^{-S[\phi]} \quad (6.2)$$

die Zustandssumme ist, zu erzeugen. Dazu konstruiert man einen Markov-Prozeß, dessen Fixpunkt W_S ist. Ein Markov-Prozeß ist dabei ein stochastisches Verfahren, aus einer Konfiguration ϕ einen Nachfolger ϕ' mit einer Wahrscheinlichkeit W_{Markov} zu erzeugen. Wenn dieser Prozeß ergodisch ist und die Gleichung

$$W_S(\phi) W_{Markov}(\phi \rightarrow \phi') = W_S(\phi') W_{Markov}(\phi' \rightarrow \phi) \quad (6.3)$$

erfüllt, dann konvergiert er zu der eindeutigen Fixpunktverteilung $W_S(\phi)$. Die Forderung, Gl. 6.3, bezeichnet man als „detailliertes Gleichgewicht“.

Fast alle verwendeten Algorithmen lassen sich in zwei Schritte zerlegen

1. Erzeugung einer neuen Konfiguration
2. Annahme oder Ablehnung der neuen Konfiguration entsprechend W_{Markov} (accept-reject Schritt)

Beim Metropolis-Algorithmus [MRR⁺53] erfüllt man diese Forderung, indem man eine neu erzeugte Konfiguration mit einer Wahrscheinlichkeit

$$W_{Markov}(\phi \rightarrow \phi') = \min \left(1, \frac{W_S(\phi')}{W_S(\phi)} \right) \quad (6.4)$$

akzeptiert. Das Verfahren, wie die neue Konfiguration erzeugt wird, ist hiermit noch nicht festgelegt. Man wird jedoch bestrebt sein, die neuen Felder so zu wählen, daß die Ablehnungsquote nicht zu hoch ist, da man sonst sehr lange Autokorrelationszeiten bekommt (siehe Abschnitt 8.3). Die einzigen Einschränkungen, die man an das Verfahren stellen muß sind, daß die Wahrscheinlichkeit $W(\phi'|\phi)$ eine Konfiguration ϕ' ausgehend von ϕ zu wählen die Bedingung

$$W(\phi|\phi') = W(\phi'|\phi) \quad (6.5)$$

erfüllt, und daß man alle Punkte des Phasenraums erreichen kann.

Zunächst will ich die Probleme aufzeigen, die bei der Berücksichtigung von Fermionen auftreten. Fermionfelder werden in der Quantenfeldtheorie durch Grassmann-wertige Felder beschrieben. Dies sind abstrakt definierte, anti-kommutierende Größen und als solche nicht direkt auf einem Computer darstellbar. In den renormierbaren 4-dimensionalen Feldtheorien, und nur diese sollen hier interessieren, treten die Fermionfelder in bilinearer Form auf, wodurch man sie mit Hilfe einer Gauß-Integration über die Grassmann-Freiheitsgrade eliminieren kann.

Betrachten wir eine Wirkung, die aus einem rein bosonischen Teil und einem bilinearen, fermionischen Teil besteht. Etwaige Kopplungen der Bosefelder an die Fermionfelder stehen im zweiten Teil, wie z.B. an der Wirkung des Higgs-Yukawa-Modells im vorigen Abschnitt ersichtlich ist. Mit

$$S = S_B(\phi) + \bar{\psi} \mathcal{Q} \psi \quad (6.6)$$

folgt

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int [d\phi][d\bar{\psi}][d\psi] \exp(-S[\phi, \bar{\psi}, \psi]) A(\phi, \bar{\psi}, \psi) \quad (6.7)$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int [d\phi] \exp[-S_B(\phi)] \det(\mathcal{Q}) A'(\phi) \quad (6.8)$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int [d\phi] \exp[-(S_B(\phi) - \log \det \mathcal{Q}(\phi))] A'(\phi). \quad (6.9)$$

ψ und $\bar{\psi}$ sind hier die Grassmann-wertigen Fermionfelder. \mathcal{Q} ist die Fermionmatrix und spielt eine zentrale Rolle bei der Behandlung fermionischer Theorien, da in dieser Matrix die gesamte Struktur der Wechselwirkung enthalten ist.

Die Wirkung, wie sie in Gl. 6.9 auftritt, ist nicht mehr lokal, da $\log \det(\mathcal{Q})$ nicht lokal ist. Aufgrund dieser Nicht-Lokalität sind die üblichen Algorithmen, wie Heatbath, Metropolis oder Overrelaxation, wenn überhaupt, nur mit erheblichem Rechenaufwand

realisierbar, da man bei lokalen Updates der bosonischen Variablen für jeden Update $\log \det(\mathcal{Q})$ berechnen muß. Will man dies vermeiden und ändert direkt eine größere Anzahl von bosonischen Freiheitsgraden, so wird man in einem Metropolis accept-reject-Schritt nur eine sehr geringe Akzeptanzrate bekommen.

Weiterhin ist $\det(\mathcal{Q})$ im allgemeinen komplex oder, wie in der QCD, zwar reell aber nicht positiv definit und hat somit keine Interpretation als Wahrscheinlichkeitsmaß. Ein Ausweg ist die Einbeziehung der durch

$$\log \det \mathcal{Q}(\phi) = \log |\det \mathcal{Q}(\phi)| + i \varphi_{\mathcal{Q}(\phi)}. \quad (6.10)$$

definierten Phase $\varphi_{\mathcal{Q}}$. Mit dieser definiert man den Erwartungswert der Meßgröße $A'(\phi)$ als

$$\langle A' \rangle = \frac{\int [d\phi] \exp[-S_B(\phi)] \det(\mathcal{Q}) A'(\phi)}{\int [d\phi] \exp[-S_B(\phi)] \det(\mathcal{Q})} \quad (6.11)$$

$$= \frac{\int [d\phi] \exp[-S_B(\phi)] |\det(\mathcal{Q})| e^{i \varphi_{\mathcal{Q}}} A'(\phi)}{\int [d\phi] \exp[-S_B(\phi)] |\det(\mathcal{Q})| e^{i \varphi_{\mathcal{Q}}}} \quad (6.12)$$

und mit der Abkürzung $\tilde{A}(\phi) = A'(\phi) e^{i \varphi_{\mathcal{Q}}}$ sowie Einschreiben einer Eins in Form von

$$1 = \frac{\int [d\phi] \exp[-S_B(\phi)] |\det(\mathcal{Q})|}{\int [d\phi] \exp[-S_B(\phi)] |\det(\mathcal{Q})|} \quad (6.13)$$

erhält man daraus

$$\langle A' \rangle_{\det \mathcal{Q}} = \frac{\langle \tilde{A} \rangle_{\det \mathcal{Q}}}{\langle e^{i \varphi_{\mathcal{Q}}} \rangle_{\det \mathcal{Q}}} \quad (6.14)$$

Die Phase $\varphi_{\mathcal{Q}}$ ist aber meist eine stark fluktuierende Größe, was zu sehr großen statistischen Fehlern in den Meßgrößen führt. Für das $U(1)_R \otimes U(1)_L$ Higgs-Yukawa-Modell, bei dem die Determinante für bestimmte Parameter komplex ist, hat M. PLAGGE diese Schwankungen untersucht [MP93]. In der statistischen Physik tritt dieses Problem bei der Behandlung von Quantensystemen auf. Diese können in ein $(d+1)$ -dimensionales klassisches System transformiert werden, wobei d die Dimension des Quantensystems ist. Die durch die Transformation induzierte Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Freiheitsgrade des klassischen Systems ist im allgemeinen zwar reell, aber nicht positiv definit. Man spaltet das Maß der Verteilung dann analog zu Gl. 6.10 in den Betrag und ein Vorzeichen auf. Auch hier treten große Fluktuationen im Vorzeichen auf, weshalb man dafür den Begriff „Minuszeichen-Problem“ kreiert hat [HSSB82, Mor89].

Das Problem besteht offensichtlich in der Notwendigkeit, eine große Zahl von Freiheitsgraden zu verändern und gleichzeitig für diese Änderung eine vernünftige Akzeptanzrate zu erhalten. Eine Lösung wurde 1987 von S. DUANE, A.D. KENNEDY, B.J. PENDLETON und D. ROWETH unter dem Namen „Hybrid-Monte-Carlo“ vorgeschlagen [DKPR87]. Die Idee besteht darin, die einzelnen Freiheitsgrade nicht zufällig zu verändern, sondern sie

einer klassischen Dynamik zu unterwerfen, die in einer neuen, fiktiven Zeitkoordinate τ verläuft. Um die Forderung nach detailliertem Gleichgewicht zu erfüllen, wird am Ende einer solchen Trajektorie noch eine Metropolisabfrage durchgeführt.

Zunächst zeige ich die Version ohne Fermionen. Man führt einen Satz konjugierter Impulse ein und definiert eine Hamiltonfunktion

$$H(\phi, \pi) = \frac{1}{2} \pi^2 + S(\phi). \quad (6.15)$$

Ein Update wird dann nach folgendem Algorithmus durchgeführt

- Impulsauswahl: Wähle π aus einer Gaußverteilung

$$W_{Gau\beta}(\pi) \propto \exp\left(-\frac{\pi^2}{2}\right). \quad (6.16)$$

- Molekulardynamik: Generiere eine neue Konfiguration, indem (ϕ, π) mittels der Hamilton'schen Bewegungsgleichungen in der fiktiven Zeitkoordinate τ fortentwickelt wird.

$$\dot{\pi} = -\frac{\partial H}{\partial \phi} = -\frac{\partial S}{\partial \phi} \quad (6.17)$$

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial \pi} = \pi \quad (6.18)$$

- Auf diese Weise erhalten wir mit einer Wahrscheinlichkeit $W_{MD}[(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')]$ eine Konfiguration (ϕ', π') , die mit einer Wahrscheinlichkeit

$$W_{Met}[(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] = \min(1, \exp(-\delta H)) \quad (6.19)$$

akzeptiert wird, wobei $\delta H = H(\phi', \pi') - H(\phi, \pi)$ ist.

Diese drei Schritte bilden zusammen den Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus.

Integriert man das Produkt $W_{Gau\beta} W_{MD} W_{Met}$ über die Impulse π und π' , so erhält man die Übergangswahrscheinlichkeit für die physikalischen Felder ϕ

$$W_{HMC}[\phi \rightarrow \phi'] (= W_{Markov}). \quad (6.20)$$

Um nun noch zu zeigen, daß W_{HMC} detailliertes Gleichgewicht nach Gl. 6.3 erfüllt und somit dieser Prozeß die Felder gemäß der Verteilung, Gl. 6.1, erzeugt, muß man voraussetzen, daß die Dynamik umkehrbar ist

$$W_{MD}[(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] = W_{MD}[(\phi', -\pi') \rightarrow (\phi, -\pi)]. \quad (6.21)$$

Mit Hilfe dieser Gleichung folgt dann

$$\begin{aligned} & \int [d\pi] [d\pi'] W_S(\phi) W_{Gau\beta}(\pi) W_{MD}[(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] W_{Met}[(\phi, \pi) \rightarrow (\phi', \pi')] = \\ & \int [d\pi] [d\pi'] W_S(\phi') W_{Gau\beta}(-\pi') W_{MD}[(\phi', -\pi') \rightarrow (\phi, -\pi)] W_{Met}[(\phi', -\pi') \rightarrow (\phi, -\pi)], \end{aligned} \quad (6.22)$$

und mit der Definition von W_{HMC} in Gl. 6.20 erhält man daraus Gl. 6.3.

Bei der Art wie die neuen Felder aus den alten erzeugt werden, läßt einem die Herleitung des detaillierten Gleichgewichts einige Freiheiten, da bei der Angabe von W_{MD} über den Algorithmus zur Feldänderung nichts spezifiziert wurde. Die einzige Forderung ist die nach der Umkehrbarkeit, Gl. 6.21, und daß er ergodisch ist. Die spezielle Wahl der Hamilton'schen Dynamik führt im Fall exakter Arithmetik zur Erhaltung von H und damit zu $\delta H = 0$, was eine Akzeptanzrate von 100% im Metropolis-Schritt zur Folge hat. Die Ergodizität wird in diesem Fall durch die Gauß-verteilten Impulse gewährleistet.

In der Praxis kann man die Bewegungsgleichungen weder analytisch integrieren, noch hat man einen Rechner mit exakter Arithmetik zur Verfügung. Man wird das System von Differentialgleichungen daher numerisch auf einer Folge von Zeitschritten $\tau, \tau + \delta\tau, \tau + 2\delta\tau, \dots$ lösen und die so nach N Schritten erhaltenen Felder dem Metropolistest unterziehen. Dabei muß man berücksichtigen, daß man bei der numerischen Integration Fehler macht, die sich mit wachsendem N aufsummieren. Zur Integration haben sich Mehrschrittverfahren bewährt, die die Eigenschaften *umkehrbar* und *volumenerhaltend* haben müssen. Das einfachste dieser Verfahren ist das Leapfrog-Verfahren, das durch die folgenden Gleichungen definiert wird. Zuerst bestimmt man die Impulse in einem Schritt der Länge $\delta\tau/2$ neu

$$\pi(\delta\tau/2) = \pi(0) + \dot{\pi}(0) \delta\tau/2 = \pi(0) - \frac{\partial S}{\partial \phi}(0) \delta\tau/2, \quad (6.23)$$

dann werden N Schritte der Länge $\delta\tau$ ausgeführt

$$\phi(\tau + \delta\tau) = \phi(\tau) + \dot{\phi}(\tau - \delta\tau/2) \delta\tau = \phi(\tau) + \pi(\tau - \delta\tau/2) \delta\tau \quad (6.24)$$

$$\pi(\tau + \delta\tau/2) = \pi(\tau - \delta\tau/2) + \dot{\pi}(\tau) \delta\tau = \pi(\tau - \delta\tau/2) - \frac{\partial S}{\partial \phi}(\tau) \delta\tau \quad (6.25)$$

und schließlich ein letzter Halbschritt der Länge $\delta\tau/2$, um die Impulse zur selben Zeit wie die Felder zu erhalten

$$\pi(\tau_N) = \pi(\tau_N - \delta\tau/2) + \dot{\pi}(\tau_N) \delta\tau/2 = \pi(\tau_N - \delta\tau/2) - \frac{\partial S}{\partial \phi}(\tau_N) \delta\tau/2 \quad (6.26)$$

mit $\tau_N = N \delta\tau$. Die Fehler sind in den beiden Halbschritten jeweils $\mathcal{O}(\delta\tau^2)$ und in den N Zwischenschritten jeweils $\mathcal{O}(\delta\tau^3)$. An diese $N + 2$ Schritte schließt sich jetzt die Metropolis-Abfrage an. Alles zusammen bildet eine Trajektorie.

Der Name Leapfrog-Verfahren rührt daher, daß ähnlich wie beim Gang des Frosches immer abwechselnd Vorder- und Hinterbeine vorne sind, bei diesem Integrationsverfahren die Impulse und Felder immer im Wechsel einen halben Zeitschritt $\delta\tau/2$ vorne liegen.

Um jetzt die Fermionen zu berücksichtigen, geht man von Gl. 6.8 aus und führt bosonische Pseudofermionfelder χ und χ^\dagger ein

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int [d\phi][d\chi][d\chi^\dagger] \exp [-S_B(\phi) - \chi^\dagger \mathcal{Q}^{-1}(\phi) \chi] A'(\phi). \quad (6.27)$$

Damit die bosonischen Gaußschen Integrale über χ und χ^\dagger konvergieren, muß \mathcal{Q} positiv definit sein. Ist das nicht der Fall, verdoppelt man die Zahl der Fermionflavours

$$S = S_B(\phi) + \sum_{f=1,2} \bar{\psi}^{(f)} \mathcal{Q}^{(f)} \psi^{(f)}, \quad (6.28)$$

$$\mathcal{Q}^1 = \mathcal{Q} \quad \text{und} \quad \mathcal{Q}^2 = \mathcal{Q}^\dagger. \quad (6.29)$$

Schreibt man die beiden Flavour-Spinoren als eine Spalte, so erhält man als neue Determinante der Fermionmatrix

$$\det \mathcal{Q} = \det \begin{pmatrix} \mathcal{Q} & 0 \\ 0 & \mathcal{Q}^\dagger \end{pmatrix} = \det(\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q}), \quad (6.30)$$

welche immer positiv definit ist. Die Wirkung mit den Pseudofermionfeldern lautet jetzt

$$S = S_B(\phi) + \chi^\dagger (\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q})^{-1}(\phi) \chi. \quad (6.31)$$

Diese Verdopplung der Fermionfelder ist rein algorithmisch bedingt und hat nichts mit dem Problem der Fermion-Dopplung bei der Diskretisierung der Dirac-Gleichung zu tun. Mit dem Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus kann man somit immer nur eine gerade Anzahl Fermionflavours simulieren. Im dritten Teil dieser Arbeit werde ich ein Verfahren vorstellen, mit dem man auch ungerade Flavourzahlen behandeln kann.

Man führt nun analog wie oben konjugierte Impulse π für die Felder ϕ ein. Die Felder χ und χ^\dagger werden als nicht-dynamische Freiheitsgrade behandelt und brauchen daher keine Impulse. Sie werden zu Beginn jeder Trajektorie neu generiert. Der Algorithmus sieht dann folgendermaßen aus

1. Generiere χ gemäß

$$W(\chi)[d\chi] = \frac{1}{\mathcal{Z}_\chi} \exp \left[-\chi^\dagger (\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q})^{-1} \chi \right] [d\chi] \quad (6.32)$$

mittels Gauß-verteilter Vektoren η

$$W(\eta)[d\eta] = \frac{1}{\mathcal{Z}_\eta} \exp \left[-\eta^\dagger \eta \right] [d\eta] \quad (6.33)$$

und der Beziehung

$$\chi = \mathcal{Q}^\dagger \eta. \quad (6.34)$$

2. Generiere π aus einer Gauß-Verteilung

$$W_{Gau\beta}(\pi)[d\pi] = \frac{1}{\mathcal{Z}_\pi} \exp\left(-\frac{\pi^2}{2}\right). \quad (6.35)$$

3. Leapfrog Integration

$$\dot{\phi} = \pi \quad (6.36)$$

$$\dot{\pi} = -\frac{\partial S_B}{\partial \phi} - \chi^\dagger \frac{\partial(\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q})^{-1}}{\partial \phi} \chi \quad (6.37)$$

$$= -\frac{\partial S_B}{\partial \phi} + [(\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q})^{-1} \chi]^\dagger \frac{\partial(\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q})}{\partial \phi} [(\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q})^{-1} \chi]. \quad (6.38)$$

4. Metropolis accept-reject Schritt mit

$$W_{Met} = \min(1, \exp(-\delta H)) \quad (6.39)$$

und

$$H(\phi, \pi, \chi) = \frac{1}{2} \pi^2 + S(\phi) + \chi^\dagger (\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q})^{-1} \chi. \quad (6.40)$$

Der numerisch aufwendige Schritt ist die Berechnung von $(\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q})^{-1} \chi$ in der Leapfrog-Integration. Das Feld χ wird zwar während der ganzen Integration konstant gehalten, aber die Matrix \mathcal{Q} hängt von den Feldern ϕ ab, und diese ändern sich in jedem Integrationsteilschritt. Die effektive Realisation dieses Teilschritts im Rahmen des Higgs-Yukawa-Modells werde ich in Kapitel 8.2.1 beschreiben.

Trotz dieser Einschränkung hat man mit dem Hybrid-Monte-Carlo ein Verfahren gefunden, bei dem alle Feldkomponenten geändert werden bevor man einen aufwendigen globalen Zwischenschritt durchführen muß. Im Bereich der Simulationen mit dynamischen Fermionen ist er der meistbenutzte und am besten untersuchte Algorithmus. In Abschnitt 8.2.4 werde ich auf ein in den letzten zwei Jahren diskutiertes, potentiell Problem eingehen.

Kapitel 7

Implementierung auf der Quadrics

Wie ich in den letzten zwei Abschnitten gezeigt habe, ist das Ziel dieser Arbeit, das Higgs-Yukawa-Modell auf mittleren und großen Gittern zu studieren, um genauere Abschätzungen der finite-size-Effekte zu erhalten und das Skalierungsverhalten der physikalisch relevanten Meßgrößen zu studieren. Die Gitterdimensionen, die ich betrachten werde, sind $8^3 \cdot 16$, $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$. Die Fermionmatrix ist im letzten Fall eine $2\,097\,152 \times 2\,097\,152$ Matrix und in jedem Hybrid-Monte-Carlo-Update mehrfach zu invertieren. Der Bedarf an Rechenleistung ist dementsprechend groß.

Die Rechnungen auf kleinen Gittern wurden auf dem Vektorrechner Cray YMP8/32 am HLRZ im FZ Jülich durchgeführt. Eine Weiterführung des Projekts auf diesem Rechner war nicht möglich, weil er nicht ausreichend Rechenleistung bot. Da unser Projekt nicht das einzige mit diesem Problem war, wurden im Rahmen des DFG Schwerpunktes „Dynamische Fermionen“ zwei Parallelrechner des Typs Quadrics der Firma Alenia Spazio angeschafft, die zum einen eine erheblich größere Rechenkapazität bieten und zum anderen ausschließlich den Teilnehmern des Schwerpunktes zu Verfügung stehen. Die Rechner sind in der aktuellen Ausbaustufe geeignet, unsere Projekte in einer vernünftigen Zeit zu bearbeiten. In diesem Kapitel werde ich die Rechner kurz vorstellen, auf die Implementierung des Programms eingehen und zum Schluß einen Vergleich mit der Cray zeigen.

7.1 Quadrics Systembeschreibung

7.1.1 Hardware

Die Rechner der Quadrics-Reihe sind aus dem APE-Projekt des INFN in Italien entstanden. Das Ziel des APE-Projekts war es, einen kostengünstigen Hochleistungsrechner speziell zugeschnitten auf die Bedürfnisse der Gitterteilchenphysik zu entwickeln. Vektorrechner scheiden bei dieser Definition von vorne herein aus, da die Entwicklungs- und Herstellungskosten sehr hoch sind. Die APE-Kollaboration entschied sich deswegen für einen Parallelrechner, der nach dem Single Instruction Multiple Data (SIMD) Prinzip arbeiten sollte. Dabei wird die gleiche Instruktion, z.B. Addieren, auf viele verschiedene Datensätze angewandt. Anders als beim Vektorrechner, der mit seinem Vektorregister auch so verfährt, arbeiten bei einem SIMD-Rechner viele CPUs parallel. Typische SIMD-

Rechner bestehen aus bis zu 2048 Rechenknoten, oder bei der speziell für die Gitter-QCD optimierten Columbia-„QCDSP“-Maschine sogar aus bis zu 16384 Knoten, die alle im Gleichtakt arbeiten. Die Vorteile der SIMD-Architektur sind der geringe Hardwareaufwand und die leichte Programmierung. Die Nachteile liegen in der geringeren Flexibilität. Für unseren speziellen Anwendungsfall spielt dieser Punkt aber kaum eine Rolle.

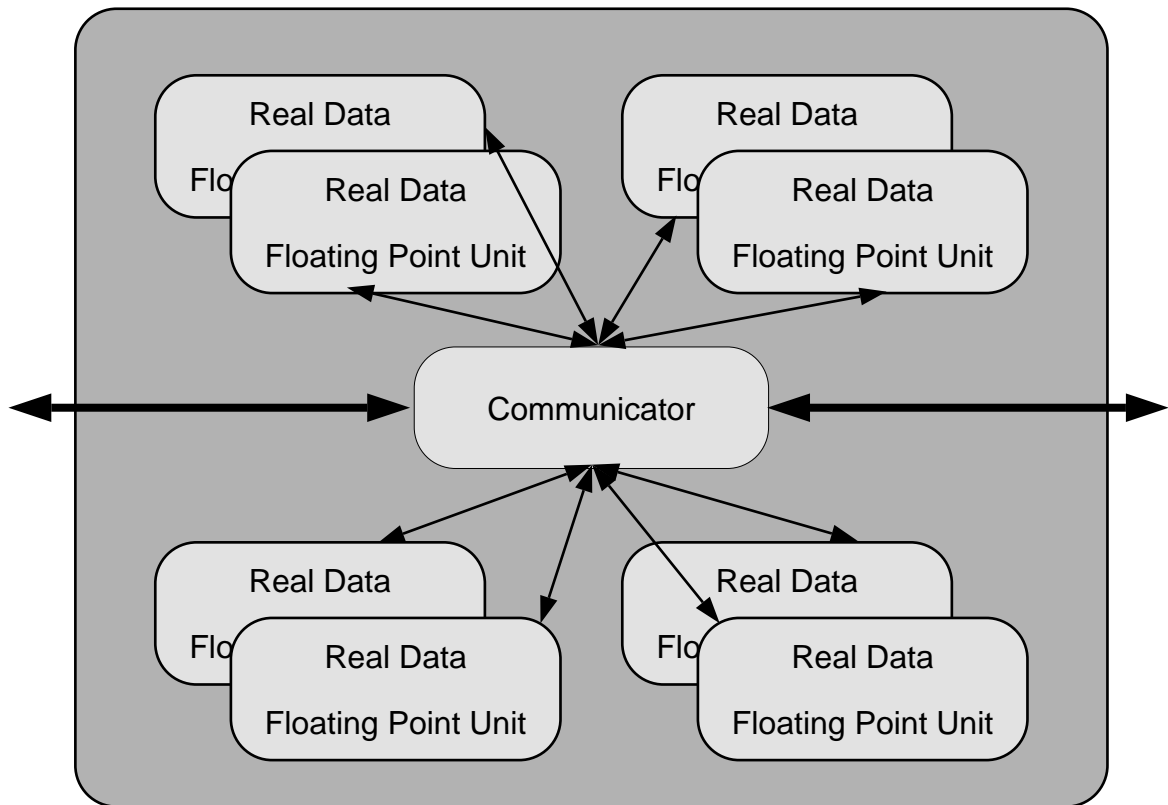


Abbildung 7.1: Der schematische Aufbau des Basisboards bestehend aus acht FPU-Knoten mit jeweils einer Multiplizier/Addier-Einheit (= MAD, Multiplier and Adder Device), 128 Datenregistern und 1 MWord = 4 MB Speicher. Zusätzlich ist auf jedem Basisboard ein Interface zur Kommunikation der acht Knoten untereinander und zu weiteren Boards untergebracht.

Um die Kosten niedrig zu halten, wurden für die Rechenknoten keine handelsüblichen Prozessoren benutzt, sondern eigene stark abgemagerte Rechenwerke entwickelt. Die Funktion eines Knotens wurde auf das Multiplizieren und Addieren von einfachgenauen Fließkommazahlen gemäß IEEE-Konvention beschränkt, was ihren Namen „Multiplier and Adder Device“ = MAD erklärt. Es gibt keinen Daten-Cache, dafür ist die Zahl der Register mit 128 recht hoch. Das Fehlen eines Daten-Caches hilft, die Logikfunktionen zu reduzieren, da man keine Probleme mit nicht-kohärenten Daten bei der Interprozessorkommunikation hat. Als letztes gibt es noch einen 1 MWord = 4 MByte großen Speicher.

Vom Konzept her handelt es sich um eine „pipelined“ Architektur. „pipelined“ bezieht sich auf die Fähigkeit, eine Kette aufeinanderfolgender gleichartiger Operationen besonders schnell verarbeiten zu können, indem man die Daten wie in einer Röhre durch den Prozessor schiebt. Dabei werden verschiedene Teiloperationen wie Register laden/schreiben, Addieren und Multiplizieren in einem Taktzyklus ausgeführt. Ähnlich wie bei Vektorprozessoren ist es also auch hier günstig, lange Schleifen zu verarbeiten. Die Prozessoren sind mit 25 MHz getaktet, was bei optimalem Pipelining von je einer Multiply/Add-Operation pro Takt zu einer Peak-Rate von 50 Mflops führt.

Je acht dieser Rechenknoten sind auf einem Basisboard zusammengefaßt, wie in Abbildung 7.1 gezeigt. Auf jedem dieser Boards befindet sich ein Kommunikator genannter Chip, ebenfalls eine Eigenentwicklung des INFN, der aus den Knoten einen Parallelrechner macht. Er ist sowohl für die Interprozessorkommunikation zwischen den acht MADs auf dem Board zuständig als auch für die Kommunikation zwischen Prozessoren auf unterschiedlichen Boards. Die Topologie ist die eines dreidimensionalen Torus, also ein Quader mit periodischen Randbedingungen. Die einzige in Hardware realisierte Kommunikationsform ist die nächste-Nachbar-Kommunikation. Abbildung 7.2 zeigt die sechs Richtungen, in die ein MAD lesen oder schreiben kann.

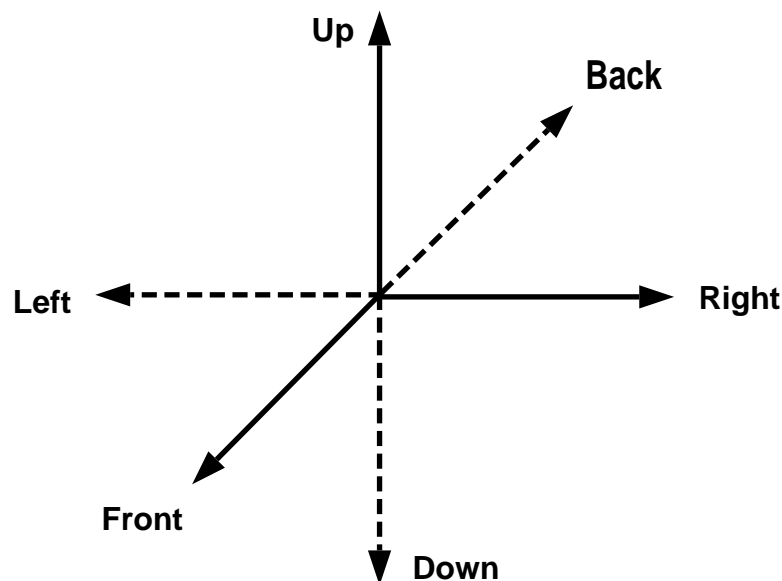


Abbildung 7.2: Kommunikationsrichtungen auf den FPU-Knoten der Quadrics. Die Namen der sechs Richtungen können in TAO zur Adressierung der nächsten Nachbarn verwendet werden.

Jeder Knoten kann über die Angabe seiner drei Koordinaten angesprochen werden. Dies geschieht in der Form $[x, y, z]$. Mit zwei dieser Dreitupel lassen sich auch Untermengen

von Knoten ansprechen. Die folgenden Beispiele gehen von einer QH2 Topologie aus, bei der x und y die Werte $0 \dots 7$ und z die Werte $0 \dots 3$ annehmen können. Insgesamt sind also 256 Knoten zu einem $8 \cdot 8 \cdot 4$ Torus verschaltet.

- $[0, 0, 0][0, 1, 3]$: alle Knoten mit $x = 0$, $y \in \{0, 1\}$ und $z \in \{0, 1, 2, 3\}$
- $[4, 1, 0][4, 1, 1]$: alle Knoten mit $x = 4$, $y = 1$ und $z \in \{0, 1\}$

Auf diese Weise können null-, ein-, zwei- und dreidimensionale Untermengen des Rechners adressiert werden. Man kann z.B. mittels *broadcast* ein Datum von einem Knoten auf alle verteilen oder Daten beim Einlesen oder Herausschreiben nach Knoten selektieren.

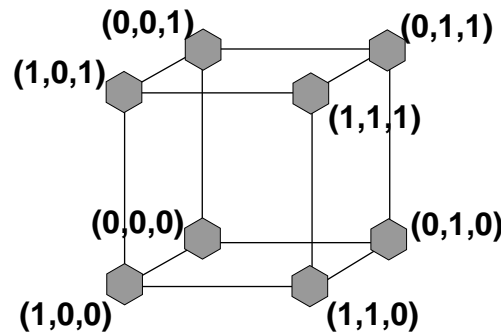


Abbildung 7.3: Das Numerierungs-Schema der acht FPU-Knoten auf dem Basisboard der Quadrics. Einzelne Knoten können über ihre drei Koordinaten direkt adressiert werden. Es ist auch möglich über diese Koordinatenschreibweise null-, ein-, zwei- und dreidimensionale Untermengen von Knoten anzusprechen.

Abbildung 7.3 zeigt die Numerierung der MADs auf dem Basisboard. Im allgemeinen wird man mehrere dieser Boards zu einer größeren Einheit zusammenschalten. Wie die dabei entstehende Topologie aussieht, hängt nur von der Verdrahtung auf der Backplane ab, die die Kommunikation zwischen den Boards regelt. Die einzige Randbedingung ist die $2 \cdot 2 \cdot 2$ Struktur des Basisboards, so daß in jede Richtung nur ein Vielfaches von zwei möglich ist. Mit 128 Prozessoren kann man z.B. die Q16 Topologie $2 \cdot 2 \cdot 32$ aufbauen oder die QH1 Topologie $8 \cdot 4 \cdot 4$.

Die Quadrics-Rechner verfügen über keinen eigenen externen Speicher. Um Daten dauerhaft zu sichern, bedient man sich eines Hosts, im allgemeinen eine Sun-Workstation, die über ein Transputerinterface mit der Quadrics gekoppelt ist. Lese- und Schreibzugriffe auf externe Daten werden vom Quadrics-Betriebssystem an den Host weitergeleitet, der die Anforderungen dann umsetzt. Die Kompilation von Programmen geschieht ebenfalls auf dem Host. Der fertige Programmcode wird dann mit Hilfe von Dienstprogrammen in den Programmspeicher der Quadrics geladen. Abbildung 7.4 zeigt den schematischen Aufbau am Beispiel der QH2, die aus 32 Basisboards also 256 Knoten besteht.

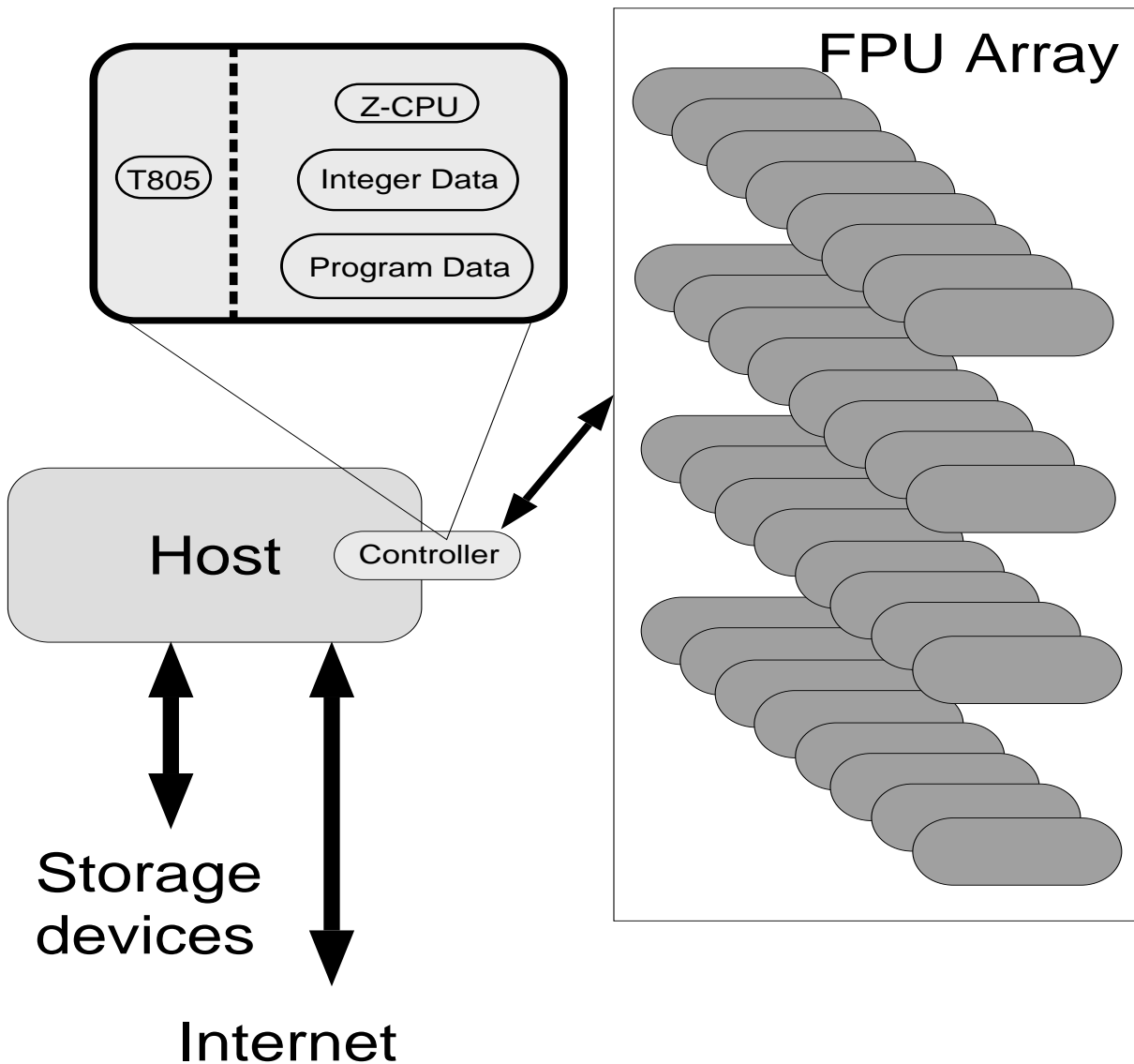


Abbildung 7.4: Der schematische Aufbau eines kompletten QH2-Systems bestehend aus 32 Basisboards mit je acht FPU-Knoten, einem Controller, der die Integer-CPU, die Programmsteuereinheit und das Interface zum Host-Rechner enthält, sowie dem Host-Rechner mit seinen Speicher-Subsystemen und der Internetanbindung.

Für alle N Rechenknoten gibt es nur eine Z-CPU, die die Programminstruktionen verarbeitet und die Knoten als Slaves mit den Anweisungen versorgt. Der Programmspeicher ist mit 2.6 MB recht knapp bemessen und führt bei der Programmierung zu einigen Einschränkungen, wie ich unten noch ausführen werde. Die Verarbeitung von Integer-Daten findet auch zentral auf der Z-CPU statt, also nicht-parallel. Alle Operationen, die

parallel ablaufen sollen, müssen auf Floating-Point-Daten arbeiten. Diese Einschränkung der Integer-Arithmetik verhindert die Möglichkeit einer lokalen Adressierung, bei der auf jedem Knoten ein anderes Feldelement bearbeitet werden könnte.

7.1.2 Software

Nach den Erläuterungen zum Hardware-Aufbau wird es niemanden wundern, daß auch die Software der Quadrics eine Neuentwicklung ist. Zum einen wurde dies durch die spezielle Hardware-Architektur nötig und zum anderen wollte man eine Programmiersprache haben, die besser an die Bedürfnisse der Benutzer angepaßt ist.

Wie ich im vorigen Abschnitt beschrieben habe, ist die Hardware recht sparsam konstruiert. Es gibt unter anderem keine Logik zur optimalen Ausnutzung der Register. Da ein Cache auch nicht vorhanden ist, hängt von der Benutzung der Register die Rechenleistung wesentlich ab. Die Strategie der APE-Kollaboration war in diesem Punkt, die Intelligenz von der Hardware in die Software zu verlagern. Dies hat zum einen den Vorteil, daß die Hardware einfach und billig bleibt, und zum anderen kann man leicht verschiedene Optimierungsstrategien testen, ohne Änderungen an den Chips machen zu müssen.

Die Programmierung naturwissenschaftlicher Simulationen geschieht zum überwiegenden Teil in Fortran. Dies liegt unter anderem begründet in der Existenz großer Fortran-Programme, die niemand gerne umschreiben möchte, in der umfangreichen Erfahrung bei der Optimierung von Fortran-Programmen und in der guten Qualität der Fortran-Compiler. Für die Quadrics hätte man den Fortran-Standard auf jeden Fall erweitern müssen, da Parallelverarbeitung nach dem SIMD-Prinzip nicht definiert ist. Die APE-Gruppe entschloß sich aufbauend auf einen selbstentwickelten Sprachengenerator namens Z_Z , der eine Erweiterung des Unix-Tool yacc (yet another compiler compiler) ist, eine neue Programmiersprache namens TAO zu designen. Dabei handelt es sich um eine Mischung aus Fortran- und C-Syntax, erweitert um Befehle für die Parallelverarbeitung. Da man gleichzeitig auch noch Zugriff auf den darunterliegenden Z_Z -Parser hat, kann man die Sprache jederzeit mit eigenen Konstrukten erweitern. Man hat die Möglichkeit Strukturen zu definieren und Operatoren zu überladen, was zu sehr übersichtlichen Programmen führt.

Um die Parallelverarbeitung zu steuern, wurden Konstrukte wie

```
y=f(x)
where ( y > 0 )
    z=log(y)
elsewhere
    z=0.0
endwhere
```

eingeführt. Der Logarithmus wird hier nur auf den Knoten ausgeführt, auf denen $y > 0$ ist. Auf den übrigen Knoten wird z gleich Null gesetzt. Leider ist es nicht so, daß die beiden where-Zweige vollständig parallel laufen, sondern im wesentlichen nacheinander. Bei der Abfrage von Bedingungen können mit *all*, *any* und *none* Teilmengen der MAD-Knoten zur Auswertung herangezogen werden:

```

while ( any x > 0 )
    x=f(x)
endwhile

```

Auf die speziellen Möglichkeiten zur Adressierung einzelner Knoten habe ich bereits im vorigen Abschnitt hingewiesen. Mit

```

open for reading ''test.dat'' as 1
write on 1 [0,0,0][0,1,1] x
close 1

```

wird der Wert von x auf den vier angegebenen Knoten in die Datei *test.dat* geschrieben, die auf dem Hostsystem angelegt wird.

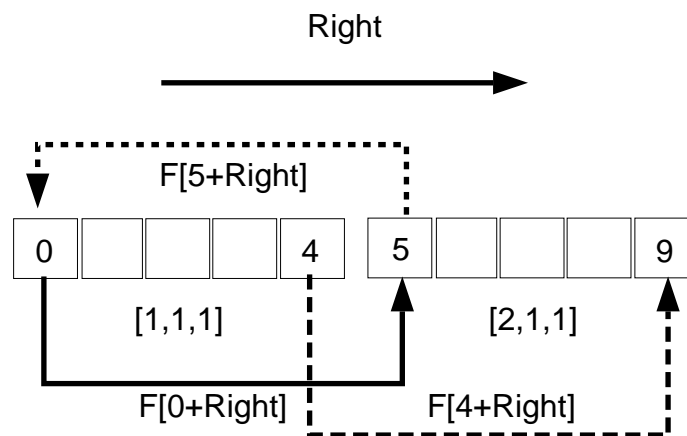


Abbildung 7.5: In dieser Skizze besteht die x -Richtung nur aus zwei Knoten. Der gepunktete Zugriff $F[5 + Right]$ ist aufgrund der periodischen Randbedingungen auf dem Torus identisch mit $F[5 + Left]$. $F[4 + Right]$ ergibt nicht den nächsten Nachbarn von $F[4]$. Dieser ist durch $F[0 + Right]$ gegeben.

Um ein verteiltes System zu simulieren braucht man noch Befehle zum Datenaustausch zwischen den Prozessoren. Wie oben beschrieben, gibt es auf der Quadrics nur nächste-Nachbar-Kommunikation, und die Knoten sind als dreidimensionaler Torus angeordnet. In TAO kann man nur auf Daten der Nachbarprozessoren zugreifen, wenn die Daten in einem Feld gespeichert sind. Mit der folgenden Definition werden drei Real-Variablen erzeugt und zwar auf jedem Knoten.

```

Real x,y[1],z[10]

```

Es gibt also ein x auf $[0,0,0]$ und ebenso auf $[1,2,3]$, usw. Die Variablen müssen nicht denselben Wert halten, aber sie haben denselben Namen.

Will man jetzt auf dem Knoten $[1, 1, 1]$ den Wert von x auf dem Knoten $[2, 1, 1]$ wissen, so geht dies nicht direkt, da x kein Feld ist. Auf den Wert in $y[0]$ kann man dagegen zugreifen.

```
x=y[0+Right]
```

setzt den Wert von x auf allen Knoten gleich dem Wert von $y[0]$ auf dem rechten Nachbarknoten. Wichtig ist, daß dies auf allen Knoten geschieht. Will man nur einen einzelnen Knoten ansprechen, so kann man dies über seine Koordinaten $[x, y, z]$ oder seiner sich daraus ergebenden *node_abs_id* erreichen

```
where ( node_abs_id == 8 )
      x=y[0+Right]
endwhere
```

Hier wird x nur auf dem mit der Nummer Acht bezeichneten Knoten neu gesetzt, die anderen Knoten legen eine Warterunde ein. Die sechs möglichen Kommunikationsrichtungen sind in Abbildung 7.2 angegeben.

Hat man z.B. ein Feld F der Länge 10 entlang der x -Richtung auf den Knoten verteilt, so ist der nächste Nachbar von $F[4]$ $F[0+Right]$, wie aus Abbildung 7.5 ersichtlich wird.

Wenn man auf Daten zugreifen möchte, die nicht auf einem der sechs Nachbarknoten liegen, so muß man den Kommunikationsvorgang in elementare nächste-Nachbar-Zugriffe aufteilen.

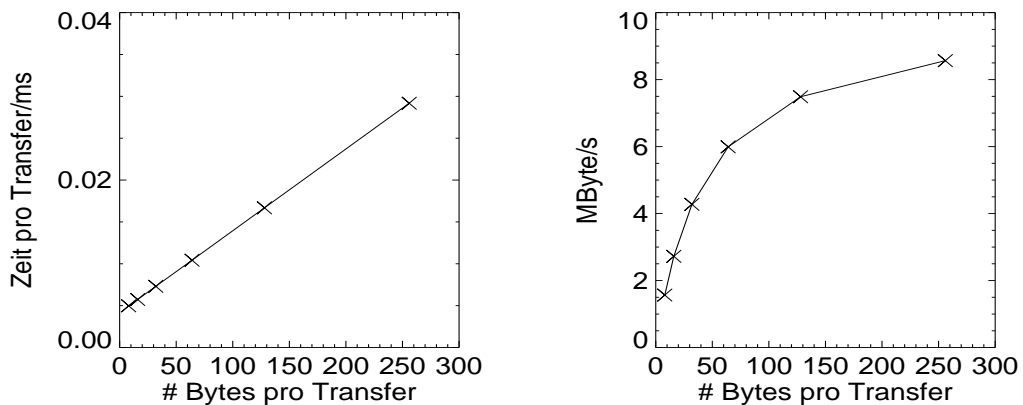


Abbildung 7.6: Für diese Abbildung wurden Datenpakete mit 2, 4, 8, 16, 32 und 64 4-Byte-Fließkommazahlen zwischen benachbarten Prozessoren ausgetauscht. Da die Interprozessorkommunikation immer über die Register geschieht, sind größere Pakete nur in Teilen hintereinander übertragbar. Die Daten wurden aus je zehn Läufen ermittelt. Die Fehlerbalken sind kleiner als die Symbole.

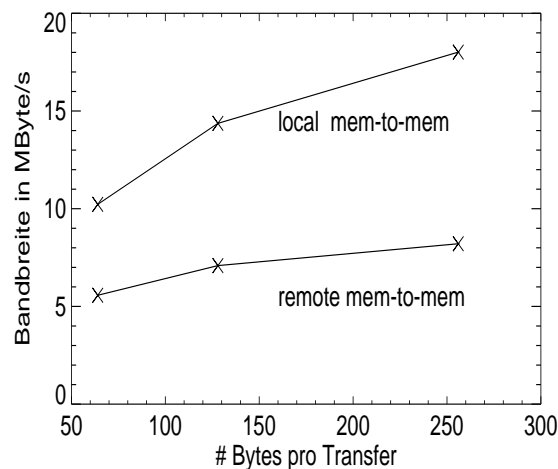


Abbildung 7.7: Vergleich der lokalen Speicher-zu-Speicher-Bandbreite mit der nicht-lokalen Speicher-zu-Speicher-Bandbreite. Der theoretische Wert für den lokalen Transfer liegt bei 25 Mbyte/s, für den Remote-Transfer bei 16.6 MByte/s.

Abbildung 7.6 und Abbildung 7.7 geben einen Eindruck von der Kommunikationsbandbreite in realen Anwendungen. Man beachte, daß die Datenblockgröße exponentiell ansteigt, und deshalb für größere Blöcke die Bandbreite ansteigt. Datenblöcke, die größer als 64 Real-Zahlen (=256 Byte) sind, müssen in mehreren Teilen übertragen werden. Dies gilt sowohl für das Kopieren lokaler Felder als auch für die Prozessor-Prozessor-Kommunikation. Die Ursache hierfür liegt an dem speziellen Verfahren zum Datenaustausch. Beim Remote-Zugriff werden die Daten zunächst aus dem Speicher in die Register geladen, dann findet ein Register-zu-Register-Transfer zwischen den benachbarten Knoten statt, und schließlich werden die Daten wieder in den Speicher geschrieben. Da sowohl die ankommenden als auch die ausgehenden Daten in den Registern gehalten werden und es nur 128 gibt, können in einem Befehl maximal 64 Real-Zahlen übertragen werden.

Die Latenzzeit, das ist die Zeit zum Initialisieren des Kommunikationsvorgangs, ergibt sich aus Abbildung 7.6 durch Extrapolation zu Paketgröße Null zu $4.18 \mu s$.

Der Compiler läuft inzwischen auf jedem SUN-Rechner und auf Linux-Rechnern, wodurch man für die Programmentwicklung nicht auf den Quadrics-Host festgelegt ist. Für unser Programm beträgt die Compiler-Laufzeit zwischen 10 und 30 min je nach verwendeter SUN-Hardware, was die Entwicklung etwas mühsam macht. Eine Ursache hierfür ist der Umstand, daß immer das komplette Programm übersetzt werden muß, da es keinen Linker gibt, mit dem man Module zusammensetzen könnte. In der neuesten Compiler-Version ist ein solcher Linker eingeführt worden, aber da unser Programm zu der Zeit bereits fertig war, der Einsatz des Linkers größere Umstrukturierungsmaßnahmen mit

sich zieht und über die Stabilität und Güte des Linkers keine Erkenntnisse vorlagen, habe ich das Programm nicht mehr auf diese Version übertragen.

Ein weiteres Problem der Software sind die teilweise kryptischen Fehlermeldungen, die in der Anfangsphase zum Teil noch in italienisch ausgegeben wurden. Der Debugger setzt leider voraus, daß man die Quadrics ohne vorgeschaltetes Queuing-System betreibt, was im allgemeinen nicht der Fall ist. So blieb nur *write* als Debug-Hilfe übrig.

7.2 Realisation des Programms

Nachdem im vorigen Abschnitt die Quadrics Hard- und Software beschrieben wurde, will ich jetzt auf die Realisierung des Programms eingehen. Dabei werde ich die verwendeten Daten-Strukturen, das Datenlayout im Rechner und algorithmische Details beschreiben.

Aus Abschnitt 5.1 entnimmt man, daß die Fermionmatrix von der Struktur

$$L_x \cdot L_y \cdot L_z \cdot L_t \cdot n_{Spinor} \cdot n_{u/d} \cdot n_{L/R} \cdot n_{\psi/\chi} \quad (7.1)$$

ist oder, zusammengefaßt,

$$V_{Gitter} \cdot V_{intern} \quad (7.2)$$

ist, wobei jeder Eintrag eine komplexe Zahl ist. V_{intern} ist gleich 16, da jeder der vier Faktoren zwei Werte annehmen kann.

Es bietet sich an, drei der vier Raumdimensionen auf den Knoten zu verteilen. Um eine möglichst große Flexibilität zu erhalten, habe ich die Aufteilung des Gitters vom eigentlichen Programm getrennt. An einer zentralen Stelle wird die Konfiguration der Hardware, die Gittergröße und die lokale Raumrichtung angegeben. Die Aufteilung der verbleibenden drei Richtungen in lokale Untergitter, die Erstellung der Indexfelder zur Adressierung der nächsten Nachbarn und weiterer von der Konfiguration abhängiger Variablen geschieht dann automatisch. Hierbei werden auch direkte Z_Z -Anweisungen benutzt, die zur Compilezeit ausgewertet werden. Die Programmierung des Algorithmus ist auf diese Weise unabhängig von der Topologie.

Bei der Aufteilung der vier Raumrichtungen kann man entweder die Richtungen 1, 2, 3 oder die Richtungen 2, 3, 4 auf die Knoten verteilen. Bei der ersten Variante ist die Zeitrichtung lokal, was die Berechnung von Zeitscheibenerwartungswerten sehr vereinfacht. Die zweite Variante wurde nötig, um das $12^3 \cdot 24$ Gitter auf der QH1 mit $8 \cdot 4 \cdot 4$ Topologie zu simulieren. Die t-Richtung des Gitters wird dabei in der x-Richtung des Rechners verteilt. Die Bestimmung von Zeitscheibenerwartungswerten geschieht in diesem Fall in zwei Schritten. Zunächst wird der lokale Teil der Erwartungswerte gebildet und in ein Feld der Länge t_{lokal} eingetragen. Diese müssen dann in einem Feld der Länge t_{global} zusammengefaßt werden. Damit die Einträge an der richtigen Stelle stehen, müssen mittels der *where* Anweisungen die aktiven Knoten selektiert werden.

Der folgende Codeteil zeigt den Kern dieser Routine. *loc* ist das Feld mit den lokalen t-Erwartungswerten und *glob* ist das Resultat mit den zusammenkopierten Werten. *latt* ist die lokale Gitterlänge in t-Richtung und *flatt* die globale.

```

subroutine gatherTimeSlices(locfield loc,gbldfield glob)

real t,ti,tf
integer i,iloc

!! First sum up spatial contributions from Y and Z direction
do i=0,latt-1
    t=loc.[i]
    call GlobalSumYZOf(t)
    loc.[i]=dotpr
enddo

!! Then prepare for gather

ti=node_abs_x*flatt
tf=ti+flatt

t=0.0
iloc=0
do i=0,rlatt-1
    glob.[i]=0.0
    where ( ( ti <= t ) && ( t < tf ) )
        glob.[i]=loc.[iloc]
        iloc=iloc+1
    endwhere
    t=t+1.0
    if ( any (t == tf) )
        iloc=0
    endif
enddo

!! Finally do gather by summing in x direction

do i=0,rlatt-1
    t=glob.[i]
    call GlobalSumXOf(t)
    glob.[i]=dotpr
enddo

end

```

Die volle Rechengeschwindigkeit von 50 Mflops pro Knoten erhält man nur, wenn Daten in den Registern verarbeitet werden. Speicherzugriffe bremsen den MAD-Chip. Optimal ist es, die Register zu laden und dann möglichst viele Rechenoperationen auf

ihnen auszuführen. Zwischenergebnisse sollten am besten in Registern gehalten werden. Da von den 128 Registern knapp über 100 zur Verfügung stehen, war die erste Idee, als Basisstruktur für die Fermionen einen komplexen Vektor der Länge 16 zu benutzen. Die Struktur der Gleichungen legt ferner eine $2 \cdot 8$ Unterstruktur nahe, so daß die TAO-Definition schließlich lautet:

```
matrix complex part.[8]
matrix part      fermion.[2]
```

In den ersten Compiler-Versionen war es leider nicht möglich, diese Struktur zu benutzen, da der Optimierer Probleme damit hatte. Darum habe ich das Programm zunächst auf der Struktur *part* aufgebaut. Kleinere Strukturen sind nicht sinnvoll, da dann die Zeit für das Laden der Register anwächst. Ab der Version 1.1 konnte der Optimierer auch die *fermion* Struktur korrekt verarbeiten. Die Umstellung hat einen Geschwindigkeitsvorteil von ca. 5-10% gebracht. Die folgende Routine, die eine Multiplikation mit der Fermionmatrix durchführt, gibt einen Eindruck vom TAO-Programm.

```
subroutine multiplyByQ()

register fermion f1,f2,f3
register real   hr,ba
register yukmat yuk

integer ipo

!!***** Q multiplication by new operators**local loop*****
DO ipo=0,nump-1,munroll
  ba=barm
  hr=hopr
  /for ii=0 to munroll-1
    yuk=yukm[ipo+ii]
    f3=fvin[ipo+ii]
    f3=localQ( yuk , f3 , ba )

!!***** Q nonlocal loop with periodic boundary conditions**

    f1=fvin[MPU[ipo+ii,0]]
    f2=fvin[MPD[ipo+ii,0]]
    f3 = f3 + ( hr * ( f1  Qunl1 f2 ) )

    f1=fvin[MPU[ipo+ii,1]]
    f2=fvin[MPD[ipo+ii,1]]
    f3 = f3 + ( hr * ( f1  Qunl2 f2 ) )
```

```

f1=fvin[MPU[ipo+ii,2]]
f2=fvin[MPD[ipo+ii,2]]
f3 = f3 + ( hr * ( f1  Qunl3 f2 ) )

f1=fvin[MPU[ipo+ii,3]]
f2=fvin[MPD[ipo+ii,3]]

fvout[ipo+ii]=f3 + ( hr * ( f1  Qunl4 f2 bc apbc[ipo+ii] ) )

enddo
end

```

Um eine möglichst hohe Effizienz zu erzielen, wurden die kritischen Programmteile vollständig ausformuliert. Dies betrifft in erster Linie alle Routinen die zur Matrixmultiplikation gehören, da diese ca. 90% der Gesamtlaufzeit ausmachen. Die Operatoren *yukm*, *Qunl1*, *Qunl4* ... *bc* sind solche ausformulierten Programmteile. Deutlich zu erkennen ist die Trennung von „Register laden“ und „rechnen in den Registern“.

Die Kommunikation zwischen den Prozessoren ist über die Indexfelder *MPD* (Nachbar in down-Richtung) und *MPU* (up-Richtung) implizit realisiert. Dazu werden zu Programmstart bei der Initialisierung der beiden Felder an den entsprechenden Stellen die Offsets *Left*, *Right* ... addiert, um die gewünschte Topologie zu erhalten (s. Abschnitt 7.1.2).

Im Hybrid-Monte-Carlo wird der Conjugate-Gradient-Algorithmus zur Matrixinversion benutzt, bei dem bei der Bestimmung der Skalarprodukte globale Summen zu bilden sind. Diese treten ebenfalls bei der Monte Carlo-Entscheidung am Ende jeder Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorie und in den Meßroutinen auf. Da die MAD-Knoten nur einfach genau rechnen, muß die Berechnung globaler Summen besonders sorgfältig durchgeführt werden. Dazu wurden zwei Verfahren implementiert.

Das erste realisiert eine baumartige Summation und zwar sowohl bei der lokalen Summation als auch bei der Summierung der Knotenteilergebnisse. Da die Gitterdimensionen und auch die Hardware ein Vielfaches von Zwei sind (mit Ausnahme des $12^3 \cdot 24$ Gitters) wurde ein Binärbaum benutzt. Hat das lokale Untergitter ein Volumen von V_{loc} und die Rechnertopologie ist $N_X \cdot N_Y \cdot N_Z$, so ist der Fehler von der Ordnung

$$(\log_2(V_{loc}) + \log_2(N_X) + \log_2(N_Y) + \log_2(N_Z)) \epsilon, \quad (7.3)$$

statt

$$(V_{loc} + N_X + N_Y + N_Z) \epsilon \quad (7.4)$$

bei der naiven Summation. ϵ ist dabei die Maschinengenauigkeit, die bei IEEE P754 single precision $5.96 \cdot 10^{-8}$ beträgt. Dieses Verfahren minimiert die Zahl der Additionsoperationen, und es werden jeweils Zahlen gleicher Größenordnung behandelt.

Das zweite Verfahren implementiert das Summationsschema von Kahan [Knu81, S.229, Aufgabe 19], bei dem bei jeder Addition der Fehler mitgeführt wird. Der folgende Pseudocode summiert die Werte x_1, \dots, x_n auf. \oplus und \ominus sind die Maschinen-Addition und -Subtraktion im Gegensatz zu den exakten Versionen.

$$\begin{aligned} s_0 &= c_0 = 0 \\ y_k &= x_k \ominus c_{k-1}, \quad s_k = s_{k-1} \oplus y_k, \quad c_k = (s_k \ominus s_{k-1}) \ominus y_k, \quad k = 1, \dots, n \end{aligned} \quad (7.5)$$

Bei exakter Arithmetik wären die Fehler c_k identisch Null, bei endlicher Rechengenauigkeit sind sie es nicht. Der Fehler ist hier von der Ordnung

$$2\epsilon + \mathcal{O}(n\epsilon^2). \quad (7.6)$$

Solange $n \leq 1/\epsilon$ ist, liefert dieses Verfahren sehr gute Ergebnisse.

Das größte Untergitter in den Simulationen hat ein Volumen von 1296 ($12^3 \cdot 24$ Gitter auf der Q4open mit $4 \cdot 4 \cdot 2$ Topologie). Bei der Benutzung der Kahan-Summation sind also keine Probleme zu erwarten. Da die Fehler auch deutlich kleiner als bei der Baumsummation sind, wurde in allen Fällen dieses Verfahren benutzt.

Um das $8^3 \cdot 16$ Gitter auf der QH2 mit $8 \cdot 8 \cdot 4$ Topologie simulieren zu können, habe ich noch eine even/odd-Verschiebung in der t-Richtung implementiert. Da das Untergitter, wenn t lokal ist, nur $1 \cdot 1 \cdot 2$ ist, besteht die Gefahr, daß benachbarte Punkte auf den Knoten gleichzeitig bearbeitet werden. Um dies zu verhindern, habe ich auf den Knoten mit gerader *node_abs_id* die Zeitscheiben in der Anordnung even sites first und auf den Knoten mit ungerader ID in der Anordnung odd sites first gespeichert. Dies wird erreicht, indem man nicht direkt auf die Felder zugreift, sondern über ein Indexfeld, das die even-odd-Anordnung implementiert. Somit findet das Updating auf benachbarten Prozessoren immer in verschiedenen Zeitscheiben statt, und es gibt keine Probleme mit nächsten Nachbarn. Macht man den Indexzugriff nicht an dieser Stelle, sondern ordnet die Felder entsprechend an, so muß man in den Meßroutinen mit einem Indexzugriff die richtige Nachbarbeziehung wieder herstellen. Ich habe mich für ersteres entschieden, da so weniger Änderungen am Programm nötig waren und die Stelle nicht zeitkritisch ist.

Vom Kommunikationsaufwand ist die Kombination $8^3 \cdot 16$ Gitter und QH2 sehr ungünstig, da in x- und y-Richtung jeder Feldzugriff auf den nächsten Nachbarn Interprozessorkommunikation zur Folge hat. In der Praxis erwies sich dies aber als nicht so schlimm wie erwartet (siehe Abschnitt 8.1).

Kapitel 8

Algorithmische Ergebnisse

8.1 Programm-Performance

Wie ich bereits erwähnt habe, fanden die Simulationen bisher auf einer Cray YMP statt, und die Motivation für die Portierung lag in der ungenügenden Rechenkapazität. Um einen Vergleich zwischen den verschiedenen Rechnern, sowohl zwischen Cray und Quadrics als auch zwischen den verschiedenen Quadrics-Konfigurationen zu erstellen, bietet sich die Fermionmatrix-Multiplikation als Grundlage an. Die entsprechende Routine wird im Conjugate-Gradient benutzt und macht ca. 90% der Gesamtlaufzeit des Programms aus. Aus der Kenntnis des Skalierungsverhaltens dieser Routine kann somit direkt auf das Gesamtprogramm geschlossen werden.

Für diesen Test wurden die Parameter wie folgt festgelegt

$$G_\psi = 0.3 \quad (8.1)$$

$$G_\chi = 0.0 \quad (8.2)$$

$$K = 0.126 \quad (8.3)$$

Das Skalarfeld wurde mit Zufallszahlen initialisiert. Der skalare Hoppingparameter κ spielt hier keine Rolle, da er in der Fermionmatrix nicht auftritt. Die Parameter sind so, wie es bei einem typischen Simulationslauf der Fall ist. Tabelle 8.1 listet die Zeiten für je 1000 Multiplikationen auf.

Der Vergleich der beiden kleinen Gitter $4^3 \cdot 8$ und $8^3 \cdot 16$ ergibt einen Faktor von ungefähr zwei zwischen der Cray YMP und der Quadrics Q1 mit 8 Rechenknoten. Auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter ist das Verhältnis etwas günstiger für die Cray als auf dem $8^3 \cdot 16$ Gitter. Die Ursache hierfür liegt im größeren Untergitter beim $8^3 \cdot 16$ Gitter. Da alle rechenzeitintensiven Schleifen über die Untergitterlänge gehen, funktioniert das Pipelining hier besser als auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter, somit ist die Performance besser. Weiterhin ist natürlich bei dem kleineren Gitter das Verhältnis von lokalen Rechenoperationen zu Kommunikation ungünstiger, da das Volumen/Oberflächen-Verhältnis kleiner ist.

Im nächsten Schritt will ich jetzt das Skalierungsverhalten bezüglich Gittergröße und Knotenzahl der Quadrics untersuchen. Die Zahl der Knoten wächst von links nach rechts wie in der dritten Zeile in Tabelle 8.1 angegeben ist. Für das $8^3 \cdot 16$ Gitter sollten sich folglich Geschwindigkeitssteigerungen von 4, 4 und 2 ergeben, wenn man in Tabelle 8.1

Rechner Konfiguration # Knoten	Single MAD 1 · 1 · 1	Q1 2 · 2 · 2	Q4open 2 · 4 · 4	QH1 8 · 4 · 4	QH2 8 · 8 · 4	Cray YMP 1
$4^3 \cdot 8$	54.0	7.8	3.0 2.8*			14.3
$8^3 \cdot 16$		100.9	29.2	10.8 7.9*	5.9 5.4*	226.9
$12^3 \cdot 24$			131.0	34.5*		
$16^3 \cdot 32$				108.8	58.4 54.4*	

Tabelle 8.1: Alle Angaben sind CPU-Zeit in Sekunden für je 1000 Fermionmatrix-Multiplikationen. Nach rechts sind die Rechnerkonfigurationen aufgetragen, nach unten die Gittergrößen. Leere Felder geben an, daß die Gittergröße auf dieser Konfiguration nicht läuft. Bei den Zeiten mit * sind die Gitterdimensionen TYZ verteilt, bei den anderen XYZ.

von links nach rechts geht. Gemessen wurde 3.5, 2.7 und 1.8 (jeweils XYZ-Version). Der Unterschied zwischen Theorie und Praxis läßt sich wieder gut mit den beiden Punkten Pipelining und Kommunikation erklären. Beim Übergang von der Q1 auf die Q4open nehmen Pipelining und Kommunikation nur leicht ab bzw. zu, so daß der Gewinn nahe am Optimum liegt. Geht man dann zur QH1 über, so werden diese beiden Performance-Faktoren deutlich stärker verschlechtert. In X-Richtung ist jetzt jeder Zugriff mit Interprozessor-Kommunikation verbunden, und die Schleife über das lokale Gitter ist mit einer Länge von $1 \cdot 2 \cdot 2 \cdot 16 = 64$ für das Pipelining auch nicht mehr optimal. Eine weitere Reduktion des lokalen Gitters auf der QH2 bringt dann allerdings keine weitere deutliche Verschlechterung des Performanceanstiegs, wie der Faktor von 1.8 gegenüber dem Theoriewert von 2 zeigt.

Den Einfluß des Pipelinings und der Kommunikation kann man auch an den Beispielen erkennen, bei denen ich Läufe sowohl in XYZ-Konfiguration als auch in TYZ-Konfiguration durchgeführt habe. Aufgrund der speziellen Hardware- und Gitterkonfigurationen ist das lokale Volumen und damit die Schleifenlänge für das Pipelining immer gleich. So ist z.B. beim $8^3 \cdot 16$ Gitter auf der QH2 das lokale Gitter in XYZ-Konfiguration $1 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 16$ und in TYZ-Konfiguration $8 \cdot 1 \cdot 2 \cdot 2$. In beiden Fällen sind auf jedem Knoten 32 Gitterpunkte gespeichert. Der Laufzeitunterschied, den man sieht, ist also allein durch die Kommunikation bedingt. Der geringe Performancegewinn beim $4^3 \cdot 8$ Gitter liegt an der eigentlich falschen Hardware-Konfiguration, die hier $2 \cdot 4 \cdot 4$ statt $4 \cdot 4 \cdot 2$ ist. Damit sind die Untergitter $2 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 8$ bzw. $4 \cdot 1 \cdot 1 \cdot 4$, was kaum einen Gewinn bringt.

8.2 Einstellung der Parameter im Hybrid-Monte-Carlo

8.2.1 Matrixinversion

Die Matrixinversion ist beim Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus der kritische Teil bezüglich der Rechenzeit wie ich in Kapitel 6 erwähnt habe. Da die Matrix nur nächste Nachbarn verbindet, ist sie dünn besetzt. Weiterhin benötigt man nicht direkt die inverse Matrix A^{-1} , sondern die Lösung des Systems

$$A x = b \tag{8.4}$$

bei gegebener Quelle b .

Zur Lösung solcher Problemstellungen bieten sich iterative Verfahren an, bei denen die Lösung x mittels Iteration approximativ bestimmt wird. Diese Verfahren laufen allgemein unter dem Namen Krylov-Raum-Verfahren, da bei der Iteration eine Basis für den Krylov-Raum aufgebaut wird. Eine Aufstellung und kurze Einführung in diese Verfahren gibt [BBC⁺93].

Es gibt eine Vielzahl von Inversionsverfahren und es ist nicht a priori klar, welches bei gegebener Matrix optimal ist. Die am häufigsten benutzten sind der Conjugate-Gradient (CG), der Minimal-Residue (MR), der Bi-Conjugate-Gradient stabilized (BiCGstab) sowie verschiedene spezielle Variationen dieser Algorithmen. Dabei stellen die Verfahren unterschiedliche Anforderungen an die Matrix. Der CG arbeitet nur mit positiv definiten, symmetrischen Matrizen, der MR mit symmetrischen Matrizen und der BiCGstab auch mit unsymmetrischen Matrizen.

M. PLAGGE hat in seiner Dissertation [Pla93] die Eignung dieser Verfahren für das Higgs-Yukawa-Modell bei verschiedenen Parametern untersucht. Der CG stellte sich dabei als günstigstes für den hier betrachteten Parameterbereich heraus. Abbildung 8.1 zeigt die einzelnen Schritte beim CG in einem Pseudocode.

Der CG konvergiert in maximal $\text{rang}(A)$ Schritten. Das Abbruchkriterium $r_k \neq 0$ kann bei Rechnungen mit endlicher Genauigkeit natürlich nicht aufrechterhalten werden. Vielmehr wird man sich eine Schranke vorgeben, die erreicht werden muß. Bei der Festlegung dieser Schranke hat man eine gewisse Wahlfreiheit in der Methode. Auf jeden Fall muß die Schranke so gewählt werden, daß die physikalischen Ergebnisse sich bei einer weiteren Reduzierung der Schranke nicht mehr ändern.

Abbildung 8.2 zeigt das Konvergenzverhalten des CG für zwei $16^3 \cdot 32$ Gitterkonfigurationen in einer Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorie. In beiden Fällen ist das typische Verhalten zu sehen. Die obere Kurve fängt bei $\|r_0\| = 2.8 \cdot 10^6$ an. Das Abbruchkriterium lautet

$$\|r_k\| < \|r_0\| \cdot 10^{-20} = 2.8 \cdot 10^{-14}.$$

In den ersten 50 Iterationen werden von diesen 20 Größenordnungen sechs bewältigt. Für die restlichen 14 Ordnungen werden dann weitere 557 Iterationen benötigt. Im zweiten Fall ist das Verhältnis ähnlich. Hier wurde die Zahl der Iterationen durch geeignete Wahl des Startvektors mittels Educated-Guess (siehe unten) reduziert. Die Quelle b ist

```

     $k = 0; x_0 = 0; r_0 = b$ 
    while  $r_k \neq 0$ 
         $k = k + 1$ 
        if  $k = 1$ 
             $p_1 = r_0$ 
        else
             $\beta_k = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{r_{k-2}^T r_{k-2}}$ 
             $p_k = r_{k-1} + \beta_k p_{k-1}$ 
        end
         $\alpha_k = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{p_k^T A p_k}$ 
         $x_k = x_{k-1} + \alpha r_{k-1}$ 
         $r_k = b - A x_k$ 
    end
     $x = x_k$ 

```

Abbildung 8.1: Pseudocode für den Conjugate-Gradient-Algorithmus. Das Abbruchkriterium $r_k \neq 0$ muß bei endlicher Rechengenauigkeit in $r_k < r_{stop}$ oder Varianten hiervon geändert werden.

in beiden Fällen dieselbe, da beim Hybrid-Monte-Carlo die konjugierten Momente der Pseudofermionfelder, die den Quellenvektor b bilden, nicht durch die Dynamik geändert werden.

Die relevante Schranke wird für alle praktischen Fälle auf dem langsamen Ast der Konvergenzkurve liegen. Um so wichtiger ist es, hier einen möglichst optimalen Wert zu finden, da man sonst viel Rechenzeit vergibt.

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen habe ich diese Schranke wie folgt bestimmt. Die Güte der Matrixinversion beeinflußt die Genauigkeit der Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorie, da der Ergebnisvektor x_r in das Leapfrog-Verfahren eingeht. Eine Größe, die direkt davon abhängt, ist der Faktor $\exp(H_{neu} - H_{alt}) = e^{\delta H}$, der in die Metropolis-Entscheidung am Ende der Trajektorie eingeht.

Diesen Faktor habe ich für gleiche Startkonfigurationen (Felder und Zufallszahlengenerator) und feste Trajektorienlänge für verschiedene Schranken bestimmt. Es wurden je zehn Startkonfigurationen gemittelt. Für die Gitter $8^3 \cdot 16$ und $12^3 \cdot 24$ wurde der Wert von $e^{\delta H}$ bei $r_{stop} = 10^{-18}$ als exakt angenommen, beim $16^3 \cdot 32$ Gitter bei $r_{stop} = 10^{-20}$. Es wurden dann die relativen Abweichungen von diesem Wert für die verschiedenen Schranken gemäß

$$\delta e^{\delta H}(r_{stop}) = \frac{|e_{exakt}^{\delta H} - e^{\delta H}(r_{stop})|}{e_{exakt}^{\delta H}} \quad (8.5)$$

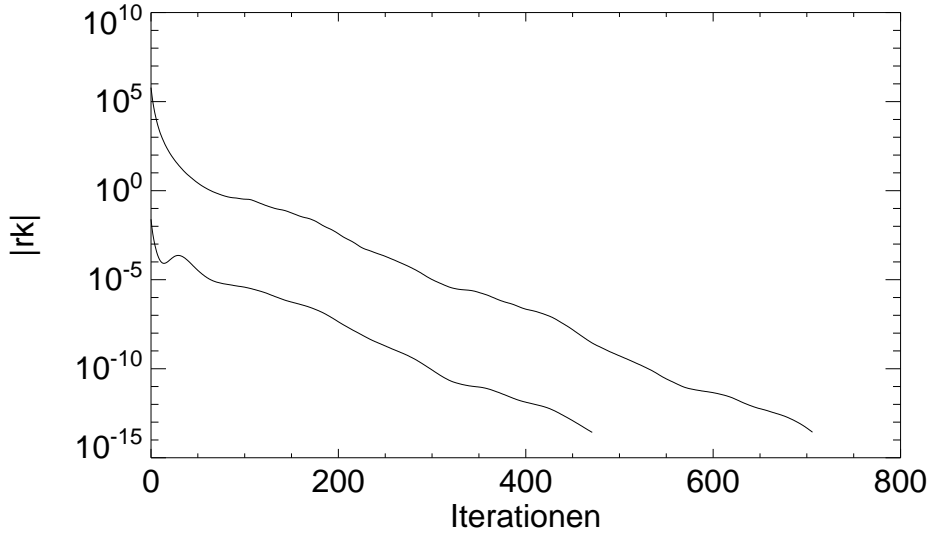


Abbildung 8.2: Konvergenzverhalten des CG auf einem $16^3 \cdot 32$ Gitter bei $G_\psi = 0.45$ und $\kappa = 0.203$. Das Abbruchkriterium ist $\|r_k\| < \|r_0\| \cdot 10^{-20}$. Die obere Kurve ist aus dem ersten CG-Aufruf in einer Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorie mit Educated-Guess-Preconditioning (5. Ordnung), die untere der zehnte Aufruf.

berechnet, und deren Standardabweichung aus den zehn Werten bestimmt. Abbildung 8.3 zeigt die Ergebnisse dieser Einstellungsläufe.

Gitter	$8^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 24$	$16^3 \cdot 32$
$r_{stop}^{1\%}$	10^{-12}	10^{-14}	10^{-16}

Tabelle 8.2: Schranken für den CG mit maximal 1% relativem Fehler.

Für $r_{stop} = 10^{-8}$ und $r_{stop} = 10^{-10}$ sind die Abweichungen noch größer als 10%, werden dann aber schnell kleiner. Setzt man 1% als Vertrauensschranke an, so muß man die Schranken entsprechend Tabelle 8.2 wählen. Dabei wurden die Werte von $r_{stop}^{1\%}$ so gewählt, daß $\delta e^{\delta H}(r_{stop}) + 2\sigma < 0.01$ ist. Dies gewährleistet, daß 95.5% der Abweichungen kleiner sind als 1%.

8.2.2 Verbesserung der Inversion

Um die Zahl der Matrixmultiplikationen weiter zu verringern, gibt es verschiedene Ansätze. Zum einen kann man versuchen, die Matrix mittels Preconditioning in eine andere, leichter zu invertierende Form zu bringen. Die Idee hinter diesen Verfahren ist es, anstatt das

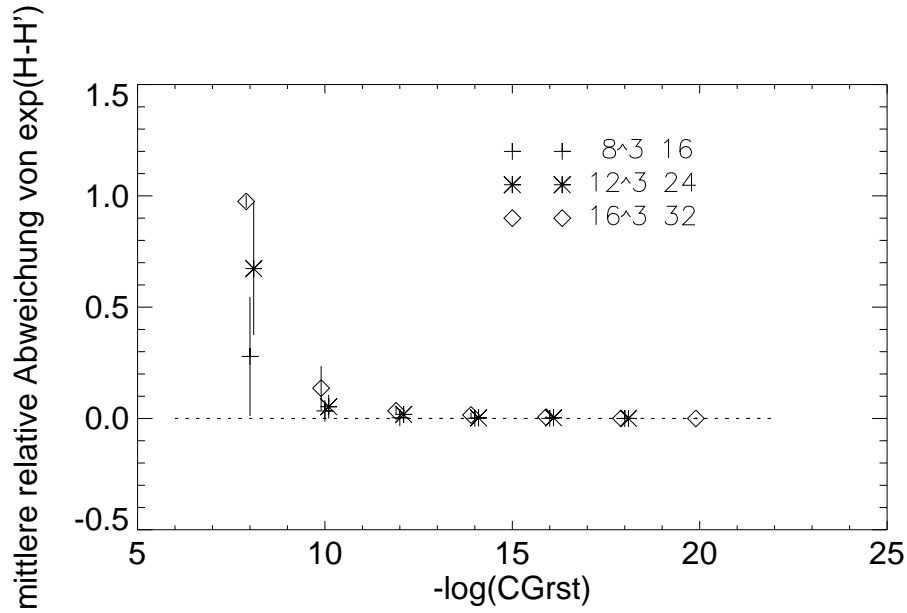


Abbildung 8.3: Mittlere relative Abweichung des Gewichtungsfaktors $e^{\delta H}$ der Metropolis-Entscheidung. Es wurden je zehn Startkonfigurationen gemittelt. Die Parameter waren $G_\psi = 0.45$ und $\kappa = 0.203$

System Gl. 8.4 zu lösen, das System

$$M^{-1} A x = M^{-1} b \quad (8.6)$$

zu betrachten. Man muß nun zusätzlich noch in jeder Iteration das System $M z_k = r_k$ lösen. Sinnvoll ist eine solche Transformation dann, wenn die Zahl der neu hinzukommenden Rechenschritte geringer ist, als die durch die geringere Iterationszahl eingesparten Schritte. Die even/odd-Zerlegung, bei der man die Gitterpunkte in einem Schachbrettartigen Muster anordnet, ist solch ein Fall. Ich werde im dritten Teil auf diese Methode noch einmal zurückkommen.

Die gerade beschriebene Form des Preconditioning greift direkt in den Algorithmus ein. Zudem ist der Code bei effizienter Implementierung deutlich länger, was bei dem begrenzten Programmspeicher auf der Quadrics eine weitere Einschränkung bedeutet.

Eine andere Möglichkeit ist es, den Startvektor für den CG möglichst gut zu raten. Dieses Verfahren ist im Zusammenhang mit dem Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus von besonderem Interesse. Beim Hybrid-Monte-Carlo werden die Feldkonfigurationen mittels klassischer Dynamik verändert. Die Änderungen verlaufen stetig in der fiktiven Zeitkoordinate τ , und man kann auch für den optimalen Startvektor ein solches Verhalten erwarten. Eine Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorie besteht aus je einem Halbschritt mit Integrations-schrittweite $\delta\tau/2$ am Anfang und am Ende sowie N Schritten mit $\delta\tau$ dazwischen. Speichert man die Ergebnisvektoren des CG nach jedem Schritt, so kann man aus dieser Historie den

Ordnung	Zahl der Iteration	Zeit in s
1	6548(73)	540(6)
2	5842(92)	483(8)
3	5274(85)	436(7)
4	4850(74)	402(6)
5	4531(72)	376(6)
6	4294(86)	357(7)
7	4281(57)	356(5)
8	4492(58)	373(5)
9	4684(66)	389(5)
10	4847(72)	402(6)

Tabelle 8.3: CIM Optimierung. Die Daten stammen von je zehn Trajektorien auf thermalisierten $16^3 \cdot 32$ Gittern bei $G_\psi = 0.45$ und $\kappa = 0.203$. Die Integrationsschrittweite ist 0.025, die Zahl der Schritte 19. Die Zahl der Iterationen ist die Summe der Iterationen aller 19 CG-Aufrufe.

Startvektor für die nächste Matrixinversion vorherbestimmen. Dieses Verfahren läuft in der Literatur unter dem Namen „Gottlieb-Trick“ [GLT⁺87] oder „Chronological Inversion Method“ [BTLO97]. In der ersten Referenz wurde das Verfahren nur bis zur zweiten Ordnung betrachtet, während es in der zweiten für beliebige Ordnungen untersucht wurde. Ordnung meint hier die Zahl der benutzten vorhergehenden Ergebnisvektoren. Ich werde die Methode im folgenden kurz als CIM bezeichnen.

Die CIM N -ter Ordnung ist wie folgt definiert. Man hat zu den Zeiten $\tau_0, \dots, \tau_{N-1}$ die Ergebnisvektoren x_0, \dots, x_{N-1} gespeichert. Der Startvektor für den nächsten Schritt bestimmt sich dann aus

$$x_N = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_{N-1} x_{N-1}. \quad (8.7)$$

Die Koeffizienten c_i ergeben sich zu

$$c_i = (-1)^i \frac{N!}{i! (N-i)!}, \quad (8.8)$$

da Gl. 8.7 für beliebige x_i gelten muß.

Die Entwicklung der Startvektoren kann natürlich nur innerhalb einer Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorie als stetig angenommen werden, da die konjugierten Momente der Pseudofermionfelder (b in Gl. 8.4) jedesmal neu gewählt werden. Zu Beginn einer Trajektorie liegt also keine Historie von Vektoren vor. Eine Möglichkeit besteht darin, bei N -ter Ordnung die ersten N Schritte ohne die CIM durchzuführen und dann beim $N+1$ -ten Schritt mit den verbesserten Startvektoren zu beginnen. Besser erschien mir aber folgendes Verfahren. In den Schritten $k = 1, \dots, N$ wird die CIM in der Ordnung $k-1$ verwendet,

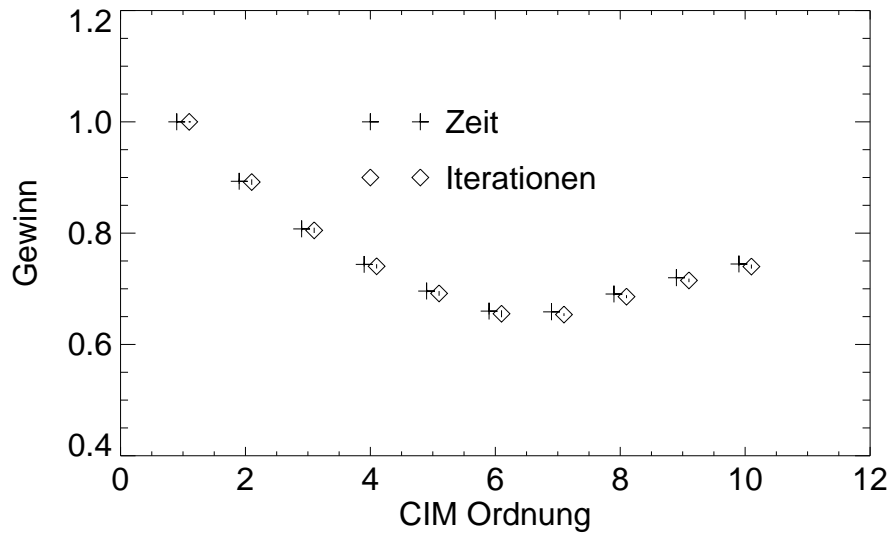


Abbildung 8.4: CIM Optimierung. Die Parameter sind wie in Tabelle 8.3. Zum Vergleich wurden alle Daten auf die Zahl der Iterationen bzw. die Zeit pro Trajektorie bei Ordnung eins normiert.

wobei für $k = 0$ ein Startvektor mit lauter Nullen und einer 1 benutzt wird. Ab dem N -ten Schritt wird dann das Verfahren N -ter Ordnung beibehalten. Die Vektoren werden dabei in einem Ringpuffer der Länge N gespeichert, der zyklisch überschrieben wird.

Für die Simulation muß man jetzt noch die beste Ordnung finden. Wählt man N zu klein, so benutzt man zu wenig Information aus der Historie. Wählt man N zu groß, besteht die Gefahr, durch weit zurückliegende Vektoren die Extrapolation zu verschlechtern. Irgendwo dazwischen liegt der günstigste Wert für N . Weiterhin gilt es, die Speicheranforderungen zu berücksichtigen. Für den CG selbst braucht man 6 Vektoren. Einen Ergebnisvektor des CG muß man auf jeden Fall speichern, also braucht man Speicherplatz für $N - 1$ zusätzliche Vektoren, von denen beim $16^3 \cdot 32$ Gitter jeder 16 Mbyte Hauptspeicher belegt.

Ich habe zur Bestimmung von N auf zehn Konfigurationen jeweils eine Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorie mit CIM der Ordnung $1, \dots, 10$ laufen lassen. Ordnung 1 entspricht dem Fall, daß man den alten Ergebnisvektor als neuen Startvektor benutzt. Tabelle 8.3 zeigt die Zahl der Iterationen und die benötigte Zeit pro Trajektorie. Man erkennt deutlich, wie die Zahl der Iterationen bis zur Ordnung sechs bis sieben abnimmt und dann wieder ansteigt.

Um den Mehraufwand zur Berechnung des Startvektors gegenüber dem Gewinn bei der Iterationsanzahl abschätzen zu können, habe ich in Abbildung 8.4 die Zeiten und die Iterationen auf die Daten der ersten Ordnung normiert. Die Graphik zeigt, daß es praktisch

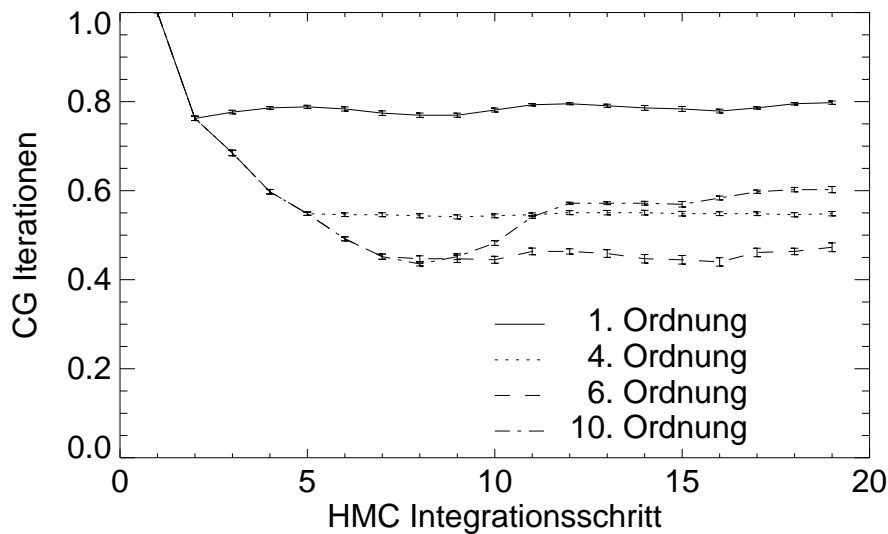


Abbildung 8.5: CIM Optimierung. Die Parameter sind wie in Tabelle 8.3. Die Daten sind auf den ersten CG-Aufruf innerhalb der Trajektorien normiert. Die Fehlerbalken wurden aus den zehn unabhängigen Messungen bestimmt.

keinen Unterschied zwischen der Iterationsreduzierung und dem Laufzeitgewinn gibt. Der Mehraufwand ist also vernachlässigbar, und das Verfahren setzt die Zahl der gesparten Iterationen zu 99.5% in Laufzeitgewinn um, wie eine numerische Inspektion der Werte in Abbildung 8.4 zeigt. Anders gesagt, bis zur Ordnung neun werden maximal 0.5% des Zeitgewinns für die aufwendigere Berechnung des Startvektors verbraucht.

Neben diesen Aussagen über die Gesamttrajektorie ist es noch interessant zu wissen, wie die Reduktion innerhalb einer Trajektorie verläuft. Auch dazu wurde wieder über zehn Startkonfigurationen gemittelt und die Zahl der CG-Iterationen innerhalb der Trajektorien auf die Anzahl beim ersten Aufruf normiert. Abbildung 8.5 zeigt den Verlauf der CG-Iterationen für die Ordnungen 1, 4, 6 und 10.

Man erkennt die spezielle Wahl der Implementierung bezüglich der Ordnung N und der Länge der Historie. Der Verlauf für eine Ordnung $N > K$ ist bis $N = K$ identisch mit der Methode bei Ordnung K . Bis $N = 6, 7$ sieht man einen stetigen Abfall der Iterationszahl bis zum Integrationsschritt N und erreicht dann ein Plateau, das etwas unter der Hälfte der Iterationen zu Beginn der Trajektorie liegt. Für $N > 7$ steigen die Kurven nach $K = 6, 7$ Integrationsschritten wieder an und erreichen ein Plateau oberhalb desjenigen bei $N = 6, 7$. Dies ist ein Hinweis auf eine Historie, die in der fiktiven Simulationszeit zu weit zurückliegende Vektoren berücksichtigt, und deshalb zu schlechteren Extrapolationen führt.

8.2.3 Integrationsschrittweite

Ein weiterer Parameter im Hybrid-Monte-Carlo, den man einstellen muß, ist die Integrationsschrittweite $\delta\tau$. Wie ich in Kapitel 6 geschrieben habe, beträgt der Fehler in der Leapfrog-Integration in den zwei Halbschritten jeweils $\mathcal{O}(\delta\tau^2)$ und in den N Zwischenschritten je $\mathcal{O}(\delta\tau^3)$. Betrachtet man jetzt eine Trajektorie der Länge τ_0 , so wird man bei kleinem $\delta\tau$ zwar den Fehler klein halten, aber der Rechenaufwand geht mit der Zahl der Schritte, die durch $\frac{\tau_0}{\delta\tau}$ gegeben ist. Macht man andererseits $\delta\tau$ zu groß, so wird die Akzeptanzrate im abschließenden Metropolissschritt klein und die Autokorrelationszeit steigt an.

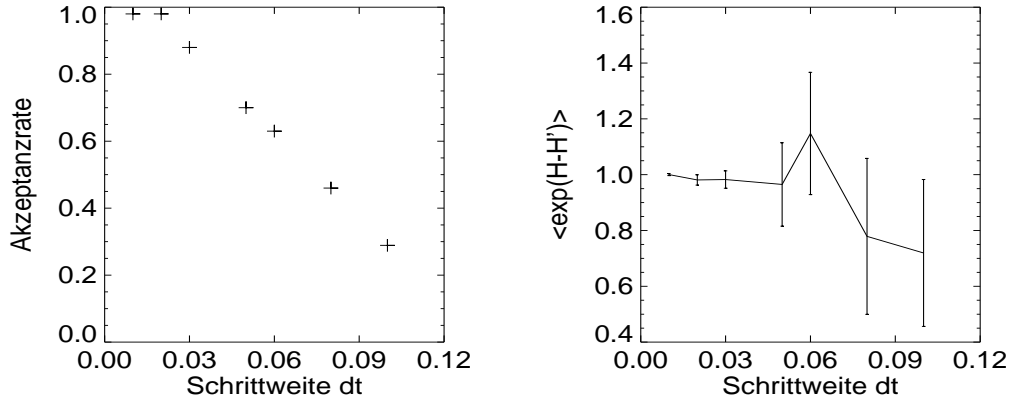


Abbildung 8.6: Abhängigkeit der Akzeptanzrate A und des Erwartungswerts $\langle e^{-\delta H} \rangle$ von der Integrationsschrittweite. Die Datenpunkte sind jeweils über 50 Trajektorien gemittelt. Die Gittergröße beträgt $8^3 \cdot 16$, die Kopplungen liegen bei $G_\psi = 0.45$ und $\kappa = 0.203$ und das Abbruchkriterium im CG ist $r_{stop} = 10^{-13}$.

Abbildung 8.6 zeigt die Abhängigkeit der Akzeptanzrate A und des Erwartungswerts $\langle e^{-\delta H} \rangle$ von der Integrationsschrittweite $\delta\tau$. Bis zu einer Schrittweite von 0.02 liegt die Akzeptanzrate fast bei 100% und fällt dann linear ab. Für den Erwartungswert $\langle e^{-\delta H} \rangle$ gilt aufgrund der Erhaltung des Phasenraumvolumens im Hybrid-Monte-Carlo, $[d\phi'][d\pi'] = [d\phi][d\pi]$,

$$\mathcal{Z} = \int [d\phi'] [d\pi'] e^{-H(\phi', \pi')} \quad (8.9)$$

$$= \int [d\phi] [d\pi] e^{-H(\phi, \pi) - \delta H} \quad (8.10)$$

$$= \mathcal{Z} \langle e^{-\delta H} \rangle \quad (8.11)$$

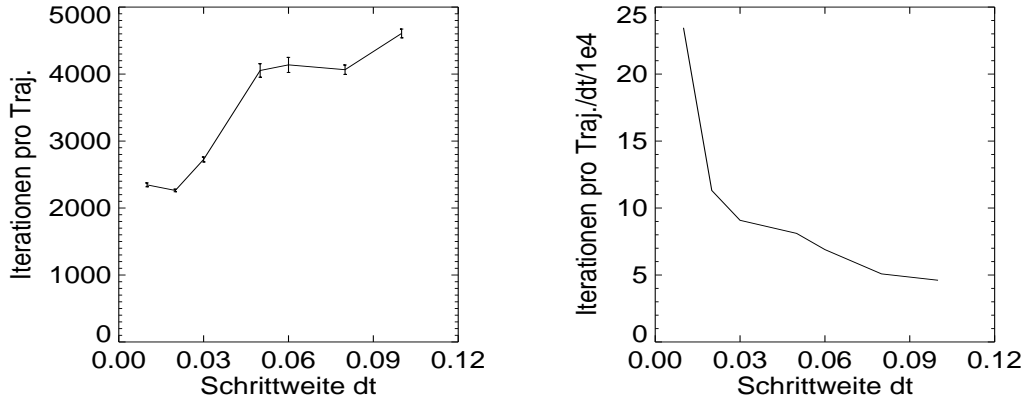


Abbildung 8.7: Die mittlere Zahl der Iterationen im CG pro Trajektorie über 50 Trajektorien. Links reine Iterationen und rechts dividiert durch die Schrittweite (mit Skalenfaktor 10 000). Die restlichen Daten sind wie bei Abbildung 8.6.

und damit

$$\langle e^{-\delta H} \rangle = 1. \quad (8.12)$$

Aus Abbildung 8.6 erkennt man, daß diese Identität für Schrittweiten bis ≈ 0.05 sehr gut erfüllt ist. Die Abweichung für die beiden Punkte bei $\delta\tau = 0.08$ und $\delta\tau = 0.1$ liegt in der begrenzten Statistik von 50 Trajektorien pro $\delta\tau$, die die Grundlage für diese Daten bilden.

Mit steigender Integrationsschrittweite wird auch die Extrapolation bei der Chronological-Inversion-Method schlechter und der Aufwand für die Inversion steigt an. Abbildung 8.7 zeigt die mittlere Zahl der CG Iterationen pro Trajektorie und das Verhältnis dieser Zahl zur Schrittweite, das proportional zum Verhältnis aus verbrauchter Rechenzeit und zurückgelegter Distanz im Phasenraum ist. Obwohl bei kleinen Schrittweiten die Zahl der Iterationen deutlich geringer ist, liegt das Optimum für die erzielte Dekorrelation pro Rechenzeiteinheit bei dieser Betrachtung bei den größeren Werten für $\delta\tau$. Bezieht man jetzt noch die Akzeptanzrate mit ein, so bildet sich ein breiter Bereich brauchbarer Schrittweiten wie Abbildung 8.8 zeigt. Die dargestellte Größe ist gegeben durch

$$R_{opt} = \frac{\langle N_{iter} \rangle}{\delta\tau A} \times 10^{-4} \quad (8.13)$$

und sollte ein Minimum annehmen.

In der Praxis kann man aus Rechenzeitgründen nicht für jeden zu simulierenden Parametersatz eine solch aufwendige Analyse durchführen. Man startet mit geschätzten Parametern und variiert diese solange, bis sie stimmen. Wie die Ergebnisse dieses Abschnitts zeigen, hat man hierbei einen ausreichenden Spielraum für eine vernünftige Wahl. In allen

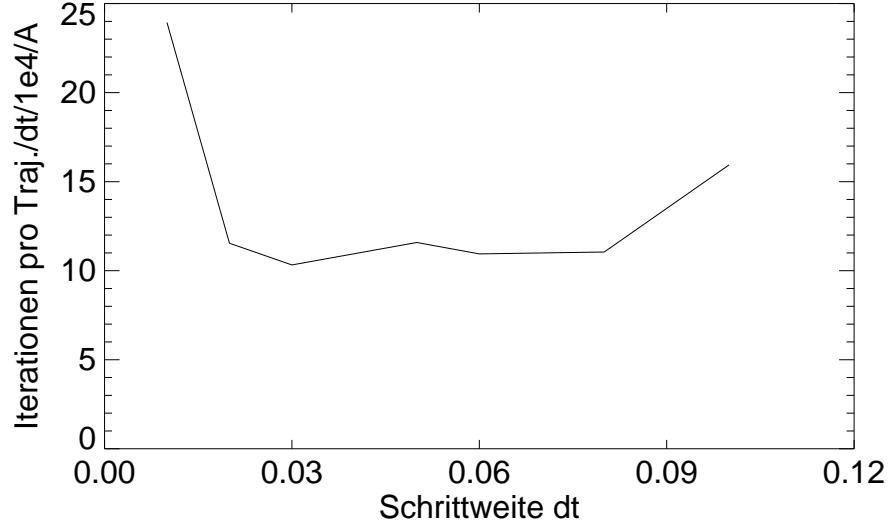


Abbildung 8.8: R_{opt} wie in Gl. 8.13 definiert in Abhängigkeit von der Integrationsschrittweite. Die restlichen Daten sind wie bei Abbildung 8.6.

Simulationen mit dem Hybrid-Monte-Carlo habe ich die Schrittweite so eingestellt, daß die Akzeptanzrate zwischen 75 und 80% lag.

Eine Hilfe bei der Justierung der Parameter ist das Skalierungsverhalten des Hybrid-Monte-Carlo bezüglich Volumen $V = L^3 \cdot T$ und Schrittweite $\delta\tau$. Der Änderung in der Energie pro Trajektorie geht wie

$$\overline{\delta H} = C \sqrt{V} \delta\tau^2 + \mathcal{O}(\delta\tau^4), \quad (8.14)$$

woraus

$$\delta\tau \propto V^{-\frac{1}{4}} \quad (8.15)$$

folgt, wenn die Akzeptanzrate im Limes $V \rightarrow \infty$ konstant bleiben soll. Der Gesamtaufwand geht dann mit $V^{5/4}$, da man $N = \frac{\tau_0}{\delta\tau}$ Schritte pro Trajektorie macht. Hat man also auf einem kleinen Gitter bereits einen Wert für die Schrittweite, so kann man ihn auf diese Weise für größere Gitter abschätzen.

Die Abhängigkeit von den physikalischen Parametern ist nicht so leicht bestimmbar. In unserem Modell spielt der skalare Hoppingparameter kaum eine Rolle für die Wahl von $\delta\tau$. Mit steigender Yukawa-Kopplung G_ψ muß man jedoch $\delta\tau$ kleiner wählen, um eine konstante Akzeptanzrate zu halten.

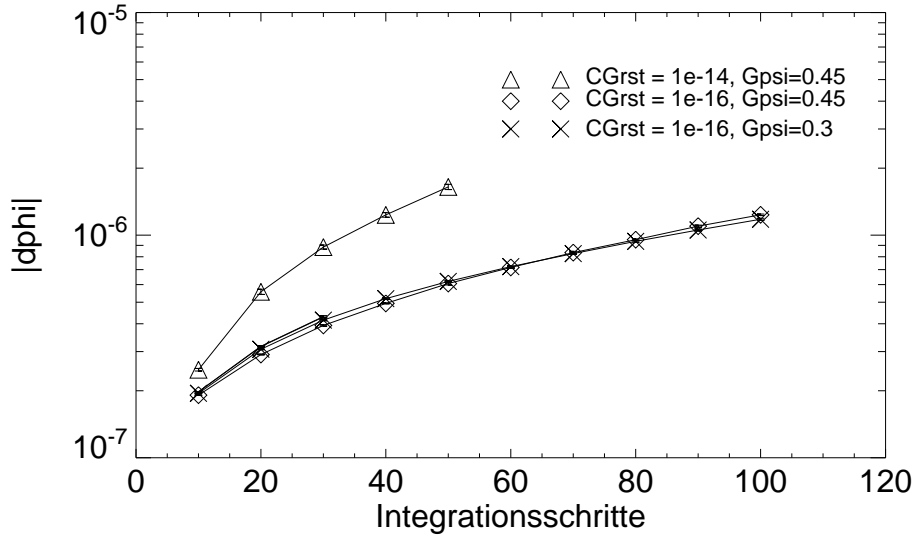


Abbildung 8.9: Abweichung des Skalarfeldes bei Vor- und Rückwärtsintegration. Die Gittergröße ist $16^3 \cdot 32$. $G_\psi = 0.45$ bzw. $G_\psi = 0.3$ und $\kappa = 0.203$ bzw. $\kappa = 0.26$.

8.2.4 Reversibilität im Hybrid-Monte-Carlo

Die Gleichungen, die man beim Hybrid-Monte-Carlo integriert sind nichtlinear und somit besteht die Möglichkeit, daß sie für bestimmte Parameter chaotisches Verhalten zeigen. Dabei meine ich mit chaotisch ein exponentielles Auseinanderlaufen von im Phasenraum nahe beieinanderliegender Konfigurationen unter der Dynamik. K. JANSEN und C. LIU haben dies zuerst für den Hybrid-Monte-Carlo in der QCD mit Eichgruppe SU(2) und SU(3) untersucht, ebenso wie die SESAM Kollaboration für QCD-Konfigurationen auf großen Gittern [JL95, JL97, GGH⁺95].

Der Hybrid-Monte-Carlo erfüllt detailliertes Gleichgewicht, wenn die Durchführung der klassischen Dynamik reversibel ist. Wenn die Dynamik chaotisch ist, dann muß man befürchten, daß durch Rundungsfehler und nicht exakte Inversion Fehler auftreten, die die Reversibilität verletzen.

Ein Maß für das exponentielle Auseinanderlaufen benachbarter Trajektorien ist der Liapunov-Exponent ν . Eine einfache, für diese Arbeit ausreichende Definition ist

$$||\delta\phi|| \propto e^{\nu \delta\tau N_{MD}}, \quad (8.16)$$

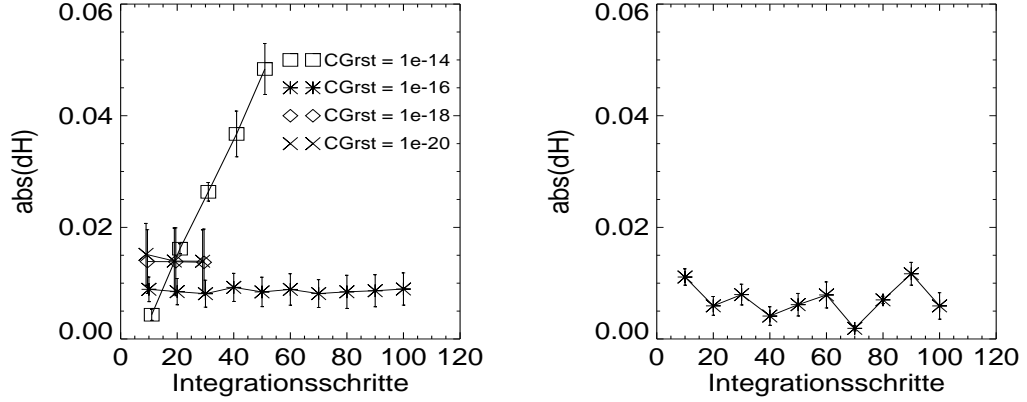


Abbildung 8.10: Energiedifferenz ΔH nach einer Vor- und Rückwärtsintegration. Die Parameter sind wie in Abbildung 8.9. Links die Daten für $G_\psi = 0.45$, rechts für $G_\psi = 0.3$.

wobei N_{MD} die Anzahl der Molekulardynamikschritte ist und mit

$$||\delta\phi|| = \sqrt{\frac{1}{4V} \sum_x \sum_{i=1}^4 (\phi_{x,i}^{start} - \phi_{x,i}^{ende})^2} \quad (8.17)$$

eine Norm im Raum der Skalarfeldkonfigurationen definiert ist.

In den zitierten Arbeiten wird ein von der Eichkopplung β abhängiger Exponent ν im Bereich von 0.4 . . . 0.8 gefunden, also größer als Null. Das heißt, eine sensitive Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen ist gegeben und damit die Verletzung der Reversibilität. Die Brauchbarkeit des Hybrid-Monte-Carlo hängt nun von der Stärke dieser Verletzung ab. Ist durch τ die Länge der Trajektorie in der fiktiven Monte-Carlo-Zeit gegeben, dann erwartet man, daß die Stärke mit $\sqrt{\tau}$ aufgrund von Rundungsfehlern und $e^{\nu\tau}$ aufgrund der nicht-linearen, chaotischen Natur der Gleichungen ansteigt. Die Autoren kommen zu dem Schluß, daß ab 32^4 auf einem Rechner mit 32 bit Rechengenauigkeit die Fehler nicht mehr akzeptabel sind.

Um dies auch für das Higgs-Yukawa-Modell zu untersuchen, habe ich fünf thermalisierte Konfigurationen jeweils bis zu 100 Molekulardynamikschritten vorwärts und wieder zurück integriert. Dazu werden am Ende der Vorwärtsintegration die Impulse umgedreht. Am Ende des Zyklus habe ich die Fehler in der Energie und der Skalarfeldkonfiguration bestimmt. Um sicherzugehen, daß das Abbruchkriterium im CG hinreichend genau ist, habe ich bis $N_{MD} = 30$ Vergleichsläufe mit mehreren Werten für r_{stop} durchgeführt. Die Läufe wurden alle auf dem größten benutzten Gitter, $16^3 \cdot 32$, durchgeführt, da man hier die größten Fehler erwartet.

Abbildung 8.9 zeigt die Ergebnisse für die Normdifferenz des Skalarfeldes. Man sieht, daß $r_{stop} = 10^{-16}$ ausreichend ist, was sich mit der obigen Analyse deckt. Tabelle 8.4

G_ψ	κ	$\delta\tau$	ν
0.3	0.26	0.028	< 0.44
0.45	0.203	0.025	< 0.42

Tabelle 8.4: Liapunov-Exponenten aus linearen Fits an die Daten in Abbildung 8.9.

enthält die Werte für die Liapunov-Exponenten. Wie man an der Zeichnung sieht, ist mit $N_{MD} \sim 100$ der asymptotische Bereich noch nicht ganz erreicht. Die Werte sind somit nur als obere Schranke zu sehen. Auch im Higgs-Yukawa-Modell bekommt man einen positiven Liapunov-Exponenten, der im gleichen Bereich liegt, wie in der QCD. Dies kann ein Hinweis auf eine universelle, modellunabhängige Eigenschaft des Exponenten sein. Da diese Untersuchungen nur zur Absicherung der Simulationen dienen, habe ich diesen Aspekt nicht weiter verfolgt.

Abbildung 8.10 zeigt die Differenz der Energien von Anfangs- und Endkonfiguration, berücksichtigt also auch die Impulse und Fermionfelder. Man erkennt wiederum das $r_{stop} = 10^{-16}$ hinreichend klein ist. Über die Distanz von 100 Molekular-Dynamik-Schritten ist keine Instabilität zu sehen. Berücksichtigt man die Verletzung der Reversibilität beim detaillierten Gleichgewicht mit einem Korrekturfaktor Z [GGH⁺95],

$$W_S(\phi) W_{Markov}(\phi \rightarrow \phi') = W_S(\phi') W_{Markov}(\phi' \rightarrow \phi) Z, \quad (8.18)$$

dann ist über

$$Z = e^{\Delta(\delta H)} \quad (8.19)$$

der Zusammenhang mit dem Fehler der Energiedifferenz gegeben. Aus den Schwankungen von δH für die verschiedenen Werte von r_{stop} sieht man, daß $\Delta(\delta H)$ im Bereich von 0.01 liegt. Die Abweichung $Z - 1$ beträgt folglich ungefähr 1%.

Bei meinen Simulationsläufen habe ich eine Länge zwischen 15 und 25 Molekular-Dynamik-Schritten benutzt, die per Zufallszahlengenerator aus diesem Intervall gleichverteilt bei jeder Trajektorie gewählt werden. Die geringe Abweichung von 1% beim größten Gitter und der stärksten Yukawa-Kopplung sowie die Tatsache, daß Gl. 8.12 für alle Simulationsläufe sehr gut erfüllt ist, rechtfertigen den Gebrauch des Hybrid-Monte-Carlo für diese Arbeit. Auf noch größeren Gittern wären sicherlich weitere Untersuchungen nötig.

8.3 Autokorrelationszeiten und Fehlerbestimmung

Die mittels Hybrid-Monte-Carlo erzeugten Konfigurationen sind nicht unabhängig voneinander. Dies ist bei der Ermittlung der statistischen Fehler zu berücksichtigen. Die naive Definition des Fehlers des Mittelwerts

$$\Delta \bar{x} = \frac{1}{\sqrt{N}} s(x) \quad (8.20)$$

mit der Standardabweichung

$$\sigma^2(x) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (8.21)$$

gilt nur, wenn die Messungen x_i , $i = 1, \dots, N$ unabhängig sind.

Wenn dies nicht der Fall ist, dann muß man die integrierte Autokorrelationszeit berücksichtigen, die ein Maß für die Abhängigkeit zeitlich aufeinanderfolgender Konfigurationen darstellt.

8.3.1 Definition

Sei $\{x_0, \dots, x_N\}$ eine Folge von Messungen einer Größe x mit Mittelwert $\bar{x} = \langle x_i \rangle$, dann heißt

$$C_{xx}(n) = \langle x_m x_{m+n} \rangle - \bar{x}^2 \quad (8.22)$$

Autokorrelationsfunktion der Größe x . Die normierte Autokorrelationsfunktion ist definiert durch

$$\rho_{xx}(n) = \frac{C_{xx}(n)}{C_{xx}(0)}. \quad (8.23)$$

Bei der Fehlerbestimmung interessieren wir uns für die Varianz der Größe x

$$\begin{aligned} \sigma^2(x) &= \langle (\delta x)^2 \rangle \\ &= \left\langle \left[\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (x_k - \bar{x}) \right]^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \left[\langle x^2 \rangle - \bar{x}^2 + 2 \sum_{k=1}^N \left(1 - \frac{k}{N} \right) (\langle x_0 x_k \rangle - \bar{x}^2) \right]. \end{aligned} \quad (8.24)$$

Mit der Monte-Carlo-Simulation ist eine fiktive Simulationszeit $t_k = k \delta t$ verbunden, wobei δt hier die Zeit für eine Hybrid-Monte-Carlo Trajektorie ist. Numerieren wir die einzelnen Datenpunkte mit diesen Zeitlabeln und transformieren die Summe in ein Integral, so erhalten wir

$$\begin{aligned} \langle (\delta x)^2 \rangle &= \frac{1}{N} \left[\langle x^2 \rangle - \bar{x}^2 + \frac{2}{\delta t} \int_0^{t_N} \left(1 - \frac{t}{t_N} \right) (\langle x(0)x(t) \rangle - \bar{x}^2) dt \right] \\ &= \frac{1}{N} C_{xx}(0) \left[1 + \frac{2}{\delta t} \int_0^{t_N} \left(1 - \frac{t}{t_N} \right) \rho_{xx}(t) dt \right]. \end{aligned} \quad (8.25)$$

Die integrierte Autokorrelationszeit ist dann definiert als

$$\tau_{int} = \int_0^\infty \rho_{xx}(t) dt \quad (8.26)$$

und gibt die Zeitspanne an, in der die Korrelationen „auf Null“ abfallen oder, anders gesagt, die Anzahl der Updates, die man machen muß, um unabhängige Konfigurationen zu erhalten.

Die Zahl der Messungen soll nun so groß sein, daß $\rho_{xx}(t)$ fast Null ist schon für $t \ll t_N$. Der Term mit t/t_N kann dann im Integranden in Gl. 8.25 vernachlässigt werden und wir erhalten mit $\tau_{gesamt} = N \delta t$

$$\langle (\delta x)^2 \rangle = \frac{1}{N} C_{xx}(0) \left(1 + 2N \frac{\tau_{int}}{\tau_{gesamt}} \right). \quad (8.27)$$

Man kann jetzt zwei Fälle unterscheiden

Fall A: $\delta t \gg \tau_{int}$

$$\rightarrow \quad \langle (\delta x)^2 \rangle = \frac{1}{N} C_{xx}(0) \quad (8.28)$$

Fall B: $\delta t \ll \tau_{int}$

$$\begin{aligned} \rightarrow \quad \langle (\delta x)^2 \rangle &= 2 C_{xx}(0) \frac{\tau_{int}}{\tau_{gesamt}} \\ &= 2 C_{xx}(0) \frac{\tau_{int}}{N} \end{aligned} \quad (8.29)$$

Der Fall A beschreibt einen Algorithmus, der im Zeitintervall δt eine unabhängige Konfiguration erzeugt. Der Fehler ist dann durch die naive Definition Gl. 8.20 gegeben, die äquivalent zur Formulierung Gl. 8.28 ist. Im zweiten Fall zeigen die erzeugten Konfigurationen Korrelationen auf einer durch τ_{int} gegebenen Skala und die naive Definition wird um einen Faktor $2\tau_{int}$ modifiziert. Man braucht im Vergleich zum Fall A $2\tau_{int}$ mal mehr Messungen, um den Fehler auf die gleiche Größenordnung herunterzubringen.

Die Wahl von δt ist willkürlich. In unserem Fall ist es natürlich, eine Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorie als Zeiteinheit zu setzen. Ebenso gut hätte man auch immer zehn Trajektorien als einen Zeitschritt auffassen können oder, in die andere Richtung, jeden Integrationsschritt bei der Molekulardynamik. Alles sind erlaubte Definitionen.

Hat man z.B. bei einem bestimmten Parametersatz eine integrierte Autokorrelationszeit von zehn Hybrid-Monte-Carlo-Trajektorien und ist die Bestimmung der Meßgrößen von vergleichbarem Aufwand wie ein Update, so ist es sinnvoller, nur jede zwanzigste Trajektorie zu messen. Der so definierte Algorithmus hat einen zwanzigmal größeren Simulationszeitschritt. Bestimmt man τ_{int} auf dieser Skala, so ist man wieder beim Fall A.

8.3.2 Numerische Bestimmung von τ_{int} und $\sigma(x)$

Bei der konkreten Bestimmung von τ_{int} in Simulationen hat man zwei Möglichkeiten. Zunächst gibt es den direkten Weg über die Definition Gl. 8.26, hier in Summenform,

$$\tau_{int} = \frac{1}{2} + \sum_{i=1}^{\infty} \rho_{xx}(t). \quad (8.30)$$

Die Autokorrelationsfunktion muß dazu numerisch bestimmt werden. Dies geht zum einen immer nur bis zur maximalen Simulationsdauer t_N und zum anderen werden die Fehler von $\rho(t)$ mit steigendem t immer größer, so daß man einen Abschneideparameter $t_{cut} < t_N$ einführen muß. t_{cut} induziert aber einen Bias im Wert von τ_{int} [Sok], nämlich gerade den Rest der Summe mit $t > t_{cut}$

$$\text{bias}(\tau_{int}) = -\frac{1}{2} \sum_{t > t_{cut}} \rho_{xx}(t) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right). \quad (8.31)$$

Für die Varianz von τ_{int} erhält man andererseits

$$\sigma^2(\tau_{int}) \approx \frac{2(2t_{cut} + 1)}{N} \tau_{int}^2, \quad (8.32)$$

dabei ist $\tau_{int} \ll t_{cut} \ll N$ vorausgesetzt. Bei der Einstellung von t_{cut} muß man offensichtlich einen Kompromiß zwischen Bias und Fehler machen. Wählt man t_{cut} zu groß, so wird der Fehler von τ_{int} groß. Macht man t_{cut} zu klein, so ist der Bias groß. Die Autokorrelationszeit wird somit zu einer Funktion des Abschneideparameters.

Es gibt kein allgemein gültiges Verfahren, den Wert für t_{cut} zu bestimmen. A. SOKAL schlägt vor, die kleinste Zeit t_{cut} zu wählen, so daß $t_{cut} \geq c \tau_{int}(t_{cut})$ ist. Damit hat man das Problem auf die Konstante c verschoben, die je nach Abfall von $\rho(t)$ im Bereich $4 \dots 10$ liegen sollte. Hier muß man von Fall zu Fall an Hand des Fehlers und des Bias entscheiden.

Ein Ziel ist die Bestimmung der Autokorrelationszeit als Gütemaß für den Algorithmus. Das wichtigere Ziel ist aber natürlich die Bestimmung der Fehler. Den Fehler bekommt man als Funktion des Cutoffs t_{cut} und muß sehen, ob man ein Fenster bei hinreichend großen Werten von t_{cut} bekommt, indem der Fehler konstant ist. Die Zahl der benötigten Rechenschritte ist $\mathcal{O}(N t_{max})$, wenn $\sigma(t_{cut}) \propto \tau_{int}(t_{cut})$ für $0 \leq t_{cut} \leq t_{max}$ bestimmt wird.

Ein anderes Verfahren ist das Blocking, wie es von H. FLYVBJERG et. al. [FP89] beschrieben wurde. Dabei faßt man die Daten in immer größeren Blöcken zusammen und bestimmt auf diesen geblockten Daten die naiven Fehler. Die so bestimmten Fehler laufen unter der Blockingtransformation in einen Fixpunkt, der den tatsächlichen Fehler unter Berücksichtigung von Korrelationseffekten angibt und mit der Definition Gl. 8.27 identisch ist. Der Rechenaufwand ist bei diesem Verfahren nur $\mathcal{O}(N)$ und damit in jedem Fall niedriger als oben. Hat man aber den wahren Fehler, so kann man über Gl. 8.29 die Autokorrelationszeit bestimmen

$$\tau_{int} = \frac{\sigma^2(x)}{2\sigma_0^2(x)}. \quad (8.33)$$

$\sigma_0^2(x)$ ist dabei die Varianz auf den ungeblockten Daten.

Das Blockingverfahren hat sich in der Praxis als sehr stabil erwiesen, da es einfach durchzuführen ist und keine Probleme mit numerischen Instabilitäten hat.

8.3.3 Fehlerbestimmung

Die Informationen über die Autokorrelationszeiten fließen in die Bestimmung der statistischen Fehler ein. Die meisten physikalisch relevanten Meßgrößen sind sekundäre Größen. Bei diesen handelt es sich um Funktionen der primären Größen. Der naive Schätzer

$$\bar{f}_{naiv} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (8.34)$$

ist nicht erwartungstreu, d.h. der Bias ist ungleich Null und dies meist auch im Limes $N \rightarrow \infty$. Besser ist es den Erwartungswert \bar{f} als

$$\bar{f} = f(\bar{x}) \quad (8.35)$$

zu bestimmen. Dieser Schätzer hat einen Bias $\mathcal{O}(\frac{1}{N})$.

Den Fehler von \bar{f} über Fehlerfortpflanzung aus den Fehlern der primären Größen zu bestimmen ist nicht empfehlenswert und in vielen Fällen auch praktisch nicht durchführbar [Ber92]. Ein Verfahren, daß sich hier etabliert hat, ist das Bootstrap- oder als reduzierte Version das Jackknife-Verfahren.

Zunächst werden bei diesen Verfahren die primären Daten über eine Blocklänge B_L gemittelt. Auf diese Weise erhält man eine Menge mit N Mittelwerten für jede primäre Größe.

Beim Bootstrap werden aus der Menge von N Messungen alle möglichen Kombinationen von N Elementen gebildet. In diesen Kombinationen können die einzelnen Messungen mit den Häufigkeiten 0 bis N auftreten. Auf diesen neuen Samples wird der Erwartungswert der primären Größen bestimmt, die dann in Gl. 8.35 eingehen. Man erhält so N^N Werte für \bar{f} , aus denen man die Varianz bestimmen kann. Da man in den seltensten Fällen wirklich alle N^N Samples auswerten kann, beschränkt man sich auf eine hinreichend große Zahl von zufällig gezogenen Bootstrap-Samples.

Der Jackknife ist eine reduzierte Version des aufwendigen Bootstraps. Hier werden N Werte für \bar{f} gebildet, indem aus den N Messungen immer eine herausgelassen wird

$$f_i^J = f(x_i^J) \quad x_i^J = \sum_{j \neq i} x_j, \quad i, j = 1, \dots, N. \quad (8.36)$$

Der Fehler berechnet sich dann gemäß

$$(\sigma^J)^2(\bar{f}^J) = \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (f_i^J - \bar{f}^J)^2 \quad (8.37)$$

Student-Verteilung			Normal-Verteilung	
Fehlergrenze Δx	$p(\bar{x} - \hat{x} < \Delta x)$		Fehlergrenze Δx	$p(\bar{x} - \hat{x} < \Delta x)$
	$N = 10$	$N = 20$		
$1 \bar{s}$	0.659	0.670	1σ	0.683
$2 \bar{s}$	0.927	0.940	2σ	0.955
$3 \bar{s}$	0.987	0.9926	3σ	0.9973
$4 \bar{s}$	0.9975	0.999 23	4σ	0.999 94

Tabelle 8.5: Wahrscheinlichkeiten, daß das exakte Ergebnis \hat{x} innerhalb der angegebenen Fehlergrenzen Δx liegt. Die Werte wurden mit Mathematica bestimmt.

mit

$$\bar{f}^J = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^J. \quad (8.38)$$

In beiden Fällen kann man zudem noch den Bias des Erwartungswerts abschätzen.

Bei der Auswertung der sekundären Größen orientiere ich mich am Verfahren in [BB89] und [Ber92]. Die primären Daten werden unter Berücksichtigung der Autokorrelationszeiten geblockt. Da bei den einzelnen Meßreihen maximal 10 000 Messungen vorliegen, ist hier ein Kompromiß zwischen Blocklänge und Blockanzahl zu finden. Bei der Bestimmung von Konfidenzintervallen ist zu beachten, daß bei geringer Blockanzahl die Student-T-Verteilung zu benutzen ist, statt der Normalverteilung. Für große N geht diese in die Normalverteilung über. Tabelle 8.5 stellt die wesentlichen Daten gegenüber.

Aus den geblockten Daten bestimme ich dann mittels des Jackknife-Verfahrens den Mittelwert und den Fehler der sekundären Größen. Die Zahl der geblockten Samples ist für die einzelnen Meßreihen im Anhang angegeben.

Bei Datensätzen mit kleiner Statistik ist eine verlässliche Bestimmung der Autokorrelationszeit nicht möglich. Die Fehler aus dem Blocking geben dann nur eine untere Schranke für den tatsächlichen Fehler an. Da die Zahl der Messungen hier meistens $< 20 \tau_{int}$ ist, sind die für den Jackknife gebildeten Blöcke nicht mehr statistisch unabhängig und die angegebenen Fehler wiederum nur Untergrenzen.

8.3.4 Ergebnisse für die Autokorrelationszeiten

Tabelle 8.6 zeigt einen Vergleich der direkten Methode zur Bestimmung der integrierten Autokorrelationszeit nach A. SOKAL und der indirekten mittels Blocking. Die Übereinstimmung ist im Bereich kleiner und mittlerer Autokorrelationszeiten sehr gut. Bei großen Zeiten macht sich die geringe Statistik von nur 10 000 Messungen bemerkbar. Dies reicht

				direkt			indirekt
Gitter	G_ψ	κ	Meßgröße	τ_{int}	$\sigma(\tau_{int})$	bias(τ_{int})	
$8^3 \cdot 16$	0.3	0.26	$ \phi $	18	9	6	17
			$\text{Re}(\overline{\chi}\psi)$	150	218	9	114
			$\text{Im}(\overline{\chi}\psi)$	10	8	5	13
			$\text{Re}(\phi\overline{\psi}_R\psi_L)$	78	80	5	56
			$\text{Im}(\phi\overline{\psi}_R\psi_L)$	1.5	0.2	0.2	1
			$C_{\phi,L}(0)$	17	9	6	17

Tabelle 8.6: Vergleich der direkten Methode zur Bestimmung der integrierten Autokorrelationszeit nach A. SOKAL und der indirekten mittels Blocking. Die Anzahl der Messungen beträgt 10 000.

Parameter			Autokorrelationszeit τ_{int}				
Gitter	G_ψ	κ	$ \phi $	$\text{Re}(\overline{\chi}\psi)$	$\text{Im}(\overline{\chi}\psi)$	$\text{Re}(\phi\overline{\psi}_R\psi_L)$	$C_{\phi,L}(0)$
$8^3 \cdot 16$	0.3	0.26	17	114	13	56	17
		0.27	14	227	14	146	14
	0.45	0.203	15	181	13	96	15
$12^3 \cdot 24$	0.3	0.26	45	130	6	37	44
	0.45	0.203	88	258	40	57	90
$16^3 \cdot 32$	0.3	0.26	101	123	6	3	98
	0.45	0.203	66	135	18	39	63

Tabelle 8.7: Autokorrelationszeiten ausgewählter Datenpunkte. Alle Zeiten stammen aus Datensätzen mit mehr als 5000 Messungen unter Benutzung der indirekten Methode.

offensichtlich nicht aus, um eine Schätzung mit akzeptablen Fehlern zu erhalten. Eine Inspektion der Blockingfehler zeigt bei diesen Größen kein Plateau, der Fixpunkt ist somit noch nicht erreicht, und die Werte geben nur Untergrenzen für den wahren Wert an. Aber auch in diesem Fall widersprechen sich die beiden Methoden nicht.

Wie der Vergleich zeigt, ist eine genaue Bestimmung der Autokorrelationszeiten bei einer Reihe mit 10 000 Messungen schon recht schwierig. Auf den größeren Gittern und bei höheren Werten von G_ψ nimmt die Genauigkeit ab, da hier der Fixpunkt nicht erreicht wird. Tabelle 8.7 zeigt die Autokorrelationszeiten für die wesentlichen Meßpunkte dieser Arbeit. Eine Angabe von Fehlern ist bei der indirekten Methode schwierig, besonders wenn man kein Plateau sieht. Die Werte sollten daher alle als untere Schranke verstanden werden. Für eine genaue Bestimmung müßte man wesentlich mehr Trajektorien rechnen.

Unter Beachtung dieser Einschränkungen kann man aus den Daten einen Trend in

der Abhängigkeit von den Parametern und der Gittergröße erkennen. Betrachtet man zuerst die Punkte bei $G_\psi = 0.3$, $\kappa = 0.26$ auf den drei Gittergrößen, so steigt die Autokorrelationszeit mit wachsendem Gittervolumen an. Bei den Skalarfeldern ist dies stärker ausgeprägt als bei den Fermionfeldern. Bei gleicher Gittergröße $8^3 \cdot 16$ und festem $G_\psi = 0.3$ nimmt τ_{int} zu, wenn man weiter in die gebrochene Phase geht, was etwas erstaunlich ist, da man in der Nähe des kritischen Punktes die größeren Autokorrelationen erwartet (critical slowing down). Eine Erhöhung von G_ψ bei ähnlichem Abstand zur Phasengrenzlinie, ($G_\psi = 0.3, \kappa = 0.26$) und ($G_\psi = 0.45, \kappa = 0.203$), führt ebenfalls zu einem Anstieg von τ_{int} .

Die Autokorrelationszeit von gemischten Größen wie dem Term $\phi \bar{\psi}_R \psi_L$ aus dem Yukawa-Teil der Wirkung wird durch die langsamste Zeit der eingehenden Felder dominiert. Auffallend ist auch der große Unterschied zwischen Real- und Imaginärteil derselben Meßgröße. Die Autokorrelationszeiten der rein skalaren Korrelationsfunktion $C_{\phi,L}(0)$ stimmen mit denen des Erwartungswerts überein. Dies gilt für alle Zeiten $0 \leq t \leq T/2$, obwohl hier exemplarisch nur $t = 0$ angegeben ist.

Aufgrund dieser Daten habe ich bei der Durchführung des Jackknife-Verfahrens die Messungen immer zu mindestens 250 geblockt. Dies trifft für alle Datenpunkte in Tabelle 8.7 zu. Neben diesen Daten gibt es noch weitere Messungen, die zum größten Teil beim Feststellen der Phasengrenzlinie angefallen sind. Im Anhang sind auch für diese Parametereinstellungen die Ergebnisse für die wichtigsten Meßgrößen aufgelistet. Da hier aber die Zahl der Messungen teilweise nur 1000 betrug, mußte ich mit der Blockgröße bis auf 50-100 zurückgehen. Die so entstandenen Fehler stammen dann nicht mehr von unabhängigen Messungen und unterschätzen den wahren Fehler.

Kapitel 9

Physikalische Ergebnisse

Die in den folgenden Abschnitten vorgestellten Daten sind über einen Zeitraum von ca. drei Jahren auf den Quadrics Rechnern des DFG Schwerpunktes in Bielefeld gemessen worden. Um den Ablauf über eine solch lange Periode möglichst bequem zu gestalten, habe ich auf den Frontendrechnern mehrere Shellskripts erstellt, die die Submission von Jobs in die Queues und die Verwaltung der anfallenden Dateien automatisiert haben.

Um gleichzeitig von Münster aus eine ständige Kontrolle über die Simulationsläufe zu haben, habe ich darüber hinaus mittels Tcl/Tk einen Simulationsmonitor implementiert, der Statusinformationen, die während der Joblaufzeit geschrieben werden, grafisch anzeigt. Dazu werden diese Daten in einem festlegbaren Zeitintervall automatisch per Remote-Access nach Münster geholt, aufbereitet und angezeigt. Als Kontrollinformationen dienen dabei die algorithmischen Daten

- Länge der Trajektorie,
- $e^{\delta H}$,
- Zahl der Matrixmultiplikationen pro CG-Aufruf,
- Akzeptanzrate

sowie die physikalischen Größen

- unrenormierter Vakuum Erwartungswert,
- Higgs-Masse aus der Abschätzung $\log(C_\sigma(1)/C_\sigma(2))$.

Abbildung 9.1 zeigt einen Screenshot des Programms.

Neben diesen speziellen Informationen gibt der Monitor auch Auskünfte über den Zustand der Queues auf den beiden Rechnern und bietet die Möglichkeit, sich die „Geschichte“ einer Simulation anzeigen zu lassen.

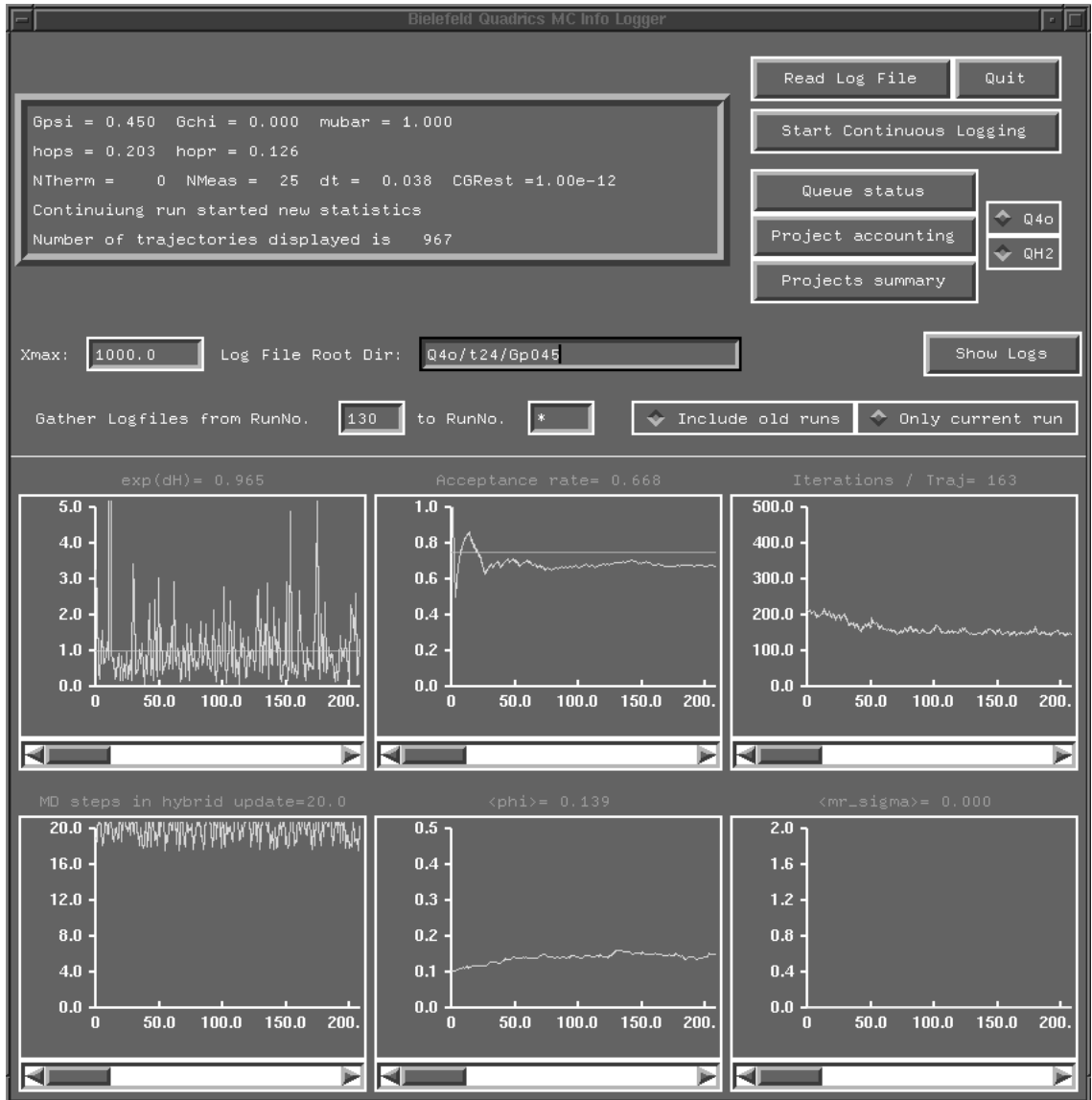


Abbildung 9.1: Simulationsmonitor zur Remote-Überwachung der Jobketten auf der Quadrics.

9.1 Abschätzung des kritischen Hoppingparameters

Das Phasendiagramm in der $G_{\psi} - \kappa$ -Ebene, wie es in Abbildung 5.1 dargestellt ist, ist durch numerische Daten und Mean-Field-Resultate bestätigt. Die Phase, in der wir uns heute befinden, ist die ferromagnetische Phase (FM) mit einem von Null verschiedenen Wert des Higgs-Vakuumerwartungswerts. Deshalb sollten die hier durchgeführten Studien auch in der FM-Phase stattfinden.

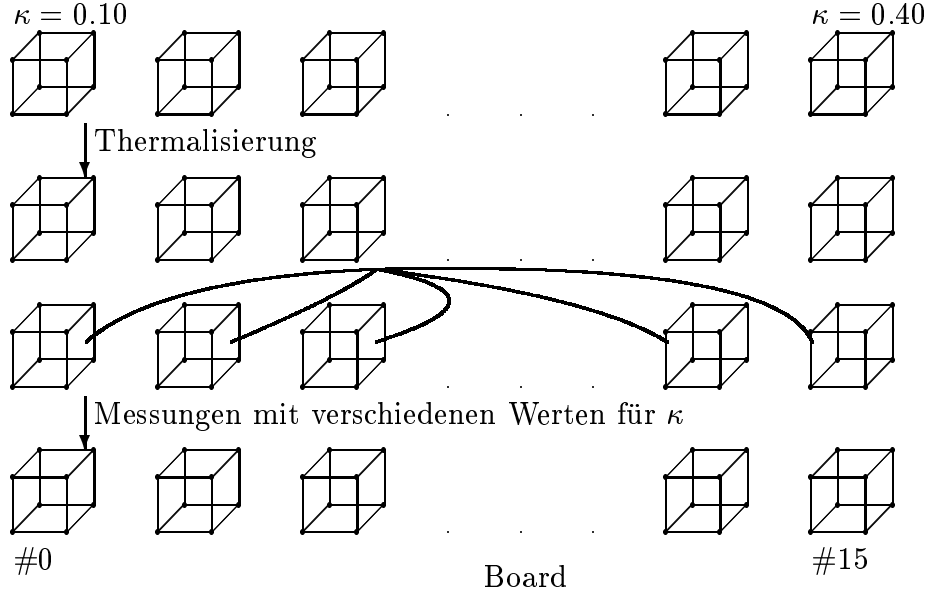


Abbildung 9.2: Schemazeichnung zum Auffinden des kritischen skalaren Hoppingparameters auf der Q16 mit $2 \cdot 2 \cdot 32$ Topologie.

Der Kontinuumsimes kann in der Nähe eines kritischen Punktes durchgeführt werden. Damit liegt das relevante Parametergebiet direkt oberhalb der Phasengrenzlinie zwischen FM- und PM-Phase. Die erste Aufgabe besteht jetzt darin, bei gegebener Yukawa-Kopplung G_ψ einen passenden Wert für κ zu finden.

Das top-Quark, als bisher schwerster fermionischer Baustein des Standardmodells, hat nach letzten Messungen eine Kopplung kleiner als eins, womit der Bereich mittlerer Yukawa-Kopplungen in den Mittelpunkt des Interesses rückt. Unsere ursprüngliche Absicht war es daher, für die drei Werte $G_\psi = 0.3, 0.45, 0.6$, die alle im Bereich mittlerer Kopplungsstärke liegen, jeweils auf drei Gittergrößen zu messen. Die Gittergrößen wurden durch die Hardwarekonfiguration der Quadrics mitbestimmt und auf $8^3 \cdot 16$, $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$ festgelegt.

Zunächst habe ich bei den drei Kopplungen auf dem $8^3 \cdot 16$ Gitter den kritischen Hoppingparameter abgeschätzt, damit auf den größeren Gittern das Feintuning von κ nicht so viel Rechenzeit verbraucht. Dabei stand mir zunächst eine als Q16 verdrahtete Quadrics mit $2 \cdot 2 \cdot 32$ Topologie zur Verfügung. Um diese für das $8^3 \cdot 16$ Gitter eher ungünstige Topologie auszunutzen, habe ich auf einer Q1 mit $2 \cdot 2 \cdot 2$ Topologie eine Konfiguration aufgeheizt und diese dann 16 mal dupliziert und auf den 16 Q1 Boards der Q16 parallel bei verschiedenen Werten des Hoppingparameters weitersimuliert. Abbildung 9.2 zeigt das verwendete Schema in einem Schaubild.

Nachdem auf dem kleinen Gitter bei $G_\psi = 0.3$ der kritische Bereich bestimmt war, habe ich mit der Justierung auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter begonnen. Ziel war es, eine skalare Masse von $\approx 0.4 - 0.5$ einzustellen. Bei den gleichen Parametern wurde dann auf dem $12^3 \cdot 24$ und $8^3 \cdot 16$ Gitter gemessen, um eine Abschätzung der Finite-Size-Korrekturen

zu erhalten. Bei der Simulation auf dem großen Gitter stellte sich dann schnell heraus, daß mit der zur Verfügung stehenden Rechenzeit lediglich zwei Werte für G_ψ untersucht werden können. Da der Rechenaufwand mit G_ψ wächst, haben wir uns für $G_\psi = 0.3$ und $G_\psi = 0.45$ entschieden.

Bei der Bestimmung des kritischen κ -Bereichs hat man das Problem, diesen mit möglichst wenig Messungen festlegen zu müssen. Als Kenngrößen dienen dazu die vier Meßgrößen

- Vakuumerwartungswert des Higgs-Feldes v_0 oder v_R ,
- Masse des Higgs m_σ ,
- renormierte Selbstkopplung des Skalarfeldes g_R ,
- Masse des Fermions μ_R .

Dabei ergibt sich g_R gemäß Gl. 5.52 aus m_σ und v_R und ist somit keine unabhängige Größe. Der Vakuumerwartungswert und die Fermionmasse sind zwei Meßwerte mit geringer Streuung und daher schnell zu messen. Die Bestimmung der Higgs-Masse ist etwas schwieriger, da hier die Streuung deutlich größer ist und bei kleiner Statistik der Propagator nur bei kurzen Distanzen kleine Fehler hat. Es hat sich jedoch gezeigt, daß für das Justieren eine grobe Abschätzung der Higgs-Masse ausreichend ist. Abbildung 9.3 bis Abbildung 9.7 zeigen die angegebenen Meßgrößen in Abhängigkeit vom skalaren Hoppingparameter. Die Werte der anderen Parameter lauten

$$G_\chi = 0 \quad r = 1 \quad K = 0.126 \quad \bar{\mu} = 1 \quad g_0 = \infty. \quad (9.1)$$

Die Wahl von g_0 wird, wie bereits gesagt, durch die fixe Länge des Skalarfeldes realisiert. Bei $G_\psi = 0.6$ war die Statistik zu gering, um Aussagen über die Higgs-Masse machen zu können. An den drei Punkten $\kappa = 0.12, 0.15, 0.18$ wurde mit höherer Statistik gemessen. Die Daten sind in Anhang A zusammengefaßt. Bei $G_\psi = 0.3$ und $G_\psi = 0.45$ kann die Abschätzung sowohl auf dem $8^3 \cdot 16$ Gitter als auch auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter durchgeführt werden. Vergleicht man die Massenplots in Abbildung 9.3 sowie die Vakuumerwartungswerte in Abbildung 9.5 und Fermionmassen in Abbildung 9.6, so ergibt sich ein übereinstimmendes Bild. Eine Verschiebung des kritischen Werts für κ läßt sich mit der hier erreichten Genauigkeit nicht messen. Faßt man die Ergebnisse aus den Plots zusammen, so ergeben sich für κ_{cr} die Werte

$$\kappa_{cr}(G_\psi = 0.3) = 0.2588(2) \quad (9.2)$$

$$\kappa_{cr}(G_\psi = 0.45) \approx 0.20 \quad (9.3)$$

$$\kappa_{cr}(G_\psi = 0.6) \approx 0.11. \quad (9.4)$$

Im unendlichen Volumen verschwindet die σ -Masse am kritische Punkt gemäß

$$m_\sigma(\kappa_r) \propto \kappa_r^\beta, \quad \kappa_r = \kappa_{cr} - \kappa. \quad (9.5)$$

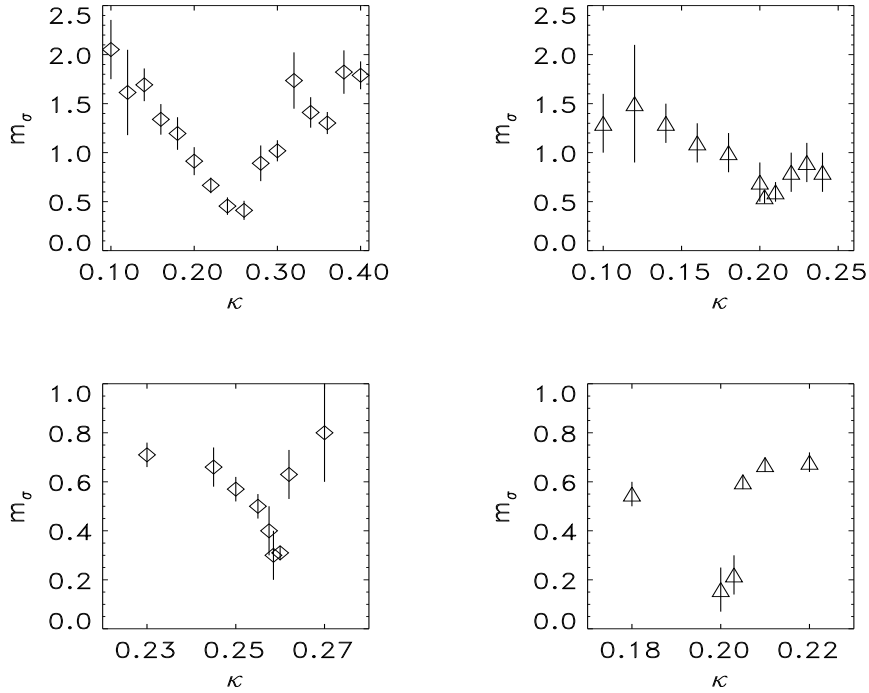


Abbildung 9.3: σ Masse auf $8^3 \cdot 16$ (oben) und $16^3 \cdot 32$ (unten) in Abhängigkeit vom skalaren Hoppingparameter κ : links bei $G_\psi = 0.3$, rechts bei $G_\psi = 0.45$. Die anderen Parameter sind im Text angeben.

Bei endlichem Volumen bleibt die σ -Masse aufgrund von Finite-Size-Effekten endlich. Vergleicht man die Massen-Plots auf $8^3 \cdot 16$ und $16^3 \cdot 32$ in Abbildung 9.3, so sieht man, daß das Minimum auf dem großen Gitter, wie erwartet, schmaler und tiefer ist. Bei steigender Yukawa-Kopplung wird das Minimum bei gleicher Gittergröße wieder breiter. Auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter habe ich den Wert für $G_\psi = 0.3$ aus einem Fit der σ -Massen an die Form Gl. 9.5 bestimmt. Auf dem $8^3 \cdot 16$ Gitter lagen die Datenpunkte zu weit von κ_{cr} entfernt, um hier eine ebensolche Analyse durchzuführen. Abbildung 9.4 zeigt die Daten und den Fit in einem Log-Log-Plot. Das kritische κ wurde bestimmt, indem der lineare Regressionskoeffizient maximiert wurde. Der Exponent ergibt sich zu

$$\beta = 0.17(3). \quad (9.6)$$

Abbildung 9.5 zeigt den renormierten Vakuumerwartungswert v_R . Betrachtet man die Werte in der gebrochenen Phase bei ungefähr gleichem Abstand zum kritischen Punkt, so ist bei steigender Yukawa-Kopplung ein leichter Abfall von v_R zu erkennen. Die stärkere Kopplung der Fermionen an den Higgs-Sektor schwächt die Stärke der Symmetriebrechung, deren zugehöriger Ordnungsparameter v_R ist.

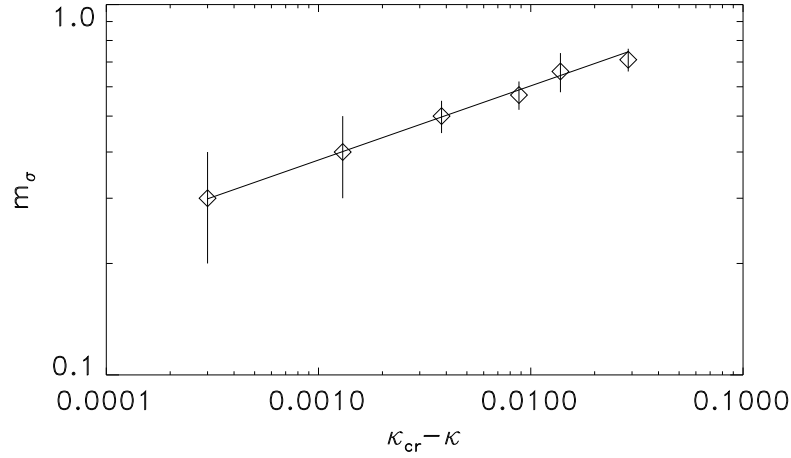


Abbildung 9.4: Log-Log-Plot der σ -Masse gegen κ direkt unterhalb des kritischen Punktes bei $G_\psi = 0.3$. κ_{cr} ergibt sich zu $0.2588(2)$ und der Exponent β in Gl. 9.5 zu $0.17(3)$.

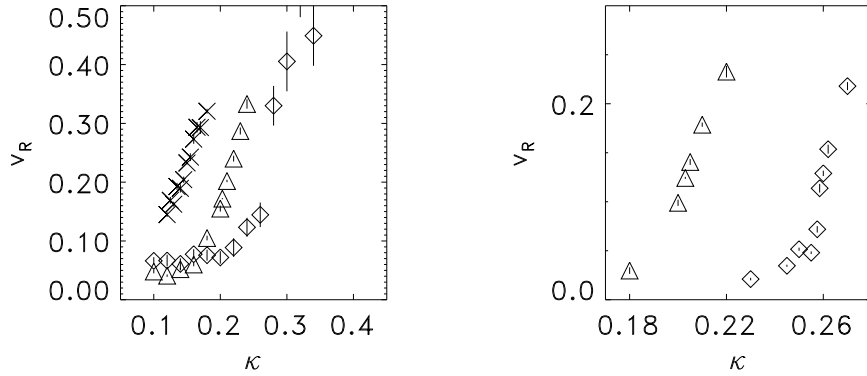


Abbildung 9.5: Der renormierter Vakuumerwartungswert v_R : links auf $8^3 \cdot 16$, rechts auf $16^3 \cdot 32$. \diamond stellt $G_\psi = 0.3$ Werte dar, \triangle steht für $G_\psi = 0.45$ und \times steht für $G_\psi = 0.6$.

In Abbildung 9.6 ist die renormierte Fermionmasse gegen den renormierten Vakuumerwartungswert aufgetragen. Man erkennt einen linearen Anstieg von μ_R , dessen Steigung mit wachsender Yukawa-Kopplung G_ψ zunimmt, was der Relation $\mu_R = G_{R\psi} v_R$ entspricht. Trägt man μ_R gegen κ auf, so erhält man ein ähnliches Bild wie bei $v_R(\kappa)$.

Als letzte Kenngröße für den Phasenübergang zeigt Abbildung 9.7 die renormierte skalare Selbstkopplung als Funktion von κ . In der symmetrischen Phase nimmt diese sehr

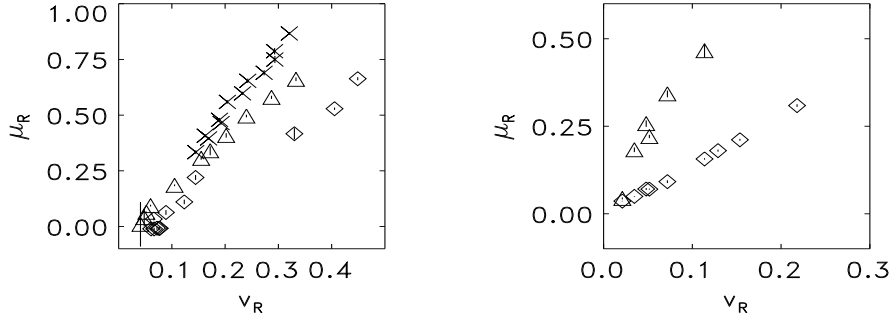


Abbildung 9.6: Die renormierte ψ Fermionmasse μ_R : links auf $8^3 \cdot 16$, rechts auf $16^3 \cdot 32$. Die Symbole sind wie in Abbildung 9.5.

große Werte, in der Nähe des kritischen Punktes zeigt sich dann scharfer Abfall und danach verbleiben die Werte auf einem Plateau. Obwohl g_R keine unabhängige Größe ist, ist dieses Verhalten gut geeignet, den kritischen Punkt zu bestimmen.

Damit möchte ich die Betrachtung der Festlegung des kritischen Hoppingparameters als Funktion der Yukawa-Kopplung abschließen. Die Daten zu den Graphiken sind in Anhang A enthalten.

9.2 Finite-Size-Analyse

Aus den früheren Simulationen auf kleinen Gittern war ersichtlich, daß die Abhängigkeit der Resultate von der Gittergröße unterschiedlich stark ausgeprägt ist. Eine genaue Analyse ließ sich aber mit den damaligen Daten nicht durchführen. Ein Ziel dieser Arbeit ist es daher, hier Klarheit zu schaffen und eine Abschätzung der physikalischen Größen im thermodynamischen Limes zu geben.

In Anwesenheit von Goldstone-Bosonen erwartet man Finite-Size-Effekte, die mit $1/L^2$ im Limes unendlicher Gitterausdehnung, $L \rightarrow \infty$, verschwinden. Dieses lineare Verhalten in $1/L^2$ wurde bereits in mehreren Gitter-Modellen des Higgs-Yukawa-Sektors bestätigt [Fri93, S.125]. Bei den von mir verwendeten Gittern $8^3 \cdot 16$, $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$ ist die Zeitrichtung zwar nicht konstant, aber das Verhältnis T/L ist konstant und somit sollten die Korrekturen auch hier mit $1/L^2$ gehen.

Bei der Auswertung der Daten hat man die beiden Möglichkeiten, mit und ohne Ein-Schleifen-Korrektur beim π -Propagator zu arbeiten. Um die Effekte der Korrektur abzuschätzen, habe ich beides durchgeführt. Da die Struktur des Propagators nicht sehr ausgeprägt ist und testweise durchgeführte Fits mit freier Yukawa-Kopplung als zusätzlichem Fitparameter neben Z_π und $m_{R\pi}$ zu keinem vernünftigen Ergebnis führten, habe ich mich dabei auf den minimalen Parametersatz Gl. 5.111 beschränkt.

Die Bestimmung der verbesserten Resultate habe ich folgendermaßen durchgeführt:

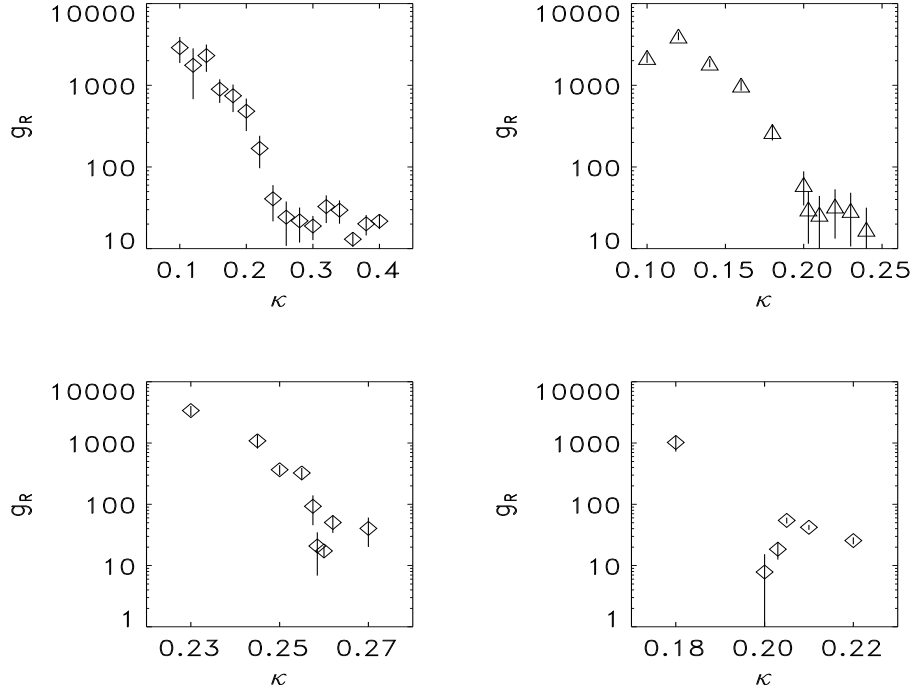


Abbildung 9.7: Die renormierte skalare Selbstkopplung g_R : oben auf $8^3 \cdot 16$, unten auf $16^3 \cdot 32$; links bei $G_\psi = 0.3$, rechts bei $G_\psi = 0.45$.

Zunächst wurden auf den drei Gittern die Werte für $v_{0,L}$, $\mu_{R\psi,L}$ und $m_{\sigma,L}$ bestimmt. Diese sind alle unabhängig von Z_π . m_σ wurde aus einem Fit an die Form Gl. 5.88 ermittelt. Aus diesen drei mal drei Werten wurden dann mit einer in $1/L^2$ linearen Extrapolation die Werte $v_{0,\infty}$, $\mu_{R\psi,\infty}$ und $m_{\sigma,\infty}$ im unendlichen Volumen festgelegt.

Dieses Schema zur Bestimmung der Werte im unendlichen Volumen habe ich gewählt, da die Selbstenergie $\Sigma_{R\pi,L}$ in der normierten Form Gl. 5.110 sowohl von den Parametern im endlichen als auch im unendlichen Volumen abhängt. Da $v_{0,L}$, $\mu_{R\psi,L}$ und $m_{\sigma,L}$ in der hier betrachteten Approximation nicht von Z_π abhängen, ergeben sich bei Einbeziehung der Ein-Schleifen-Korrektur keine Änderungen in diesen Parametern und eine selbstkonsistente Bestimmung ist nicht erforderlich. Bei der Berechnung der Fehler mit der Jackknife-Methode wurden die so bestimmten Korrekturen als konstant über die N Jackknife-Samples betrachtet. Angesichts der geringen Schwankung der drei Werte scheint dieses Vorgehen gerechtfertigt.

Bei der Extrapolation wurden die Fehler σ_i der Meßpunkte als Gewichtungsfaktoren

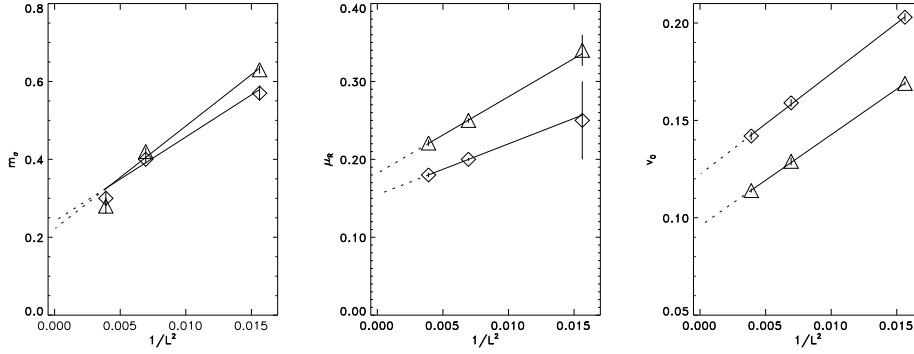


Abbildung 9.8: $1/L^2$ Extrapolation für die Parameter v_0 , $\mu_{R\psi}$ und m_σ , die in die Ein-Schleifen-Korrektur eingehen, bei $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.26)$ und $(0.45, 0.203)$. Die Symbole sind wie in Abbildung 9.9.

berücksichtigt. Wert und Fehler für $L = \infty$ ergeben sich mit den Definitionen

$$S = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \quad S_x = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\sigma_i^2} \quad S_y = \sum_{i=1}^N \frac{y_i}{\sigma_i^2} \quad (9.7)$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2} \quad S_{xx} = \sum_{i=1}^N \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \quad (9.8)$$

sowie

$$x = 1/L^2 \quad y = y(L), \quad L = 8, 12, 16 \quad (9.9)$$

zu

$$y_\infty = \frac{S S_{xy} - S_x S_y}{S S_{xx} - S_x^2} \quad \text{und} \quad \sigma_{y_\infty}^2 = \frac{S_{xx}}{S S_{xx} - S_x^2}. \quad (9.10)$$

Die bei der Auswertung erhaltenen π -Propagatoren sind mit den zugehörigen angepaßten Funktionen der Form

$$-\Gamma_{0\pi}^{(2,0)}(p) = Z_{\pi,L}^{-1} \left(\hat{p}^2 + m_{R\pi,L}^2 + \Sigma_{R\pi,L}(p; v_{0,L}, \mu_{R\psi,L}, m_{\sigma,L}; v_{0,\infty}, \mu_{R\psi,\infty}, m_{\sigma,\infty}) \right) \quad (9.11)$$

in Abbildung 9.9 dargestellt. Die leichte Krümmung des Propagators zeigt den Einfluß der Fermionen, die über den Yukawa-Term an den skalaren Sektor koppeln. Im rein skalaren $O(4)$ -Modell ist das Verhalten des Propagators in dem hier gezeigten Impulsbereich linear [Fri93, S.64]. Wie bereits erwähnt, reichte die Struktur nicht aus, um weitere Parameter aus dem Fit zu bestimmen. Dies ist anhand der sehr guten Übereinstimmung des Zwei-Parameter-Fits mit den Daten verständlich, der in einem Mehr-Parameter-Fit immer ein lokales Minimum wäre.

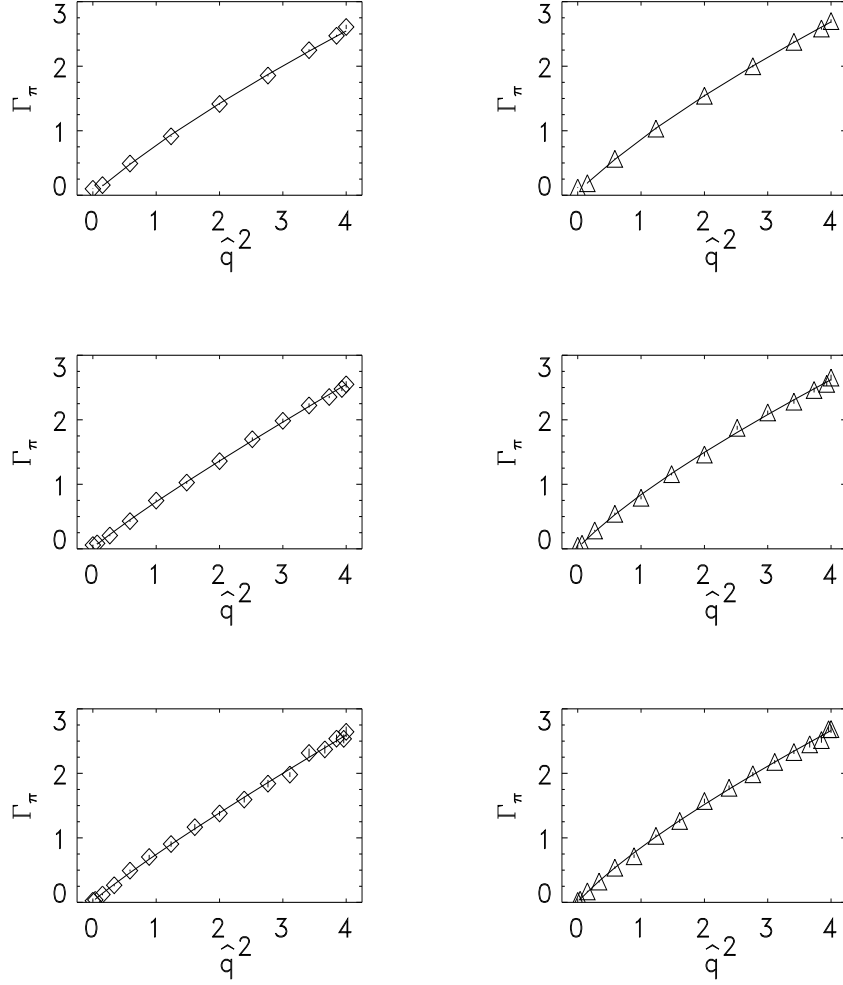


Abbildung 9.9: Simulationsergebnisse des π -Propagators mit angepaßter Ein-Schleifen-verbesselter Fitfunktion. Die Gittergrößen sind von oben nach unten $8^3 \cdot 16$, $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$. Die Meßpunkte bei $G_\psi = 0.3$ sind mit \diamond , die bei $G_\psi = 0.45$ mit \triangle bezeichnet.

Der Ortsraum- π -Propagator nimmt für alle sechs Datenpunkte negative Werte bei großen Zeitabständen an. Dies kann bei einem Ortsraum-Fit durch die Konstante in der Fit-Funktion, Gl. 5.88, ausgeglichen werden. Um bei der Fouriertransformation keine oszillierenden Beiträge zu erhalten, wurde das Minimum des Ortsraum- π -Propagators von den Daten subtrahiert. Dies beeinflusst nur die Lage des Werts von $\Gamma_{0\pi}^{(2,0)}(0)$, alle Werte bei $p \neq 0$ bleiben von dieser Verschiebung unberührt. Beim Anpassen der störungstheoretischen Form, Gl. 5.48, wurde daher der Punkt bei $p = 0$ nicht berücksichtigt.

Mit den aus diesen Fits ermittelten Werten für die Renormierungskonstante Z_π wurden

dann alle weiteren renormierten Größen bestimmt.

Meßgröße	Gittergröße				
	$8^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 24$	$16^3 \cdot 32$	∞	$\infty(\infty)$
v_0	0.203(2)	0.159(2)	0.142(2)	0.122(4)	
$\mu_{R\psi}$	0.25(5)	0.200(2)	0.180(3)	0.154(24)	
m_σ	0.57(2)	0.40(1)	0.30(2)	0.24(5)	
$Z_\pi^{1-\text{loop}}$	1.36(1)	1.29(4)	1.07(6)	1.12(16)	
Z_π	1.44(2)	1.49(7)	1.25(8)	1.32(25)	
$v_R^{1-\text{loop}}$	0.175(2)	0.146(3)	0.138(4)	0.125(7)	0.116(4)
v_R	0.170(2)	0.130(3)	0.127(4)	0.11(1)	0.106(4)
$g_R^{1-\text{loop}}$	31.8(3.9)	23.3(1.8)	14.3(2.6)	11.3(6.6)	11.3(2.0)
g_R	33.8(2.4)	29.0(2.3)	16.7(2.9)	17.0(10.0)	15.6(2.8)
$G_{R\psi}^{1-\text{loop}}$	1.42(23)	1.35(3)	1.28(4)	1.21(14)	1.24(4)
$G_{R\psi}$	1.46(43)	1.52(4)	1.29(4)	1.05(31)	1.46(4)

Tabelle 9.1: Daten und Resultate der $1/L^2$ Extrapolation für $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.26)$ (Meßreihe A). Die mit Index 1 – loop versehenen Datenreihen sind mit dem verbesserten Propagatoransatz bestimmt. Die Spalte ∞ gibt die extrapolierten Werte an. Mit $\infty(\infty)$ wurden die Werte bezeichnet, die aus bereits extrapolierten Werten berechnet wurden.

Tabelle 9.1 und Tabelle 9.2 fassen die wichtigsten Daten zusammen. Im Anhang A sind die zugehörigen Plots zu finden. Die jeweils ersten vier Größen sind unabhängig voneinander, die weiteren sind Funktionen dieser vier. Da die Daten auf nur drei Gittergrößen vorliegen, hat man bei der Extrapolation wenig Wahlmöglichkeiten. Bei den abhängigen Größen kann man zum einen direkt zu $L = \infty$ extrapolieren oder zuerst die unabhängigen Variablen im unendlichen Volumen ermitteln und daraus die abhängigen bestimmen. Beides wurde durchgeführt und die Ergebnisse sind in den beiden Tabellen in der Spalte ∞ und $\infty(\infty)$ aufgelistet. Die Werte stammen immer aus dem besten Fit über alle drei Gittergrößen. Zur Fehlerbestimmung bei der direkten Extrapolation habe ich 10 000 Samples nach folgender Vorschrift generiert

Methode 1

1. bilde $x_L^{MC} = x_L + z_N * \Delta x_L$, $L = 8, 12, 16$, mit normalverteiltem z_N ($\bar{z}_N = 0$, $\sigma^2(z_N) = 1$),
2. wähle eins der vier Sets $\{\{1,2\}, \{1,3\}, \{2,3\}, \{1,2,3\}\}$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit,
3. bestimme den Wert x_∞^{MC} durch Fit an das in Schritt 2 festgelegte Subset.

Meßgröße	Gittergröße				
	$8^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 24$	$16^3 \cdot 32$	∞	$\infty(\infty)$
v_0	0.169(1)	0.129(2)	0.114(1)	0.096(3)	
$\mu_{R\psi}$	0.34(2)	0.250(3)	0.221(4)	0.18(1)	
m_σ	0.63(1)	0.42(1)	0.28(2)	0.22(6)	
$Z_\pi^{1-\text{loop}}$	0.89(1)	0.86(3)	0.88(5)	0.86(8)	
Z_π	1.28(2)	1.13(5)	1.07(7)	1.0(1)	
$v_R^{1-\text{loop}}$	0.179(2)	0.139(3)	0.122(4)	0.105(7)	0.104(3)
v_R	0.149(2)	0.122(3)	0.110(4)	0.099(7)	0.096(4)
$g_R^{1-\text{loop}}$	37.2(1.9)	27.4(2.7)	15.9(3.6)	13.9(9.0)	13.4(2.3)
g_R	53.6(2.5)	35.7(3.3)	19.3(4.0)	13.6(11.0)	15.2(2.6)
$G_{R\psi}^{1-\text{loop}}$	1.9(1)	1.78(3)	1.79(7)	1.71(12)	1.74(3)
$G_{R\psi}$	2.3(1)	2.03(4)	2.05(15)	1.94(24)	1.85(3)

Tabelle 9.2: Daten wie in Tabelle 9.1 für $(G_\psi, \kappa) = (0.45, 0.203)$ (Meßreihe B).

Bei den Werten $\infty(\infty)$ habe ich folgendes Verfahren benutzt

Methode 2

1. bilde $(x_\infty^{MC}, y_\infty^{MC}) = (x_\infty, y_\infty) + z_N * (\Delta x_\infty, \Delta y_\infty)$, mit normalverteiltem $z_N = (z_{N,1}, z_{N,2})$ ($\bar{z}_N = 0, \sigma^2(z_N) = 1$),
2. berechne den Wert $w_\infty^{MC}(x_\infty^{MC}, y_\infty^{MC})$.

Von den so erhaltenen Samples habe ich die Standardabweichung als Fehler angegeben. Zur Kontrolle habe ich mir auch die Histogrammverteilung und die durch den Wert und die Standardabweichung definierte Normalverteilung angesehen. Bei keinem Wert gab es signifikante Abweichungen dieser beiden Verteilungen, was die Art der Fehlerbestimmung rechtfertigt.

Auch bei den hier betrachteten Gittergrößen, die für Simulationen mit dynamischen Fermionen recht groß sind, zeigen die meisten Meßgrößen noch ausgeprägte Finite-Size-Effekte. Im folgenden bezeichne ich die Daten bei $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.26)$ als Meßreihe A und die bei $(G_\psi, \kappa) = (0.45, 0.203)$ als Meßreihe B.

Das $1/L^2$ -Verhalten ist für die drei bei der Ein-Schleifen-Korrektur eingehenden Werte sehr gut erfüllt, was aus Abbildung 9.8 ersichtlich ist und aus den kleinen Fehlern der $L = \infty$ Werte. Die Higgs-Masse zeigt zwar die größte Schwankung, aber der bosonische Anteil der Korrektur variiert nur schwach mit der Masse.

Die Renormierungskonstante Z_π zeigt in der Meßreihe A noch einen deutlichen Einbruch beim Übergang vom $12^3 \cdot 24$ auf das $16^3 \cdot 32$ Gitter und zwar sowohl in der einfachen

als auch in der Ein-Schleifen-verbesserten Version. Dieser Abfall zeigt sich in den abhängigen Größen bei den einfachen stärker als bei den verbesserten. In Meßreihe B ist der korrigierte Wert von Z_π innerhalb der Fehler konstant, während der unkorrigierte Wert noch deutliche Finite-Size-Effekte zeigt. In beiden Reihen ist der Wert aus dem Ein-Schleifen-verbesserten Propagator kleiner als der aus dem Baumgraphen-Propagator bestimmte Wert. Dies liegt an der leichten negativen Krümmung des numerisch bestimmten Propagators, die durch die Rückwirkung der Fermionen verursacht wird. Z_π als inverse Steigung des Propagators bei kleinen Impulsen ist daher kleiner im einfachen Ansatz. Im verbesserten Ansatz wird die Krümmung durch den Korrekturterm aufgehoben und der leicht negativ gekrümmte Verlauf nach oben zum linearen Verlauf gebogen. Dabei vergrößert sich die Steigung und verkleinert somit Z_π . Abbildung 9.10 zeigt die Ein-Schleifen-Korrekturen für die beiden Meßreihen auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter.

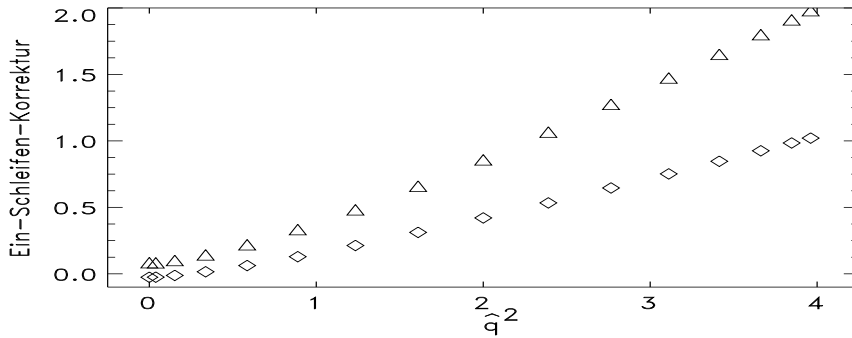


Abbildung 9.10: Ein-Schleifen-Korrektur zum π -Propagator für Meßreihe A und B auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter. Die Symbole sind wie in Abbildung 9.9.

Vergleicht man die Korrekturen mit den Propagatoren in Abbildung 9.9, so sieht man, daß sie in der gleichen Größenordnung liegen wie $\Gamma_\pi(p)$ selbst. Wie erwartet, nehmen sie mit steigendem Impuls zu und gleichen so die Abweichung durch die negative Krümmung des Propagators aus. Die Higgs-Masse ist bei den beiden Parametereinstellungen nahezu gleich. Die deutlich größere Korrektur bei Meßreihe B kommt durch den kleineren Vakuum Erwartungswert zustande und durch die größere Fermionmasse $\mu_{R\psi}$. Insbesondere die stärkere Krümmung ist ein Effekt von $\mu_{R\psi}$, da v_0 nur als gemeinsamer Skalierungsfaktor des bosonischen und fermionischen Anteils eingeht. Dies zeigt sehr schön den zunehmenden Einfluß der Fermionen auf den skalaren Sektor bei steigender Yukawa-Kopplung, der durch die Korrektur offensichtlich fast vollständig erfaßt wird.

Bei den Yukawa-Kopplungen zeigen die Ein-Schleifen-verbesserten Werte auch ein besseres $1/L^2$ -Verhalten. Die hier benutzten Yukawa-Kopplungen wurden mittels der Baumgraphen-Relation, Gl. 5.65, unter Benutzung der Golterman-Petcher-Identität bei der Fermionmassenbestimmung ermittelt. Die Korrekturen bezüglich der Gittergröße sind klein. Bei Meßreihe B ist zwischen dem $12^3 \cdot 24$ und dem $16^3 \cdot 32$ Gitter kein Unterschied mehr zu sehen. Bei Meßreihe A liegen die Unterschiede um 5%, was bei einem Fehler

von 3-4% eine Gleichheit der Werte durchaus zuläßt. Der deutliche Unterschied der nicht-verbesserten extrapolierten Yukawa-Kopplungen in Meßreihe A liegt an dem großen Fehler des Werts von $G_{R\psi}^{8^3 \cdot 16}$, der beim gewichteten Fit eine geringere Bedeutung bekommt. Der Fehler von $G_{R\psi}[\infty]$ ist demzufolge auch entsprechend groß und das Ergebnis mit dem indirekt extrapolierten Wert $G_{R\psi}[\infty(\infty)]$ verträglich.

Die größte Abweichung vom linearen Verhalten in $1/L^2$ zeigt die renormierte quartische Selbstkopplung des Skalarfeldes g_R . Anhand der drei Datenpunkte läßt sich leider nicht ausmachen, ob Werte mit steigendem L nach unten vom linearen Fall abweichen. Ein Vergleich der direkt (∞) und indirekt ($\infty(\infty)$) bestimmten Werte im thermodynamischen Limes zeigt eine gute Übereinstimmung der Mittelwerte, wobei zu berücksichtigen ist, daß die direkt extrapolierten Werte Fehler von 60-90% haben. Auf jeden Fall nehmen die Werte mit steigendem L mindestens wie $1/L^2$ ab, und die lineare Extrapolation kann somit als obere Schranke angesehen werden.

Meßgröße	Gittergröße				
	$8^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 24$	$16^3 \cdot 32$	∞	$\infty(\infty)$
v_0	0.277(1)	0.260(1)	0.254(2)	0.246(2)	
$\mu_{R\psi}$	0.36(1)	0.316(2)	0.309(4)	0.290(6)	
m_σ	0.80(7)	0.53(8)	0.60(13)	0.41(12)	
$Z_\pi^{1-\text{loop}}$	1.29(2)	1.28(6)	0.98(29)	1.24(25)	
Z_π	1.41(2)	1.39(8)	1.01(31)	1.31(29)	
$v_R^{1-\text{loop}}$	0.245(2)	0.230(6)	0.259(46)	0.219(34)	0.221(10)
v_R	0.234(2)	0.221(6)	0.254(46)	0.212(35)	0.215(11)
$g_R^{1-\text{loop}}$	31.9(5.6)	15.9(4.9)	16.3(9.0)	6.2(9.8)	10.4(6.1)
g_R	35.1(6.2)	17.3(5.3)	16.8(9.5)	6.2(10.7)	11.2(6.6)
$G_{R\psi}^{1-\text{loop}}$	1.46(6)	1.37(4)	1.20(20)	1.28(16)	1.32(4)
$G_{R\psi}$	1.53(6)	1.42(5)	1.22(21)	1.31(17)	1.37(4)

Tabelle 9.3: Daten wie in Tabelle 9.1 für $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.27)$ (Meßreihe C).

In Tabelle 9.3 und Tabelle 9.4 sind die Resultate der Finite-Size-Extrapolationen für je einen weiteren Wert des skalaren Hoppingparameters pro Yukawa-Kopplung angegeben. Diese Daten werden im nächsten Abschnitt für die Skalierungs-Analyse benötigt und sind mit Meßreihe C und D bezeichnet. Auf den beiden kleinen Gittern $8^3 \cdot 16$ und $12^3 \cdot 24$ wurden die Daten mit ausreichender Statistik gemessen. Auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter ist dies nicht der Fall. Die Fehler auf diesem Gitter sind dementsprechend größer. Tabelle 9.5 zeigt die Zahl der Messungen und die Blockgröße für das Jackknife-Verfahren. Bei der Angabe der Fehler ist wieder zu berücksichtigen, daß bei wenigen Blöcken die Konfidenzintervalle mit der Student-T-Verteilung zu bestimmen sind und nicht mit der Normalverteilung. Bei der Ermittlung von Fehlern mit dem Monte-Carlo-Verfahren wurden die Monte-Carlo-

Meßgröße	Gittergröße				
	$8^3 \cdot 16$	$12^3 \cdot 24$	$16^3 \cdot 32$	∞	$\infty(\infty)$
v_0	0.207(2)	0.176(1)	0.178(3)	0.155(2)	
$\mu_{R\psi}$	0.41(1)	0.339(3)	0.342(10)	0.293(9)	
m_σ	0.61(5)	0.57(5)	0.67(10)	0.59(8)	
$Z_\pi^{1-\text{loop}}$	0.98(1)	0.95(5)	0.89(12)	0.91(11)	
Z_π	1.33(3)	1.16(7)	1.02(16)	1.00(15)	
$v_R^{1-\text{loop}}$	0.210(2)	0.180(4)	0.190(14)	0.160(14)	0.163(7)
v_R	0.180(3)	0.163(5)	0.177(14)	0.154(15)	0.155(9)
$g_R^{1-\text{loop}}$	25.3(4.2)	30.0(5.4)	29.0(12.4)	32.8(11.1)	41.0(11.8)
g_R	34.5(5.8)	36.6(6.8)	33.4(14.5)	36.7(13.7)	43.7(12.9)
$G_{R\psi}^{1-\text{loop}}$	1.94(7)	1.88(4)	1.78(9)	1.80(10)	1.84(3)
$G_{R\psi}$	2.27(8)	2.08(6)	1.91(11)	1.87(13)	1.90(3)

Tabelle 9.4: Daten wie in Tabelle 9.1 für $(G_\psi, \kappa) = (0.45, 0.21)$ (Meßreihe D).

Samples allerdings wie auch oben mit normalverteilten Zufallszahlen bestimmt. Da die Normalverteilung bei gegebener Varianz schneller abfällt als die Student-T-Verteilung mit $N < \infty$ Freiheitsgraden, sollte dies den Fehler leicht unterschätzen.

Da die Extrapolation mittels gewichteter Fits durchgeführt wird, erwarte ich trotz der Hinzunahme der ungenaueren $16^3 \cdot 32$ Werte eine Verbesserung bei der Bestimmung der $L = \infty$ Werte. Abweichend von der oben beschriebenen Methode 1 (s. S.106) zur Ermittlung des Fehlers der ∞ Werte, habe ich mich in diesem Fall auf die Sets $\{1, 2\}$ und $\{1, 2, 3\}$ beschränkt. Die beiden Sets $\{1, 3\}$ und $\{2, 3\}$ hätten den Datenpunkten auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter zu großes Gewicht gegeben, da es sich hier bei zwei Datenpunkten nicht mehr um einen Fit, sondern nur noch um die eindeutige Lösung von zwei Gleichungen mit zwei Unbekannten handelt.

Abbildung 9.11 zeigt die drei Meßgrößen, die in die Ein-Schleifen-Korrektur eingehen. Beim unrenormierten Vakuum Erwartungswert und bei der Fermionmasse ist die Extrapolation gut durchzuführen. Die Higgs-Masse ist problematisch, da die drei Punkte keinen eindeutigen Trend zeigen. Sowohl in Meßreihe C als auch in D steigt die Masse auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter wieder an. Ob dies ein echter Effekt ist oder nur durch die kurze Statistik hervorgerufen wird, ist anhand der Daten nicht zu entscheiden. Wie oben bereits gesagt, zeigt der bosonische Anteil der Ein-Schleifen-Korrektur nur eine schwache Abhängigkeit von der skalaren Masse, und der fermionische Teil ist unabhängig davon. Darum erwarte ich hier keine großen systematischen Fehler.

Das Verhalten der in Tabelle 9.3 und Tabelle 9.4 zusammengefaßten Daten der Meßreihen C und D zeigt ein analoges Verhalten wie die Meßreihen A und B. Die verbesserten Werte zeigen einen etwas flacheren Verlauf mit $1/L^2$, was wieder auf die Absorption von

Gitter	G_ψ	κ	#Messungen	Blockgröße	#Blöcke
$8^3 \cdot 16$	0.3	0.26	10500	500	21
		0.27	10000	500	20
	0.45	0.203	13000	650	20
		0.21	4500	250	18
$16^3 \cdot 32$	0.3	0.26	6000	300	20
		0.27	3300	300	11
	0.45	0.203	10500	500	21
		0.21	8400	400	21
$16^3 \cdot 32$	0.3	0.26	6600	300	22
		0.27	1200	150	8
	0.45	0.203	8000	400	20
		0.21	750	150	5

Tabelle 9.5: Anzahl der Messungen und der Blockgrößen für das Jackknife-Verfahren bei den in der Finite-Size-Analyse verwendeten Parametersätzen und Gittergrößen.

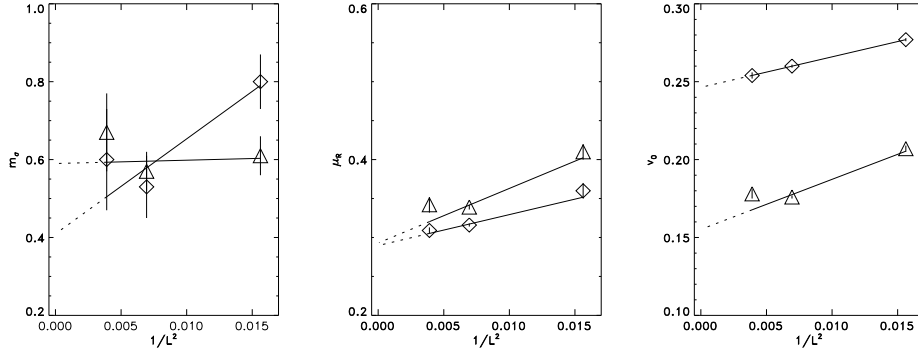


Abbildung 9.11: $1/L^2$ Extrapolation für die Parameter v_0 , $\mu_{R\psi}$ und m_σ bei $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.26)$ und $(0.45, 0.203)$. Die Symbole sind wie in Abbildung 9.9.

Finite-Size-Effekten durch die Ein-Schleifen-Korrektur hinweist. Insgesamt ist der Einfluß der Gittergröße etwas geringer als bei den Meßreihen A und B. Ein Grund hierfür kann in der Higgs-Masse liegen, die hier auf allen drei Gittern im mittleren Bereich liegt, während sie in Meßreihe A und B mit steigender Gitterausdehnung deutlich abfällt und dadurch zu stärkeren Finite-Size-Fehlern führt. Die skalare Selbstkopplung zeigt keinen eindeutigen Trend. In Meßreihe C fällt sie zunächst vom $8^3 \cdot 16$ zum $12^3 \cdot 24$ Gitter stark ab, um dann konstant zu bleiben. In Meßreihe D ist hingegen aus den drei Punkten kein Trend zu er-

sehen. Ältere Resultate unserer Arbeitsgruppe auf $6^3 \cdot 12$ Gittern bei den Parametern von Meßreihe C geben hier auch keine Hinweise. Der unrenormierte Vakuum Erwartungswert und die Fermionmasse passen zwar gut ins Bild, die weiteren Daten jedoch nicht. Die Ursache hierfür liegt in der geänderten Bestimmung der transversalen skalaren Renormierungskonstante Z_π . Bei Meßreihe D gibt es keine alten Daten.

Die Finite-Size-Analyse zeigt, daß auch auf großen Gittern noch deutliche Effekte zu sehen sind. Die Stärke scheint mit zunehmendem Abstand vom kritischen Punkt abzunehmen, was darauf hindeutet, daß die Masse des σ /Higgs-Teilchens die Hauptursache ist. Die Ein-Schleifen-Korrektur führt zu verbesserten Werten, die weniger Effekte des endlichen Gitters zeigen. Trotz des minimalen Parametersatzes für die verbesserte Fitfunktion, ist ein deutlicher Unterschied zu den unverbesserten Daten zu sehen. Die Optimierung von Z_π allein reicht aber offensichtlich nicht aus, die Volumeneffekte zum größten Teil zu beseitigen. Betrachtet man die in die Ein-Schleifen-Korrektur eingehenden drei Meßgrößen, so sieht man hier auch deutlich die Abhängigkeit von der Gitterausdehnung L . Diese Größen sind aber unabhängig von Z_π . Inwieweit ein erweiterter Fitansatz mit mehr Parametern die Situation verbessern würde, läßt sich nicht beantworten, da diese Fits nicht zu eindeutigen Ergebnissen führten und somit unbrauchbar sind.

Im Gegensatz zu den Erwartungen aufgrund der früheren Resultate auf kleinen Gittern sind die Finite-Size-Effekte auch bei mittleren Yukawa-Kopplungen groß. Dies läßt vermuten, daß bei starken Yukawa-Kopplungen die Gitter noch größer sein müßten und damit jenseits des zur Zeit Machbaren liegen.

9.3 Skalierungs-Analyse

Nach der Analyse der Finite-Size-Effekte im vorigen Abschnitt will ich jetzt auf dem $8^3 \cdot 16$ und $12^3 \cdot 24$ Gitter die Übereinstimmung der nicht-perturbativen Daten aus der Simulation mit der Ein-Schleifen-Störungstheorie testen. Wie oben bereits besprochen, beschreibt die β -Funktion in dieser Ordnung eine Theorie mit trivialem Szenario, d.h. beim Kontinuumslimes verschwinden die skalare Selbstkopplung und die Yukawa-Kopplungen, und die so definierte Kontinuumstheorie ist eine Theorie mit freien Bosonen und Fermionen, was nicht mehr dem Standardmodell entspricht.

Um diesen Test durchzuführen habe ich auf den beiden Gittern neben den beiden Meßreihen A und B noch an je einem weiteren Punkt für jede Yukawa-Kopplung gemessen. Diese Daten sind in den Meßreihen C und D enthalten. Auf der Grundlage dieser vier Meßreihen soll bei zwei verschiedenen Verhältnissen von Cutoff zu Higgs-Masse das Skalierungsverhalten der nicht-störungstheoretischen und störungstheoretischen Resultate verglichen werden. Da die Ergebnisse auf den endlichen Gittern noch deutliche Finite-Volume-Effekte zeigen, und die Ein-Schleifen- β -Funktion im unendlichen Volumen bestimmt wurde, werde ich zum Vergleich die zu $L = \infty$ extrapolierten Werte benutzen. Soweit möglich, verwende ich die $\infty(\infty)$ Daten aus den Tabellen 9.1 bis 9.4 für diese Analyse.

Beim Vergleich mit der störungstheoretischen β -Funktion, Gl. 5.115, ist zu berücksichtigen, daß diese mit der Kontinuumsnormierung der Felder berechnet wurde und die Kopplungen dementsprechend umzurechnen sind. Die Beziehungen zwischen den Gitter- und Kontinuumskopplungen lauten

$$G_{0\psi} = \frac{G_\psi}{2K\sqrt{2\kappa}} \quad G_{0\chi} = \frac{G_\chi}{2K\sqrt{2\kappa}} \quad \text{und} \quad g_0 = \frac{6\lambda}{\kappa^2}. \quad (9.12)$$

Bei den hier betrachteten Parametersätzen reduzieren sich die drei Beziehungen für die nackten Größen auf die erste, da $G_\chi = G_{0\chi} = 0$ und $g_0 = \lambda = \infty$ sind.

Die Berechnung der Werte mit der Ein-Schleifen- β -Funktion habe ich mit Mathematica durchgeführt. Dazu wurde das Differentialgleichungssystem, Gl. 5.115, numerisch nach den folgenden Überlegungen aufintegriert. Die nackten Kopplungen entsprechen den Kopplungen am Cutoff. Ich habe $g_0 = 10^4$ und $G_{0\psi}(G_\psi)$ gemäß Gl. 9.12 gewählt. Daß der Wert der nackten skalaren Selbstkopplung als Approximation für $g_0 = \infty$ ausreichend groß ist, habe ich getestet durch einen Vergleichslauf mit $g_0 = 10^5$, der keine Abweichungen zeigte. Die Integration erfolgt dann über die SkalenvARIABLE $\tau = \log(\Lambda/\mu)$. Dabei ist Λ der Cutoff und μ legt die Energieskala fest, bei der die Messungen durchgeführt werden. In unserem Fall startet man bei $\mu = \Lambda$ also $\tau = 0$, da hier die nackten Kopplungen definiert sind. Die Skala, bei der die Simulation stattfindet, wird durch die Higgs-Masse gesetzt, d.h. das Ende der Integration ist bei $\mu = m_{\text{Higgs}}$. Der Cutoff auf dem Gitter mit Gitterabstand a ist durch $\Lambda = \pi/a$ gegeben, daraus folgt das Verhältnis

$$\frac{\Lambda}{m_{\text{Higgs}}} = \frac{\pi}{am_\sigma}, \quad (9.13)$$

wobei die Higgs-Masse mit der σ -Masse identifiziert wurde. Damit nimmt die Integration folgende Form an

$$\int_0^{\tau_f} d\tau = \int_{g_0}^{g_R} \frac{dg}{\beta_g}, \quad \int_0^{\tau_f} d\tau = \int_{G_{0\psi}}^{G_{R\psi}} \frac{dG_\psi}{\beta_{G_\psi}} \quad (9.14)$$

mit

$$\tau_f = \log \frac{\pi}{am_\sigma}. \quad (9.15)$$

Dies definiert bei gegebenen nackten Kopplungen und der Higgs-Masse renormierte Kopplungen, die mit denen der Simulationen verglichen werden können. Die Differentialgleichung für G_χ entfällt in diesem Fall, da $G_{0\chi} = 0$ und damit auch $G_{R\chi} = 0$ ist.

Die Fehlerangaben der Ein-Schleifen-Resultate stammen aus der Unsicherheit bei der Bestimmung der Higgs-Masse und geben die Standardabweichung von 1000 mittels Monte-Carlo-Verfahrens erzeugten Samples an.

Tabelle 9.6 und Abbildung 9.12 zeigen die nicht-störungstheoretischen Daten der Simulation und die entsprechenden Ergebnisse aus der Ein-Schleifen- β -Funktion. Im Plot

		m_σ	g_R		$G_{R\psi}$	
G_ψ	κ	MC-Sim.	MC-Sim.	β -Fkt.	MC-Sim.	β -Fkt.
0.3	0.26	0.24(5)	11.3(2.0)	12.2(1.1)	1.24(4)	1.26(3)
			15.6(2.8)		1.46(4)	
	0.27	0.41(12)	10.4(6.1)	15.4(2.3)	1.32(4)	1.30(4)
			11.2(6.6)		1.37(4)	
0.45	0.203	0.22(6)	13.4(2.3)	13.7(1.2)	1.74(3)	1.59(6)
			15.2(2.6)		1.85(3)	
	0.21	0.59(8)	41.0(11.8)	19.8(1.4)	1.84(3)	1.82(4)
			43.7(12.9)		1.90(3)	

Tabelle 9.6: Vergleich der nicht-störungstheoretischen Daten und der entsprechenden Resultate aus der Ein-Schleifen- β -Funktion für die $L \rightarrow \infty$ extrapolierten Werte aus Abschnitt 9.2. Die obere Reihe der beiden Parametersätze enthält die Werte mit Ein-Schleifen-Korrektur, die untere Reihe die Werte ohne Korrektur. In beiden Fällen wurden die $\infty(\infty)$ Werte benutzt.

sind nur die verbesserten Kopplungen dargestellt. Die Linien im Plot zeigen die Entwicklung der Kopplungen bei der Integration der β -Funktion im Bereich der Higgs-Masse von 1.0 bis 0.1.

Die Daten bei $G_\psi = 0.3$ zeigen eine gute Übereinstimmung mit der β -Funktion. Die entsprechenden Paare liegen weniger als eine Standardabweichung sowohl in g_R - als auch in $G_{R\psi}$ -Richtung auseinander. Dabei ist die Abweichung bei Meßreihe A geringer als bei Meßreihe C, was an der besseren Statistik liegen könnte. Daß im Vergleich zu den Daten aus der β -Funktion die numerischen Ergebnisse eine gegenläufige Tendenz bei steigender Higgs-Masse haben, läßt sich aufgrund der Fehlerbalken nicht als Aussage belegen. Bei beiden Meßreihen ist die Überstimmung der Yukawa-Kopplungen besser als die der skalaren Selbstkopplungen. Die Ursache hierfür kann in der Extrapolation liegen, da bei g_R nicht auszuschließen ist, daß es größere Abweichungen vom $1/L^2$ Verhalten gibt, wie der letzte Abschnitt gezeigt hat.

Bei $G_\psi = 0.45$ ist bei $\kappa = 0.203$ die Übereinstimmung der numerischen Werte der quartischen Kopplung des Skalarfeldes mit denen aus der β -Funktion hervorragend, dafür gibt es bei $G_{R\psi}$ Abweichungen von mehr als 2σ . Bei $\kappa = 0.21$ ist es genau umgekehrt, hier sind die Abweichungen bei $G_{R\psi}$ minimal und die bei g_R groß aber noch im 2σ -Bereich. Im Gegensatz zu $G_\psi = 0.3$ läuft die Trajektorie unter Renormierungstransformationen wesentlich flacher und somit können kleine Änderungen in der Massenskala große Änderungen in der renormierten Yukawa-Kopplung nach sich ziehen. Dies kann die Diskrepanz der Daten bei $\kappa = 0.203$ erklären. Die Abweichung von g_R bei $\kappa = 0.21$ kann wieder durch die bei geringer Statistik schwierigere Extrapolation begründet werden. Ein Hinweis hierauf liegt auch in der deutlichen Abweichung der direkt und indirekt extrapolierten Daten

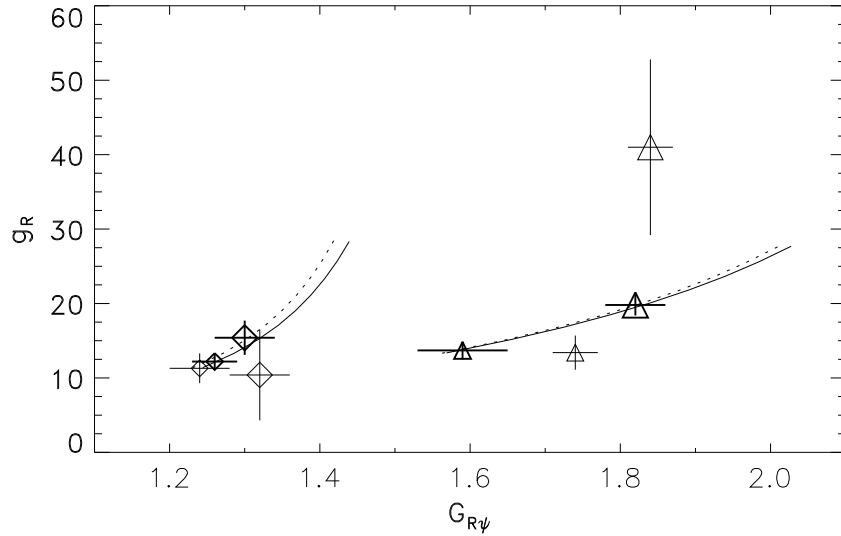


Abbildung 9.12: Vergleich der Ein-Schleifen- β -Funktion mit den numerischen Daten. \diamond bezeichnet $G_\psi = 0.3$ Werte und \triangle $G_\psi = 0.45$ Werte. Die größten Symbole gehören zu den höheren Werten der skalaren Selbstkopplung κ . Die fetten Symbole und Fehlerbalken sind die der β -Funktion. Die Linien deuten den Verlauf der renormierten Kopplungen bei festen nackten Parametern $(G_{0\psi}, g_0)$ als Funktion von $\log(\pi/am_\sigma)$ gemäß der β -Funktion an. Die gepunktete Linie gehört in beiden Fällen zum größeren κ .

für g_R (s. Tabelle 9.3 und Tabelle 9.4). Bei steigender Higgs-Masse zeigen die beiden Datenpaare aus Meßreihe B und D aber dieselbe Tendenz, wie die störungstheoretischen Daten.

Vergleicht man die Werte aus der β -Funktion mit den Daten inklusive und exklusive der Ein-Schleifen-Korrektur, so ist die Abweichung der verbesserten Größen bei den Yukawa-Kopplungen in allen Fällen kleiner. Bei den skalaren Selbstkopplungen trifft dies auf die Punkte aus den beiden Meßreihen A und B zu, die mit besserer Statistik bestimmt wurden. Bei den Meßreihen C und D sind die Ergebnisse aus den beiden Bestimmungsmethoden aufgrund der Fehlerbalken nicht voneinander aufzulösen, so daß hier keine Aussage getroffen werden kann.

Faßt man die Resultate zusammen, so kommt man zu dem Schluß, daß die nicht-perturbativen Monte-Carlo-Resultate die perturbative Ein-Schleifen- β -Funktion im wesentlichen bestätigen. Kleinere Abweichungen sind im Rahmen der statistischen Fehler erklärbar. Darüber hinaus kann die volle, nicht-störungstheoretische β -Funktion, die das Skalierungsverhalten der Monte-Carlo-Daten beschreibt, natürlich ein etwas anderes Verhalten zeigen als die hier benutzte Ein-Schleifen-Approximation. Aber die Simulationen sind im Rahmen der Meßgenauigkeit weder in der Lage solche Abweichungen klar heraus-

zustellen, noch ebensolche auszuschließen.

Es gibt aber keinen Hinweis darauf, daß das durch die Ein-Schleifen-Näherung beschriebene Trivialitätsszenario nicht zutrifft. Die Simulationen zeigen, daß mit steigendem Verhältnis von Cutoff zu Higgs-Masse die Kopplungen kleiner werden und in der Extrapolation dieses Verhaltens im Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ gegen Null gehen.

9.4 Massen und Kopplungen

Nach den eher grundsätzlichen Untersuchungen der letzten beiden Abschnitte zum thermodynamischen Limes und zum Kontinuumslikes möchte ich jetzt noch Daten diskutieren, die Eigenschaften des Gittermodells sind und weitere Hinweise auf die Eignung des Modells zur Beschreibung des Fermion-Higgs-Sektors des Standardmodells geben.

9.4.1 Fermionen- und Fermion-Doppler-Zustände

Zunächst will ich zeigen, daß die Doppler-Fermionen im Spektrum gut von den $p = 0$ Zuständen getrennt sind. Dazu wurden neben dem $p = 0$ Propagator auch die Propagatoren für Impulse in anderen Ecken der Brillouin-Zone gemessen und zwar für

$$\begin{aligned} p_{1,x} &= (\pi, 0, 0, 0) & p_{2,x} &= (\pi, 0, 0, \pi) & p_1 &= (0, 0, 0, \pi) \\ p_3 &= (\pi, \pi, \pi, 0) & p_4 &= (\pi, \pi, \pi, \pi). \end{aligned} \quad (9.16)$$

Um diese Propagatoren zu berechnen, wird der Ortsraum-Propagator mit einem geeigneten Faktor

$$(-1)^{n(x,y,z,t)} = e^{i\pi n(x,y,z,t)} \quad (9.17)$$

multipliziert. Für die fünf Impulse benutzt man

$$\begin{aligned} n_{1,x} &= x & n_{2,x} &= x + t & n_1 &= t \\ n_3 &= x + y + z & n_4 &= x + y + z + t. \end{aligned} \quad (9.18)$$

In Tabelle 9.8 und Tabelle 9.7 sind Werte für die Massen der Fermionen und Spiegelfermionen in den durch Gl. 9.16 bezeichneten Ecken der Brillouin-Zone auf dem $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$ Gitter angegeben. Abbildung 9.13 zeigt die Daten für das $12^3 \cdot 24$ Gitter noch einmal grafisch.

Die Zustände in den $p \neq 0$ Ecken sind von den Zuständen bei $p = 0$ gut getrennt. Wie die Theorie voraussagt, nimmt die Masse mit steigender Zahl von Impulskomponenten $p_\mu \neq 0$ zu. Die etwas durcheinander wirkenden Werte auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter bei $(G_\psi, \kappa) = (0.45, 0.203)$ hängen mit den extrem langen Autokorrelationszeiten zusammen. Das Binning-Verfahren liefert hier Werte zwischen 500 und 1000 Trajektorien, was eine verlässliche Auswertung mit ca. 7500 Samplen nicht zuläßt. Insgesamt zeigen die $p \neq 0$ Zustände bei allen Parametersätzen deutlich längere Autokorrelationszeiten als die $p = 0$ Zustände.

	(G_ψ, κ)			
	$(0.3, 0.26)$		$(0.45, 0.203)$	
Impuls	$\mu_{R\psi}$	$\mu_{R\chi}$	$\mu_{R\psi}$	$\mu_{R\chi}$
p_0	0.180(3)	0.004(70)	0.221(5)	0.0028(16)
$p_{1,x}$	2.02(5)	1.86(4)	1.96(33)	1.85(33)
$p_{2,x}$	3.91(21)	3.8(20)	4.9(1.5)	5.1(1.6)
p_1	1.96(6)	1.82(5)	1.90(21)	2.4(5)
p_3	5.62(34)	5.61(36)	2.49(44)	2.7(5)
p_4	9.5(1.1)	8.77(1.1)	25.0(96.0)	8.3(72.1)

Tabelle 9.7: Fermion- und Doppler-Zustände auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter in den Ecken $p \neq 0$ der Brillouin-Zone.

	(G_ψ, κ)			
	$(0.3, 0.26)$		$(0.45, 0.203)$	
Impuls	$\mu_{R\psi}$	$\mu_{R\chi}$	$\mu_{R\psi}$	$\mu_{R\chi}$
p_0	0.201(2)	0.0026(90)	0.250(3)	0.0019(40)
$p_{1,x}$	1.99(4)	1.81(4)	1.88(3)	2.14(4)
$p_{2,x}$	4.1(2)	3.8(2)	4.0(2)	3.82(11)
p_1	2.06(4)	1.87(4)	1.73(5)	1.94(6)
p_3	6.0(5)	5.9(6)	6.0(2)	5.98(31)
p_4	8.9(1.5)	8.6(1.5)	8.3(5)	8.05(40)

Tabelle 9.8: Fermion- und Doppler-Zustände auf dem $12^3 \cdot 24$ Gitter in den Ecken $p \neq 0$ der Brillouin-Zone.

9.4.2 Yukawa-Kopplungen

Bei der Bestimmung der Yukawa-Kopplung hat man mehrere Methoden zur Auswahl. Diese ergeben sich zum einen aus der Kenntnis, daß $G_\chi = 0$ ist und den daraus folgenden Einschränkungen an die Form des Propagators. Zum anderen gibt es zwei Definitionen der Yukawa-Kopplung als Quotient von Fermionmasse zu Vakuumerwartungswert gemäß Gl. 5.65 und als Kopplung des Dreipunkt-Vertex gemäß Gl. 5.69. Die Definition über den Quotienten werde ich im folgenden als Massen-Kopplung bezeichnen. Von diesen Varianten sind die folgenden bestimmt worden

- naive Bestimmung aus $G_R = \mu_R/v_R$,
- naive Bestimmung aus $G_R^0 = \mu_R/v_R$ unter Benutzung von $G_\chi = 0$,

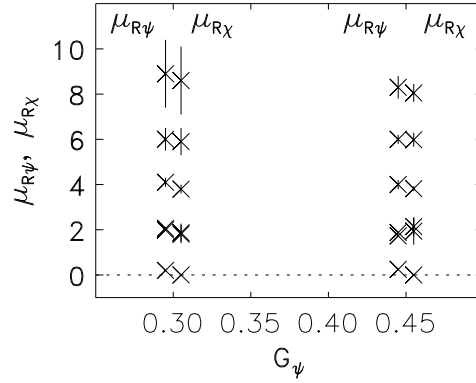


Abbildung 9.13: Massen der Fermionzustände bei $p = 0$ und der Dopplerfreiheitsgrade in ausgesuchten Ecken der Brillouin-Zone. Die Werte für die ψ -Felder sind etwas nach links verschoben dargestellt, die der χ -Felder nach rechts.

- Bestimmung über die Dreipunkt-Funktion $\Gamma_{\pi,\alpha\beta}^{1,2}(p)$ als $G_R^{(3)}$,
- Bestimmung über die Dreipunkt-Funktion $\Gamma_{\pi,\alpha\beta}^{1,2}(p)$ als $G_R^{(3),0}$ unter Benutzung von $G_\chi = 0$.

	$12^3 \cdot 24$		$16^3 \cdot 32$	
Kopplung	(0.3,0.26)	(0.45,0.203)	(0.3,0.26)	0.45,0.203
$G_{R\psi}$	1.31(5)	1.79(3)	1.24(4)	1.77(7)
$G_{R\psi}^0$	1.36(3)	1.78(3)	1.28(4)	1.79(7)
$G_{R\psi}^{(3)}$	0.91(15)	1.71(9)	1.32(12)	2.28(27)
$G_{R\psi}^{(3),0}$	0.92(14)	1.71(9)	1.32(12)	2.26(27)
$G_{R\chi}$	0.05(5)	0.009(6)	0.38(17)	0.019(39)
$G_{R\chi}^0$	0.0	0.0	0.0	0.0
$G_{R\chi}^{(3)}$	0.017(19)	0.015(16)	0.055(15)	0.04(5)
$G_{R\chi}^{(3),0}$	0.002(9)	0.013(10)	0.039(11)	0.012(14)

Tabelle 9.9: Vergleich verschiedener Definitionen und Meßmethoden der Yukawa-Kopplung auf dem $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$ Gitter.

Tabelle 9.9 enthält die Daten für das $12^3 \cdot 24$ und das $16^3 \cdot 32$ Gitter. Alle Daten stammen aus der Ein-Schleifen-verbesserten Analyse. Die Ergebnisse für die χ Yukawa-

Kopplung werde ich noch im nächsten Abschnitt besprechen. Innerhalb der Fehlerbalken sind hier keine Abweichungen der verschiedenen Methoden und Definitionen ersichtlich.

Bei den ψ -Kopplungen stimmen die aus der Baumgraphen-Relation bestimmten Kopplungen mit und ohne Benutzung der Kenntnis, daß $G_\chi = 0$ ist, hervorragend überein. Dies gilt ebenso für die beiden Bestimmungen der Dreipunkt-Yukawa-Kopplungen. Das Verhältnis

$$\frac{G_{R\psi}^{(3)}}{G_{R\psi}} \quad (9.19)$$

liegt in allen vier Fällen in der Nähe von Eins. Auf dem $12^3 \cdot 24$ Gitter bei (0.3,0.26) und auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter bei (0.45,0.203) sind Abweichungen der beiden Definitionen zu sehen, die im Bereich von 2σ liegen. Unter Berücksichtigung der Student-T-Verteilung, Tabelle 8.5, mit 20 Samplen stimmen die Mittelwerte der beiden Verteilungen mit einer Wahrscheinlichkeit von $\approx 5\%$ überein. Interessant ist, daß die Daten aus der nicht verbesserten Analyse eine viel bessere Übereinstimmung zeigen. Dies kann ein Hinweis darauf sein, daß man die Yukawa-Kopplung doch als freien Parameter mit berücksichtigen sollte. Aus numerischen Gründen ließ sich dies leider nicht durchführen, da das resultierende Minimierungsproblem zu viele lokale Minima besitzt und so keine definierten Aussagen über die Parameter gewonnen werden können.

Allgemein geht man davon aus, daß Teilchen, die deutlich schwerer sind als eine typische Massenskala M_{ph} , wenig Einfluß auf die Physik bei M_{ph} haben. In Modellen, in denen die Massen über Yukawa-Kopplungen an ein Skalarfeld erzeugt werden, werden aber die Schleifen-Korrekturen nicht durch die große Masse unterdrückt, wie dies in Modellen mit expliziten Massentermen der Fall ist. Man spricht in diesem Fall vom „Non-Decoupling“ der schweren Fermionen. Dies betrifft nicht die Dopplerfreiheitsgrade, die nach wie vor entkoppeln für $a \rightarrow 0$.

Die Entkopplung von schweren Fermion- und Spiegelfermionfreiheitsgraden kann über das Verhältnis der Dreipunkt-Yukawa-Kopplung $G_{R\psi}^{(3)}$ zur Massen-Kopplung $G_{R\psi}$ untersucht werden. Der für eine Entkopplung von Fermionzuständen über große Massen nötige Bereich, in dem die 3-Punkt-Kopplung klein bleibt aber die Fermionmasse groß werden kann ist

$$\frac{G_{R\psi}^{(3)}}{G_{R\psi}} \ll 1 \quad \text{bzw.} \quad \frac{G_{R\psi}^{(3)}}{G_{R\psi}} \ll 1, \quad (9.20)$$

da $G_{R\psi} \propto \mu_{R\psi}$ ist. Bei den beiden von mir untersuchten Yukawa-Kopplungen mittlerer Stärke ist ein solcher Bereich nicht zu sehen. Wie bereits gesagt, liegt das Verhältnis ungefähr bei Eins und somit ist nicht zu erwarten, daß die schweren fermionischen Freiheitsgrade entkoppeln.

Dieses Verhalten konnte auch für ein Higgs-Yukawa-Modell mit Z_2 -Symmetrie und staggered-Fermionen für einen weiten Bereich von Yukawa-Kopplungen gezeigt werden [Lin95].

9.4.3 Golterman-Petcher-Identitäten

Eine weiterer Punkt ist die Überprüfung der durch die Golterman-Petcher-Shift-Symmetrie gegebenen Ward-Identitäten. Wie ich oben geschildert habe, sagen diese vorher, daß die renormierte Spiegelfermion-Yukawa-Kopplung Null ist, wenn die nackte Kopplung Null war.

	$12^3 \cdot 24$		$16^3 \cdot 32$	
Meßgröße	(0.3,0.26)	(0.45,0.203)	(0.3,0.26)	(0.45,0.203)
$\mu_{R\chi}$	0.026(90)	0.0019(40)	0.004(70)	0.0028(16)
Z_χ	0.70(8)	0.76(7)	0.88(2)	0.29(6)
ζ	0.11(8)	-0.036(37)	0.07(3)	0.04(7)

Tabelle 9.10: Spiegelfermionmassen aus dem Propagator auf dem $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$ Gitter.

Die Werte für die renormierten Spiegelfermion-Yukawa-Kopplungen in Tabelle 9.9 sind alle mit $G_{R\chi} = 0$ verträglich und bestätigen damit die analytischen Ergebnisse. Tabelle 9.10 faßt der Vollständigkeit halber nochmals die aus dem Propagator bestimmten Spiegelfermionmassen zusammen. Auch diese sind alle mit $\mu_{R\chi} = 0$ im Einklang.

Weiterhin sind in Tabelle 9.10 noch die Renormierungskonstante Z_χ (s. Gl. 5.59 und Gl. 5.73) der Spiegelfermionen und der Mischungswinkel ζ (s. Gl. 5.57) angegeben. Die Relation $\zeta = 0$ als Ergebnis der Einschränkungen an die Form des Propagators in Gl. 5.72 läßt sich anhand der Daten bei $G_\psi = 0.45$ bestätigen und bei $G_\psi = 0.3$ nicht widerlegen. Anders sieht es mit den Resultaten für Z_χ aus. Hier ist die Vorhersage $Z_\chi = 1$ in allen Fällen deutlich verletzt. Dies hat aber offensichtlich keinen Einfluß auf die Massen und Kopplungen. Da die Werte für Z_χ keinen erkennbaren Trend in der Abhängigkeit von den Parametern zeigen, ist schwierig eine Ursache für die Abweichung anzugeben. In Tabelle 9.11 sind zum Vergleich noch einmal die Daten für die Renormierungskonstante Z_ψ des ψ -Fermions angegeben. Diese zeigen in der Tendenz das gleiche Verhalten wie Z_χ . Der Wert auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter bei (0.45, 0.203) liegt auch hier deutlich unter den anderen Werten.

	$12^3 \cdot 24$		$16^3 \cdot 32$	
Meßgröße	(0.3,0.26)	(0.45,0.203)	(0.3,0.26)	(0.45,0.203)
Z_ψ	0.67(7)	0.81(2)	0.69(6)	0.25(5)

Tabelle 9.11: ψ -Fermion-Renormierungskonstante Z_ψ auf $12^3 \cdot 24$ und $16^3 \cdot 32$ Gitter.

Kapitel 10

Zusammenfassung

Im ersten Teil dieser Arbeit habe ich den Fermion-Higgs-Sektor des Standardmodells mit einer vereinfachten Gittertheorie nicht-störungstheoretisch untersucht. Die Vereinfachungen beziehen sich auf die Vernachlässigung der Eichkopplungen und den Verzicht der Massenaufspaltung in den Fermion-Isospin-Doublets. Das Ziel war dabei zum einen den Gültigkeitsbereich im Parameterraum des Standardmodells zu überprüfen, und zum anderen die Formulierung einer Gittertheorie zu testen, die im Kontinuumslimit chirale Fermionen beschreibt.

Zunächst will ich die Ergebnisse zu den Parameterschranken des Standardmodells zusammenfassen.

Die Resultate der Skalierungsanalyse stehen im Einklang mit den Vorhersagen der störungstheoretischen β -Funktion in Ein-Schleifen-Approximation, die ein Trivialitätsszenario beschreibt.

Der Gültigkeitsbereich der Störungstheorie wird über die Unitarität der S-Matrix abgeschätzt und ergibt sich im Fall des Higgs-Yukawa-Modells zu [LW87, LW89, LW89, BDF⁺92]

$$g_R < \frac{48\pi}{5} \approx 30.2 \quad \text{oder} \quad \frac{m_{\text{Higgs}}}{v_R} = \sqrt{\frac{g_R}{3}} < 4 \sqrt{\frac{\pi}{15}} \approx 3.17 \quad (10.1)$$

und

$$G_R < \sqrt{\frac{4\pi}{N_f}} \approx 2.5. \quad (10.2)$$

Die von mir benutzten Yukawa-Kopplungen fallen damit noch in diesen Bereich, die skalare Selbstkopplung liegt teilweise etwas darüber. Dies mag erklären, warum die Übereinstimmung mit der Störungstheorie so gut ist. Es zeigt aber andererseits auch, daß es keine größeren nicht-perturbativen Korrekturen in diesem Bereich gibt. Da die experimentellen Massen der Fermionen sich alle mit Yukawa-Kopplungen $\lesssim 1$ erklären lassen, besteht innerhalb des Standardmodells auch keine Notwendigkeit, bei größeren Kopplungen zu messen.

Aus den Schranken der bei $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.26), (0.45, 0.203)$ zum unendlichen Volumen extrapolierten Werte erhält man

$$\frac{m_\sigma}{v_R} = 1.76(40) \quad \text{bei } (0.3, 0.26) \quad (10.3)$$

und

$$\frac{m_\sigma}{v_R} = 1.82(58) \quad \text{bei } (0.45, 0.203), \quad (10.4)$$

und mit $v_R = 246$ GeV folgt als obere Schranke für die Higgs-Masse in physikalischen Einheiten

$$m_{\text{Higgs}} \lesssim 433(98) \text{ GeV} \quad (10.5)$$

bzw.

$$m_{\text{Higgs}} \lesssim 449(140) \text{ GeV}. \quad (10.6)$$

Der Unterschied in der oberen Grenze variiert in diesem Bereich offensichtlich nur sehr wenig mit $G_{R\psi}$, so daß eine genaue Festlegung der renormierten Yukawa-Kopplung auf experimentelle Daten nicht erforderlich ist. Das Verhältnis von Cutoff zu Higgs-Masse beträgt ungefähr 15. In physikalischen Einheiten ist der Cutoff ca. 7 TeV. Die bisherigen Abschätzungen gehen nur von einem Verhältnis von ≈ 3 aus und gelangen so zu etwas größeren Schranken an die Higgs-Masse.

Zuletzt will ich die Resultate des eher technischen Aspekts „Gitter versus chirale Fermionen“ diskutieren.

Für die weitere Untersuchung des Standardmodells mit Gittermethoden ist man auf eine Formulierung angewiesen, die, wenn nicht bei endlichem Gitterabstand a , so doch wenigstens im Kontinuumslimit $a \rightarrow 0$ chirale Fermionen beschreibt. Die in dieser Arbeit benutzte Spiegelfermion-Variante leistet dies im Prinzip. Die Spiegelfreiheitsgrade entkoppeln vom physikalischen Spektrum aufgrund verschwindender Kopplungen zu den übrigen Feldern, und die Doppler-Freiheitsgrade würden im Kontinuumslimit durch den modifizierten Wilson-Term verschwinden. Diese aufgrund analytischer Rechnungen gemachten Aussagen konnten anhand der Simulationen nicht-störungstheoretisch verifiziert werden. Da der Limes $a \rightarrow 0$ hier aber nicht durchgeführt werden kann, verbleiben die Doppler im Spektrum, allerdings bei hohen Massen.

Denkt man weiter in Richtung des vollen Standardmodells, so muß man in einem nächsten Schritt die Eichkopplungen berücksichtigen. Dann ist aber die Shift-Symmetrie gebrochen und eine exakte Entkopplung kann analytisch nicht gezeigt werden. Die Stärke der Eichkopplungen ist jedoch klein und es kann sein, daß die Spiegelfreiheitsgrade auch in diesem Fall keinen Einfluß auf das Spektrum haben. Sollte dies nicht der Fall sein, muß

man nach anderen Methoden der Entkopplung suchen, z.B. indem man die Spiegelfermionen schwer macht.

Abschließend bleibt festzustellen, daß auch im Rahmen dieser Arbeit das Standardmodell als Niederenergie-Limes einer allgemeineren Theorie erscheint. Einen Ausblick auf eine solche Theorie werde ich im nächsten Teil dieser Arbeit geben.

Teil III

**Supersymmetrie auf dem Gitter:
eine Teststudie am Beispiel der $N=1$
 $SU(2)$ Super-Yang-Mills-Theorie**

Kapitel 11

Jenseits des Standardmodells: Supersymmetrie

Das Standardmodell kann alle experimentellen Daten mit sehr guter Genauigkeit reproduzieren. Trotzdem gibt es gute Gründe anzunehmen, daß das Modell in seiner heutigen Form nicht die endgültige Theorie der Elementarteilchen ist, sondern nur eine Niederenergie-Approximation einer allgemeineren Theorie. Im ersten Teil dieser Arbeit bin ich auf die Cutoff-abhängigen Schranken eingegangen, die sich aus der Trivialität des Kontinuumslimites ergaben. Darum liegt es nahe, nach Theorien und Modellen zu suchen, die über das Standardmodell hinausgehen, dieses aber als Grenzfall enthalten.

11.1 Geschichte und Definition der Supersymmetrie

Die Suche nach einer Theorie mit einem größeren Gültigkeitsbereich ist eng verknüpft mit den Symmetriegruppen, die im Standardmodell auftreten. Zum einen sind dies die internen Symmetrien, die $SU(3)$ der QCD und die $SU(2)_L \otimes U(1)_Y$ des elektro-schwachen Sektors, und zum anderen, als Symmetriegruppe des Raumes, die Poincaré-Gruppe, die in allen relativistischen Theorien die Grundlage bildet. Die Leitlinie bei der Suche nach neuen Theorien ist meist ein abstraktes Schönheitsideal. So liegt auch hier der Wunsch nahe, die unnatürlich und konstruiert wirkende Produktgruppe des Standardmodells aus einer einzigen Symmetriegruppe durch Symmetriebrechung zu erhalten. Diese umfassendere Gruppe sollte dann zu einem Modell gehören, das auch bei Energien jenseits des Standardmodells gültig ist.

Die Poincaré-Gruppe ist über ihre Generatoren festgelegt. Diese erfüllen die Vertauschungsregeln

$$[P^\mu, P^\nu] = 0 \quad (11.1)$$

$$[M^{\mu\nu}, P^\rho] = i(\eta^{\nu\rho} P^\mu - \eta^{\mu\rho} P^\nu) \quad (11.2)$$

$$[M^{\mu\nu}, M^{\rho\sigma}] = i(\eta^{\nu\rho} M^{\mu\sigma} + \eta^{\mu\sigma} M^{\nu\rho} - \eta^{\mu\rho} M^{\nu\sigma} - \eta^{\nu\sigma} M^{\mu\rho}). \quad (11.3)$$

Dabei ist die Metrik im Minkowski-Raum gegeben durch

$$\eta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11.4)$$

Der Versuch, die Poincaré-Gruppe \mathcal{P} mit einer internen Lie-Gruppe \mathcal{I} , die durch Generatoren T_a mit

$$[T_a, T_b] = f_{abc} T_c \quad (11.5)$$

gegeben ist, nicht-trivial zu vereinigen, wurde in den sechziger Jahren unternommen. 1967 konnten S. COLEMAN und J. MANDULA [CM67] zeigen, daß dies nicht möglich ist. Hat man eine Lie-Gruppe \mathcal{G} , die \mathcal{P} und \mathcal{I} nicht-trivial enthält, so ist die resultierende Physik trivial, d.h. in diesem Fall ist die S-Matrix die Einheitsmatrix. Will man andererseits eine nicht triviale S-Matrix haben, so wird die Gruppenstruktur von \mathcal{G} zu einer einfachen Produktgruppe, und alle Kommutatoren zwischen den Generatoren von \mathcal{P} und \mathcal{I} verschwinden

$$[P^\mu, T_a] = [M^{\mu\nu}, T_a] = 0. \quad (11.6)$$

1971 zeigten Y. GOLFAND und E. LIKHTMAN [GL71], daß eine Erweiterung des Lie-Gruppen-Konzepts dieses No-go Theorem umgehen kann. Die Erweiterung besteht darin, statt kommutierender Generatoren, anti-kommutierende hinzuzunehmen. Die auf diese Weise entstehende Gruppe \mathcal{G} enthält dann gerade und ungerade Generatoren, für die folgender Zusammenhang besteht

$$\begin{aligned} [\textit{gerade}, \textit{gerade}] &= \textit{gerade} \\ \{\textit{ungerade}, \textit{ungerade}\} &= \textit{gerade} \\ [\textit{gerade}, \textit{ungerade}] &= \textit{ungerade}. \end{aligned} \quad (11.7)$$

Die ersten beiden Gleichungen sind gleichzeitig die Definition der Eigenschaft gerade bzw. ungerade. Die so erhaltene Struktur wird als gradierte Lie-Algebra bezeichnet.

Die besondere Stellung dieser Erweiterung wurde 1975 von R. HAAG, J.T. LOPUSZANSKI und M. SOHNUS gezeigt [HLS75]. Sie bewiesen, daß diese spezielle Erweiterung mit der Z_2 Gradierung die einzig mögliche ist, die mit der relativistischen Quantenfeldtheorie vereinbar ist.

Man hat also das No-go Theorem für gewöhnliche Lie-Gruppen und ein No-go Theorem für gradierte Lie-Gruppen mit einer anderen Gradierung als der in Gl. 11.7 angegebenen. Die so ausgezeichnete, übrigbleibende Symmetriegruppe der S-Matrix wird als Supersymmetrie bezeichnet.

Anti-kommutierende Größen werden mit fermionischen Freiheitsgraden assoziiert. Die neu einzuführenden Generatoren sind dementsprechend Majorana- oder Weyl-Spinoren.

Je nach Anzahl spricht man von N=1 Supersymmetrie, N=2 Supersymmetrie usw. Im einfachsten Fall N=1 treten neben den oben eingeführten Generatoren der Poincaré-Gruppe, noch ein Majorana-Spinor Q_α und sein adjungierter Spinor $\bar{Q}_{\dot{\alpha}}$ auf. Die zusätzlichen Kommutatoren und Anti-Kommutatoren lauten dann

$$\{Q_\alpha, \bar{Q}_{\dot{\beta}}\} = 2\sigma_{\alpha\dot{\beta}}^\mu P_\mu \quad (11.8)$$

$$\{Q_\alpha, Q_\beta\} = \{\bar{Q}_{\dot{\alpha}}, \bar{Q}_{\dot{\beta}}\} = 0 \quad [Q_\alpha, P_\mu] = [\bar{Q}_{\dot{\alpha}}, P_\mu] = 0 \quad (11.9)$$

$$[Q_\alpha, M_{\mu\nu}] = \sigma_{\mu\nu\alpha}{}^\beta Q_\beta \quad [\bar{Q}_{\dot{\alpha}}, M_{\mu\nu}] = \bar{\sigma}_{\mu\nu\dot{\alpha}}{}^{\dot{\beta}} \bar{Q}_{\dot{\beta}}. \quad (11.10)$$

Dabei wurden folgende Definitionen benutzt (σ sind die Pauli-Matrizen)

$$\sigma^\mu = (\mathbf{1}, \boldsymbol{\sigma}) \quad \bar{\sigma}^\mu = (\mathbf{1}, -\boldsymbol{\sigma}) = \sigma_\mu \quad (11.11)$$

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{4}(\sigma^\mu \bar{\sigma}^\nu - \sigma^\nu \bar{\sigma}^\mu) \quad \bar{\sigma}^{\mu\nu} = \frac{i}{4}(\bar{\sigma}^\mu \sigma^\nu - \bar{\sigma}^\nu \sigma^\mu). \quad (11.12)$$

Der Zusammenhang zwischen gepunkteten und ungepunkteten Spinorindices ist über die irreduziblen Darstellungen der Lorentz-Gruppe $SO(3,1)$ gegeben

$$\left(\frac{1}{2}, 0\right) \quad : \quad \psi_\alpha \quad (11.13)$$

$$\left(0, \frac{1}{2}\right) \quad : \quad \bar{\psi}^{\dot{\alpha}} \equiv (\psi_\alpha)^*. \quad (11.14)$$

Damit folgen die Gleichungen

$$\bar{\psi}_{\dot{\alpha}} \equiv (\psi_\alpha)^* \quad : \quad \psi^\alpha \equiv (\bar{\psi}_{\dot{\alpha}})^*. \quad (11.15)$$

Aus dem Kommutator Gl. 11.8 folgte für $\mu = 0$, daß in einer supersymmetrischen Theorie jeder Zustand ψ eine positiv definite Energie E_ψ hat. Das Verschwinden der Energie ist eine hinreichende und notwendige Bedingung für die Existenz eines eindeutigen Vakuumzustands

$$<\psi|E|\psi> \begin{cases} > 0 & \text{für alle Zustände mit } p \neq 0 \\ = 0 & \text{für den Vakuumzustand.} \end{cases} \quad (11.16)$$

In supersymmetrischen Modellen gibt es damit keine Nullpunktsenergie und alle damit verbundenen Divergenzen verschwinden. Weiterhin folgt mit Gl. 11.9, daß auch

$$[P^2, Q_\alpha] = [P^2, \bar{Q}_{\dot{\alpha}}] = 0 \quad (11.17)$$

ist. Die Zustände einer Darstellung haben also alle die gleiche Masse, da $P^2 = m^2$. Das Quadrat des Pauli-Lubanski-Spin-Vektors

$$W^\mu = \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} P_\nu M_{\rho\sigma}, \quad (11.18)$$

$$W^2 = -m^2 \mathbf{J}^2 \quad (11.19)$$

ist genau wie P^2 ein Casimir-Operator der Poincaré-Gruppe, d.h. er kommutiert mit allen Elementen der Lie-Algebra. $\mathbf{J} = j(j+1)$ ist der Drehimpulseigenwert. Im Gegensatz zu P^2 ist aber wegen Gl. 11.10

$$[W^2, Q_\alpha] \neq 0, \quad (11.20)$$

und die Darstellungen enthalten somit Teilchen mit unterschiedlichem Spin. Dies gilt sowohl für massive Darstellungen als auch für masselose, bei denen man aber wegen $P^2 = 0$ anders argumentieren muß. Entsprechend den Regeln in Gl. 11.7 sind die Q_α und $\bar{Q}_{\dot{\alpha}}$ die ungeraden Generatoren und P^μ und $M^{\mu\nu}$ die geraden. Q_α und $\bar{Q}_{\dot{\alpha}}$ sind aus der Spin- $\frac{1}{2}$ -Darstellung der Lorentz-Gruppe. Angewandt auf einen Zustand mit Spin j erhält man einen Zustand mit $j \pm \frac{1}{2}$, d.h. aus Bosonen werden Fermionen und umgekehrt. Dies ist die physikalische Interpretation der Gradierungskommutatoren, Gl. 11.7. Die Abbildungseigenschaft der fermionischen Generatoren zusammen mit dem Kommutator Gl. 11.8 liefert dann die Aussage, daß die Zahl der bosonischen Freiheitsgrade in einer Darstellung gleich der Zahl der fermionischen Freiheitsgrade ist. Mit dem Fermionzahloperator

$$N_F = \begin{cases} +1 & \text{bei Anwendung auf bosonische Zustände} \\ -1 & \text{bei Anwendung auf fermionische Zustände} \end{cases} \quad (11.21)$$

definiert man den Witten-Index

$$\Delta = \text{Tr}(-1)^{N_F}, \quad (11.22)$$

wobei die Spur über alle Zustände bei festem Viererimpuls p geht. Die Gleichheit der Freiheitsgrade bekommt dann die einfache Gestalt

$$\Delta = 0 \quad (11.23)$$

für jeden Viererimpuls $p \neq 0$. Zusammenfassend erhält man also Multipletts von Teilchen gleicher Masse und unterschiedlichem Spin, und die Zahl der Bosonen ist gleich der Zahl der Fermionen. Da die Generatoren der internen Symmetriegruppen mit denen der Raum-Zeit-Supersymmetrie vertauschen, haben alle diese Teilchenpaare die gleichen Quantenzahlen bezüglich der internen Symmetrien.

Die Frage, die sich stellt, ist, was macht die Supersymmetrie, außer der Tatsache, daß sie die einzige nicht-triviale Erweiterung der Poincaré-Gruppe ist, physikalisch interessant? Mögliche Antworten darauf werde ich im folgenden Abschnitt geben.

11.2 Motivation und experimenteller Status

Aus physikalischer Sicht gibt es im Standardmodell einige „Ungereimtheiten“. Eine davon ist das Hierarchieproblem. Die drei Eichkopplungen im Standardmodell sind laufende

Kopplungen, d.h. ihre Stärke hängt von der Energieskala ab, bei der sie gemessen werden. Läßt man diese Skala zu sehr hohen Energien gehen und bestimmt die Kopplungen entsprechend den störungstheoretischen β -Funktionen, so stellt man fest, daß sich die drei Kopplungen bei $M_X \approx 10^{16}$ GeV treffen. Dies gibt Anlaß zu der Vermutung, daß oberhalb von M_X eine neue Physik mit nur einer Kopplung beginnt. Die auf dieser Annahme beruhenden Theorien bezeichnet man als „grand unified theories“ oder kurz GUT. Um das Standardmodell mit seinen drei Kopplungen zu erhalten, bemüht man wieder den Higgs-Mechanismus mit einem Feld φ_{GUT} , das bei der Skala M_X die GUT-Symmetrie spontan bricht. Zusätzlich hat man nach wie vor noch die Brechung der elektro-schwachen Symmetrie, deren Energieskala durch den Vakuumerwartungswert $v = 246$ GeV des Standardmodell-Higgs-Feldes φ_{SM} gesetzt wird. Das Problem liegt nun in der großen Differenz zwischen M_X und v . Durch Strahlungskorrekturen sollte das Feld φ_{SM} eine Masse bei der durch M_X gesetzten Skala erhalten. Dies steht im Widerspruch zu den oberen Schranken an die Higgs-Masse, die im Rahmen des Standardmodells bei ca. 640 GeV liegen. Die Fermionen und die Eichfelder kann man über die chirale Symmetrie und die Eichsymmetrie vor solchen Korrekturen bewahren. Um die Higgs-Masse dennoch in den erlaubten Bereich zu bringen, muß man die freien Parameter der GUT auf 26 Stellen genau einstellen und dies in jeder Ordnung der Störungstheorie erneut. Dies ist eine durchführbare aber keine zufriedenstellende Lösung des Problems. Der Übergang zu einer supersymmetrischen Theorie liefert hier eine Teillösung. Für diese Theorien gibt es ein „non-renormalization“-Theorem, das besagt, daß das Superpotential in beliebiger Störungsordnung höchstens durch endliche Beiträge oder Wellenfunktionsrenormierungen renormiert wird. Da aber im Superpotential gerade die auf 26 Stellen feinjustierten Parameter stehen, bleiben diese von Renormierungseffekten verschont und müssen nur einmal eingestellt werden. In der Literatur wird dies als Lösung des Hierarchie-Problems genannt, obwohl die einmalige Justierung immer noch notwendig ist.

Insgesamt zeigen supersymmetrische Theorien weniger Divergenzen als nicht-supersymmetrische Theorien. Betrachtet man eine Theorie und ihre supersymmetrische Erweiterung, so sind die divergenten Diagramme auch in der Erweiterung divergent. Da aber in letzterer für jedes Boson ein Fermion hinzukommt und umgekehrt, gibt es neue Divergenzen mit gleicher Struktur aber anderem Vorzeichen. Die Divergenzen können sich somit gegenseitig aufheben.

Ab der Planck-Skala $M_P \approx 10^{18}$ GeV erwartet man, daß auch die Gravitation eine ähnliche Stärke hat wie die Eichwechselwirkung und nicht mehr vernachlässigt werden kann. In lokal supersymmetrischen Theorien sind die Eich- und Gravitationswechselwirkung auf natürliche Weise miteinander verbunden. Das Gravitino als Spin-2-Austauschteilchen ist in den entsprechenden Multipletts enthalten. Die so resultierenden Supergravitations-Theorien enthalten die Einsteinsche allgemeine Relativitätstheorie als Grenzwert. Der Kommutator Gl. 11.8 gibt bereits einen Hinweis auf den Zusammenhang zwischen Supersymmetrie-Transformationen, die durch Q generiert werden und Raum-Zeit-Translationen, die durch P generiert werden. Offensichtlich ist die Transformation

$$\text{Boson} \xrightarrow{Q} \text{Fermion} \xrightarrow{\bar{Q}} \text{Boson} \quad (11.24)$$

äquivalent zu einer Verschiebung in der Raum-Zeit. In diesem Zusammenhang treten auch die Stringtheorien als Kandidaten einer „theory of everything“ oder kurz TOE auf. Diese lassen sich nur konsistent formulieren, wenn man Raum-Zeit-Supersymmetrie voraussetzt.

Wie oben bereits geschildert, ist die Supersymmetrie keine neue Entdeckung. Verstärktes Interesse an supersymmetrischen Modellen ist aber wieder aufgekommen, seit N. SEIBERG und E. WITTEN 1994 in einer Reihe von Arbeiten exakte Lösungen vierdimensionaler supersymmetrischer Eichtheorien aufgezeigt haben. Diese Arbeiten stellen die wichtigste Entwicklung auf dem Gebiet der nicht-störungstheoretischen Quantenfeldtheorie in den letzten Jahren dar. Die exakten Resultate basieren auf einer neuen Art von Dualität zwischen „elektrischen“ und „magnetischen“ Freiheitsgraden. Sie beinhalten die Berechnung der starken Wechselwirkung sowie einen Beweis des Quark-Confinement und der chiralen Symmetriebrechung, zwei zentralen Fragestellungen in der QCD. Diese Dualität gilt für alle $N=4$ supersymmetrischen Theorien. Seiberg und Witten konnten dies zunächst auf eine Klasse von $N=2$ Theorien ausweiten [SW94a, SW94b], und schließlich konnte Seiberg [Sei95] auch für gewisse $N=1$ Theorien die Existenz einer Dualität zeigen. Im Anschluß an diese Arbeiten hat es eine Vielzahl von Folgearbeiten gegeben. Einen Überblick über den Stand der Forschung und ein ausführliches Verzeichnis der erschienenen Arbeiten erhält man in [Fer96].

Wenn nun unser Universum durch ein supersymmetrisches Modell beschrieben wird, so müssen zu allen Teilchen des Standardmodells auch die supersymmetrischen Partnerteilchen existieren. Es muß ein Boson geben mit der gleichen Masse und Ladung des Elektrons, ein masseloses Fermion als Partner des Photons usw. Für eine Generation von Quarks und Leptonen ist das Teilchenspektrum in Tabelle 11.1 zusammengefaßt. Dabei handelt es sich um das minimale supersymmetrische Standardmodell, bei dem die kleinstmögliche Anzahl neuer Teilchen hinzugenommen wurde. Wie aus der Tabelle zu ersehen ist, gibt es eine eins-zu-eins Abbildung der Boson-Fermion-Paare. Lediglich den Higgs-Sektor muß man etwas erweitern.

In Experimenten werden die supersymmetrischen Partner aber nicht beobachtet. Daraus schließt man, daß die Supersymmetrie bei niedrigen Energien eine gebrochene Symmetrie ist und die Superpartner eine höhere Masse haben. Wie bei der Brechung der Eichsymmetrie stellt sich auch hier sofort die Frage nach der Energie-Skala M_S , bei der diese Brechung stattfindet. Besonders attraktiv erscheinen Modelle, in denen $M_S \approx v_{SM}$, also im Bereich bis 1 TeV liegt. In diesen Modellen kann man zeigen, daß die Brechung der elektroschwachen Wechselwirkung eine Konsequenz der Brechung der Supersymmetrie ist und nicht mehr von Hand eingebaut werden muß. Weiterhin gibt es Schranken an die Massen der Superpartner, wenn man das Hierarchie-Problem auch mit gebrochener Supersymmetrie lösen will. Diese Massenschranken liegen ebenfalls im Bereich von v_{SM} . Die Vereinigung der drei Eichkopplungen bei der Skala M_X im Rahmen des Standardmodells, die ich oben beschrieben habe, ist durch neuere Experimente in Frage gestellt worden. Präzisionsmessungen der Kopplungen ergeben Werte, die unter Integration mit den Standardmodell- β -Funktionen keinen gemeinsamen Schnittpunkt mehr haben. In supersymmetrischen Modellen mit einer niedrigen Brechungs-Skala M_S ist dies nicht der

		Bosonen		Fermionen	
Eich-Multipletts	SU(3)	Gluonen	g^a	Gluinos	\tilde{g}^a
	SU(2)		W^i	Winos	\tilde{W}^i
	U(1)	Photon	B	Photino	\tilde{B}
Materie-Multipletts		Sleptonen	$\tilde{L}^j = (\tilde{\nu}, \tilde{e}_L^-)$ $\tilde{R} = \tilde{e}_R^+$	Leptonen	$(\nu, e^-)_L$ e_L^c
		Squarks	$\tilde{Q}^j = (\tilde{u}_L, \tilde{d}_L)$ $\tilde{U} = \tilde{u}_R^*$ $\tilde{D} = \tilde{d}_R^*$	Quarks	$(u, d)_L$ u_L^c d_L^c
		Higgs	H_1^j H_2^j	Higgsino	$(\tilde{H}_1^0, \tilde{H}_1^-)_L$ $(\tilde{H}_2^+, \tilde{H}_2^0)_L$

Tabelle 11.1: Teilchenspektrum des minimalen supersymmetrischen Standardmodells. Entsprechend der Konvention werden alle Teilchen linkshändig gewählt, so daß die rechtshändigen als linkshändige Anti-Teilchen erscheinen ($u_R \equiv u_L^c$).

Fall. Abbildung 11.1 zeigt den Verlauf der drei Eichkopplungen in Abhängigkeit von der Skala. Die Kopplung α_1 gehört zur U(1)-, α_2 zur SU(2)- und α_3 zur SU(3)-Eichgruppe. α_1 und α_2 sind über den Weinberg-Winkel θ_W mit der elektromagnetischen Kopplung, der Feinstrukturkonstante α verknüpft. Während es im unteren Diagramm einen gemeinsamen Schnittpunkt innerhalb der Fehler gibt, ist dies im oberen Bild mit den Daten des Standardmodells nicht der Fall.

Abbildung 11.2 und Abbildung 11.3 zeigen den Vergleich zwischen experimentellen Daten und den Vorhersagen des Standardmodells und des minimalen supersymmetrischen Standardmodells am Beispiel des Weinberg-Winkels $\sin(\hat{\theta}_W)$ (im \overline{MS} -Schema) und der QCD-Kopplung α_s , beide an der durch die Z-Bosonmasse gesetzten Skala M_Z . Die zwei Diagramme zeigen deutlich, daß die gemessenen Daten sowohl aus dem Experiment als auch aus Gittersimulationen das minimale supersymmetrische Standardmodell favorisieren.

Als letzte Motivation will ich noch das Neutralino angeben. Als schwerer Superpartner des Neutrinos wäre es ein idealer Kandidat für kalte schwere Materie, die in der Kosmologie eine wichtige Rolle spielt.

Die Brechung der Supersymmetrie ist auch ein Thema der Folgearbeiten der Seiberg-Witten-Theorie. Generell unterscheidet man zwischen leichter (soft) und schwerer (hard) Brechung der Supersymmetrie. Bei ersterer bleiben die wichtigen Eigenschaften wie Aufhebung der Divergenzen und das non-renormalization-Theorem erhalten, bei letzterer nicht. Damit ist klar, daß die leichte Brechung die bevorzugte Form ist. Die erlaubten, leicht brechenden Zusätze in supersymmetrischen Feldtheorien sind alle klassifiziert worden [GG82]. Hierzu zählen unter anderem explizite Massenterme für die skalaren Teilchen der Materie-

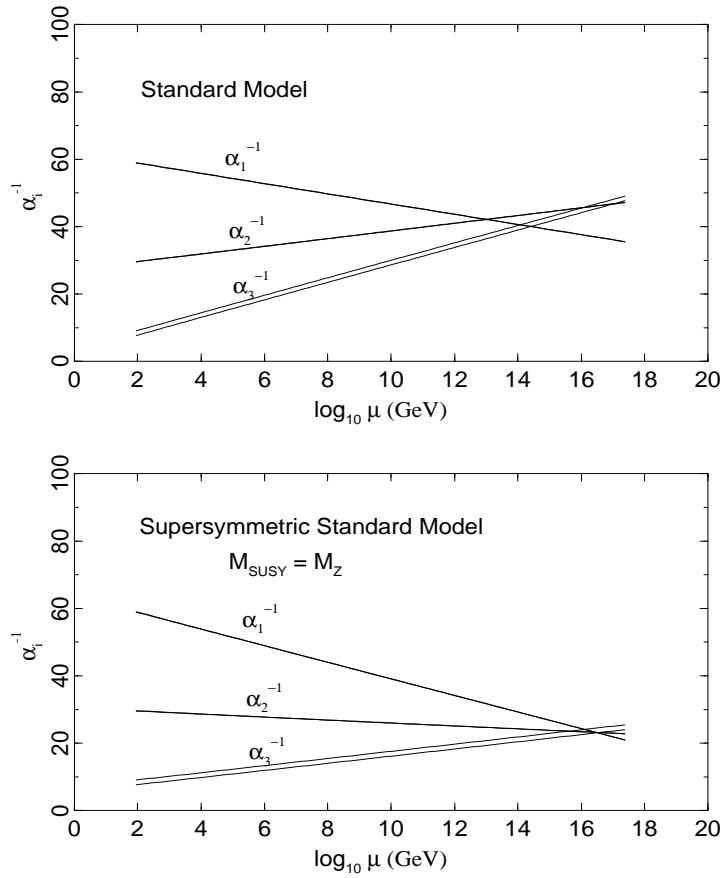


Abbildung 11.1: Laufende Eichkopplungen des Standardmodells (SM) und des minimalen supersymmetrischen Standardmodells (MSSM) mit zwei Higgs-Doublets und einer Brechungs-Skala $M_S = M_Z$, wobei M_Z die Z-Bosonmasse ist. Die Fehler bei α_1 und α_2 sind kleiner als die Strichstärke. Die Plots sind aus [Lan95] übernommen.

Multipletts und für die fermionischen Partner der Eichbosonen die Gauginos. Ausgehend von den exakten Seiberg-Witten-Lösungen hat man erfolgreich versucht, auch Lösungen für Modelle mit kleinen leichten Brechungstermen zu finden. Hierbei wird die Theorie zunächst an einem Punkt hoher Symmetrie gelöst. Anschließend werden die Symmetriebrechungen mit Hilfe von verschiedenen Entwicklungen als kleine Störungen eingeführt [ASPY95, AGDKM96].

Trotz der vielen guten Argumente für supersymmetrische Modelle muß man leider feststellen, daß bisher weder supersymmetrische Teilchen im Experiment gefunden wurden, noch indirekte Hinweise auf deren Existenz im Rahmen der Fehler vorliegen. Somit lassen sich aus den experimentellen Messungen lediglich untere Grenzen für die Massen der postulierten Teilchen angeben, eine ähnliche Situation wie in den 30iger Jahren, als Di-

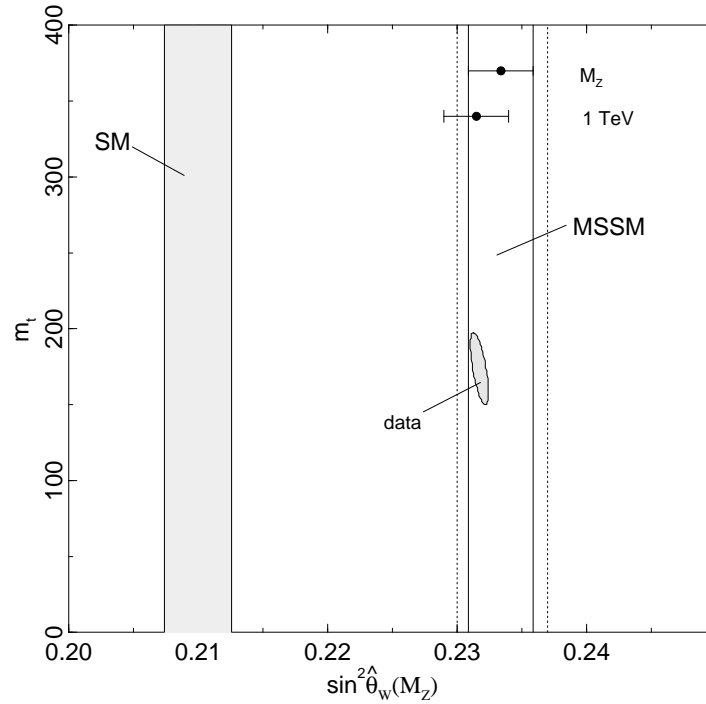


Abbildung 11.2: Das Diagramm zeigt die 90% Konfidenzbereiche für $\sin^2(\theta_W(M_Z))$ gegen m_t verglichen mit den Vorhersagen des Standardmodells (SM) und des minimalen supersymmetrischen Standardmodells (MSSM). m_t ist die top-Quark-Masse. Die beiden Bezeichnungen M_Z und 1 TeV geben die Brechungs-Skala M_S an. Der Plot ist aus [Lan95] übernommen.

rac aufgrund theoretischer Überlegungen Anti-Teilchen postulierte. Diese konnten wenige Jahre später mit neuen Beschleunigern nachgewiesen werden. Ebenso liegen bei der Supersymmetrie die Hoffnungen auf der nächsten Beschleuniger-Generation, wie z.B. LEP2. Die „Supersymmetrie Theory Subgroup“ und andere Gruppen veröffentlichen regelmäßig Reports, in denen die phenomenologischen Konsequenzen der verschiedenen supersymmetrischen Modelle und Brechungsmethoden diskutiert werden und Wirkungsquerschnitte für geeignete Reaktionen mit den zu erwartenden Produktionsraten in bestehenden und geplanten Beschleunigern verglichen werden [A⁺96, BNTW96]. Darüber hinaus werden die Daten aus den laufenden Experimenten auf Signale überprüft, die Abweichungen vom Standardmodell zeigen und damit Hinweise auf neue Physik geben könnten. Wie bereits gesagt war die Suche bisher nicht erfolgreich. Die genauesten Schranken an supersymmetrische Parameter stammen aus elektroschwachen Präzisionsmessungen vom LEP am CERN bei Genf. Die Übereinstimmung der experimentellen Zerfallsbreite des Z^0 -Bosons mit dem Standardmodell liefert eine untere Schranke von 30-45 GeV für die Charginos (Massen-Eigenzustände der SU(2)-Eichboson-Susy-Partner), Squarks, Sneutri-

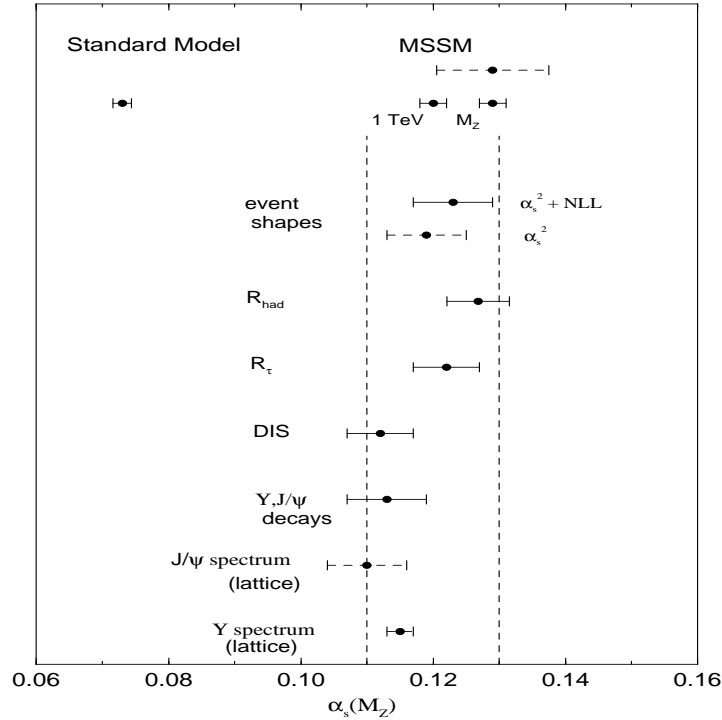


Abbildung 11.3: Verschiedene Bestimmungen der QCD-Kopplung $\alpha_s = \alpha_3$ bei der Skala M_Z verglichen mit den Vorhersagen aus dem Standardmodell und dem minimalen supersymmetrischen Standardmodell (MSSM). Der Plot ist aus [Lan95] übernommen.

nos und Sleptons, deren Kopplung an das Z^0 durch die Eichsymmetrie fixiert ist. Aus den Ergebnissen des CDF- und D0-Experiments am Fermilab erhält man für die Gluinos $m_{\tilde{g}} \gtrsim 173$ GeV. Generell ist die momentane Meinung, daß man mit den zur Zeit laufenden Beschleunigern keine Signale finden wird. Wie beim Higgs-Teilchen konzentriert sich also auch hier, zumindest was die experimentelle Seite angeht, alles auf die nähere Zukunft.

11.3 Supersymmetrie auf dem Gitter

In der Einleitung zu dieser Arbeit habe ich versucht zu zeigen, daß Gittersimulationen sich als dritter Zweig in der Teilchenphysik etabliert haben. Auch in diesem Fall liegt es nahe, die fehlenden experimentellen Befunde zunächst mit Daten aus Monte-Carlo-Simulationen zu ersetzen. Dazu muß man die Supersymmetrie auf das Gitter bringen, was sich als Problem erweist. Wie man weiß, geht Poincaré-Symmetrie einer Kontinuumsfeldtheorie bei der Diskretisierung verloren. Dies liegt an der reduzierten Symmetrie des Gitters gegenüber dem Kontinuum. Mit der Supersymmetrie, die ja eine Erweiterung der Poincaré-Symmetrie darstellt, verhält es sich genauso. Auf dem Gitter gibt es

keine Supersymmetrie. Versuche in den 80iger Jahren, die Kontinuums-Supersymmetrie durch eine Gitter-Variante zu ersetzen, haben zu keinen brauchbaren Ergebnissen geführt. Die Brechung der Supersymmetrie durch die Gitterregularisierung ist kein ausgezeichneter Einzelfall, sondern Teil des Problems, daß bisher keine Supersymmetrie-erhaltende Regularisierung bekannt ist.

Um dennoch zu einer Lösung zu gelangen, schlugen G. CURCI and G. VENEZIANO vor, sich mit der Brechung auf dem Gitter abzufinden und die Supersymmetrie nur im Kontinuums-limes wieder zu restaurieren. Ein ähnliches Vorgehen wie mit der chiralen Symmetrie in der QCD. Als Testmodell wählten sie die einfachste supersymmetrische Version einer nicht-abelschen Eichtheorie, reine $N = 1$ Gluodynamik mit der Eichgruppe $SU(2)$. Dies ist die supersymmetrische Erweiterung der reinen $SU(2)$ -Eichtheorie. Die Wahl von $N = 1$ ist zum einen motiviert durch die einfachere Form der Wirkung. Zum anderen erwartet man aber auch, daß die Physik bei niedrigen Energien nur von $N = 1$ -Modellen beschrieben werden kann, da Modelle mit $N > 1$ nicht mehr chiral sind. Außerdem ist es fast unmöglich die Supersymmetrie in Theorien mit $N > 1$ zu brechen [Din96], was aber auf Grund der experimentellen (Nicht-)Befunde erforderlich scheint.

Ein inhärentes Problem bei der Simulation supersymmetrischer Modelle ist das Auftreten fermionischer Freiheitsgrade. Diese stellen hohe Ansprüche an die Simulation, wie ich im ersten Teil diese Arbeit gezeigt habe. Vielleicht blieb der Vorschlag von G. CURCI and G. VENEZIANO deswegen auch zunächst unbeachtet. Zudem hat man hier die zusätzliche Schwierigkeit, daß die Fermionen nicht als Dirac-, sondern als Majorana-Spinoren auftreten. Wie ich noch zeigen werde, verhindert dies die Benutzung des Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus. Im Prinzip wäre es möglich gewesen, das Modell mit dem verwandten Langevin- oder R-Algorithmus zu simulieren. Diese benötigen aber noch mehr Rechenzeit, da man hier noch eine Extrapolation in der Integrationsschrittweite durchführen muß.

1994 hat M. LÜSCHER ein neues Simulationsverfahren für Fermionen vorgeschlagen, das die Einschränkung an die Art der Spinoren nicht hat. Da zur selben Zeit die Arbeiten von SEIBERG und WITTEN erschienen und das Interesse an supersymmetrischen Modellen sprunghaft anstieg, lag es nahe, die neue Methode auf den acht Jahre alten Vorschlag von G. CURCI and G. VENEZIANO anzuwenden. Die Idee dazu kam von I. MONTVAY, der die grundlegenden Formulierungen ausgearbeitet und in ersten Simulationen getestet hat [Mon95, Mon96]. Da sich schon nach kurzer Zeit herausstellte, daß das Projekt Arbeit für mehrere Mitarbeiter liefert und unsere Münsteraner Arbeitsgruppe bereits im Rahmen des Higgs-Yukawa-Modells mit I. MONTVAY zusammengearbeitet hat, haben wir auch hier wieder eine Kollaboration gebildet.

Das Projekt hat sowohl eine physikalische als auch eine algorithmische Zielsetzung. Zum einen soll festgestellt werden, ob mit Gittermethoden supersymmetrische Quantenfeldtheorien untersucht werden können. Diese Fragestellung bezieht sich auf die Existenz eines kritischen Punktes, an dem der Kontinuums-limes zu einer supersymmetrischen Theorie führt. Zum anderen soll der Lüscher-Algorithmus zur Simulation dynamischer Fermionen im Rahmen einer größeren Simulation getestet werden. Dabei verwenden wir nicht den ursprünglichen, sondern einen von I. MONTVAY vorgeschlagenen erweiterten Algorithmus.

Die Supersymmetrie des $N = 1$ $SU(2)$ -Super-Yang-Mills-Modells wird zweifach gebrochen. Zum einen durch das Fehlen einer Darstellung der Supersymmetrie-Algebra auf dem Gitter und zum zweiten durch den Wilson-Term im fermionischen Teil der Gitterwirkung, der eine Masse für die Gluinos erzeugt. Die Brechung ist im obigen Sinne leicht. Damit hat man eine vergleichbare Situation wie im Kontinuum, in dem die Symmetrie auch gebrochen sein muß, da man keine Masse-entarteten Superpartner beobachtet. Das Gittermodell kann also auch als Studienobjekt für Supersymmetrie-Brechung und -Restauration dienen.

Kapitel 12

Einführung in die Super-Yang-Mills-Theorie

In diesem Abschnitt werde ich zunächst das Kontinuumsmodell vorstellen und einige fundamentale Eigenschaften angeben. Dabei gehe ich kurz auf das allgemeine Vorgehen bei der Konstruktion supersymmetrischer Theorien ein. Anschließend zeige ich, was man bei der Gitterregularisierung beachten muß, und wie die Gitterwirkung aussieht.

12.1 Das Kontinuumsmodell

12.1.1 Konstruktion supersymmetrischer Modelle

Das erste vierdimensionale supersymmetrische Modell war 1974 das Wess-Zumino-Modell [WZ74]. Die Konstruktion dieses Modells beruhte im wesentlichen auf der Intuition der Autoren und etwas Bastelarbeit bei der Definition der Transformationen. Einen wohldefinierten Weg zur Konstruktion supersymmetrischer Wirkungen eröffnete erst die Einführung des Superraum-Konzeptes durch A. SALAM und J. STRATHDEE [SS75a, SS75b].

In der gewöhnlichen Quantenfeldtheorie erhält man Poincaré-invariante Modelle aus der Invarianz des Wirkungsfunktional unter Variationen bezüglich der Poincaré-Gruppe \mathcal{P} . Das Wirkungsfunktional ist definiert durch

$$S[\phi] = \int d^4x \mathcal{L}(\phi, \partial\phi). \quad (12.1)$$

Invarianz heißt in diesem Fall, daß

$$\delta S = \int d^4x \delta \mathcal{L} \quad (12.2)$$

unter Transformation mit $g \in \mathcal{P}$ bis auf irrelevante Oberflächenterme verschwindet. Die Poincaré-Transformation g wirkt dabei auf die Raum-Zeit-Koordinaten

$$g : (x_1, x_2, x_3, x_4) \rightarrow (x'_1, x'_2, x'_3, x'_4). \quad (12.3)$$

Um eine solche Formulierung auch für die Supersymmetrie zu erhalten, muß man die Raum-Zeit mit neuen Koordinaten erweitern. Wie schon bei der Erweiterung der Poincaré-Gruppe, sind auch hier die neuen Koordinaten keine einfachen Zahlen, sondern entsprechend der Spinor-Natur von Q_α und $Q_{\dot{\alpha}}$ Grassmann-Zahlen. Die Rechenregeln für

diese algebraisch definierten Zahlen sind in Anhang B.1 zusammengestellt. Für den Fall $N = 1$ erhält man als neues Koordinaten-Tupel

$$(x_1, x_2, x_3, x_4, \theta^1, \theta^2, \bar{\theta}_1, \bar{\theta}_2). \quad (12.4)$$

Zwischen den Koordinaten gelten die Kommutatoren

$$\{\theta^\alpha, \theta^\beta\} = \{\bar{\theta}_{\dot{\alpha}}, \bar{\theta}_{\dot{\beta}}\} = \{\theta^\alpha, \bar{\theta}_{\dot{\beta}}\} = 0 \quad (12.5)$$

und

$$[x^\mu, \theta^\alpha] = [x^\mu, \bar{\theta}_{\dot{\alpha}}] = 0. \quad (12.6)$$

In diesem erweiterten Raum kann man jetzt Supersymmetrie-Transformationen definieren

$$\begin{aligned} \theta &\rightarrow \theta + \eta, & \bar{\theta} &\rightarrow \bar{\theta} + \bar{\eta}, \\ x^\mu &\rightarrow x^\mu + a^\mu - i\eta \sigma^\mu \bar{\theta} + i\theta \sigma^\mu \bar{\eta} \end{aligned} \quad (12.7)$$

Wirkungen, die unter diesen Transformationen invariant sind, beschreiben supersymmetrische Modelle. Mit der Einführung des Superraums hat man auch Superfelder eingeführt. Die wichtigsten sind die chiralen und Vektor-Superfelder. Chirale Superfelder hängen nur von x und θ ab und haben die allgemeine Darstellung

$$\Phi(y, \theta) = \phi(y) + \sqrt{2}\psi(y)\theta + \theta\theta F(x) \quad (12.8)$$

mit dem Skalarprodukt

$$\theta\theta = \theta^\alpha\theta_\alpha = \theta^1\theta_1 + \theta^2\theta_2 \stackrel{!}{\neq} 0 \quad (12.9)$$

und

$$y^\mu = x^\mu + i\theta \sigma^\mu \bar{\theta}. \quad (12.10)$$

Mit den Superraum-Ableitungen

$$\bar{D}_{\dot{\alpha}} = -\bar{\partial}_{\dot{\alpha}} - i\theta^\beta \sigma_{\beta\dot{\alpha}}^\mu \partial_\mu \quad \text{und} \quad D_\alpha = \partial_\alpha + i\sigma_{\alpha\dot{\beta}}^\mu \bar{\theta}^{\dot{\beta}} \partial_\mu \quad (12.11)$$

lautet die definierende Gleichung für chirale Superfelder

$$\bar{D}_{\dot{\alpha}} \Phi(y, \theta) = 0, \quad (12.12)$$

da

$$\bar{D}_{\dot{\alpha}} y = 0 \quad \text{und} \quad \bar{D}_{\dot{\alpha}} \theta = 0 \quad (12.13)$$

ist. ∂_α ist die Ableitung nach den Grassmann-Koordinaten θ^α , wie sie im Anhang B.1 definiert ist.

Die skalare Funktion F in Gl. 12.8 kann nur von x abhängen, da jede Abhängigkeit von θ bei der Taylorentwicklung mit dem Vorfaktor $\theta\theta$ zu Null werden würde. Höhere Terme treten aufgrund der Grassmann-Natur der θ nicht auf. Die Felder auf der rechten Seite bezeichnet man als Komponentenfelder. Im Fall des chiralen Superfeldes bestehen diese aus einem komplexen Skalarfeld ϕ , einem Weyl-Spinor ψ und dem skalaren Hilfsfeld F . Die Superfelder sind offensichtlich geeignet, die in der Einleitung beschriebenen Teilchen-Multipletts in Form der Komponentenfelder zu verwalten. Unter der Supersymmetrie-Transformation Gl. 12.7 transformieren sich die Komponenten gemäß

$$\begin{aligned}\delta\phi &= \sqrt{2}\eta\psi \\ \delta\psi &= \sqrt{2}\eta F + i\sqrt{2}\partial_\mu\phi\sigma^\mu\bar{\eta} \\ \delta F &= \frac{i}{\sqrt{2}}\partial_\mu\psi\sigma^\mu\bar{\eta}.\end{aligned}\tag{12.14}$$

Analog zu dem chiralen Superfeld kann man natürlich auch ein anti-chirales definieren, das nur von x und $\bar{\theta}$ abhängig ist

$$D_\alpha\Phi^\dagger = 0, \quad \Phi^\dagger = \Phi^\dagger(y^+, \bar{\theta}).\tag{12.15}$$

Diese beiden Feldarten beschreiben die Materiefelder in supersymmetrischen Modellen. Mit einem Feld Φ kann man z.B. das linkshändige u -Quarkfeld und seinen bosonischen Superpartner darstellen. Das Produkt von zwei oder mehr chiralen Superfeldern ist wieder ein chirales Superfeld. Das Produkt $\Phi^\dagger\Phi$ ergibt dagegen ein Vektor-Superfeld (s. Gl. 12.16). Dies wird bei der Konstruktion von supersymmetrischen Wirkungen benötigt.

Für die Eichfelder braucht man ein weiteres Superfeld, das Vektor-Superfeld. Dieses hängt vom vollen Koordinatensatz ab und erfüllt die Bedingung $V^\dagger = V$. Die Zerlegung in Komponenten lautet

$$\begin{aligned}V(x, \theta, \bar{\theta}) &= C(x) + i\theta\chi(x) - i\bar{\theta}\bar{\chi}(x) \\ &+ \frac{i}{2}\theta\theta[M(x) + iN(x)] - \frac{i}{2}\bar{\theta}\bar{\theta}[M(x) - iN(x)] \\ &+ \theta\sigma^\mu\bar{\theta}A_\mu(x) + i\theta\theta\bar{\theta}[\bar{\lambda}(x) + \frac{i}{2}\bar{\sigma}^\mu\partial_\mu\chi(x)] + i\bar{\theta}\bar{\theta}\theta[\lambda(x) + \frac{i}{2}\sigma^\mu\partial_\mu\bar{\chi}(x)] \\ &+ \frac{1}{2}\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}[D(x) - \frac{1}{2}\partial_\mu\partial^\mu C(x)].\end{aligned}\tag{12.16}$$

Wegen $V^\dagger = V$ sind die Felder C, M, N und A reell. Wenn Φ ein chirales Superfeld ist und Φ^\dagger sein anti-chiraler Partner, dann ist $\Phi + \Phi^\dagger$ ein Vektor-Superfeld. Analog zur Abelschen Eichtransformation in der einfachen Feldtheorie kann man hieraus ein eichtransformiertes Vektor-Superfeld definieren

$$V(x, \theta, \bar{\theta}) \rightarrow V(x, \theta, \bar{\theta}) + \Phi(x, \theta) + \Phi^\dagger(x, \bar{\theta}).\tag{12.17}$$

Jede Superfeld-Wirkung, die unter dieser Transformation invariant ist, hängt nicht von allen Komponenten des Feldes V ab. Die Felder C, M, N und χ können immer durch geeignete Wahl von Φ weggeeeicht werden. Diese spezielle Eichung ist die Wess-Zumino-Eichung. In dieser Eichung reduziert sich das Vektorfeld auf die Form

$$V_{WZ}(x, \theta, \bar{\theta}) = \theta \sigma^\mu \bar{\theta} A_\mu(x) + i\theta\bar{\theta}\bar{\lambda}(x) + i\bar{\theta}\theta\lambda(x) + \frac{1}{2}\theta\bar{\theta}\theta\bar{\theta} D(x). \quad (12.18)$$

Die Transformationen der Komponentenfelder unter den Superraum-Translationen Gl. 12.7 lauten

$$\begin{aligned} \delta\lambda_\alpha &= -iD\eta_\alpha - \frac{1}{2}(\sigma^\mu \bar{\sigma}^\nu)_\alpha^\beta \eta_\beta V_{\mu\nu}, \quad V_{\mu\nu} = \partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu \\ \delta V^\mu &= i(\eta\sigma^\mu \bar{\lambda} - \lambda\sigma^\mu \bar{\eta}) - \partial^\mu (\eta\lambda + \bar{\eta}\bar{\lambda}) \\ \delta D &= \partial_\mu (-\eta\sigma^\mu \bar{\lambda} + \lambda\sigma^\mu \bar{\eta}). \end{aligned} \quad (12.19)$$

Als nächstes konstruiert man aufbauend auf dem Wess-Zumino-geeichten Vektor-Superfeld eine supersymmetrische Version der Eichfeldstärke $F_{\mu\nu}$. Dazu braucht man einen Satz von N Vektor-Superfelder, entsprechend den N -Generatoren der Eichgruppe.

$$V = T^a V^a, \quad \text{mit} \quad [T^a, T^b] = if^{abc} T^c, \quad \text{Tr } T^a T^b = \delta^{ab}. \quad (12.20)$$

Aus V konstruiert man dann die Feldstärke-Superfelder

$$W_\alpha = -\frac{1}{8}(\overline{DD})e^{-2V} D_\alpha e^{2V} \quad (12.21)$$

$$\overline{W}_{\dot{\alpha}} = \frac{1}{8}(DD)e^{2V} \overline{D}_{\dot{\alpha}} e^{-2V} \quad (12.22)$$

mit den Superraum-Ableitungen aus Gl. 12.11. Die Terme DD und \overline{DD} sind wieder als Skalarprodukte aufzufassen. Mit dem Vektor-Superfeld in Wess-Zumino-Eichung bricht die Entwicklung der e-Funktionen nach der zweiten Ordnung ab, da wieder die Grassmann-Koordinaten als Entwicklungskoeffizienten auftreten.

Die Felder W_α und $\overline{W}_{\dot{\alpha}}$ sind chirale bzw. anti-chirale Felder, wie man mit Hilfe der Beziehungen

$$\overline{D}_{\dot{\alpha}} W_\beta = 0 \quad \text{und} \quad D_\alpha \overline{W}_{\dot{\beta}} = 0 \quad (12.23)$$

nachrechnen kann. Die beiden Felder sind nicht unabhängig voneinander, sondern über die Beziehung

$$\overline{D}_{\dot{\beta}} \overline{W}^{\dot{\beta}} = D^\alpha W_\alpha \quad (12.24)$$

verknüpft. Eine längere Rechnung liefert die Komponentenfelder des Feldstärke-Superfeldes

$$W^a = -\lambda^a(y) + \theta D^a(y) + \theta\sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu}^a(y) - \theta\bar{\theta}\bar{\sigma}^\mu \nabla_\mu \bar{\lambda}^a(y). \quad (12.25)$$

Darin sind

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu + i[V_\mu, V_\nu] \quad (12.26)$$

und

$$\nabla_\mu \bar{\lambda} = \partial_\mu \bar{\lambda} + i[V_\mu, \bar{\lambda}] \quad (12.27)$$

der Eichfeld-Feldstärketensor und die kovariante Yang-Mills-Ableitung.

Aus den gerade eingeführten chiralen und Vektor-Superfeldern baut man jetzt supersymmetrische Wirkungen zusammen. Dazu benutzt man die Tatsache, daß bei der Transformation der Komponentenfelder gemäß Gl. 12.14 und Gl. 12.19 der F -Term des chiralen Superfeldes und der D -Term des Vektor-Superfeldes sich als totale Divergenz im gewöhnlichen Raum transformieren. Wie im Anhang B.1 gezeigt, hat die Integration über eine Grassmann-Variable θ die gleiche Wirkung wie die Differentiation nach θ . Mit diesem Wissen kann man die zwei Haupttypen supersymmetrischer Wirkungen formulieren

$$S_1 = \int d^4x d^2\theta d^2\bar{\theta} f(\Phi, \Phi^\dagger) \quad (12.28)$$

$$S_2 = \int d^4x d^2\theta W(\Phi) + \int d^4x d^2\bar{\theta} [W(\Phi)]^\dagger. \quad (12.29)$$

S_1 wird als D -Typ- und S_2 als F -Typ-Wirkung bezeichnet. Die Funktion f hat als Ergebnistyp ein Vektor-Superfeld. Somit projiziert bei S_1 die Grassmann-Integration den Term proportional zu $\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}$ heraus. Da dessen Variation unter der Superraum-Translation eine totale Divergenz bezüglich d^4x ist, verschwindet dieser Term bis auf Oberflächenterme. Analog projiziert in S_2 die Grassmann-Integration den F -Term heraus, der auch wieder als totale Divergenz transformiert.

Die Forderung nach Renormierbarkeit schränkt die Form der Funktion f und des Superpotentials W stark ein. Unter Berücksichtigung dieser Tatsache ergibt sich als allgemeinste Form einer supersymmetrischen, renormierbaren Theorie die Lagrangedichte [BW92]

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{4g^2} \text{Tr}(W^\alpha W_\alpha |_{\theta\theta} + \bar{W}_{\dot{\alpha}} \bar{W}^{\dot{\alpha}} |_{\bar{\theta}\bar{\theta}}) + \Phi^\dagger e^V \Phi |_{\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}} \\ & + \left[\left(\frac{1}{2} m_{ij} \Phi_i \Phi_j + \frac{1}{3} g_{ijk} \Phi_i \Phi_j \Phi_k \right) |_{\theta\theta} + h.c. \right]. \end{aligned} \quad (12.30)$$

Die Angaben $|_{\theta\theta}$, $|_{\bar{\theta}\bar{\theta}}$ und $|_{\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}}$ besagen, daß vom vorhergehenden Superfeld-Ausdruck der Teil proportional zu $\theta\theta$, $\bar{\theta}\bar{\theta}$ oder $\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}$ genommen werden soll. Dies sind gerade der F - und der D -Term. Der Term

$$\Phi^\dagger e^V \Phi |_{\theta\theta\bar{\theta}\bar{\theta}} \quad (12.31)$$

beschreibt die eichinvariante Kopplung der chiralen und anti-chiralen Materiefelder an das Eichfeld V . Der letzte Term enthält Massenterme und trilineare Terme, die die Form

Yukawa-artiger Kopplungen zwischen den Fermionen und Bosonen haben. Damit ist die Konstruktion abgeschlossen. Gibt man die Eichgruppe und den Materieinhalt des Modells vor, so kann man mittels Gl. 12.30 die Lagrangedichte ausrechnen. Bei der Berechnung von Feynman-Diagrammen in der Störungstheorie ist es allerdings günstiger, im Superfeld-Formalismus zu bleiben und nur ganz am Schluß, wenn benötigt, wieder auf die Komponentenfelder zu reduzieren.

12.1.2 Das $N = 1$ SU(2) Super-Yang-Mills-Modell

Nachdem ich gezeigt habe wie man die allgemeinste Theorie konstruiert, widme ich mich jetzt der einfachsten supersymmetrischen nicht-abelschen Eichtheorie. Dies ist das $N = 1$ SU(2) Super-Yang-Mills-Modell als supersymmetrische Erweiterung der reinen SU(2)-Eichtheorie. Da wir keine Materiefelder brauchen, reduziert sich unsere Wirkung auf die erste Klammer in Gl. 12.30. Entsprechend den drei Generatoren der Gruppe SU(2) brauchen wir drei Superfelder, W^1, W^2 und W^3 . Die Lagrangedichte ergibt sich damit im Minkowski-Raum zu

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4g^2} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \frac{\vartheta}{32\pi^2} F_{\mu\nu}^a \tilde{F}_{\mu\nu}^a + \frac{i}{2g^2} \bar{\lambda}^a \nabla_\mu \gamma^\mu \lambda^a - \frac{1}{2} D^a D^a, \quad (12.32)$$

$$\tilde{F}_{\mu\nu}^a = \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}^a. \quad (12.33)$$

Die auftretenden Felder sind die Eichfeldstärke $F_{\mu\nu}$, das Spinorfeld λ , das wahlweise als vier-komponentiger reeller Majorana-Spinor oder zwei-komponentiger komplexer Weyl-Spinor geschrieben werden kann, und das reelle skalare Feld D . Bei der Abzählung der bosonischen und fermionischen Freiheitsgrade muß man darauf achten, ob man die on-shell- oder die off-shell-Formulierung meint. Off-shell besitzt das Spinorfeld vier Freiheitsgrade und das Eichfeld nur drei. Deshalb braucht man das Feld D , um die Gleichheit der Freiheitsgrade zu sichern. On-shell reduzieren sich die Freiheitsgrade des Spinorfeldes auf zwei und die des Eichfeldes ebenfalls, so daß das D -Feld nicht benötigt wird. Der Übergang vom off-shell- zum on-shell-Formalismus erfolgt durch Anwendung der Bewegungsgleichungen. Da das Feld D keinen kinetischen Term besitzt, nimmt es nicht an der Dynamik teil und kann mittels der Bewegungsgleichungen entfernt werden. Das Feld D fällt also automatisch beim Übergang off-shell nach on-shell heraus. Der Parameter ϑ wird als Vakuumwinkel bezeichnet. Für $\vartheta \neq 0$ kann man eine komplexe Eichkopplung

$$\frac{1}{g_c^2} = \frac{1}{g^2} + i \frac{\vartheta}{8\pi^2} \quad (12.34)$$

definieren. Aus der Analytizität der Wirkung in diesen komplexen Variablen ergeben sich weitreichende Konsequenzen, wie man z.B. in [DS94, Sei94] nachlesen kann. Im folgenden werde ich immer $\vartheta = 0$ annehmen. Die on-shell-Wirkung im Euklidischen und mit reskalierten Eichfeldern $A \rightarrow g A$ lautet dann

$$S_{SYM} = \int d^4x \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \frac{1}{2} \bar{\lambda}^a \gamma^\mu \nabla_\mu \lambda^a \quad (12.35)$$

mit

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf_{abc} A_\mu^b A_\nu^c, \quad (12.36)$$

$$\nabla_\mu \lambda^a = \partial_\mu \lambda^a + gf_{abc} A_\mu^b \lambda^c. \quad (12.37)$$

Die euklidische Super-Yang-Mills-Wirkung S_{SYM} ist invariant unter den Supersymmetrie-Transformationen

$$\begin{aligned} \delta A_\mu^a &= 2i \bar{\eta} \gamma_\mu \lambda^a \\ \delta \lambda^a &= -\sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}^a \eta \\ \delta \bar{\lambda}^a &= \bar{\eta} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}^a. \end{aligned} \quad (12.38)$$

Die Wirkung sieht auf den ersten Blick aus wie die QCD-Wirkung. Im Unterschied zu dieser treten hier Majorana-Spinoren statt Dirac-Spinoren auf, und die Eichfelder wirken in der adjungierten Darstellung. Da die adjungierte Darstellung von $SU(2)$ dreidimensional ist, hat man auch hier drei Gluino-Felder λ^i entsprechend den drei Eichbosonen W^i . Aus der formalen Analogie zur QCD erwartet man auch für dieses Modell nur farblose asymptotische Zustände und Confinement. Die Wirkung, Gl. 12.35, ist klassisch invariant unter chiralen Transformationen

$$\lambda \rightarrow e^{i\alpha\gamma_5} \lambda, \quad (12.39)$$

und beschreibt damit masselose Teilchen. Außerdem ist sie skaleninvariant. In der Quantentheorie wird die Chiralität durch die Anomalie des axialen Stroms gebrochen

$$\partial_\mu J_\mu^5 = -\frac{\beta(g)}{2g} F_{\mu\nu}^a \tilde{F}_{\mu\nu}^a \quad (12.40)$$

und die Skaleninvarianz durch die Anomalie des Energie-Impuls-Tensors

$$\partial_\mu (x_\nu \theta_{\mu\nu}) = \theta_{\mu\mu} = \frac{\beta(g)}{2g} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a. \quad (12.41)$$

Hierbei ist

$$\beta(g) = -\frac{3 N_c}{2\pi g^2} \frac{1}{1 - \frac{N_c}{2\pi g}}, \quad N_c = \text{rang}(SU(N)) \quad (12.42)$$

die vollständig bekannte β -Funktion für Super-Yang-Mills-Theorien mit der Eichgruppe $SU(N)$, in diesem Fall $N=2$. Da man beweisen kann, daß es keine nicht-störungstheoretischen Beiträge gibt, reicht die Kenntnis der Funktion in allen Ordnungen der Störungstheorie [NSVZ83, SVZ86]. Dies ist einer der wenigen Fälle in denen man die volle β -Funktion analytisch kennt und eine Konsequenz der Supersymmetrie.

Weiterhin gibt es ein exakt berechenbares Gluino-Kondensat, das durch die Dynamik erzeugt wird

$$\langle \lambda^{a\alpha} \lambda_{\alpha}^a \rangle = c \Lambda^3 e^{2\pi i k / N_c}, k = 0, \dots, N_c - 1. \quad (12.43)$$

Die Konstanten c sind ebenfalls bekannt. Die durch die Anomalie Gl. 12.40 zu Z_{2N_c} gebrochene $U(1)$ -Symmetrie der klassischen Wirkung wird durch das Kondensat weiter zu Z_2 gebrochen. In einer vor kurzem erschienenen Arbeit von A. KOVNER und M. SHIFMAN wird ergänzend, noch die Existenz einer zweiten Phase mit verschwindendem Gluino-Kondensat, Z_{2N_c} -Symmetrie und masselosen Teilchen (ohne spontane Symmetriebrechung) vorausgesagt.

Aufgrund des Confinement treten die elementaren Felder, die Gluonen und Gluinos, nur in gebundenen Zuständen auf. In der Phase mit $\langle \lambda^a \lambda^a \rangle \neq 0$ erwartet man massive Eichbosonen und massive Majorana-Fermionen mit Massen

$$m_F = m_B = \frac{1}{3g} \Lambda. \quad (12.44)$$

Λ ist die Skala, die die Brechung der Skaleninvarianz parametrisiert. Die Supersymmetrie wird durch diese Massen nicht gebrochen [VY82]. Aufgrund der Brechung $Z_{2N_c} \rightarrow Z_2$ gibt es N_c entartete Vakuumzustände mit verschwindender Energiedichte, wie es im supersymmetrischen Fall sein muß (s. Gl. 11.16).

12.2 Das Gittermodell

Im ersten Teil dieses Kapitels habe ich skizziert, wie man die Kontinuumswirkung konstruiert und welche Eigenschaften man im Fall $N = 1$ und Eichgruppe $SU(2)$ bzw. $SU(N)$ erwartet. In diesem Teil werde ich die Gitterformulierung der Wirkung Gl. 12.35 angeben und die wesentlichen Größen auflisten, die zur Messung in der Simulation benötigt werden.

12.2.1 Konstruktion der Gitterwirkung

Die Wirkung, Gl. 12.35, enthält das $SU(2)$ -Eichfeld in der adjungierten Darstellung und drei Majorana-Spinoren, die ebenfalls zur adjungierten Darstellung gehören. Die Konstruktion der Gitterwirkung erfolgt in zwei Schritten. Zunächst diskretisiere ich das Eichfeld und dann den Teil mit den Fermionen.

Diskretisierung der Eichfelder

Die Gitterformulierung von Eichfeldern folgt aus deren Transporteigenschaft. Im Kontinuum dienen die Eichfelder dazu, Materiefelder an verschiedenen Orten miteinander vergleichen zu können, was insbesondere für die Differentiation wichtig ist. Dazu definiert man den Transport mittels des Eichfeldes A_{μ} über das pfadgeordnete Integral

$$U_C = \mathcal{P} e^{-\int_C ds A(s)}. \quad (12.45)$$

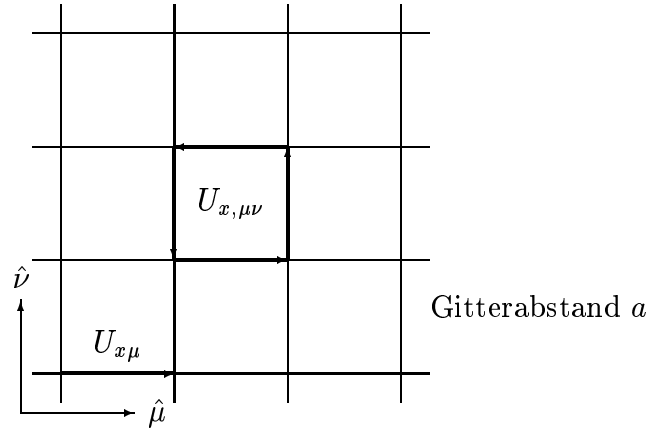


Abbildung 12.1: Anordnung der Eichfelder auf dem Gitter. Mit dicken Linien ist eine Linkvariable $U_{x\mu}$ und eine Plaquette $U_P = U_{x,\mu\nu}$ dargestellt. $\hat{\mu}$ und $\hat{\nu}$ geben die Einheitsvektoren in Richtung μ und ν an.

Auf dem Gitter befinden sich die Materiefelder an den Gitterpunkten. Daher erscheint es sinnvoll, die Eichtransporter U_C mit den Kanten oder Links zwischen den Gitterpunkten zu assoziieren. Die kürzeste Strecke hat die Länge a , wobei a der Gitterabstand ist und der damit verknüpfte Transporter $U_{x\mu}$ am Gitterpunkt x in Richtung $\hat{\mu}$ hat für kleine a die Entwicklung

$$U_{x\mu} = \mathbf{1} - a A_\mu x + \frac{a^2}{2} A_\mu^2(x) + \dots \quad (12.46)$$

Das Feld A_μ ist dabei bereits die Kontraktion mit den Generatoren der gewählten Darstellung der Eichgruppe

$$A_\mu(x) = -g A_\mu^a(x) T_a. \quad (12.47)$$

Die gebräuchteste Gitterversion des reinen Eichanteils in Gl. 12.35 geht auf K. WILSON zurück. Im Kontinuum bekommt man den Feldstärketensor $F_{\mu\nu}$, indem man das Integral Gl. 12.45 auf einem infinitesimalen Rechteck der Seitenlänge dx und dy auswertet. Das kleinste Rechteck auf dem Gitter ist ein Quadrat mit den Ecken

$$x, \quad x + \hat{\mu}, \quad x + \hat{\mu} + \hat{\nu} \quad \text{und} \quad x + \hat{\nu}, \quad \mu, \nu = 1, 2, 3, 4. \quad (12.48)$$

Abbildung 12.1 zeigt dies noch einmal in einer Skizze.

Mit der in der Abbildung gezeigten Plaquette

$$U_P = U_{x,\mu\nu} = U_{x\mu} U_{x+\mu,\nu} U_{x+\nu,\mu}^{-1} U_{x\nu}^{-1} \quad (12.49)$$

lautet die Wilson-Wirkung für ein $SU(N)$ -Eichfeld

$$S_W(\mathcal{U}) = \beta \sum_p \left(1 - \frac{1}{\text{Tr } \mathbf{1}} \text{Re Tr } U_p \right). \quad (12.50)$$

Die Summe geht dabei über alle positiv orientierten Plaquetten, wie sie durch die Reihenfolge der Eichtransporter in Gl. 12.49 festgelegt ist. Durch Einsetzen der Entwicklung Gl. 12.46 und Anwendung der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel zeigt man, daß im Limes $a \rightarrow 0$ die Wilson-Wirkung in die Kontinuums-Yang-Mills-Wirkung übergeht. Die Eichkopplung β ist über die Beziehung

$$\beta = \frac{2N_c}{g^2} \quad (12.51)$$

mit der Kontinuums-Kopplung verbunden.

In unserem Fall ist die Eichgruppe $SU(2)$. Die adjungierte Darstellung ist mit der fundamentalen Darstellung über die Relation

$$V_{rs;x\mu} = V_{rs;x\mu}^* = V_{rs;x\mu}^{-1\ T} = 2 \text{Tr}(U_{x\mu}^\dagger T_r U_{x\mu} T_s) \quad (12.52)$$

verknüpft. Die Matrizen $V_{x\mu}$ sind also reell und vom Rang drei. Die Generatoren T_r sind im $SU(2)$ -Fall durch die Pauli-Matrizen gegeben

$$T_r = \frac{1}{2} \sigma_r. \quad (12.53)$$

In der Wilson-Wirkung, Gl. 12.50, treten in unserem Modell die Linkfelder $U_{x\mu}$ in der fundamentalen Darstellung auf. Die adjungierte Form wird im fermionische Teil gebraucht, zu dem ich jetzt komme.

Diskretisierung der Fermionfelder

Wie ich im ersten Teil dieser Arbeit gezeigt habe, ist die Diskretisierung von Dirac-Fermionen bekannt und führt zur Wilson-Wirkung für Fermionen. Analog zu dieser kann man die Wirkung Gl. 12.35 zunächst mit Dirac-Spinoren diskretisieren und erhält

$$S_f = \sum_x \left\{ \bar{\psi}_x \psi_x - K \sum_{\mu=1}^4 \bar{\psi}_{x+\hat{\mu}} (r + \gamma_\mu) V_{x\mu} \psi_x + \bar{\psi}_{x-\hat{\mu}} (r - \gamma_\mu) V_{x-\hat{\mu},\mu}^T \psi_x \right\} \quad (12.54)$$

mit den Linkfelder $V_{x\mu}$ der adjungierten Darstellung und dem Wilson-Parameter r , der im folgenden immer gleich Eins gesetzt wird. Zusammen mit der Wilson-Wirkung für die Eichfelder hat die Wirkung die Form einer $SU(2)$ -Eichtheorie mit einem einzelnen Materiefeld in der adjungierten Darstellung. Man nutzt jetzt die Tatsache aus, daß sich Dirac-Spinoren als Linearkombination zweier Majorana-Spinoren darstellen lassen [Mon96]

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda^{(1)} + i\lambda^{(2)}). \quad (12.55)$$

Umgekehrt kann man aus zwei Dirac-Spinoren zwei Majorana-Spinoren konstruieren

$$\lambda^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi + C\bar{\psi}^T) \quad \text{und} \quad \lambda^{(2)} = \frac{i}{\sqrt{2}} (-\psi + C\bar{\psi}^T). \quad (12.56)$$

C ist die Matrix, die die Ladungskonjugation vermittelt und hat die Eigenschaften

$$C^T = -C \quad \text{und} \quad (\gamma_\mu C)^T = \gamma_\mu C. \quad (12.57)$$

Eine mögliche Wahl im Euklidischen ist damit $C = \gamma_2\gamma_4$. Die in Gl. 12.56 definierten Majorana-Spinoren erfüllen die Majorana-Bedingung

$$\bar{\lambda}^{(k)} = \lambda^{(k)T} C, \quad k = 1, 2. \quad (12.58)$$

Setzt man Gl. 12.56 in Gl. 12.54 ein, so bekommt man die entsprechende Wirkung mit zwei Majorana-Spinoren

$$S_f = \frac{1}{2} \sum_x \sum_{k=1}^2 \left\{ \bar{\lambda}_x^{(k)} \lambda_x^{(k)} - K \sum_{\mu=1}^4 \bar{\lambda}_{x+\hat{\mu}}^{(k)} (1 + \gamma_\mu) V_{x\mu} \lambda_x^{(k)} + \bar{\lambda}_{x-\hat{\mu}}^{(k)} (1 - \gamma_\mu) V_{x-\hat{\mu},\mu}^T \lambda_x^{(k)} \right\} \quad (12.59)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 \sum_x \bar{\lambda}_y^{(j)} Q_{yx} \lambda_x^{(j)} \quad (12.60)$$

mit der Fermionmatrix

$$Q_{yr,xs} = \delta_{yx}\delta_{rs} - K \sum_{\mu=1}^4 \delta_{y,x+\hat{\mu}} (1 + \gamma_\mu) V_{rs,x\mu} + \delta_{y,x-\hat{\mu}} (1 - \gamma_\mu) V_{rs,x-\hat{\mu},\mu}^T. \quad (12.61)$$

Die Fermionmatrix erfüllt die Beziehungen

$$Q^\dagger = \gamma_5 Q \gamma_5 \quad \text{und} \quad \tilde{Q} = \gamma_5 Q = \tilde{Q}^\dagger. \quad (12.62)$$

\tilde{Q} ist folglich hermitesch und somit ist $\det Q = \det(\gamma_5 Q)$ immer reell. Darüber hinaus gilt [Mon97b]

$$C^{-1} Q C = Q^T, \quad (12.63)$$

da die Linkmatrizen in der adjungierten Darstellung reell und symmetrisch sind. Als Folge davon treten reelle Eigenwerte immer doppelt auf, und somit ist $\det Q[V] \geq 0$ und $\sqrt{\det Q[V]}$ reell für alle Eichkonfigurationen V .

Im nächsten Schritt muß man jetzt noch den Zusammenhang zwischen dem Pfadintegral über die Dirac-Spinoren und dem Pfadintegral über die Majorana-Spinoren herstellen, da die quantisierte Theorie hierüber definiert ist und auch Erwartungswerte mit

dem Pfadintegral berechnet werden. Dazu geht man von der Dirac-Version aus und setzt Gl. 12.55 ein

$$\int d\bar{\psi} d\psi e^{\bar{\psi} Q \psi} \stackrel{\text{Gl. B.11}}{=} \det Q = \prod_{k=1} 2 \int d\lambda^{(k)} e^{\bar{\lambda}^{(k)} Q \lambda^{(k)}}. \quad (12.64)$$

Die letzte Integration geht nur über λ , weil $\bar{\lambda}$ mit diesem über Gl. 12.58 verknüpft ist. Da wir nur einen Majorana-Freiheitsgrad benötigen folgt

$$\int d\lambda e^{\bar{\lambda} Q \lambda} = \pm \sqrt{\det Q}. \quad (12.65)$$

Die Festlegung des Vorzeichens ist etwas problematisch. Zwar kann man für ein festes Eichfeld das Vorzeichen festlegen, aber man muß sicherstellen, daß es sich auf kontinuierlichen Eichorbits nicht ändert. Wie ich oben gesagt habe, kann man die Kontinuumswirkung wahlweise mit Majorana- oder Weyl-Fermion formulieren. Im Kontinuum hat E. WITTEN 1982 gezeigt, daß eine $SU(2)$ -Eichtheorie mit einem einzelnen linkshändigen Weyl-Fermion-Doublett in der fundamentalen Darstellung als Materiefeld nicht existiert, da das Pfadintegral identisch verschwindet [Wit82]. Der Beweis beruht auf der Tatsache, daß es zu jedem Eichfeld ein transformiertes Feld gibt, das einen genau entgegengesetzten Beitrag zum Pfadintegral liefert. Die Ursache hierfür ist die nicht-verschwindende vierte Homotopie-Gruppe

$$\pi^4(SU(2)) = Z_2. \quad (12.66)$$

Die Eichfeldpaare sind dabei über kontinuierliche Eichorbits verbunden und liegen nicht in getrennten Sektoren des Raums der Eichfeldkonfigurationen. Da das Pfadintegral aber gerade durch die Determinante der Fermionmatrix gegeben ist, wäre eine Festlegung des Vorzeichens nicht möglich. Für die adjungierte Darstellung wurde keine Aussage getroffen und die Frage blieb offen, ob diese Theorie existiert. In einem 1997 erschienenen Preprint beantwortet S. HSU diese Frage positiv. In der adjungierten Darstellung gibt es keine Vorzeichenfluktuationen und damit kann die Wahl eindeutig getroffen werden. Der Beweis gilt zunächst nur im Kontinuum, aber ich gehe im folgenden davon aus, daß die Aussage auch in der gitterregularisierten Form gilt, da diese im Limes $a \rightarrow 0$ die Kontinuumswirkung beliebig genau approximiert.

Die Festlegung des Vorzeichens kann z.B. über die Pfaff'sche Form der Fermionmatrix Q geschehen [Mon96]. Für komplexe anti-symmetrische Matrizen $M_{ij} = -M_{ji}$ mit geradem Rang $2N$, ist diese definiert als

$$\text{pf}(M) = \frac{(-1)^N}{2^N N!} \prod_P \text{sign}(P) M_{i_1 i_2} \dots M_{i_{2N-1} i_{2N}}. \quad (12.67)$$

Die Summe geht über alle Permutationen und $\text{sign}(P)$ ist das Signum der Permutation P

$$\text{sign}(P) = \begin{cases} +1 & \text{wenn } i_1, \dots, i_{2N} \text{ eine gerade Permutation von } 1, 2, \dots, 2N \text{ ist} \\ -1 & \text{wenn } i_1, \dots, i_{2N} \text{ eine ungerade Permutation von } 1, 2, \dots, 2N \text{ ist} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (12.68)$$

Der Zusammenhang mit der Determinante der Matrix M ist dann gegeben durch [Nak91]

$$\det M = \text{pf}(M)^2. \quad (12.69)$$

In unserem Fall ist die Matrix M gegeben durch $\bar{Q} = C Q$, und somit kann man über $\text{pf}(C Q)$ das Vorzeichen festlegen, indem man für eine spezielle Wahl von Q , z.B. $K = 0$, $\text{pf}(C Q)$ berechnet und mit dem Ausdruck

$$\pm \sqrt{\det(C Q)} = \pm \sqrt{(\det C \det Q)} = \pm \sqrt{\det Q} \quad (12.70)$$

vergleicht. Die Wirkung mit einem Majorana-Freiheitsgrad lautet dann

$$S_f = \frac{1}{2} \sum_x \left\{ \bar{\lambda}_x \lambda_x - K \sum_{\mu=1}^4 \bar{\lambda}_{x+\hat{\mu}} (r + \gamma_\mu) V_{x\mu} \lambda_x + \bar{\lambda}_{x-\hat{\mu}} (r - \gamma_\mu) V_{x-\hat{\mu},\mu}^T \lambda_x \right\}, \quad (12.71)$$

und das Pfadintegral über λ ergibt sich zu

$$\int d\lambda e^{-S_f} = \sqrt{\det Q}. \quad (12.72)$$

Die Gesamtwirkung ist schließlich gegeben durch die Summe

$$S_{\text{SYM}}^{\text{Gitter}} = S_W[U] + S_f[U]. \quad (12.73)$$

Für die Simulation tritt hier das Problem auf, daß die Wurzel der Fermiondeterminante zu berechnen ist. Wie man dies mit dem Lüscher-Verfahren behandelt, werde ich im nächsten Kapitel beschreiben.

Für die numerische Berechnung muß man noch alle Erwartungswerte von Funktionen der Majorana-Spinoren auf Dirac-Spinoren umrechnen, da diese in Simulation verwendet werden. Für die n -Punkt-Funktion erhält man [Mon96]

$$\begin{aligned} \langle \lambda_{y_1} \bar{\lambda}_{x_1} \dots \lambda_{y_n} \bar{\lambda}_{x_n} \rangle &= \frac{1}{Z} \int dU e^{-S_W[U]} \sqrt{\det Q[U]} (\det Q[U])^{-1} \\ &\quad \times \int d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi} Q \psi} \frac{1}{2^n} (\bar{\psi}_{x_1} + C \psi_{x_1}^T) \dots (\bar{\psi}_{x_n} + C \psi_{x_n}^T) \end{aligned} \quad (12.74)$$

mit

$$Z = \int dU e^{-S_W[U]} \sqrt{\det Q[U]}. \quad (12.75)$$

Im Fall $n = 1$ bekommt man damit

$$\langle \lambda_y \bar{\lambda}_x \rangle = \frac{1}{Z} \int dU e^{-S_W[U]} \sqrt{\det Q[U]} \frac{1}{2} \{ Q_{yx}^{-1} + C^{-1} Q_{yx}^{-1} C \}. \quad (12.76)$$

Die höheren n -Punkt-Funktionen kann man auf diese Weise ebenfalls bestimmen.

12.2.2 Eigenschaften und Meßgrößen

Wie in der Einleitung bereits gesagt, ist die gitterregularisierte Theorie nicht mehr supersymmetrisch. Die Supersymmetrie wird durch das Gitter im obigen Sinne leicht gebrochen. Die klassische Wirkung ist chiral invariant. Diese Symmetrie wird zwar durch Quanteneffekte gebrochen, es bleibt aber eine Restsymmetrie Z_2 . Auf dem Gitter hat man zwei Parameter, die man justieren kann, um den kritischen Punkt, der zur supersymmetrischen Kontinuumstheorie gehört, zu finden. Zum einen ist dies die Eichkopplung β und zum anderen der fermionische Hoppingparameter K . Bei fester Eichkopplung kann man die Massen der auftretenden Teilchenzustände mit dem Hoppingparameter einstellen und so den kritischen Wert K_c bestimmen, an dem die Massen der Teilchen des Super-Multipletts übereinstimmen. Die Gitterkonstante a ist eine Funktion von β und K . Folglich wird man den kritischen Wert K_c bei verschiedenen Werten der Eichkopplung bestimmen und aus diesen Werten nach $a \rightarrow 0$ extrapolieren. Im Falle der nicht-abelschen Eichtheorien wird der Kontinuumsimes über $\beta \rightarrow \infty$ erreicht. In der Praxis genügen für die Eichkopplungen in der reinen SU(2)-Eichtheorie Werte im Bereich 2.0-3.0. Damit ist das Programm zunächst festgelegt.

Aus den elementaren Feldern der Wirkung werden die asymptotischen gebundenen Einteilchenzustände aufgebaut. In [VY82] wird für die Teilchen des niedrigsten Super-Multipletts der folgende Ansatz gemacht

$$a = c \bar{\lambda} \lambda \quad b = c i \bar{\lambda} \gamma_5 \lambda \quad \chi = \frac{1}{2} i c F_{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \lambda_L \quad (12.77)$$

$$M = c F^2 \quad N = -c F \tilde{F}. \quad (12.78)$$

Um diese Zustände auf dem Gitter zu messen, machen wir die Identifikation

- $M \sim 0^+$ -Glueball G_{0^+} (gg)
- $\chi \sim \frac{1}{2} \text{Majorana}$ Gluino-Glueball χ ($g\tilde{g}$)
- $a \sim 0^-$ Pseudoskalar a-Eta⁻ η_a^- ($\tilde{g}\tilde{g}$)
- $b \sim 0^+$ Skalar a-Eta⁺ η_a^+ ($\tilde{g}\tilde{g}$).

Die Buchstabenkombinationen gg , $g\tilde{g}$ und $\tilde{g}\tilde{g}$ sollen nur den Inhalt an elementaren Feldern andeuten und sind nicht mit dem Propagator zu verwechseln. Die entsprechenden Massen $M_{G_{0^+}}$, M_χ , $M_{\eta_a^-}$ und $M_{\eta_a^+}$ sollten beim kritischen K den gleichen Wert haben. Neben diesen vier Zuständen messen wir noch

- 2^+ Glueball G_{2^+} (gg)
- 0^- a-Pion π_a ($\tilde{g}\tilde{g}$)
- 0^+ a-Sigma σ_a ($\tilde{g}\tilde{g}$).

Die letzten beiden Zustände treten nicht als physikalische Teilchen im Spektrum auf. Sie werden auf dem Gitter aus den Wilson-Fermionen analog zum Pion und Sigma in der QCD gebildet und dienen als Hilfsgröße bei der Bestimmung des kritischen Hoppingparameters. Neben dieser Analogie stellen sie den verbundenen Anteil der physikalischen Eta-Propagatoren dar. In der OZI-Approximation (Okubo-Zweig-Iizuka [BJ95, §10.7.2]), in der hadronische Zerfälle, die durch unverbundene Quark-Flow-Diagramme beschrieben werden, unterdrückt sind, sind das a-Eta $^-$ und das a-Pion sowie das a-Eta $^+$ und das a-Sigma identisch. Man erwartet, daß das a-Pion bei einem kritischen Wert des Hoppingparameters verschwindet [CV87]. Der so definierte Wert $K_c^{\pi_a}$ muß aber nicht mit dem supersymmetrischen K_c übereinstimmen.

Die beiden Glueballzustände werden aus Korrelationsfunktionen der räumlichen Plaquetten, Gl. 12.49, aufgebaut

$$C_{0^+}(t) = \langle A(t)A(0) \rangle - \langle A(t) \rangle \langle A(0) \rangle \quad (12.79)$$

$$C_{2^+}(t) = \begin{cases} \langle E_1(t)E_1(0) \rangle - \langle E_1(t) \rangle \langle E_1(0) \rangle \\ \langle E_2(t)E_2(0) \rangle - \langle E_2(t) \rangle \langle E_2(0) \rangle \end{cases} \quad (12.80)$$

mit den Größen

$$A(t) = \sum_{x_1, x_2, x_3} \sum_{ij} \text{Re}[U_{x,ij}] \quad (12.81)$$

$$E_1(t) = \sum_{x_1, x_2, x_3} \text{Re}[U_{x,12} - U_{x,23}] \quad (12.82)$$

$$E_2(t) = \sum_{x_1, x_2, x_3} \text{Re}[U_{x,12} + U_{x,23} - 2U_{x,13}]/\sqrt{3}. \quad (12.83)$$

Die Summe über ij schließt die drei raumartigen Plaquetten ein. Der Vakuumerwartungswert der beiden Größen $E_1(t)$ und $E_2(t)$ verschwindet für Gitter, die invariant unter der kubischen Symmetriegruppe sind. Da unsere Gitter asymmetrisch sind, muß man dies durch die Subtraktion ausgleichen. Die Bezeichnung der Linearkombination A , E_1 und E_2 ist in Anlehnung an die Darstellung der kubischen Gruppe gewählt, unter der die Zustände sich transformieren. Weitere Einzelheiten über die Klassifikation der Glueball-Zustände kann man in [BB83] finden.

Das Signal-zu-Rausch-Verhältnis ist bei der Bestimmung der Glueball-Korrelationsfunktionen immer ein Problem. Die Ursache hierfür liegt im schlechten Überlapp der Operatoren A und E mit der Grundzustandswellenfunktion. Um die Klassifikation der

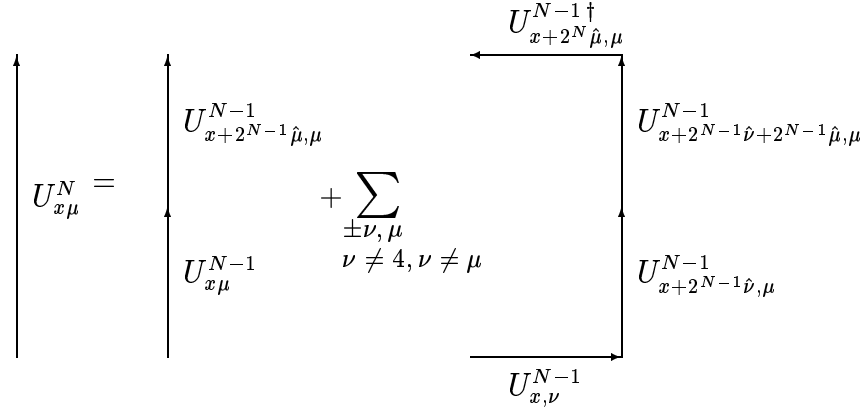


Abbildung 12.2: Eichinvariantes Blocking-Schema nach Teper. Die geschmierten Links sind iterativ definiert und werden in jedem Iterationsschritt um einen Faktor Zwei länger.

Zustände zu erhalten und gleichzeitig den Überlapp zu verbessern, wurden mehrere Verfahren vorgeschlagen und getestet, die aus den elementaren Links „geschmierte“ Links aufbauen. Dabei unterscheidet man eichinvariante Verfahren [Tep87, A⁺87] und solche, bei denen man die Eichung fixieren muß [CSVW93]. Die aus den geschmierten Linkfeldern bestimmten Plaquetten und Korrelationsfunktionen zeigen ein deutlich besseres Signal-zu-Rausch-Verhältnis.

Wir haben uns für das Teper-Verfahren entschieden, da es eichinvariant und damit leicht zu implementieren ist. Dabei werden die Links entsprechend der Vorschrift in Abbildung 12.2 zu neuen Links zusammengefaßt. Formal lautet die Vorschrift

$$U_{x\mu}^N = U_{x\mu}^{N-1} U_{x+2^{N-1}\hat{\mu},\mu}^{N-1} + \sum_{\pm\nu, \mu, \nu \neq 4, \nu \neq \mu} U_{x,\nu}^{N-1} U_{x+2^{N-1}\hat{\nu},\mu}^{N-1} U_{x+2^{N-1}\hat{\nu}+2^{N-1}\hat{\mu},\mu}^{N-1} U_{x+2^N\hat{\mu},\mu}^{N-1\dagger}. \quad (12.84)$$

Dieses Verfahren ist iterativ definiert. Die effektive Länge der geschmierten Linkvariablen nimmt in jedem Schritt um einen Faktor Zwei zu. Dementsprechend haben auch die Plaquetten eine wachsende Ausdehnung und können so den Grundzustand besser herausprojizieren. Das optimale Blocking-Level hängt im wesentlichen von der Eichkopplung und der Gittergröße ab und kann mit einem Variationsverfahren bestimmt werden. Dies werde ich im Abschnitt über die algorithmischen Resultate zeigen.

Bei den Fermionpropagatoren haben ich bei den von mir durchgeführten Messungen nur Punktquellen und -senken verwendet. Zur Zeit wird auch hier ein Verfahren mit geschmierten Quellen und Senken getestet, von dem aber noch keine Ergebnisse vorliegen.

Die rein fermionischen Korrelationsfunktionen lauten

$$C_{\pi_a}(y, x) = \text{Tr}\{\gamma_5 Q_{yx}^{-1} \gamma_5 Q_{xy}^{-1}\} \quad (12.85)$$

$$C_{\sigma_a}(y, x) = \text{Tr}\{Q_{yx}^{-1} Q_{xy}^{-1}\} \quad (12.86)$$

$$C_{\eta_a^-}(y, x) = \text{Tr}\{\gamma_5 Q_{yy}^{-1}\} \text{Tr}\{\gamma_5 Q_{xx}^{-1}\} - 2 \text{Tr}\{\gamma_5 Q_{yx}^{-1} \gamma_5 Q_{xy}^{-1}\} \quad (12.87)$$

$$C_{\eta_a^+}(y, x) = \text{Tr}\{Q_{yy}^{-1}\} \text{Tr}\{Q_{xx}^{-1}\} - 2 \text{Tr}\{Q_{yx}^{-1} Q_{xy}^{-1}\}. \quad (12.88)$$

Zur praktischen Berechnung wird die Punktquelle y per Zufallszahlengenerator im Gitter gewählt. Die Senken werden auf den einzelnen Zeitscheiben aufsummiert. Der verbleibende Propagator hängt dann nur noch von t ab. Durch die Summation wird der $\vec{p} = 0$ Beitrag herausprojiziert. Der Faktor Zwei bei den Eta-Propagatoren resultiert aus der Umrechnung Majorana nach Dirac. Mit dem Propagator $C_{\pi_a}(y, x)$ kann man aus den Werten für $x = y$ noch das unrenormierte Fermion-Kondensat $\langle \lambda_x \lambda_x \rangle$ bestimmen.

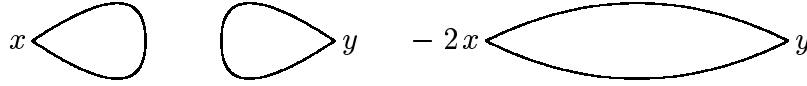


Abbildung 12.3: Graphische Darstellung des a-Eta-Propagators mit dem unverbundenen Anteil links und dem verbundenen Anteil, der dem a-Pion entspricht, rechts.

Abbildung 12.3 zeigt die Beiträge zur a-Eta⁺- und a-Eta⁻-Korrelationsfunktion nochmals in graphischer Form. Die unverbundenen Anteile werden mittels der „volume source technique“ bestimmt [KFM⁺94, E⁺96]. Dazu wird auf jedem Gitterpunkt der betrachteten Spinor-Komponente entsprechende Eintrag gleich Eins gesetzt und dann mit diesem Quellenvektor die Inversion durchgeführt

$$Q[U] v = b, \quad b_{x,\alpha} = 1 \quad \text{für alle } x \quad (12.89)$$

$$\langle Q_{xx}^{-1} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{yx} Q_{yx}^{-1}[U_i] \quad (12.90)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_x Q_{xx}^{-1}[U_i] + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{y \neq x} Q_{yx}^{-1}[U_i]. \quad (12.91)$$

Der so erhaltene Propagator enthält sowohl Anteile mit $x = y$ als auch solche mit $x \neq y$. Der zweite Beitrag in Gl. 12.91 mit $x \neq y$ ist nicht eichinvariant und somit verschwindet der Erwartungswert bei genügend großer Zahl von Eichkonfigurationen (Elitzur's Theorem

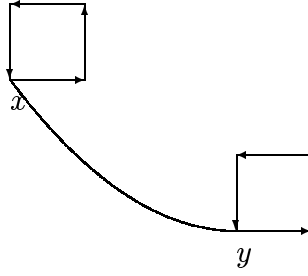


Abbildung 12.4: Graphische Darstellung des Gluino-Glueball-Propagators. Die Plaquette wird aus verschmierten Linkvariablen gebildet.

[Eli75]). Übrig bleibt der erste Teil mit $x = y$, und dies ist der gesuchte Teilpropagator für den unverbundenen Anteil der a-Eta-Korrelationsfunktionen.

Die Korrelationsfunktion für den Gluino-Glueball setzt sich aus zwei Plaquetten und einem Propagator zusammen und ist in Abbildung 12.4 skizziert. Berechnet wird der Propagator über

$$C_{g\bar{g}}(y, x) = \text{Tr}\{\vartheta_y^a Q_{y a \alpha, x b \beta}^{-1} \vartheta_x^b\}. \quad (12.92)$$

Das Feld ϑ_x^a wird nach folgender Vorschrift konstruiert

$$\hat{U}_x = U_{x,23} + U_{x,13} + U_{x,12} \quad (12.93)$$

$$\vartheta_x^a = \frac{-i}{2} \text{Tr}_{\text{SU}(2)} \{\sigma^a \hat{U}_x\}. \quad (12.94)$$

Um das Signal-zu-Rausch-Verhältnis auch hier zu verbessern, werden die schon für die Glueball-Propagatoren verwendeten geschmierten Plaquetten benutzt. Das optimale Blocking-Level muß dann wieder aus den Simulationsergebnissen bestimmt werden.

Die Korrelationsfunktionen mit Gluino-Beiträgen werden über die Inversion der Fermionmatrix bestimmt. Das a-Pion und das a-Sigma kann man zusammen bestimmen, da sie sich nur um den γ_5 -Einschub unterscheiden. Da die Spinoren $4_{\text{Dirac}} \times 3_{\text{colour}}$ Einträge haben, macht das bei einer Punktquelle 12 Inversionen. Für die beiden Eta-Propagatoren gilt dasselbe. Bei den Gluino-Glueballs hat man auf einem $L^3 \cdot T$ Gitter $4_{\text{Dirac}} \times T$ Inversionen und dies zunächst für jedes Blocking-Level. Man kann die Zahl der Inversionen jedoch in allen Fällen um die Hälfte reduzieren, da es genügt, die Propagatoren für die Dirac-Indizes 1 und 3 zu bestimmen. Die Werte für 2 und 4 stimmen mit diesen beiden überein, wie eine Inspektion des Propagators zeigt. Ursache hierfür ist die Tatsache, daß die Linkmatrizen V reell sind.

Neben diesen Propagatoren werden noch rein gluonische Meßgrößen ermittelt. Dies

sind die Erwartungswerte für die raum- und zeitartigen Plaquetten

$$\langle U_{sp} \rangle = \text{Tr}_{\text{SU}(2)} \text{Tr}_x \langle U_{x,12} + U_{x,13} + U_{x,23} \rangle \quad (12.95)$$

$$\langle U_{tp} \rangle = \text{Tr}_{\text{SU}(2)} \text{Tr}_x \langle U_{x,14} + U_{x,24} + U_{x,34} \rangle, \quad (12.96)$$

der Polyakov-Loop und sein Absolutwert

$$\langle P_L \rangle = \text{Tr}_{\text{SU}(2)} \text{Tr}_x \left\langle \prod_{t=1}^T U_{\mathbf{x},t} \right\rangle, \quad (12.97)$$

sowie die Wilson-Loops

$$\langle W_L^{RT} \rangle = \text{Tr}_{\text{SU}(2)} \text{Tr}_x \langle W_{L,1}^{RT} + W_{L,2}^{RT} + W_{L,3}^{RT} \rangle. \quad (12.98)$$

Letztere sind geordnete Produkte von Linkvariablen entlang eines Rechtecks der Ausdehnung $R \cdot T$

$$W_{L,i}^{RT} = \prod_{k=0}^{R-1} U_{x+k\hat{i},i} \prod_{k=0}^{T-1} U_{x+R\hat{i}+k\hat{4},4} \prod_{k=R-1}^0 U_{x+k\hat{i}+T\hat{4},i}^T \prod_{k=T-1}^0 U_{x+k\hat{4},4}^T. \quad (12.99)$$

Über die Wilson-Loops ist das statische Quarkpotential $V(R)$ definiert

$$V(R) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \log \langle W_L^{RT} \rangle, \quad (12.100)$$

das die Eichfeldenergie in Anwesenheit eines statischen Quark-Anti-Quark-Paares beschreibt. Aus $V(R)$ leitet man die „string tension“ σ ab

$$\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{R} V(R). \quad (12.101)$$

Confinement, wie man es im $\text{SU}(2)$ -Super-Yang-Mills-Modell erwartet, ist gleichbedeutend mit $\sigma > 0$. In diesem Fall ist

$$V(R) \sim \sigma R, \quad \text{für } R \rightarrow \infty \quad (12.102)$$

und die Energie steigt an, wenn man das Quark-Anti-Quark-Paar „auseinanderzieht“. Für die Wilson-Loops folgt hieraus, daß sie eine Funktion der eingeschlossenen Fläche sind

$$W_L^{RT} \sim C e^{-\sigma RT}, \quad \text{für } R, T \rightarrow \infty. \quad (12.103)$$

Große Werte für R und T sind immer ein Problem in der Simulation. Zum einen braucht man große Gitter und zum anderen wird das Signal mit steigender Fläche der Wilson-Loops schlechter. Um dennoch eine gute Messung für σ zu erhalten, hat M. CREUTZ die Creutz-Ratios eingeführt [Cre80b, Cre80a]

$$\sigma \approx \chi_{ij} = - \log \frac{W_L^{ij} W_L^{i-1,j-1}}{W_L^{i,j-1} W_L^{i-1,j}}, \quad (12.104)$$

die schon bei moderaten Werten für R und T gute Werte liefern. Eine Extrapolation ist aber auch hier nötig.

Kapitel 13

Simulationsverfahren: Lokale Bosonische Wirkung

13.1 Grundlagen

Wie ich bereits bei der Beschreibung des Hybrid-Monte-Carlo-Verfahrens gezeigt habe, ist die Matrixinversion das Hauptproblem bezüglich der Rechenzeit. Die beim Hybrid-Monte-Carlo eingesetzten Algorithmen zur Invertierung, wie der Conjugate Gradient oder der Minimal Residue, liefern in einem iterativen Verfahren eine Lösung x für das Gleichungssystem

$$A x = b \tag{13.1}$$

bei gegebener Quelle b . Um die Zahl der Iterationen zu senken, kann man verschiedene Präkonditionierungs-Methoden verwenden. Ein spezielles Verfahren ist die polynomiale Approximation der inversen Matrix A^{-1} . Dazu setzt man ein Polynom in A an

$$C(A) = c_0 + c_1 A + c_2 A^2 + \dots + c_n A^n \tag{13.2}$$

und hat zusätzlich in jeder Iteration des Inversions-Algorithmus noch

$$z_k = C(A) r_k \tag{13.3}$$

zu bestimmen. Dieses Verfahren hat den Vorteil, daß es nur auf der Matrix A selbst beruht. Will man das Programm von einem Single-CPU-Rechner auf einen Parallelrechner portieren, so genügt es die Matrixmultiplikation mit A zu optimieren, alle weiteren Schritte bauen dann darauf auf.

Eine etwas andere Sichtweise auf dieses Verfahren ist die folgende. Bei der Iteration konstruiert man die Koeffizienten eines Polynoms $P(s) \approx 1/s$. Wendet man $P(A)$ auf b an, so erhält man den Lösungsvektor $x = P(A)b$. Die einzelnen Inversions-Verfahren generieren dabei unterschiedliche Polynome, die die inverse Matrix verschieden gut approximieren. M.LÜSCHER[Lüs94] hat diese Idee in einer Arbeit von 1993 aufgegriffen und die Polynom-Approximation nicht als Präkonditionierer, sondern als kompletten Inverter eingesetzt. Die exakte Inversion erhält man zwar nur im Grenzwert $\deg(P) \rightarrow \text{rang}(A)$, aber für den Einsatz in der Physik ergeben sich bereits bei deutlichen niedrigerem Grad

des Polynoms brauchbare Resultate.

Startpunkt ist eine Wirkung vom Typ

$$S[\psi, \bar{\psi}, U] = S_{gauge}[U] + \sum_x \bar{\psi}(D + m)\psi. \quad (13.4)$$

D ist z.B. der Dirac-Operator und hängt im allgemeinen noch von den Eichfeldern ab. Wie beim Hybrid-Monte-Carlo werden zwei entartete Fermionflavours angesetzt. Ausintegrieren der Fermionfelder liefert dann die effektive Verteilungsfunktion für die Eichfelder

$$P_{eff} = \frac{1}{Z} [\det(D + m)]^2 e^{-S_{gauge}[U]}. \quad (13.5)$$

Die dabei auftretende Determinante ist der Kern der Schwierigkeiten bei der Simulation. Man kann die Determinante mit Hilfe bosonischer Felder wieder als Gaußsches Integral schreiben

$$\det(D + m)^2 = \frac{1}{(2\pi i)^N} \int [d\phi^\dagger][d\phi] e^{\phi^\dagger (D+m)^{-2} \phi}. \quad (13.6)$$

Im Integral steht jetzt aber nicht mehr die Fermionmatrix, sondern deren Inverse. Die Idee von LÜSCHER war es, diese inverse Matrix durch ein Polynom zu ersetzen. Bei der folgenden Beschreibung des Lüscher-Algorithmus beziehe ich mich bei der Fermionmatrix immer auf die im letzten Kapitel definierte Matrix Q . Das ganze funktioniert aber genauso mit der QCD-Fermionmatrix.

Zunächst stellt man fest, daß für die Matrix $\tilde{Q} = \gamma_5 Q$ gilt

$$\tilde{Q}^\dagger = (\gamma_5 Q)^\dagger = Q^\dagger \gamma_5^\dagger = \gamma_5 Q = \tilde{Q}. \quad (13.7)$$

Damit hat \tilde{Q} einen vollständigen Satz von Eigenvektoren mit reellen Eigenwerten. Die Determinante von \tilde{Q} ist folglich auch reell. Weiterhin kann man beweisen, daß das Eigenwertspektrum beschränkt ist. Mit diesem Vorwissen konstruiert man jetzt ein Polynom vom Grad $n = 2m$, das die Funktion $1/x$ auf einem Intervall $[\varepsilon, \lambda]$ approximiert, welches das Spektrum von \tilde{Q}^2 enthält

$$P_n(x) \approx \frac{1}{x} \quad \text{für } \varepsilon \leq x \leq \lambda. \quad (13.8)$$

Mit $x = \tilde{Q}^2$ folgt

$$P_n(\tilde{Q}^2) \approx \frac{1}{\tilde{Q}^2} \quad (13.9)$$

und für die Determinante

$$\det \tilde{Q}^2 \approx \frac{1}{\det P_n(\tilde{Q}^2)}. \quad (13.10)$$

Über die Art der Approximation ist zunächst nichts genaueres gesagt. Das Polynom muß nur für $n \rightarrow \infty$ gegen die Funktion $1/x$ konvergieren. Im nächsten Schritt zerlegt man das Polynom in ein Produkt von Monomen

$$P_n(x) = c_n x^n + \dots + c_1 x + c_0 = c_n \prod_{i=1}^n (x - z_k). \quad (13.11)$$

Da die Koeffizienten des Polynoms reell sind und n gerade ist, treten die Wurzeln z_k als komplex konjugierte Paare auf. Einsetzen von \tilde{Q} liefert

$$P_n(\tilde{Q}^2) = c_n \prod_{i=1}^m (\tilde{Q}^2 - \tilde{z}_k)(\tilde{Q}^2 - z_k). \quad (13.12)$$

Die Wurzeln z_k kann man als

$$z_k = (\mu_k + i\nu_k)^2 \quad \text{und} \quad \tilde{z}_k = (-\mu_k + i\nu_k)^2, \quad \nu_k > 0, \quad (13.13)$$

schreiben. Mit dieser Parametrisierung erhält man für das Polynom die manifest positive Darstellung

$$P_n(\tilde{Q}^2) = c_n \prod_{i=1}^n [(\tilde{Q} + \mu_k)^2 + \nu_k^2]. \quad (13.14)$$

Die ν_k treten hierin doppelt auf und die entsprechenden μ_k mit jeweils unterschiedlichem Vorzeichen. Auf diese Darstellung wendet man jetzt die Determinante an

$$\det P_n(\tilde{Q}^2) = c_n^N \prod_{k=1}^n \det[(\tilde{Q} + \mu_k)^2 + \nu_k^2]. \quad (13.15)$$

Unter Beachtung von Gl. 13.10 schreibt man diese mit Hilfe von n komplexen Skalarfeldern $\phi_{jx}, j = 1, \dots, n$, als ein Integral über diese Felder

$$\frac{1}{\prod_{k=1}^n \det[(\tilde{Q} + \mu_k)^2 + \nu_k^2]} \propto \int [d\phi_j] [d\phi_j^\dagger] \exp \left\{ - \sum_{xy} \sum_{j=1}^n \phi_{jx}^\dagger [\nu_j^2 \delta_{xy} + (\tilde{Q} + \mu_j)_{xy}^2] \phi_{jy} \right\} \quad (13.16)$$

und erhält somit eine bosonische Wirkung, die die fermionische approximiert. Die vollständige Wirkung mit dem Eichanteil lautet jetzt

$$S[U, \phi] = S_W[U] + \sum_{xy} \sum_{j=1}^n \phi_{jx}^\dagger [\nu_j^2 \delta_{xy} + (\tilde{Q}[U] + \mu_j)_{xy}^2] \phi_{jy}. \quad (13.17)$$

Die entscheidende Frage ist, welche Polynom-Approximation nimmt man und bis zu welcher Ordnung muß man gehen? Erste Tests von K. JANSEN zeigten, daß bei schlechter

Wahl des Polynoms schnell Ordnungen in der Größenordnung von 100 und mehr nötig sind. Eine gute Wahl beruht auf den Chebyshev-Polynomen T_n . Diese sind definiert über die Rekursionsrelation

$$T_0(x) = 1 \quad T_1(x) = x = \cos \theta \quad T_n(x) = \cos(n\theta). \quad (13.18)$$

Daraus konstruiert man das Approximations-Polynom als

$$P_n(x) = \frac{1 - R_{n+1}(x)}{x} \quad (13.19)$$

mit

$$R_{n+1}(x) = \frac{T_{n+1}\left(\frac{2x}{1-\varepsilon} - \frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\right)}{T_{n+1}\left(-\frac{1+\varepsilon}{1-\varepsilon}\right)}. \quad (13.20)$$

$\varepsilon \in (0, 1)$ ist ein freier Parameter. Die Wurzeln sind bekannt und man kann zeigen, daß $P_n(x)$ die Funktion $1/x$ auf dem Intervall $[\varepsilon, 1]$ mit einem in n exponentiell abfallenden Fehler

$$|R_{n+1}(x)| = |x P_n(x) - 1| \leq \delta = 2 \left(\frac{1 - \sqrt{\varepsilon}}{1 + \sqrt{\varepsilon}} \right)^{n+1}, \quad \text{für alle } x \in [\varepsilon, 1] \quad (13.21)$$

gleichmäßig approximiert. Im Bereich $[0, \varepsilon)$ konvergiert $P_n(x)$ auch noch, aber die Konvergenzrate nimmt hier exponentiell ab [Lüs94]. Der Bereich $[0, 1]$ reicht aus, da man die Matrix immer so skalieren kann, daß die Eigenwerte in diesem Intervall liegen.

Die Fehlerabschätzung aus den Chebyshev-Polynomen, Gl. 13.21, liefert einen Zusammenhang zwischen dem Parameter ε und dem Grad des Polynoms n . Will man den Fehler δ konstant halten, dann muß man

$$n \propto \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \quad (13.22)$$

wählen. Die untere Schranke ε sollte möglichst kleiner als der kleinste Eigenwert sein. Der kleinste Eigenwert der Fermionmatrix ist mit der kleinsten Masse verknüpft und diese geht im chiralen Limes $K \rightarrow K_c$ gegen Null, die Zahl der benötigten Skalarfelder steigt entsprechend an. Gleichzeitig beobachtet man für die Autokorrelationszeit des Lüscher-Algorithmus [ABdF⁺95]

$$\tau_{\text{int}} \propto \frac{n}{\sqrt{\varepsilon}} \propto n^2. \quad (13.23)$$

In der Nähe des kritischen K muß man den Grad des Polynoms gemäß Gl. 13.22 erhöhen und dabei steigt die integrierte Autokorrelationszeit nach Gl. 13.23 an. Dies beschreibt den Zusammenhang zwischen dem „critical slowing down“ und dem Lüscher-Algorithmus.

13.2 Zwei-Schritt-Approximation

Nach dem gerade Gesagten ist es klar, daß man die Zahl der Skalarfelder möglichst klein halten möchte, da sonst der Rechenzeitaufwand pro unabhängiger Konfiguration stark anwächst. Gleichzeitig soll aber auch der Fehler der Approximation klein sein. Um diese beiden Gegensätze zu vereinen, hat I. MONTVAY eine Zwei-Schritt-Variante des Lüscher-Algorithmus vorgeschlagen [Mon96]. Das Polynom $P_n(x)$ wird durch das Produkt zweier Polynome, $P'_{n_1}(x)$ und $P''_{n_2}(x)$, mit $n_1 \ll n_2$ ersetzt, die jetzt die Funktion $1/x$ oder allgemein $1/x^\alpha$ approximieren

$$\frac{1}{x^\alpha} \approx P_{n_1 n_2}(x) = P'_{n_1}(x) P''_{n_2}(x). \quad (13.24)$$

Die Approximation wird nicht mehr über Chebyshev-Polynome definiert, sondern über die quadratische Abweichung

$$\delta = \left[\int_\varepsilon^\lambda dx x^w [x^\alpha - P_{n_1 n_2}(x)]^2 \right]^{1/2}. \quad (13.25)$$

w ist ein optionaler Gewichtungsfaktor, der im folgenden gleich 2α gesetzt wird. Im Fall des Super-Yang-Mills-Modells ist $\alpha = \frac{1}{4}$, da man einen Majorana-Freiheitsgrad beschreiben möchte und dieser durch $\sqrt{\det \tilde{Q}} = \sqrt[4]{\det \tilde{Q}^2}$ gegeben ist.

Die Bestimmung des Polynoms $P_{n_1 n_2}(x)$ erfolgt in zwei Schritten. Aus der Minimierung von

$$\delta^2 = \int_\varepsilon^\lambda dx x^w [1 - x^\alpha P'_{n_1}(x)]^2 = \int_\varepsilon^\lambda dx x^w [1 - \sum_{i=0}^{n_1} c_i x^{\alpha+n_1-i}]^2, \quad (13.26)$$

die man analytisch durchführen kann (Integrieren, Ableiten nach c_i und Lösen des Gleichungssystems), erhält man das Polynom

$$P'_{n_1}(x; \alpha, \varepsilon, \lambda) = \sum_{i=1}^{n_1} c_{n_1, i}(\alpha, \varepsilon, \lambda) x^{n_1-i}. \quad (13.27)$$

Mit den bekannten Koeffizienten c_i iteriert man dieses Verfahren jetzt und erhält das zweite Polynom aus der Minimierung von

$$\delta^2 = \int_\varepsilon^\lambda dx x^w [1 - x^\alpha P'_{n_1}(x) P''_{n_2}(x)]^2 = \int_\varepsilon^\lambda dx x^w [1 - \sum_{i=0}^{n_1} \sum_{j=0}^{n_2} c_i \bar{c}_j x^{\alpha+n_1+n_2-i-j}]^2. \quad (13.28)$$

Auch dieses läßt sich wieder analytisch lösen. Für kleine Werte von δ , i.e. $\delta \approx 10^{-5}$, benötigt man eine Rechengenauigkeit, die über die doppelt genaue IEEE Arithmetik hinausgeht. Darum werden die Polynome mit Maple bestimmt, da man die Rechengenauigkeit hier beliebig vorgeben kann. Im folgenden werde ich die beiden Polynome mit

$$\bar{P}_n(x) \equiv P'_{n_1}(x) \quad \text{und} \quad P_n(x) \equiv P''_{n_2}(x) \quad (13.29)$$

bezeichnen.

Mit den beiden so definierten Polynomen wird der Lüscher-Algorithmus nun erweitert. Das erste Polynom $\overline{P}_{\overline{n}}(x)$ wird genauso eingesetzt wie oben beschrieben. Das zweite Polynom $P_n(x)$ wird in einem Metropolis accept-reject-Schritt eingesetzt. Dieser wird mittels normalverteilter Zufallszahlen durchgeführt und deshalb „Noisy“-Korrektur genannt. Die Approximation der Determinante lautet in diesem Schema

$$[\det \tilde{Q}^2]^\alpha \xrightarrow{\bar{\delta}} \frac{1}{\det[\overline{P}(\tilde{Q}^2)]} \xrightarrow{\delta} \frac{1}{\det[\overline{P}(\tilde{Q}^2)] \det[P(\tilde{Q}^2)]}. \quad (13.30)$$

Der Faktor $\det \overline{P}$ wird in ein Integral über \overline{n} komplexe Skalarfelder umgeschrieben. Für die Noisy-Korrektur wird ein Vektor mit Zufallszahlen gemäß der Verteilung

$$\frac{e^{\eta^\dagger P(\tilde{Q}[U]^2) \eta}}{\int [d\eta^\dagger][d\eta] e^{\eta^\dagger P(\tilde{Q}[U]^2) \eta}} \quad (13.31)$$

benötigt. Dazu generiert man einen Satz normalverteilter Zufallszahlen η' und transformiert diese nach η

$$\eta = [P(\tilde{Q}^2)]^{-1/2} \eta'. \quad (13.32)$$

Für die inverse Wurzel aus dem Polynom konstruiert man ein drittes Polynom $R(x)$ mit gleicher Abweichung δ wie $P_n(x)$. Mit der Approximationskette

$$R(x) \xrightarrow{\delta} [P_n(x)]^{-1/2} \xrightarrow{\delta} x^{\alpha/2} [\overline{P}_{\overline{n}}(x)]^{1/2} \xrightarrow{\delta} x^{\alpha/2} S(\overline{P}_{\overline{n}}(x)) \quad (13.33)$$

definiert man zunächst das Polynom $S(\overline{P}) \approx \overline{P}^{1/2}$. Dieses kann man mit der Methode zur Gewinnung des ersten Polynoms aus Gl. 13.26 mit $\alpha = -\frac{1}{2}$ und dem Integrationsbereich $[\lambda^{-\alpha}, \varepsilon^{-\alpha}]$ bestimmen. Mit dem Polynom $S(x)$ erhält man schließlich $R(x)$ aus der Minimierung von

$$\delta^2 = \int_{\varepsilon}^{\lambda} dx [x^{-\alpha/2} S(x) - R(x)]^2, \quad \text{mit } w = 0. \quad (13.34)$$

Mit $R(x)$ ist man in der Lage, Gl. 13.31 zu bestimmen. In [Mon96] wird dann gezeigt, daß mit der Akzeptanzfunktion

$$A(\eta, [U] \rightarrow [U']) = \exp \left(-\eta^\dagger \{P(\tilde{Q}[U']^2) - P(\tilde{Q}[U]^2)\} \eta \right) \quad (13.35)$$

und der Metropolis-Abfrage

$$\min(1, A(\eta, [U] \rightarrow [U'])) \quad (13.36)$$

in der Noisy-Korrektur das Zwei-Schritt-Verfahren detailliertes Gleichgewicht erfüllt. Dabei wurde vorausgesetzt, daß die Eichfelder mit einem der Standard-Algorithmen (s.u.) gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$e^{S[U, \phi]} \quad (13.37)$$

geändert wurden. $S[U, \phi]$ ist die in Gl. 13.17 definierte Wirkung mit dem Polynom $\overline{P}_{\overline{n}}$.

13.3 Update der Felder

Bleibt noch zu spezifizieren, wie die Updates für die Felder aussehen. Für die Skalarfelder kann man Heatbath und Overrelaxation einsetzen. In dieser Mischung erfüllen die beiden Algorithmen detailliertes Gleichgewicht. Um die Form der Updates anzugeben, braucht man zunächst nochmals die Wirkung für die skalaren Hilfsfelder

$$S_{\overline{P}}[U, \phi] = \sum_j \sum_{xy} \phi_{jx}^\dagger \left\{ (\nu_j^2 \delta_{xy} + \left[(\mu_j + \gamma_5) \delta_{xy} - K \sum_{\mu=1}^4 \delta_{y, x+\hat{\mu}} (\gamma_5 + \gamma_5 \gamma_\mu) V_{x\mu} + \delta_{y, x-\hat{\mu}} (\gamma_5 - \gamma_5 \gamma_\mu) V_{x-\hat{\mu}, \mu}^T \right]^2 \right\} \phi_{jy}. \quad (13.38)$$

Durch Ausmultiplizieren erhält man einen lokalen Wechselwirkungsterm A_j und einen nicht-lokalen mit Nächster- und Übernächster-Nachbarwechselwirkung B_j

$$A_j = (1 + 16 K^2 + \nu_j^2 + \mu_j^2 + 2 \mu_j \gamma_5) \quad (13.39)$$

$$B_j = -2 K \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} [1 + \mu_j (\gamma_5 + \gamma_5 \gamma_\mu)] V_{x\mu} \phi_{j, x+\hat{\mu}}^\dagger + K^2 \sum_{\mu, \nu=\pm 1, \mu \neq \nu}^{\pm 4} (1 + \gamma_\mu - \gamma_\nu - \gamma_\mu \gamma_\nu) V_{x\mu} V_{x+\hat{\mu}, \nu} \phi_{j, x+\hat{\mu}+\hat{\nu}}^\dagger. \quad (13.40)$$

Dabei wurde von den Konventionen $V_{x, -\mu} = V_{x-\hat{\mu}, \mu}^T$ und $\gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu$ Gebrauch gemacht. Aufgrund der γ_5 Matrix in A_j hat man für die ersten beiden Dirac-Indizes ein $+$ vor dem letzten Term und ein $-$ bei den zweiten beiden Dirac-Indizes. Mit diesen beiden Hilfsgrößen lautet die Gleichung für die Overrelaxation

$$\phi'_{jx} = -\phi_{jx} - 2 V_j A_j^{-1}. \quad (13.41)$$

Für den Heatbath-Update bestimmt man für jede der 12 Komponenten von ϕ_{jx} zwei normalverteilte Zufallszahlen ζ_s , $s = 1, 2$, mit Mittelwert Null und Varianz $\sigma^2 = A_j$. Auch hier muß man wieder die Abhängigkeit des Vorzeichens in A_j vom Dirac-Index beachten. Das geänderte Feld ergibt sich daraus zu

$$\phi'_{jx} = \text{Cmplx}(\zeta_1, \zeta_2) - V_j A_j^{-1}. \quad (13.42)$$

Für die Eichfelder kann man im QCD-Fall auch Heatbath und Overrelaxation einsetzen. Im Fall des Super-Yang-Mills-Modells geht dies nicht. Die Ursache hierfür liegt im Auftreten sowohl der fundamentalen Darstellung in der Eichwirkung als auch der adjungierten im Teil für die Skalarfelder. Da die Linkvariablen in der adjungierten Darstellung quadratisch in denen der fundamentalen sind, weiß man nicht, wie man den Algorithmus formulieren soll. Es bleibt nur der einfache Metropolis-Algorithmus, der aber mit mehreren Hits auf denselben Link in Folge den Heatbath-Algorithmus gut approximiert. Entsprechend den beiden Darstellungen bestimmt man aus der Wirkung $S_W[U]$

die Wechselwirkungsmatrix $\Sigma_{Fx\mu}$ in der fundamentalen Darstellung und aus $S_{\overline{P}}[U, \phi]$ die Wechselwirkungsmatrix $\Sigma_{Ax\mu}$ in der adjungierten. $\Sigma_{Fx\mu}$ ergibt sich aus der Standard-Wilson-Wirkung als Summe über die Stapel

$$\Sigma_{Fx\mu} = \sum_{\nu, \nu \neq \mu} U_{x+\hat{\mu}, \nu} U_{x+\hat{\nu}, \mu}^\dagger U_{x+\hat{\nu}, \nu}^\dagger + U_{x-\hat{\mu}-\hat{\nu}, \nu}^\dagger U_{x-\hat{\nu}, \mu}^\dagger U_{x-\hat{\nu}, \nu}. \quad (13.43)$$

Der Anteil aus der Skalarfeld-Wirkung ist etwas komplizierter

$$\begin{aligned} \Sigma_{Ax\mu, rs} = & \sum_{j=1}^n \left\{ -4K \operatorname{Re} [\phi_{jx,r} (1 + \mu_j (\gamma_5 - \gamma_5 \gamma_\mu)) \phi_{jx+\hat{\mu},s}^*] \right. \\ & + 2K^2 \sum_{\nu=\pm 1, \nu \neq \pm \mu}^{\pm 4} \left\{ \operatorname{Re} [\phi_{jx,r} (1 + \gamma_\mu - \gamma_\nu - \gamma_\mu \gamma_\nu) V_{x+\hat{\mu}, \nu, st} \phi_{jx+\hat{\mu}+\hat{\nu}, t}^*] \right. \\ & \left. \left. + \operatorname{Re} [\phi_{jx+\nu, t} (1 - \gamma_\nu - \gamma_\mu + \gamma_\nu \gamma_\mu) V_{x\nu, tr}^T \phi_{jx+\mu, s}^*] \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (13.44)$$

Der erste Anteil stammt aus der Nächsten-Nachbar- und der zweite aus der Übernächsten-Nachbar-Wechselwirkung. Man wählt nun eine $SU(2)$ -Zufallsmatrix U_R in der fundamentalen Darstellung, wobei der Eichparameter als Gewichtungsfaktor benutzt wird, multipliziert diese auf die Linkvariable $U_{x\mu}$ und berechnet die zugehörige adjungierte Matrix V' . Mit diesen beiden Matrizen ergibt sich die Energieänderung für die Metropolisentscheidung zu

$$\begin{aligned} \Delta S = & \operatorname{Tr}_F \{ (U'_{x\mu} - U_{x\mu}) \Sigma_{Fx\mu} \} + \operatorname{Tr}_A \{ (V'_{x\mu} - V_{x\mu}) \Sigma_{Ax\mu} \} \\ U'_{x\mu} = & U_R U_{x\mu} \quad V'_{x\mu} = \operatorname{Adj}(U'_{x\mu}). \end{aligned} \quad (13.45)$$

Hält man die Wechselwirkungsmatrix fest und wählt nur U_R neu, so erhält man die Multihit-Version des Metropolis-Algorithmus, die für genügend viele Hits vergleichbar mit dem Heatbath-Algorithmus ist. Im Anschluß an das Eichfeld-Update wird die Noisy-Korrektur durchgeführt und die komplette Änderung der Konfiguration beibehalten oder verworfen. Bei größeren Gittern als dem von mir verwendeten $4^3 \cdot 8$ Gitter wird man nur einen Teil der Linkfelder ändern können, bevor man in die Noisy-Korrektur geht. Ändert man zu viele Eichfreiheitsgrade, so sinkt die Akzeptanzrate im Korrekturschritt stark ab.

Damit sind der Algorithmus und die Updates vollständig beschrieben. Im nächsten Kapitel werde ich noch auf einige Besonderheiten bei der Implementation eingehen.

Die hier beschriebene Zwei-Schritt-Variante ist nicht exakt. Man könnte sie mit einem dritten Schritt exakt machen, wie in [BdFG96] gezeigt. Im Fall des Super-Yang-Mills-Modells mit der Wurzel aus der Fermiondeterminante ist aber nicht klar, wie dies gehen soll.

13.4 Noisy-Schätzer

Man kann die skalaren Felder auch dazu benutzen Erwartungswerte fermionischer Größen auszurechnen. Diese werden dann als Noisy-Estimators oder Noisy-Schätzer bezeichnet. Diese Schätzer sind nicht neu, sondern sind im Zusammenhang mit Pseudofermionfeldern schon früher benutzt worden. Mit der Beziehung

$$\frac{\partial}{\partial M_{ij}} \det M = M_{ji}^{-1} \det M \quad (13.46)$$

erhält man [Mon96]

$$\tilde{Q}_{yx}^{-1} = \frac{2 \frac{\partial}{\partial \tilde{Q}_{xy}} [\det \tilde{Q}^2]^{1/4}}{[\det \tilde{Q}^2]^{1/4}}. \quad (13.47)$$

Das unrenormierte Gluino-Kondensat lautet in dieser Schreibweise

$$-\langle \lambda_x \lambda_x \rangle = -2 \sum_{j=1}^n \left\langle \phi_{jx}^\dagger \gamma_5 \bar{\phi}_{jx} + \bar{\phi}_{jx}^\dagger \gamma_5 \phi_{jx} \right\rangle \quad (13.48)$$

mit

$$\bar{\phi}_{jx} = \sum_y (\tilde{Q} + \mu_j)_{xy} \phi_{jy}. \quad (13.49)$$

Man kann auch die Zwei-Punkt-Funktionen und alle weiteren n-Punkt-Funktionen umschreiben, aber die Ausdrücke werden schnell umfangreich.

Über den Nutzen dieser Größen liegen noch keine endgültigen Ergebnisse vor. In einem nicht veröffentlichten Vortrag am HLRZ in Jülich hat M. PEARDON berichtet, daß die Varianz der Noisy-Schätzer mit zunehmender Polynomordnung stark anwächst und die Verteilung sehr flach wird. Wir haben sowohl für das Kondensat als auch für den Gluino-Glueball Noisy-Schätzer getestet. Beim Kondensat haben wir ein gutes Signal und beim Propagator ein sehr schlechtes Signal erhalten, so daß sich aus unseren bisherigen Resultaten auch keine eindeutige Schlußfolgerung ergibt.

13.5 Nicht-Hermitesche Variante

Bisher war der Ausgangspunkt immer die Approximation von Q^{-2} . In diesem Fall ist die Matrix hermitesch und positiv definit und man spricht von der hermiteschen Variante des Lüscher-Algorithmus. Es gibt aber auch die Möglichkeit, direkt Q^{-1} zu approximieren. Dies funktioniert solange der Realteil der Eigenwerte positiv bleibt, da dann auch $\det Q$ positiv ist und wieder als Integral über Skalarfelder dargestellt werden kann. In der QCD erwartet man negative Eigenwerte der Fermionmatrix nur für Werte von K , die sehr dicht bei K_c liegen und mit den zur Zeit zur Verfügung stehenden Hardwareressourcen

bei Simulationen mit dynamischen Fermionen nicht erreicht werden können. Im Falle des Super-Yang-Mills-Modells gehen wir von einem ähnlichen Verhalten aus.

Das Polynom $P_n(z)$ muß in diesem Fall nicht mehr über ein Intervall auf der reellen Achse angepaßt werden, sondern auf einem Gebiet in der komplexen Ebene, das das Spektrum enthält. Typischerweise ist das Spektrum ellipsenförmig und somit ist eine Ellipse auch die erste Wahl bei der Approximation. Man kann aber auch zunächst mit einem rechteckigen Gebiet starten, das analytisch leichter zu handhaben ist. Erste Erfahrungen mit Fitpolynomen zeigen, daß in diesem Fall die Fehler in den Ecken zwar groß werden, aber in diesem Gebiet treten keine Eigenwerte auf, so daß man keine Probleme erwartet. Wichtig ist es, die Lage und die Form des Bereichs zu kennen, in dem das Spektrum liegt, da man den Fitbereich möglichst klein halten will.

Das Polynom hat im nicht-hermiteschen Fall die Form

$$\det P_n(Q) = c_n^N \prod_{k=1}^{n/2} \det(Q - \tilde{z}_k) \det(Q - z_k). \quad (13.50)$$

Mit $\gamma_5 Q \gamma_5 = Q^\dagger$ folgt

$$\det(Q - \tilde{z}_k) = \det(Q - z_k)^\dagger. \quad (13.51)$$

Somit lautet die Approximation

$$\det Q \approx \frac{1}{\det P_n(Q)} \propto \int \prod_{k=1}^{n/2} d\phi^\dagger d\phi e^{-\phi_k^\dagger (Q - z_k)^\dagger (Q - z_k) \phi_k}. \quad (13.52)$$

In [BdFG96] wird gezeigt, daß diese Version kürzere Autokorrelationszeiten hat. Darum soll sie auch für unser Modell implementiert und getestet werden. Die Vorstudien zum Spektrum von Q sind in dieser Arbeit durchgeführt worden.

Kapitel 14

Implementierung auf der Cray T90

Der Algorithmus wurde zunächst von I. MONTVAY in Fortran77 auf einer IBM SP2 am CERN entwickelt, auf der auch die ersten Testläufe stattfanden. Um höhere Statistiken zu erhalten, wurde von G. KOUTSOUMBAS und I. MONTVAY eine TAO-Version des Fortran77-Programms für die Quadrics erstellt. Diese war zunächst auf quenched Simulationen beschränkt und wurde dann von I. MONTVAY und J. WESTPHALEN auf die Version mit dynamischen Fermionen erweitert. Parallel dazu habe ich erst auf der Cray YMP und dann auf der Cray T90, beide sind Vektorrechner, eine Fortran90-Version des Algorithmus neu implementiert. Die beiden Programmversionen wurden dann am Ende auf Übereinstimmung getestet, was in Abwesenheit analytischer Vorhersagen für einfache Meßgrößen als Test für die Richtigkeit der Programme dient. Inzwischen gibt es darüber hinaus noch eine C++-Version, die von K. SPANDEREN aufbauend auf die Fortran90-Version für die Cray T3E entwickelt wurde. Dies ist zur Zeit die am weitesten entwickelte Programmversion.

14.1 LBA auf der T90

Bei der Neuimplementation wurden die speziellen Bedingungen auf einem Vektorrechner berücksichtigt. Das heißt vor allem, daß die innersten Schleifen möglichst lang sein sollten und keine indirekten Abhängigkeiten vom Schleifenindex auf der linken Seite von Zuweisungen auftreten. Im allgemeinen wird man daher die innere Schleife über einen unabhängigen Satz von Gitterkoordinaten laufen lassen. Bei der lokalen bosonischen Wirkung bietet sich daneben noch der Polynomindex als Schleifenindex an, da die einzelnen Ordnungen völlig unabhängig voneinander sind. Zunächst ging ich davon aus, daß die Ordnung \bar{n} von \bar{P} in der Größenordnung von 30-40 liegen wird. Das war auf der Cray YMP bereits eine Vektorlänge, die zu sehr guter Performance führte. Es stellte sich dann aber sehr schnell heraus, daß wir mit der Zwei-Schritt-Approximation nur Polynome der Ordnung 10-20 für die Skalarfelder brauchen und Polynome der Ordnung 30-40 nur in der Noisy-Korrektur auftreten. Um dennoch eine vernünftige Vektorlänge zu erzielen, habe ich das Programm so umgeschrieben, daß es N_g Eichfeldkopien gleichzeitig bearbeiten kann. Solche Multikonfigurations-Programme sind übrigens bei kleinen lokalen Feldern auch auf der Quadrics sehr effektiv, da sie das Pipelining verbessern. Die Länge der inner-

sten Schleife wird damit zu $\bar{n} \cdot N_g$. Mit $\bar{n} = 16$ und $N_g = 8$ erhält man eine Vektorlänge von 128, was dem doppelten der Hardwarevektorlänge auf der YMP entspricht. Ein Vergleich mit einer Version, die über die Gitterpunkte vektorisiert, zeigte eine um 50% schlechtere Performance. Bei der Multiplikation mit der Fermionmatrix, die sowohl in der Noisy-Korrektur als auch bei der Berechnung der Propagatoren mit Gluino-Beiträgen auftritt, habe ich die Vektorisierung über die Gitterpunkte benutzt, da hier kein Polynom-Index vorkommt. Insgesamt erreichte das Programm auf der YMP 220 MFlops, was etwa 66% der Peak-Performance entspricht. Beim Wechsel auf das Nachfolgemodell T90 mit einem Leistungsgewinn von ca. 540% sank die Performance relativ zur Peakperformance auf 50%, was aber immerhin noch 900 MFlops entspricht. Ursache hierfür ist wahrscheinlich die längere Hardwarevektorlänge, die jetzt nicht mehr optimal gefüllt wird. Der Einsatz von mehr als acht Eichfeldkopien brachte keine Verbesserung.

14.2 Formulierung der Updates mit Hilfsfeldern

Der skalare Teil der Wirkung in Gl. 13.17 enthält Nächste- und Übernächste-Nachbar-Wechselwirkungen. Eine Möglichkeit, dies auf nächste Nachbarn zu beschränken, ist die Definition eines Hilfsfeldes. Den skalaren Teil kann man mit

$$\tilde{Q}_{yx} = \gamma_5 \delta_{yx} - K \tilde{M}_{yx} \quad (14.1)$$

in folgender Form Schreiben

$$\begin{aligned} S_{\overline{P}}[V, \phi] = \sum_{xy} \sum_j \phi_{jy}^\dagger \Big\{ [1 + 2\mu_j \gamma_5 + \mu_j^2 + \nu_j^2] \delta_{yx} \\ - K[(2\mu_j + \gamma_5) \tilde{M}_{yx} + \tilde{M}_{yx} \gamma_5] + K^2 \tilde{M}_{yz} \tilde{M}_{zx} \Big\} \phi_{jx}. \end{aligned} \quad (14.2)$$

Der Term proportional zu K^2 enthält noch einen lokalen Anteil in Form des Terms $16K^2 \delta_{yx}$. Es hat sich als günstig herausgestellt, die beiden Hilfsfelder

$$h_{1jx} = \sum_{xy} \tilde{M}_{xy} \phi_{jy} \quad \text{und} \quad h_{2jx} = \sum_{xy} \tilde{M}_{xy} \gamma_5 \phi_{jy} \quad (14.3)$$

zu verwenden. Damit lassen sich alle Feld-Updates im Heatbath-, Overrelaxation- und Metropolis-Algorithmus auf Nächste-Nachbar-Wechselwirkungsterme mit den Hilfsfeldern umschreiben. Am Ende der Updates müssen die Hilfsfelder natürlich auch wieder geändert werden. Die geänderte Gleichung für den Wechselwirkungsvektor B_{jx} läßt sich sofort aus Gl. 14.2 ablesen

$$B_{jx} = -K[(2\mu_j + \gamma_5)h_{1jx} + h_{2jx}] + K^2 \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} [(\gamma_5 + \gamma_5 \gamma_\mu) V_{x\mu} h_{1jx+\hat{\mu}}] - 16K^2 \phi_{jx}. \quad (14.4)$$

Bei den Wechselwirkungsmatrizen für den Link-Metropolis-Updater ändert sich nur der Teil aus der skalaren Wirkung. Der Anteil aus der Standard-Wilson-Wirkung bleibt gleich.

Die Matrix $\Sigma_{Ax\mu}$ ergibt sich hier als

$$\begin{aligned}\Sigma_{Ax\mu} = & -4K \operatorname{Re} \left[\phi_{jx}^\dagger (1 + (\gamma_5 + \gamma_5 \gamma_\mu) \mu_j) \phi_{jx+\hat{\mu}} \right] \\ & + 2K^2 \operatorname{Re} \left[\phi_{jx+\hat{\mu}}^\dagger [(\gamma_5 + \gamma_5 \gamma_\mu) h_{1jx} - 2(1 - \gamma_\mu) V_{x\mu}^T \phi_{jx+\hat{\mu}}] \right] \\ & + 2K^2 \operatorname{Re} \left[\phi_{jx}^\dagger [(\gamma_5 - \gamma_5 \gamma_\mu) h_{1jx+\hat{\mu}} - 2(1 + \gamma_\mu) V_{x\mu} \phi_{jx}] \right].\end{aligned}\quad (14.5)$$

Im Vergleich zu Gl. 13.44 fällt die Summation über $\nu \neq \mu$ hier weg. Trotz der zusätzlichen Rechenoperationen durch das Ändern der Hilfsfelder ist diese Version deutlich schneller. Ich werde bei den algorithmischen Ergebnissen hierauf noch einmal eingehen.

14.3 Meßgrößen

Ungefähr die Hälfte der Rechenzeit wird in den Meßroutinen verbraucht. Die Ursache hierfür liegt in den Matrixinversionen für die Propagatoren mit fermionischen Beiträgen. Aus der QCD ist bekannt, daß der Bi-Conjugate-Gradient stabilized (BiCGstab) schneller invertiert als der Conjugate-Gradient [FHN⁺94]. Da unsere Wirkung sehr ähnlich der QCD-Wirkung ist — der einzige Unterschied sind reelle statt komplexer Linkvariablen — habe ich beide Inverter implementiert. Zusätzlich habe ich noch eine even-odd Präkonditionierung programmiert, die mit beiden Inversions-Algorithmen läuft. Dazu schreibt man die Fermionmatrix in der Blockform

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} \gamma_5 & -K \gamma_5 M_{odd-even} \\ -K \gamma_5 M_{even-odd} & \gamma_5 \end{pmatrix} \quad (14.6)$$

und verwendet die Identität

$$\det \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \det A \det (D - C A^{-1} B). \quad (14.7)$$

Man erhält daraus

$$\det \tilde{Q} = \det \gamma_5 \det (\gamma_5 - K^2 \gamma_5 M_{even-odd} \gamma_5^{-1} \gamma_5 M_{odd-even}) \quad (14.8)$$

$$= \det (\gamma_5 - K^2 \gamma_5 M_{even-odd} M_{odd-even}), \quad (14.9)$$

da $\gamma_5^2 = 1$, $\gamma_5^{-1} = \gamma_5$ und $\det \gamma_5 = 1$ ist. Die Matrix

$$\tilde{Q}' = \gamma_5 - K^2 \gamma_5 M_{even-odd} M_{odd-even} \quad (14.10)$$

hat eine kleinere Konditionszahl $\lambda_{\max}/\lambda_{\min}$ als \tilde{Q} und läßt sich mit weniger Rechenaufwand invertieren.

Für die Propagatoren braucht man das Inverse von Q und nicht von $Q^\dagger Q$. Um dennoch den CG einsetzen zu können, benutzt man die Variante Conjugate-Gradient on Normal Equations (CGNE). Dies läuft darauf hinaus, statt des Gleichungssystems

$$Q x = b, \quad (14.11)$$

das System

$$Q^\dagger Q x = Q b \quad (14.12)$$

zu lösen. Beim BiCGstab ist dies nicht nötig, da dieser Algorithmus auch mit nicht-hermiteschen Matrizen arbeitet. Abbildung 14.1 zeigt den Pseudocode für dieses Verfahren.

```

 $r_0 = b - Ax_0$ 
 $\tilde{r} = r_0$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
     $\rho_{i-1} = \tilde{r}^T r_{i-1}$ 
    if  $\rho_{i-1} = 0$  Fehler
    if  $i = 1$ 
         $p_i = r_{i-1}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = (\rho_{i-1}/\rho_{i-2})(\alpha_{i-1}/\omega_{i-1})$ 
         $p_i = r_{i-1} + \beta_{i-1}(p_{i-1} - \omega_{i-1}v_{i-1})$ 
    endif
     $v_i = Ap_i$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1}/(\tilde{r}^T v_i)$ 
     $s = r_{i-1} - \alpha_i v_i$ 
    if  $\|s\| < r_{stop} : x_i = x_{i-1} + \alpha_i p_i$  , stop
     $t = As$ 
     $\omega_i = (t^T s)/(t^T t)$ 
     $x_i = x_{i-1} + \alpha_i p_i + \omega_i s$ 
     $r_i = s - \omega_i t$ 
    if  $\|r_i\| < r_{stop} : \mathbf{stop}$ 
    if  $\omega_i = 0 : \mathbf{stop}$ 
end

```

Abbildung 14.1: Pseudocode für den Bi-Conjugate-Gradient-stabilized-Algorithmus.

Im BiCGstab werden in jedem Schleifendurchlauf zwei Matrixmultiplikationen durchgeführt. Die Zahl der Skalarprodukte und der Operationen vom Typ $y' = ax + y$ ist ebenfalls einen Faktor zwei größer. Der Speicherbedarf beträgt beim BiCGstab zehn Vektoren gegenüber sechs beim CG. Damit ist der Rechenaufwand bei gleicher Iterationszahl vergleichbar.

Bei den Linkvariablen ist es günstig, diese für die Inverter mit even-odd-Zerlegung in even-sites-first-Anordnung im Speicher zu haben. Dagegen ist es in den übrigen Meßrouti-

nen und in den Updatern für die Skalarfelder besser, die Felder in einfacher lexikographischer Anordnung zu speichern, da man sonst einen weiteren Index oder einen indirekten Indexzugriff hat. Um die beiden Programmteile dennoch mit der optimalen Anordnung benutzen zu können, werden die Linkvariablen zwischendurch umgespeichert. Der zusätzliche Aufwand wird durch die daraus resultierende gleich gute Performance der beiden Programmteile mehr als ausgeglichen, so daß ein Netto-Gewinn übrig bleibt.

Die fermionischen Meßgrößen zerfallen in zwei Klassen. Zum einen in den Gluino-Glueball χ , der die aufwendigste Meßgröße darstellt und zum anderen in die vier Gluino-Gluino Kombinationen π_a , σ_a , η_a^- und η_a^+ . Aufgrund der ersten Abschätzungen der Autokorrelationszeiten erschien es günstig, die Gluino-Gluebälle nicht nach jedem Sweep zu messen. Für die anderen Propagatoren braucht man auch deutlich weniger Messungen, als für die rein gluonischen Meßgrößen. Um diesen Beobachtungen Rechnung zu tragen, habe ich ein Statistikmodul implementiert, das eine beliebige aber zur Compilezeit festzulegende Anzahl von Meßdatenreihen unterstützt. Die Meßgrößen habe ich dann in drei Klassen aufgeteilt

1. rein gluonisch (Plaquetten, Wilson-Loops, Gluebälle, ...),
2. gemischt (Gluino-Glueball),
3. rein fermionisch (Fermion-Kondensat, a-Pion, a-Sigma, a-Eta).

Jede Klasse wird mit einer unterschiedlichen Meßfrequenz gemessen. Typische Werte für die inversen Frequenzen sind

$$\{1, 4, 10\} \quad \text{bei } K = 0.16, 0.17, 0.18 \quad (14.13)$$

und

$$\{5, 20, 20\} \quad \text{bei } K = 0.185. \quad (14.14)$$

Da die integrierte Autokorrelationszeit τ_{int} gemäß Gl. 8.29 in den Fehler eingeht, verschlechtert man die Statistik nicht, solange der Abstand zwischen zwei Messungen kleiner oder gleich τ_{int} ist.

Kapitel 15

Algorithmische Ergebnisse

15.1 Vorbemerkungen

In diesem Kapitel werde ich einige Resultate über die Zwei-Schritt-Variante des Lüscher-Algorithmus und die Fortran90-Implementierung auf der Cray T90 präsentieren. Weitere Ergebnisse zum Algorithmus und der Polynom-Approximation findet man in den Arbeiten [Mon96] und [Mon97a].

Zunächst will ich festlegen, wie ein Sweep über das Gitter aufgebaut ist. Dazu dient das folgende Updateschema

$$(N_{\text{ovr}}, N_{\text{htb}}, (N_{\text{met}}, N_{\text{hits}}, N_{\text{nc}}, N_{\text{dir/nc}})). \quad (15.1)$$

Die verwendeten Bezeichnungen sind dabei

N_{ovr}	Anzahl der Skalar-Overrelaxation Schritte,
N_{htb}	Anzahl der Skalar-Heatbath Schritte,
N_{met}	Anzahl der Link-Metropolis Schritte,
N_{hits}	Anzahl der Metropolis-Hits pro Link,
N_{nc}	Anzahl der Noisy Estimator,
$N_{\text{dir/nc}}$	Anzahl der Linkrichtungen pro Noisy Korrektur.

Der letzte Parameter gibt den Bruchteil der Linkvariablen an, die mit dem Metropolis-Algorithmus geändert werden, bevor ein Noisy-Korrektur-Schritt durchgeführt wird. In unserem Fall war es ausreichend, die Links in 25% Teile zu zerlegen, was jeweils einer Richtung im Gitter entspricht. Die Noisy-Estimator sind die normalverteilten Zufallszahlenvektoren, die zur Bestimmung des Determinantenverhältnisses, Gl. 13.35, in der Noisy-Korrektur eingesetzt werden. Um dieses Verhältnis hinreichend genau zu ermitteln, braucht man ca. 4-8 Vektoren. Zusammen bilden diese Schritte einen Sweep, der noch keine Messungen enthält. Auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter, das mit Ausnahme einiger Testläufe für alle Messungen in dieser Arbeit benutzt wurde, ist das Standard-Update-Schema $(6,1,(1,10,6,4))$.

15.2 Polynomapproximation und Spektrum von \tilde{Q}^2

Die Polynome werden mit dem Schema

$$(\bar{n}, n, \varepsilon, \lambda, \delta_1, \delta_2, \delta_3) \quad (15.2)$$

bezeichnet. Darin ist

- \bar{n} die Ordnung des Polynoms $\bar{P}(x)$,
- n die Ordnung der Polynome $P(x)$ und $R(x)$,
- ε die untere Schranke des Fitintervalls,
- λ die obere Schranke des Fitintervalls,
- δ_i die quadratische Abweichung der drei Fitpolynome \bar{P}, P, R .

Die ersten beiden Polynome zusammen approximieren $x^{-1/4}$. Das dritte Polynom ist das Hilfspolynom für die Noisy-Korrektur.

Abbildung 15.1 zeigt die relative Abweichung für die Approximation (16, 40, 0.0005, 5.0, $8.5 \cdot 10^{-4}$, $6.2 \cdot 10^{-5}$, $6.9 \cdot 10^{-6}$) in einem Log-Log-Plot. Im oberen Bild wurde nur das Fitpolynom der Ordnung 16 benutzt, dessen Determinante in der Simulation mit den Skalarfeldern dargestellt wird. Im unteren Bild wurde zusätzlich noch das Korrekturpolynom der Ordnung 40 heranmultipliziert, das in der Noisy-Korrektur den Fehler des groben Polynoms ausgleichen soll.

Man erkennt, daß die Approximation zur unteren Grenze hin schlechter wird. Die obere Einhüllende des Fehlers $\delta(x) = |P(x) - x^{-1/4}|x^{1/4}$ kann durch ein Polynom der Form $y = ax^\beta$ beschrieben werden. Für den oberen Plot erhält man $\beta_1 \approx -1.7$ und für den unteren $\beta_{12} \approx -2.0$. Die Approximation mit beiden Polynomen zeigt bei Werten in der Nähe der unteren Grenze einen deutlich schnelleren Abfall und bleibt dann immer eine Zehnerpotenz unter dem groben Polynom. Unterhalb der unteren Fitgrenze nähert sich der relative Fehler asymptotisch der Eins. Die Approximation zeigt einen kontinuierlichen Übergang an dieser Grenze.

Aufgrund des Anstiegs an der unteren Grenze ist es wichtig, genaue Informationen über das Spektrum zu haben. Im hermiteschen Fall kann man den kleinsten und den größten Eigenwert der Matrix \tilde{Q}^2 leicht mit dem in [FF64, §74] angegebenen Gradientenverfahren bestimmen.

Zur Kontrolle wurden nach 10-50 Sweeps die Grenzen des Spektrums auf den gerade aktuellen Eichkonfigurationen während der Simulation gemessen und ausgegeben. Abbildung 15.2 und Abbildung 15.3 zeigen die Verteilung der oberen und unteren Schranke für $\tilde{Q}^2 = Q^\dagger Q$ bei $\beta = 2.3$ und $K = 0.17$ und 0.18 . Das in der Simulation benutzte Polynom ist das in Abbildung 15.1 gezeigte. Das Simulationschema ist (6,1,(1,10,6,4)). Zusätzlich zu den Daten ist noch die Normalverteilung, die sich aus dem Mittelwert und der Varianz der Meßwerte ergibt. An der unteren Grenze sieht man für $K = 0.18$ und $K = 0.185$ deutliche Abweichungen von dieser Verteilung. Da der Mittelwert für $K \rightarrow K_c$ gegen Null geht, die Matrix aber positiv definit ist und die Breite der Verteilung offensichtlich

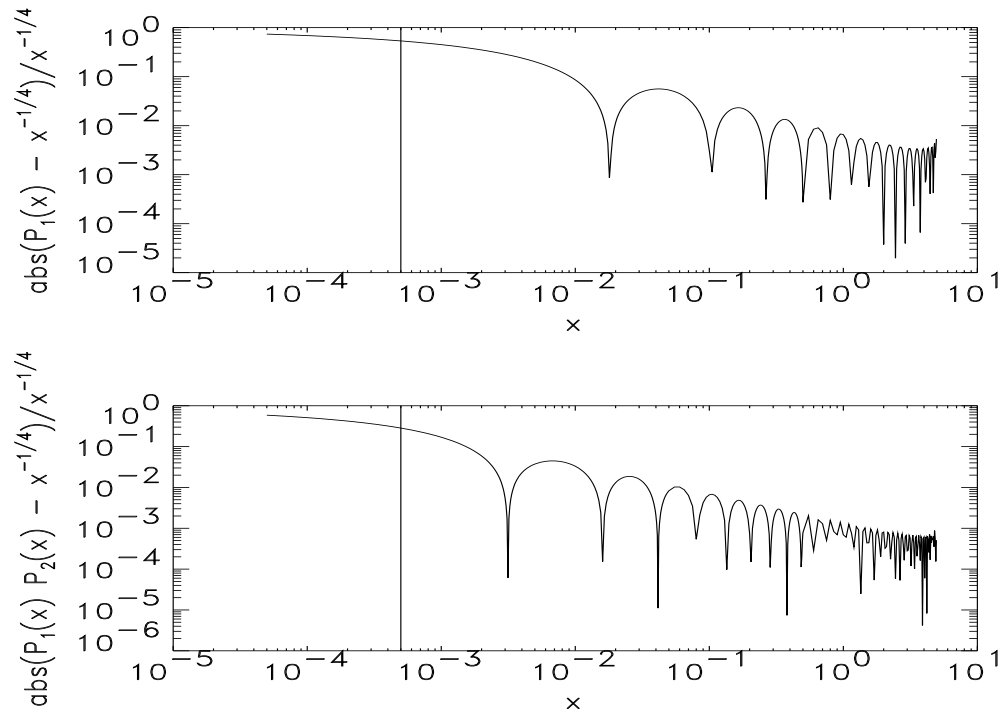


Abbildung 15.1: Log-Log-Plot der relativen Abweichung der Polynomapproximation im Fall $x^{-1/4}$. Oben wurde nur das erste Polynom $P_1(x) = \bar{P}_n(x)$ benutzt, unten zusätzlich noch das Korrekturpolynom $P_2(x) = P_n(x)$. Die Approximation ist in diesem Fall durch das Produkt $P_1(x)P_2(x)$ gegeben. Der senkrechte Strich markiert die untere Grenze des Fitintervalls.

K	$p(\lambda < \varepsilon)$	$\min(\lambda)$
0.16	0.0	0.01036
0.17	0.0	0.00352756
0.18	0.0021	0.000146820
0.185	0.0941	0.0000135267

Tabelle 15.1: Anteil der Eigenwerte λ , die kleiner als die untere Grenze ε des Fitintervalls sind, und kleinster Eigenwert in Abhängigkeit von K .

langsamer abnimmt als der Mittelwert, muß die Verteilung asymmetrisch werden. Bei den anderen beiden K -Werten und an der oberen Grenze ist die Übereinstimmung mit der Normalverteilung sehr gut.

In Tabelle 15.1 ist der kleinste Eigenwert und der Anteil der Eigenwerte kleiner als die untere Grenze des Fitintervalls angegeben. Bei den Werten $K = 0.16, 0.17, 0.18$ ist

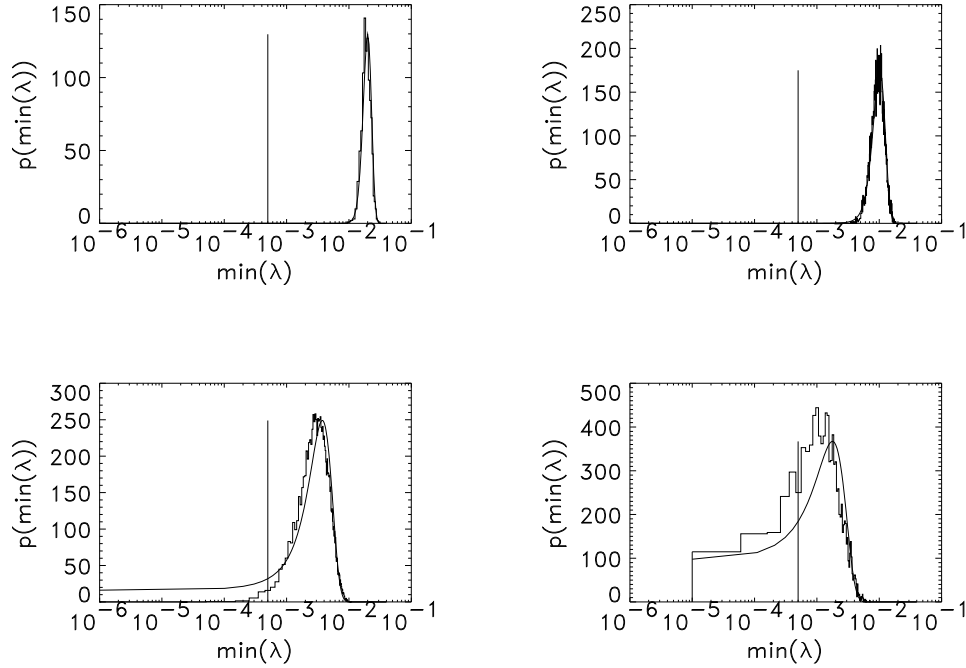


Abbildung 15.2: Verteilung der unteren Schranke des Eigenwertspektrums von $Q^\dagger Q$. Alle Daten bei $\beta = 2.3$. Die Werte von K sind von links nach rechts und von oben nach unten 0.16, 0.17, 0.18, 0.185. Der senkrechte Strich gibt die untere Grenze des Fitintervalls an.

dieser Anteil nicht vorhanden oder so klein, daß er vernachlässigbar ist. Bei $K = 0.185$ liegen fast 10% der Eigenwerte unterhalb. Deshalb muß man etwas vorsichtiger bei der Interpretation der Daten sein.

15.3 Nicht-hermitescher Fall: Spektrum von Q

In der nicht-hermiteschen Version des Lüscher-Algorithmus approximiert man $\det Q$ und nicht $\det(Q^\dagger Q)$. Das Polynom muß in diesem Fall über einen Bereich der komplexen Ebene, der das Spektrum von Q bzw. \sqrt{Q} für ein Majorana-Fermion mit $N_f = \frac{1}{2}$ enthält, an die komplexe Potenzfunktion $z^{-\alpha}$ angepaßt werden.

Um einen ersten Eindruck von der Form des Spektrums zu erhalten, habe ich die volle Fermionmatrix auf thermalisierten Eichfeldkonfigurationen mit der Standard-Routine CGEEV aus der Basic Linear Algebra (Blas) Library invertiert. Der Speicherbedarf hierfür beträgt ca. 640 MB, und eine Inversion dauert etwa vier Stunden, da die Routine nicht gut vektorisiert. Abbildung 15.4 zeigt zwei Beispielspektren für $\beta = 2.3$ und $K = 0.17$ und 0.18. Berechnet wurden die Eigenwerte von Q , das Spektrum von \sqrt{Q} wurde dann

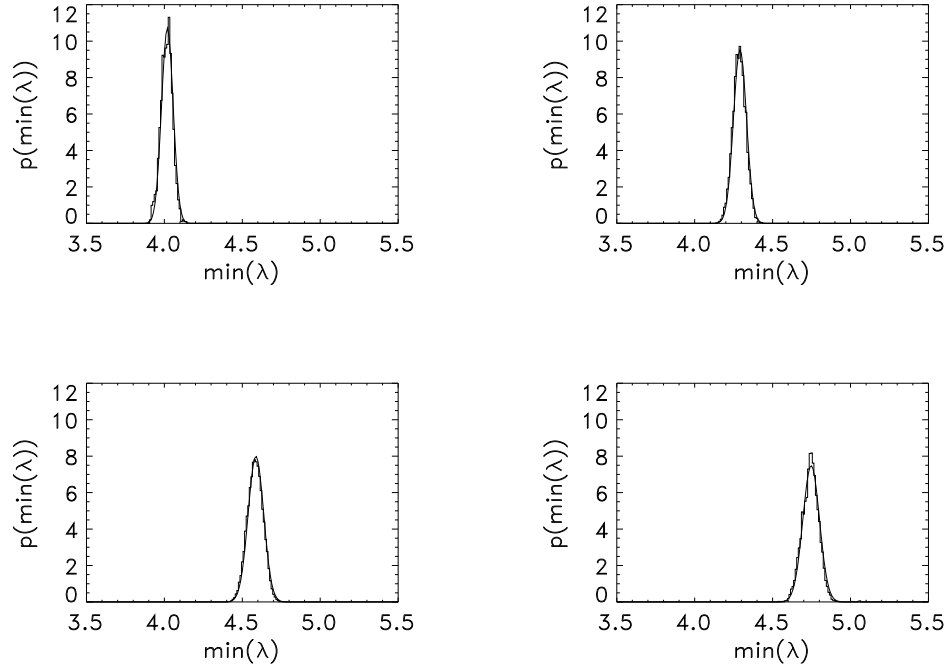


Abbildung 15.3: Verteilung der oberen Schranke des Eigenwertspektrums von $Q^\dagger Q$. Anordnung wie in Abbildung 15.2

durch Ziehen der komplexen Wurzel bestimmt.

Das Spektrum von Q liegt symmetrisch zur reellen Achse, was aus der Identität $Q = \gamma_5 Q^\dagger \gamma_5$ folgt. Weiterhin ist auch $\text{Re}(z) = 1$ eine Symmetrieachse des Spektrums. Insgesamt habe ich fünf Spektren auf diese Art bestimmt. Entscheidend für die Approximation ist die Kenntnis des größten und kleinsten Imaginärteils und des größten und kleinsten Realteils. Aufgrund der Symmetrie reicht je einer der Werte. Weiterhin muß sichergestellt sein, daß der kleinste Realteil nicht negativ wird, da sonst die Determinante nicht mehr als Integral über die Skalarfelder dargestellt werden kann. Um hierüber mehr Informationen zu erhalten, haben wir die naive Potenzmethode mit Verschiebung und Drehung der Matrix benutzt. Die Potenzmethode projiziert den betragsmäßig größten Eigenwert λ_{\max} der Matrix Q heraus. Dazu startet man mit einem beliebigen Vektor v_0 , der nur nicht orthogonal auf dem zu λ_{\max} gehörenden Eigenvektor stehen darf, und bildet die Iterierten

$$v_n = Q v_{n-1}. \quad (15.3)$$

Ein Schätzer für den größten Eigenwert ist dann z.B.

$$\hat{\lambda}_{\max} = \frac{\sum_i v_{n,i}}{\sum_i v_{n-1,i}} \quad (15.4)$$

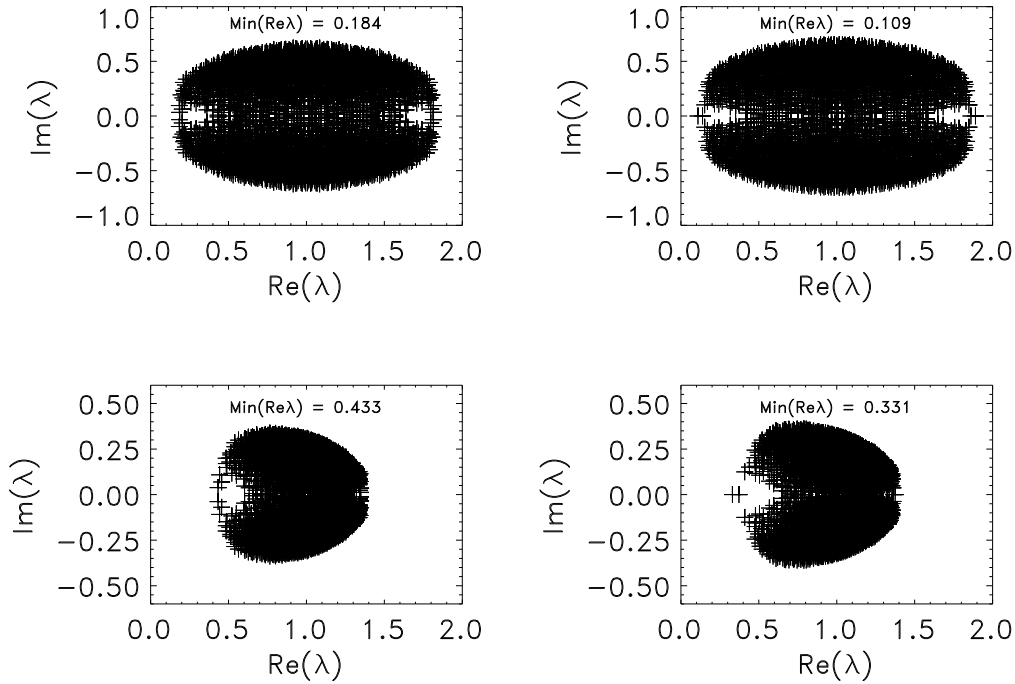


Abbildung 15.4: Beispiele für Spektren von Q und \sqrt{Q} . Links sind die Daten für $(\beta, K) = (2.3, 0.17)$ und rechts für $(2.3, 0.18)$ dargestellt.

oder jede andere Linearkombination der Einträge von v_n und v_{n-1} . Will man den Eigenwert mit dem größten Realteil $\lambda_{\max_{\text{Re}}}$ haben und nicht den betragsmäßig größten λ_{\max} , dann kann man durch Addieren einer Matrix $A = a \mathbf{1}$, die proportional zur Einheitsmatrix ist, das Spektrum so weit nach links schieben, daß $\lambda_{\max_{\text{Re}}} = \lambda_{\max}$ gilt. Zur Bestimmung des maximalen Imaginärteils multipliziert man die Matrix Q mit einer Matrix $B = e^{i\pi/2} \mathbf{1}$ und verschiebt sie anschließend wieder. In unserem Fall habe ich die beiden extremalen Eigenwertanteile mit den folgenden Parametern bestimmt

$$\lambda_{\max_{\text{Re}}} : \quad Q \rightarrow Q_{\text{Re}} = Q + 5.0 \mathbf{1} \quad (15.5)$$

$$\lambda_{\max_{\text{Im}}} : \quad Q \rightarrow Q_{\text{Im}} = (e^{i\pi/2} \mathbf{1}) Q + 5.0 \mathbf{1}. \quad (15.6)$$

Man muß den aus Q_{Re} und Q_{Im} mit der Potenzmethode erhaltenen Eigenwert wieder entsprechend zurücktransformieren. Der kleinste Realteil ergibt sich aus

$$\lambda_{\min_{\text{Re}}} = 2 - \lambda_{\max_{\text{Re}}} \quad (15.7)$$

und der kleinste Imaginärteil aus

$$\lambda_{\min_{\text{Im}}} = -\lambda_{\max_{\text{Im}}}. \quad (15.8)$$

Bei den fünf vollständigen Spektren habe ich die Übereinstimmung der beiden Methoden verifiziert und daraus auf die generelle Eignung der Potenzmethode für dieses Problem geschlossen. Bei allen untersuchten Konfigurationen konvergierte die Potenzmethode nach wenigen hundert Iterationen. Abbildung 15.5 zeigt die Verteilung des kleinsten Realteils und des größten Imaginärteils aus jeweils 800 Konfigurationen.

Realteile kleiner als Null habe ich nicht gemessen. Die Verteilung des kleinsten Realteils liegt bei $K = 0.18$ näher am Nullpunkt, als bei $K = 0.17$. Daß man bei weiterer Annäherung an den kritischen Punkt K_c negative Werte erhält, läßt sich nicht ausschließen. Man wird also immer wieder die Grenzen des Spektrums überprüfen müssen, wie es auch im hermiteschen Fall gemacht wird.

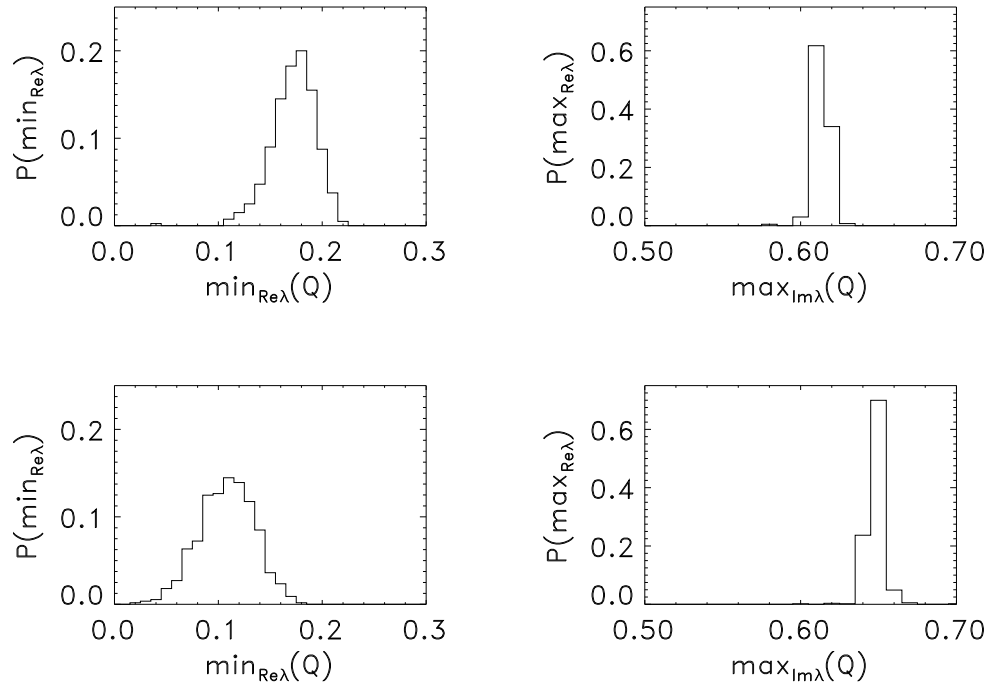


Abbildung 15.5: Verteilung des kleinsten Realteils und des größten Imaginärteils von Q . Links sind die Daten für $(\beta, K) = (2.3, 0.17)$ und rechts für $(2.3, 0.18)$ dargestellt.

Abbildung 15.6 vergleicht nochmals den kleinsten Realteil der Eigenwerte von Q und $Q^\dagger Q$. In der unteren Reihe sind Histogramme des Verhältnisses

$$\gamma = \frac{(\lambda_{\min_{\text{Re}}}(Q))^2}{\lambda_{\min_{\text{Re}}}(Q^\dagger Q)}. \quad (15.9)$$

Bei allen untersuchten Konfigurationen ist $\gamma > 1$. Sollte dies für alle Werte von K gelten, so wäre der kleinste Realteil von Q immer größer Null, da $Q^\dagger Q$ positiv definit ist.

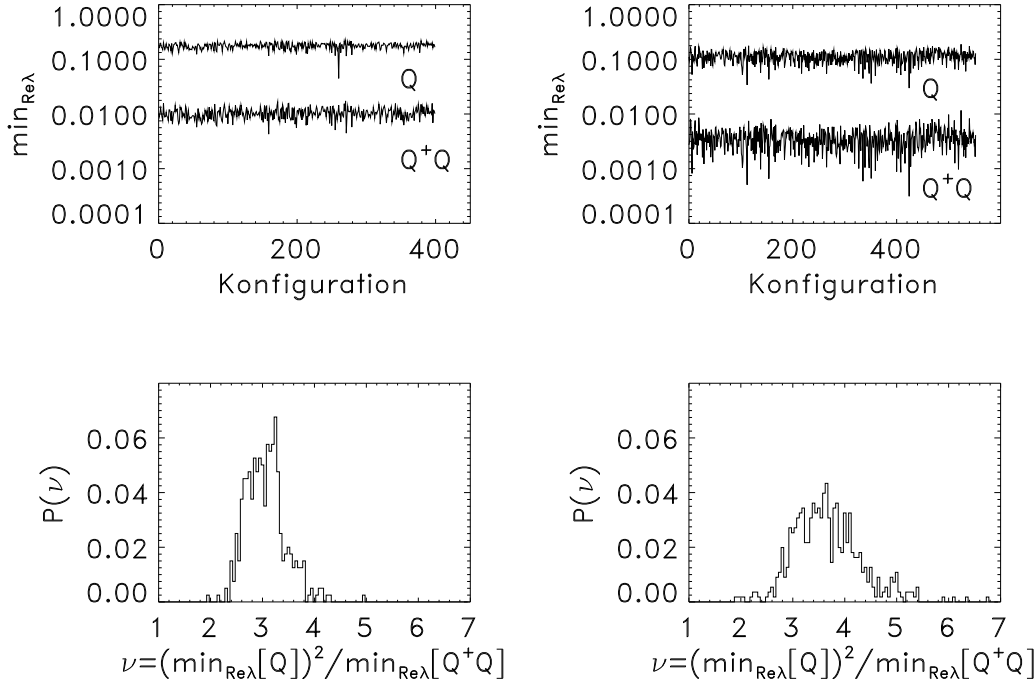


Abbildung 15.6: Vergleich des Realteils des kleinsten Eigenwerts von Q und $Q^\dagger Q$. Links sind die Daten für $(\beta, K) = (2.3, 0.17)$ und rechts für $(2.3, 0.18)$ dargestellt.

15.4 Autokorrelationszeiten

Wie ich bereits bei der Auswertung des Higgs-Yukawa-Modells diskutiert habe, geht die integrierte Autokorrelationszeit τ_{int} in die Fehlerabschätzung ein. Daher ist eine Kenntnis von τ_{int} wichtig, um die Zahl der nötigen Messungen abschätzen zu können. Die Abhängigkeit von der Polynomordnung sowohl mit dem Ein-Schritt- als auch mit dem Zwei-Schritt-Verfahren ist in [Mon96] diskutiert worden. Hier möchte ich auf das Verhalten bei Annäherung an den chiralen Punkt K_c eingehen.

Tabelle 15.2 zeigt die Autokorrelationszeiten für einige Meßgrößen. Die Werte wurden mit der Blockingmethode nach Gl. 8.33 bestimmt. Die Fehler habe ich durch Wahl von σ aus den Blocking-Leveln ($n - 6 : n - 3$) abgeschätzt, wobei n das letzte Level ist.

Wie zu erwarten, steigen die Werte für τ_{int} für $K \rightarrow K_c$ an. Besonders stark ist dieser Anstieg in den rein gluonischen Größen. In Abbildung 15.7 ist die Zeitentwicklung der Plaquette aufgetragen. Dabei wurden die Rohdaten über jeweils 100 Messungen gemittelt. Bei allen vier Werten für K treten charakteristische lange Moden auf. Beachtet man die unterschiedlichen Skalen auf der X-Achse, so sieht man, daß die Länge dieser Moden mit steigendem K zunimmt. Es ist noch nicht klar, ob es sich dabei um ein algorithmisches

Meßgröße	K			
	0.16	0.17	0.18	0.185
Plaquette	100(40)	60(10)	170(20)	550(100)
Polyakov-Loop	1(1)	2(1)	32(10)	600(200)
Fermion-Kondensat ^a	8(4)	20(3)	36(3)	11(2)
Fermion-Kondensat ^b	1(1)	1(1)	30(15)	80(20)
$C_{g\bar{g}}(0)$	23(6)	30(8)	45(8)	35(10)
$C_{\pi_a}(0)$	5(2)	25(4)	40(12)	25(5)

Tabelle 15.2: Integrierte Autokorrelationszeit aus der Blocking-Methode in Abhängigkeit vom Hoppingparameter K . Das Fermion-Kondensat ist im Fall ^a aus Q_{xx}^{-1} bestimmt worden und im Fall ^b aus dem entsprechenden Noisy-Estimator.

oder ein physikalisches Problem handelt. Zum einen könnten die langen Autokorrelationen durch die Noisy-Korrektur hervorgerufen werden, wie K. SPANDEREN in Testläufen gezeigt hat. Zum anderen könnte es aber auch ein Signal für eine zweite Phase sein, die sich hier durch eine Metastabilität in der Plaquette zeigt. Bei der zweiten Phase könnte es sich dabei um die in [KS97] vorhergesagte symmetrische Phase des Modells handeln. Da die Kontinuumstheorie auch zwei entartete Vakua aufgrund der gebrochenen chiralen Symmetrie besitzt, könnte auch dies die Ursache sein.

In Abbildung 15.8 sind zusätzlich auch die Verteilungsfunktionen der Plaquette inklusive der angepaßten Normalverteilungen geplottet. Eine Metastabilität sollte sich hier als Zwei-Peak-Struktur zeigen. Bei $K = 0.16, 0.17$ und 0.18 ist dies nicht zu erkennen. Bei $K = 0.185$ kann man im Bereich des Maximums leichte Abweichungen erkennen, die aber sehr schwach ausgeprägt sind. Bei der langen Autokorrelationszeit kann aber bei diesem K -Wert auch die Zeitreihe zu kurz sein, um zwei Peaks aufzulösen. Zur Klärung muß man die Statistik verbessern oder noch näher an K_c herangehen, um den Effekt zu verstärken.

15.5 Programmpformance

Als nächstes will ich auf die Performance des Programms eingehen. Soweit bei den Testläufen Messungen durchgeführt wurden, geschah dieses in allen drei Meßklassen gleich häufig. In Tabelle 15.3 habe ich zunächst Resultate von Testläufen auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter zusammengestellt. Alle Läufe wurden mit Random-Startkonfigurationen durchgeführt. Die Approximation war $(16, 40, 0.001, 5.0, 7.3 \cdot 10^{-4}, 3.5 \cdot 10^{-5}, 3.8 \cdot 10^{-6})$.

Die ersten fünf Reihen enthalten Daten, die mit dem von mir erstellten Fortran90-Programm ermittelt wurden. Die letzte Zeile zeigt zum Vergleich die ursprüngliche Fortran77-Version ohne Hilfsfelder. Man muß dazu sagen, daß diese Version nicht vektorisiert ist, was man unschwer an der kurzen Vektorlänge erkennt, da sie für eine RISC-Architektur programmiert wurde. Der Faktor 20 zum Fortran90-Programm überschätzt

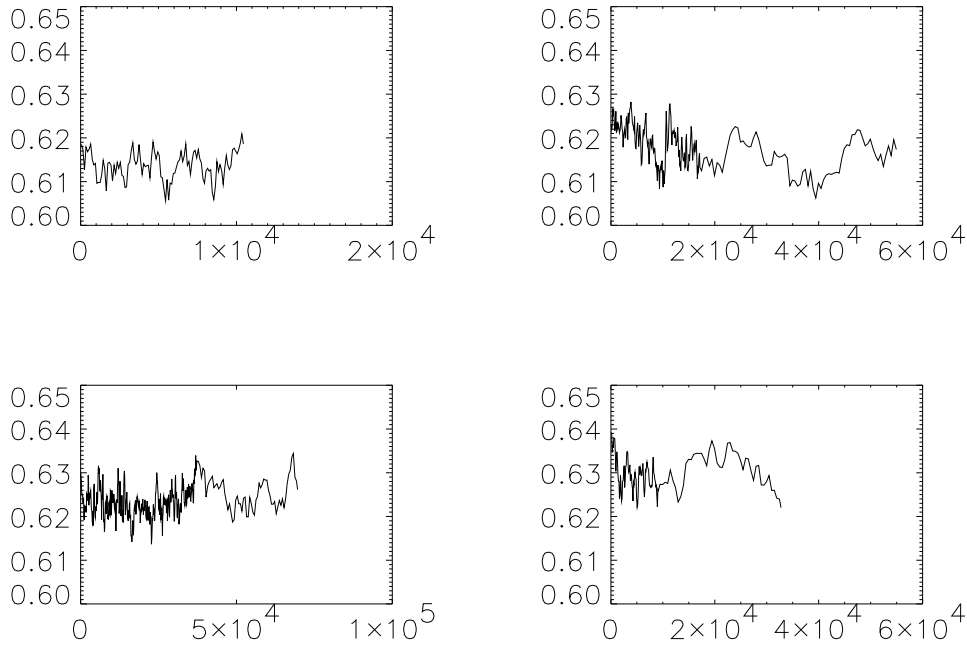


Abbildung 15.7: Zeitreihendarstellung der Plaquette. Von links nach rechts und von oben nach unten sind die Plots für $K = 0.16, 0.17, 0.18, 0.185$ und $\beta = 2.3$ dargestellt.

den Performance-Gewinn etwas. Es bleibt aber festzuhalten, daß die Version ohne Hilfsfelder fünfmal mehr Rechenoperationen ausführt, als die Version mit Hilfsfeldern. Daher ist auch bei einer vektorisierten Version ohne diese Felder, eine schlechtere Performance zu erwarten.

Der Einfluß der Anzahl der Eichkopien N_g auf die Vektorlänge ist offensichtlich. Da die innerste Schleife die Länge $N_g \cdot \bar{n}$ hat, bestätigt dies die Erwartung. Bis $N_g = 4$ steigt die Vektorlänge deutlich an und bleibt dann knapp unter Hardwarevektorlänge von 128. Der Aufwand in Kontingent-Einheiten KE pro Konfiguration bleibt auch nahezu konstant. Gegenüber dem Fall mit nur einer Kopie hat man einen Gewinn von ca. 40%. Die Speicherbelegung bei acht Eichkopien mit $10 \text{ MW} = 80 \text{ MB}$ ist bei 512 MW Hauptspeicher sehr moderat.

Tabelle 15.4 zeigt Daten von Testläufen auf verschiedenen Gittern bei etwas höherem Hoppingparameter K . An den längeren Läufen auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter sieht man, daß Zeit pro Konfiguration auf thermalisierten Konfigurationen kleiner ist, als der hier angegebene Wert. Dies trifft auf die anderen Gitter natürlich genauso zu. Die Akzeptanzraten, soweit man diese aus $2^4 \cdot 4$ (Sweeps*Kopien*NC/Sweep) bzw. $2^4 \cdot 2$ Noisy-Korrektur-Schritten bestimmen kann, liegen jeweils über 90% bzw. 80%. Die Akzeptanzraten der Läufe auf

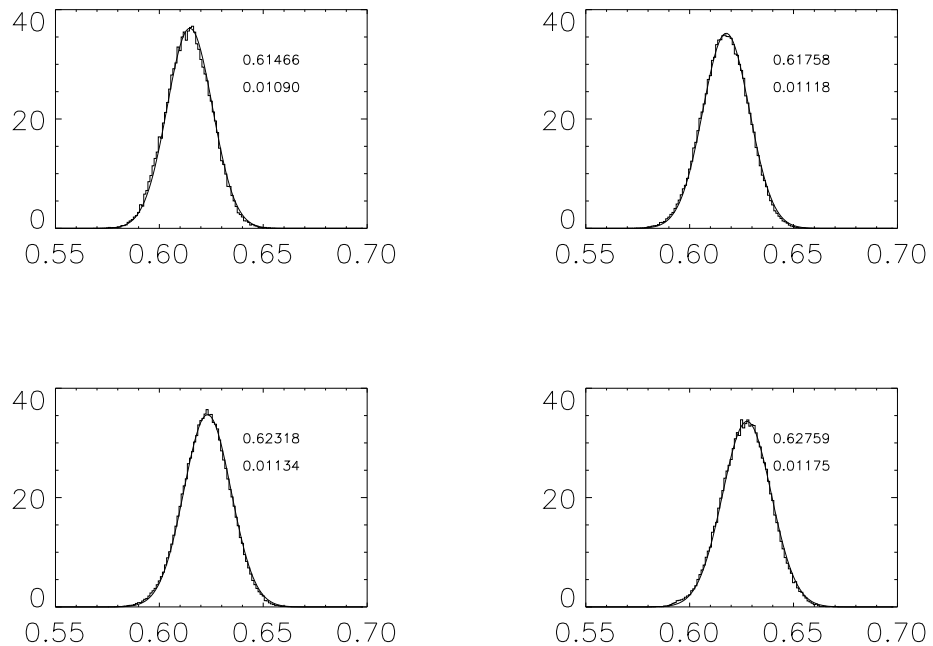


Abbildung 15.8: Histogrammdarstellung der Plaquette. Anordnung wie in Gl. 15.7. Die durchgezogene Kurve ist die entsprechende, angepaßte Normalverteilung. Die beiden Zahlen geben den Mittelwert und die Standardabweichung an.

dem $8^3 \cdot 16$ Gitter liegen bei ca. 85% (aus $2 \cdot 1 \cdot 4 + 2 \cdot 2 \cdot 4$ Noisy-Korrektur-Schritten).

An der hohen Akzeptanzrate erkennt man, daß das Polynom \bar{P} bereits sehr gut $x^{-1/4}$ approximiert. Auf dem $6^3 \cdot 12$ Gitter erkennt man das vom $4^3 \cdot 8$ Gitter bekannte Verhalten bei steigender Anzahl von Eichkopien. Der Gewinn ist hier mit 16% aber deutlich geringer. Auf dem $8^3 \cdot 16$ Gitter kehrt sich dieses Verhalten sogar um. Daß die Version mit zwei Eichfeldern weniger Hauptspeicher belegt, als die Version mit nur einem, liegt an einem anderen Speicherschema bei der Berechnung der Propagatoren, das aber keinen Einfluß auf die Geschwindigkeit hat.

Geht man von unserem derzeitigen Monatskontingent von 65 000 KE aus, so kann man bei $\beta = 2.3$ und $K = 0.17$ auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter etwa 26 000 Updates und Messungen machen, auf dem $6^3 \cdot 12$ Gitter etwa 1 000 und auf dem $8^3 \cdot 16$ Gitter etwa 230. Dabei ist noch nicht berücksichtigt, daß mit asymmetrischen Meßfrequenzen mehr Updates und weniger Messungen bei gleichem Fehler erreicht werden können. Eine hinreichend lange Statistik läßt sich auf der T90 nur bei dem $4^3 \cdot 8$ Gitter erzielen. Für die größeren Gitter sind Parallelrechner wie die Cray T3E oder die Quadrics besser geeignet.

Gauge copies	Memory	Time	MFlops	VL	KE	KE/cfg
1	3.4	247.38	581	69	16.1	0.81
2	4.4	411.57	704	92	26.8	0.67
4	6.4	742.45	781	111	48.3	0.60
8	10.3	1401.64	821	123	91.2	0.57
12	14.3	2065.80	840	119	134.2	0.56
1	4.2	2419.21	203	17	221.0	11.05

Tabelle 15.3: Test des Programms auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter bei $(\beta, K) = (2.3, 0.14)$. Das Updateschema ist $(6, 1, (1, 10, 1, 6))$ (s. Gl. 15.1). Die Daten sind aus je 10 Sweeps nur Updates + 10 Sweeps Updates und Messungen gewonnen. Die letzte Zeile enthält die Zahlen für die nichtvektorierte Fortran77-Version ohne Hilfsfelder.

Gitter	Eichkopien	Speicher/MW	Zeit/s	MFlops	VL	KE	KE/Kfg
$4^3 \cdot 8$	8	11	791	873	125	51.3	2.5
$6^3 \cdot 12$	1	8	1175	755	114	76.2	76.2
$6^3 \cdot 12$	4	23	4155	854	120	268.8	67.2
$6^3 \cdot 12$	8	43	8127	878	121	525.5	65.7
$8^3 \cdot 16$	1	45	4220	857	119	275.9	275.9
$8^3 \cdot 16$	2	39	8914	828	122	580.7	290.3

Tabelle 15.4: Test des Programms auf dem $4^3 \cdot 8$ und $6^3 \cdot 12$ Gitter bei $(\beta, K) = (2.3, 0.17)$. Das Updateschema ist $(6, 1, (1, 10, 6, N))$ (s. Gl. 15.1). Dabei ist $N=4$ auf dem $4^3 \cdot 8$ und $N=1$ auf dem $6^3 \cdot 12$ und $8^3 \cdot 16$ Gitter. Die Daten sind für das Updating plus Messungen.

15.6 Matrixinversion

Zuletzt will ich noch die Ergebnisse des Vergleichs der beiden Matrix-Inversions-Algorithmen mit und ohne even-odd-Präkonditionierung angeben. Wie bereits gesagt, wird in der QCD der BiCGstab mit even-odd-zerlegter Matrix favorisiert. Tabelle 15.5 faßt die Daten für das Super-Yang-Mills-Modell zusammen.

Beide Algorithmen werden durch die even-odd-Zerlegung beschleunigt. Beim BiCGstab ist der Gewinn mit 53% noch größer als beim CGNE mit 45%. Trotzdem schlägt der CGNE den BiCGstab in unserem Modell in beiden Fällen deutlich. Das Verhältnis zwischen den beiden Verfahren ist genau umgekehrt zur QCD. Da die Fermionmatrix direkt mit der Physik verknüpft ist und die Inverter sensitiv auf die Eigenschaften der Matrix sind, kann man daraus folgern, daß trotz der großen oberflächlichen Ähnlichkeit der QCD- und der SYM-Gitter-Wirkung die Physik anders sein wird.

Inverter	Zeit/s	MFlops	KE	Iter1	Iter2
CGNE/eo	917	938	60.32	53	43
BiCGstab/eo	1418	899	93.45	95	75
CGNE	1668	903	108.99	119	95
BiCGstab	3040	929	199.45	239	196

Tabelle 15.5: Test verschiedener Matrix-Inverter zur Bestimmung der Teilchenpropagatoren. Die Kopplungen sind $(\beta, K) = (2.3, 0.17)$. Das Updateschema ist $(6, 1, (1, 10, 1, 6))$ (s. Gl. 15.1). Die Daten sind für das Updating plus Messungen. Es wurden 20 Meß-Sweeps mit Meßfrequenzen $(1, 4, 10)$ durchgeführt.

Propagator	K			
	0.16	0.17	0.18	0.185
Gluino-Glueball	38	110	117	103
a-Pion/a-Sigma	31	68	84	88
a-Eta ⁺ /a-Eta ⁻	40	55	84	107

Tabelle 15.6: Mittlere Anzahl der Matrixmultiplikationen pro Aufruf in Abhängigkeit vom Hoppingparameter K .

Die Zahl der benötigten Matrixmultiplikationen pro Inversion hängt vom Hoppingparameter K ab. Tabelle 15.6 zeigt die entsprechenden Daten für die drei Propagatortypen Gluino-Glueball $g\tilde{g}$, Gluino-Gluino connected $\tilde{g}\tilde{g}$ und Gluino-Gluino disconnected $\tilde{g}\tilde{g}_{\text{VST}}$. Wie zu erwarten, nimmt die Zahl der Multiplikationen mit steigendem K zu. Dabei ist zu berücksichtigen, daß pro Propagator im Fall $g\tilde{g}$ 16 und im Fall $\tilde{g}\tilde{g}$ und $\tilde{g}\tilde{g}_{\text{VST}}$ je 6 Inversionen durchzuführen sind. Beim Gluino-Glueball kommen dann noch maximal drei Blocking-Level auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter hinzu. Warum die Anzahl beim Gluino-Ball von $K = 0.18$ auf $K = 0.185$ fällt, kann ich nicht sagen. Die Zahl der Messungen ist bei allen Punkten größer als 10 000 und die Fehler kleiner als Eins, so daß statistische Fluktuationen ausscheiden.

Kapitel 16

Physikalische Ergebnisse

Die Auswertung der physikalischen Daten ist noch in einem sehr frühen Stadium. Auf dem kleinen $4^3 \cdot 8$ Gitter sind sicherlich noch deutliche finite-size-Effekte zu erwarten, die aufgrund fehlender Daten von größeren Gittern hier aber nicht abgeschätzt werden können. Trotzdem geben die Daten wichtige Anhaltspunkte für die weitere Entwicklung des Projekts und erlauben erste Schlüsse auf die Durchführbarkeit des von CURCI und VENEZIANO vorgeschlagenen Programms. Die Statistik auf dem kleinen Gitter ist in allen Punkten hoch bis sehr hoch wie Tabelle 16.1 zeigt. Die Daten sind im Zeitraum des letzten dreiviertel Jahres gemessen worden. Bei festem K stammen die Daten aus einem kontinuierlichen Lauf, bei dem gelegentlich algorithmische Parameter wie die Meßabstände oder das Polynom geändert wurden. Für die Auswertung wurden alle Daten bei gleichem K zusammengefaßt. Bei der Bestimmung der Autokorrelationszeiten wurden die unterschiedlichen Meßfrequenzen berücksichtigt. Weiterhin ist zu beachten, daß die Statistik immer aus der Zeitentwicklung acht unabhängiger Eichkopien zusammengesetzt ist, die Länge der Zeitreihe für eine Eichkopie also nur ein achtel der angegebenen Gesamtstatistik ist. Die Thermalisierung ist von den Messungen bereits abgezogen.

K	Meßreihe 1	Meßreihe 2	Meßreihe 3 ^a	Meßreihe 3 ^b	Meßabstände
0.16	64 000	16 000	16 000	16 000	(1,4,4)
0.17	152 000	37 776	17 360	3 600	(1,4,10)
	46 400	11 600	11 600	11 600	(5,20,20)
0.18	197 280	49 320	19 176	0	(1,4,10)
	96 000	24 000	24 000	0	(1,4,4)
	54 400	13 600	13 600	13 480	(5,20,20)
0.185	73 600	18 400	18 400	0	(1,4,4)
	77 760	19 440	19 440	12 640	(5,20,20)

Tabelle 16.1: Anzahl der Messungen in den drei Meßreihen. 3^a ist das a-Pion und das a-Sigma, 3^b die beiden a-Eta's, die erst später implementiert wurden.

16.1 Blocking-Optimierung

Zur Messung der Glueball-Zustände G_{0+} und g_{zp} sowie des Gluino-Glueball-Zustandes χ ist es wichtig, das Blocking-Level optimal eingestellt zu haben. Dazu sieht man sich Kenngrößen an wie z.B. die Massen oder den Überlapp mit dem Grundzustand. Weiterhin gibt es noch die Möglichkeit, die Propagatoren auch aus unterschiedlichen Blocking-Levels aufzubauen. Beim Gluino-Glueball könnte man z.B. eine Plaquette aus Level 1 am Anfang und eine aus Level 2 am Ende des Gluino-Propagators haben. Diese gekreuzten Größen habe ich nicht bestimmt. Aufgrund des kleinen Gitters wurden lediglich die level-diagonalen Größen für die Blocking-Level 0, 1 und 2 bestimmt. Die Ausdehnung der geschmierten Plaquetten beträgt dementsprechend 1, 2 und 4. In Level 2 sind damit bereits Informationen über die Eichfeldkonfiguration des ganzen räumlichen Gitters in jeder Plaquette enthalten.

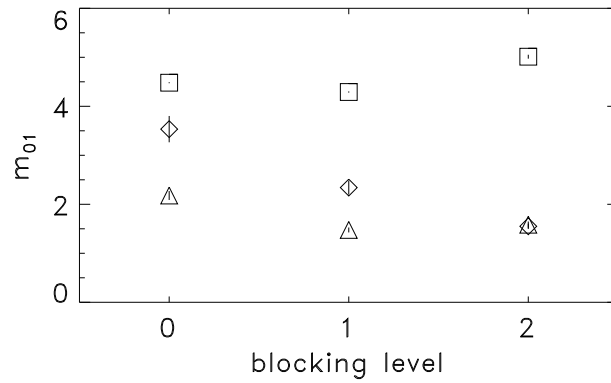


Abbildung 16.1: Daten zu Optimierung des Blocking-Levels für die Eichfelder. Geplotted ist die Masse $m_{01} = \log(C(0)/C(1))$. Die Symbole bezeichnen: \diamond 2^+ Glueball, \triangle 0^+ Glueball und \square Gluino-Glueball χ .

Abbildung 16.1 zeigt die Werte für $m_{01} = \log(C(0)/C(1))$ für den 0^+ und 2^+ Glueball sowie den Gluino-Glueball χ . Bei maximalem Überlapp mit dem Grundzustand sollte die Masse minimal werden, da die Beiträge der höheren Anregungen klein werden. Für den 2^+ Glueball liegt das Minimum beim Blocking-Level $n = 2$, für die beiden anderen Zustände bei $n = 1$. Insbesondere beim Gluino-Glueball, der sehr rechenzeitintensiv ist, kann man sich aufgrund dieser Analyse auf $n = 1$ beschränken. Das optimale n sollte im wesentlichen vom Eichparameter β abhängen. Mit steigendem β und damit schwächer werdender Eichkopplung g steigt die Ausdehnung der Glueball-Zustände an und n muß größer gewählt werden.

16.2 Gluonische Meßgrößen und Fermion-Kondensate

In Abbildung 16.2 sind Resultate aus den quenched-Simulationen, denen der unquenched-Simulationen gegenübergestellt. Bei den Plaquetten und den Creutz-Ratios liegen die Unterschiede im Bereich kleiner 5%. Beim Betrag des Polyakov-Loops sind es 10-20%. In der QCD ist 10% Unterschied zwischen quenched und unquenched typisch. Hier scheint es etwas weniger zu sein. Es liegt nahe, die Ursache hierfür im kleineren fermionischen Sektor des Modells zu suchen. Ein Majorana-Freiheitsgrad hat offensichtlich weniger Einfluß als ein Dirac-Freiheitsgrad.

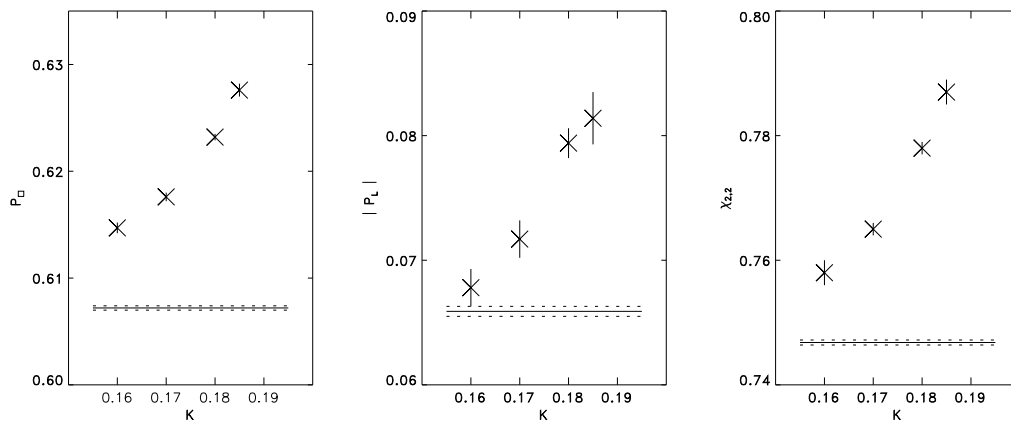


Abbildung 16.2: Vergleich von quenched und unquenched Daten. Links die Plaquette, in der Mitte der Absolutwert des Polyakov-Loops und rechts der Creutz ratio $e^{-\chi_{22}}$. Die waagerechte durchgezogene Linie gibt den Wert aus der quenched-Simulation an, die gepunkteten Linien sind die Fehler.

Aus dem Creutz-Ratio χ_{nn} , definiert in Gl. 12.104, kann man die String-Tension bestimmen. Dazu ist zwar eine Extrapolation zu größeren Werten von n nötig, aber da χ_{22} das einzige Ratio ist, das man auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter bestimmen kann, muß dies hier genügen. Die in Abbildung 16.2 angegebenen Werte sind nicht χ_{22} , sondern $e^{-\chi_{22}}$. Für $\chi_{22}(K)$ selbst erhält man in Einheiten von a^2 die Werte 0.277(3), 0.268(2), 0.251(2) und 0.240(3) im Vergleich zum Wert von 0.292(1) bei $K = 0$. Für die reine SU(2)-Eichtheorie ergibt sich der Wert im Fall $n \rightarrow \infty$ aus einer Starkkopplungs-Entwicklung zu 0.1989 [Mün81]. Daher ist anzunehmen, daß auch die anderen Meßwerte die tatsächlichen Werte überschätzen. Die Vermutung, daß das Super-Yang-Mills-Modell wie die QCD Confinement zeigt, kann mit den Daten unterstützt aber nicht gezeigt werden.

Das Fermion-Kondensat $\langle \bar{\lambda}_x \lambda_x \rangle$ ist in Abbildung 16.3 geplottet. Neben den quenched Daten ist das Resultat aus der Inversion der Fermionmatrix und aus dem entsprechenden Noisy-Estimator eingezeichnet. Die Daten aus der vollen Simulation zeigen wieder nur eine geringe Abweichung von den quenched-Resultaten. Die Noisy-Estimates weichen etwas von den Non-Noisy-Estimates ab. Der Verlauf ist bei ihnen etwas steiler. Die Unter-

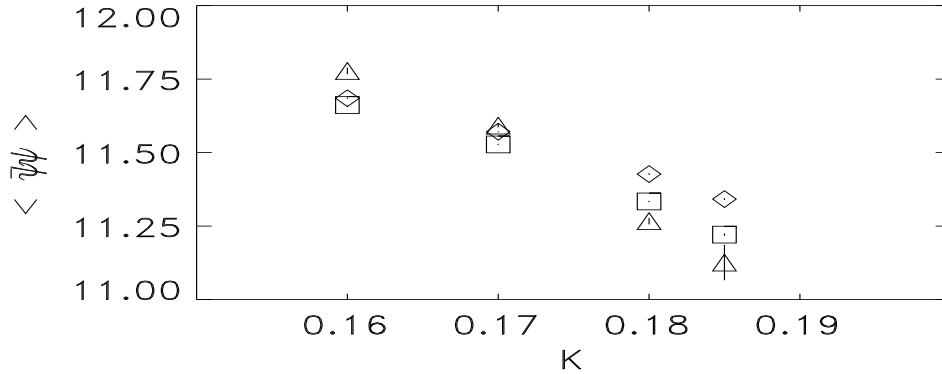


Abbildung 16.3: Vergleich der Fermion-Kondensate. Die quenched Resultate sind aus dem Propagator bestimmt. Bei den unquenched Werten sind zusätzlich noch die Werte aus dem Noisy-Estimator geplottet. Die Symbole bezeichnen: \diamond quenched, Propagator; \triangle unquenched, Noisy Estimator; \square unquenched, Propagator.

schiede liegen alle außerhalb des 2σ Bereichs. Ursache für die Abweichung kann sein, daß die Noisy-Estimates bei der Zwei-Schritt-Methode aus dem Polynom mit größerem Approximationsfehler bestimmt werden und daher noch Korrekturen zu den exakten Werten aus dem Propagator auftreten.

16.3 Teilchen und Massen

Ziel der Untersuchung ist die Bestimmung der Teilchenmassen im Limes $K \rightarrow K_c$. Tabelle 16.2 faßt alle in der Simulation gemessenen Massen zusammen. Die mit Index 0 gekennzeichneten Reihen sind jeweils aus quenched-Simulationen gewonnen. Die Massen wurden bestimmt aus den Relationen [MM94, §7.1.3]

$$r_{12}(x^{\tau_2} + x^{-\tau_2}) = (x^{\tau_1} + x^{-\tau_1}) \quad (16.1)$$

und

$$(r_{13} - 1)(x^{\tau_2} + x^{-\tau_2} - x^{\tau_3} - x^{-\tau_3}) = (r_{23} - 1)(x^{\tau_1} + x^{-\tau_1} - x^{\tau_3} - x^{-\tau_3}) \quad (16.2)$$

mit den Bezeichnungen

$$\tau_i = \left(\frac{1}{2}T - t_i \right) \quad x = e^{-m(\{t_i\}, T)} \quad r_{ij} = \frac{C(t_i)}{C(t_j)}. \quad (16.3)$$

Das Einsetzen der gemessenen Zeitscheibenwartungswerte und die Bestimmung der Nullstellen liefert hieraus die Massen. Die mit Index ^a gekennzeichnete Massen stammen

aus der Relation Gl. 16.1 und den Zeitscheiben $t_1 = 1$ und $t_2 = 2$. Die übrigen Resultate wurden mit Gl. 16.2 und den Werten für $t_1 = 1$, $t_2 = 3$ und $t_3 = 2$ bestimmt. Bei den Zuständen, die beide Bestimmungsarten zulassen, liegen die Unterschiede der Massen innerhalb der Fehlerbalken.

Zustand	Hoppingparameter K				
	0.0	0.16	0.17	0.18	0.185
0^+	1.30(15)	^a 1.40(28)	^a 1.23(13)	^a 1.21(13)	^a 1.04(18)
2^+	1.77(44)	^a 1.30(40)	^a 1.52(32)	^a 1.71(33)	^a 1.34(62)
2^+	1.80(51)	^a 1.37(38)	^a 2.13(71)	^a 1.54(22)	^a 1.53(58)
χ^0		2.68(6)	2.56(5)	2.45(8)	2.31(7)
χ		2.67(12)	2.41(7)	2.37(7)	^a 2.87(50)
π_a^0		1.791(2)	1.583(2)	1.366(4)	1.256(6)
π_a		1.779(4)	1.569(5)	1.34(1)	0.47(1.00)
σ_a^0		2.99(1)	2.82(1)	2.66(1)	2.59(2)
σ_a		2.93(2)	2.73(1)	2.51(4)	2.72(58)
η_a^{-0}		1.793(2)	1.586(3)	1.370(4)	1.264(6)
η_a^-		1.781(5)	1.573(5)	1.34(2)	1.38(32)
η_a^{+0}		^a 1.64(28)	^a 1.72(17)	^a 1.50(19)	^a 1.29(8)
η_a^+		^a 1.85(75)	^a 1.68(30)	^a 1.51(16)	^a 1.06(17)

Tabelle 16.2: Massen im SU(2) N=1 Super-Yang-Mills-Modell. Die Zustände mit Index 0 sind auf quenched Konfigurationen gemessen worden. Die Daten der mit ^a markierten Massen wurden aus der Relation Gl. 16.1 mit $t_1 = 1$ und $t_2 = 2$ bestimmt, die anderen mittels Gl. 16.2 aus $t_1 = 1$, $t_2 = 3$ und $t_3 = 2$. Die Fehler wurden aus 100 Monte-Carlo-Samplen ermittelt.

Werte für die Glueball-Zustände bei $K = 0$ auf größeren Gittern liegen in [CMT87] vor. Bei $\beta = 2.3$ findet man dort

- $m(0^+) = 1.1(1)$
- $m(2^+) = 2.0(1)$.

Ein Vergleich mit den von mir gemessenen Werten zeigt, daß Finite-Size-Effekte innerhalb der statistischen Fehlerbalken nicht aufzulösen sind. Die a-Pion-Masse bei $K = 0.185$ ist mit dem $4^3 \cdot 8$ nicht zu bestimmen, wenn sie wirklich im Bereich von 0.5 in Gittereinheiten liegt. Nimmt man die Faustregel $L \gtrsim 6 m^{-1}$, so wird man $8^3 \cdot 16$ oder $12^3 \cdot 24$ Gitter benötigen, um die Masse zu bestimmen.

Die Unterschiede der Massen vom quenched zum unquenched Fall sind auch bei den Massen klein und zeigen deutliche Abweichungen erst in der Nähe des kritischen Hop-
pingparameters.

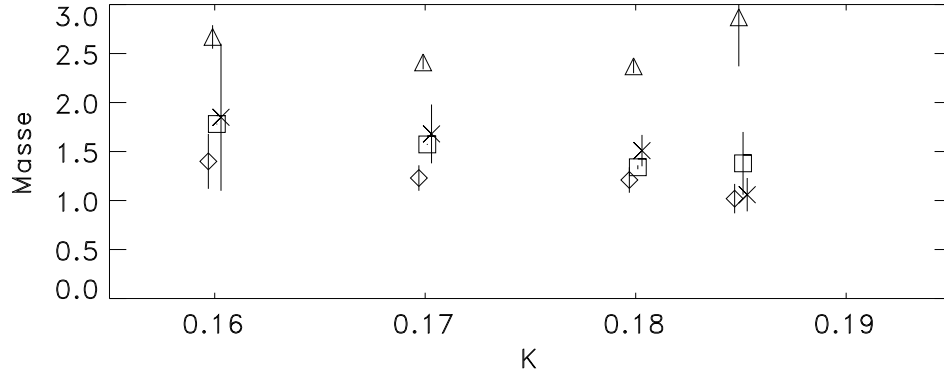


Abbildung 16.4: Massen der Zustände des N=1 Susy Multipletts. Die Symbole bezeichnen: \diamond 0^+ Glueball, \triangle Gluino-Glueball χ , \square η_a^- Pseudoskalar, \times η_a^+ Skalar. Die Datenpunkte sind leicht versetzt eingezeichnet, damit man die Fehlerbalken auseinanderhalten kann.

In Abbildung 16.4 sind die Massen der Teilchen des niedrigsten Supermultipletts dargestellt. Am kritischen Punkt, der gleichzeitig den chiralen und den supersymmetrischen Limes charakterisiert, sollten die Massen gleich werden. Für das a -Eta $^+$, das a -Eta $^-$ und den 0^+ Glueball ist dies innerhalb der Fehlerbalken erfüllt. Der Gluino-Glueball liegt jedoch noch deutlich darüber. Der gemessene Wert bei $K = 0.185$ beträgt $2.87(50)$. Eine Inspektion der Zeitreihe für diesen Wert zeigt allerdings einen Trend zu niedrigeren Werten. Die Ursache für das „Kriechen“ der Masse kann die lange Autokorrelationsfunktion sein oder die schon erwähnte mögliche Metastabilität. Beide Möglichkeiten konnten anhand der Plaquette aufgezeigt werden und damit ist auch der Gluino-Glueball davon betroffen. Eine Extrapolation der Massen mit $K < 0.185$ läßt einen Wert von 2.2-2.3 erwarten, was mit den Fehlerbalken des $K = 0.185$ Werts verträglich ist. Dies ist aber immer noch deutlich zu hoch für die Restaurierung der Supersymmetrie. Entweder gibt es noch deutliche Finite-Size oder finite- a -Korrekturen oder die Masse rutscht, ähnlich wie die a -Pion-Masse, erst nahe am kritischen K auf den Wert der anderen Teilchen. Die in [DGHV97] gemessenen Massen für χ aus quenched-Simulationen auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter bei $\beta = 2.6$ zeigen eine gute Übereinstimmung mit den anderen Massen. Da hier sowohl das Gitter größer, als auch a kleiner ist, läßt sich die Ursache für unsere erhöhten Massen nicht festlegen. Weitere Rechnungen sind nötig um die Diskrepanz zu klären.

16.4 Extrapolation zum kritischen Hoppingparameter

Der Phasenraum des Gittermodells wird durch den Eichparameter β und den Hoppingparameter K parametrisiert. Kritische Punkte, an denen der Limes zur supersymmetrischen Kontinuumsstheorie durchgeführt werden kann, fallen im $N = 1$ SU(2) Super-Yang-Mills-Modell mit den Punkten zusammen, an denen die chirale Symmetrie restauriert wird. Aus der QCD ist bekannt, daß der chirale Limes über das Einstellen des Hoppingparameters K erreicht werden kann. Dort verschwindet die Pion-Masse, das eines der Goldstone-Bosonen der chiralen Symmetriebrechung ist. Im SYM Fall erwartet man ein ähnliches Verhalten. Das entsprechende Teilchen im Gitter-Super-Yang-Mills-Modell ist das pseudosklare a -Eta $^-$. In der OZI-Approximation hat dieses Teilchen nur einen verbundenen Anteil, der identisch mit dem a -Pion ist. In [VY82] wird die Vorhersage getroffen, daß das a -Pion sich genauso verhält wie das QCD-Pion, d.h. es wird beim kritischen Hoppingparameter K_c masselos. Im vollen Modell bleibt dieses Verhalten bestehen. Da aber noch zusätzlich der unverbundene Anteil auftritt, erwartet man hier, daß dieser Teil eine endliche Masse für das a -Eta $^-$ erzeugt.

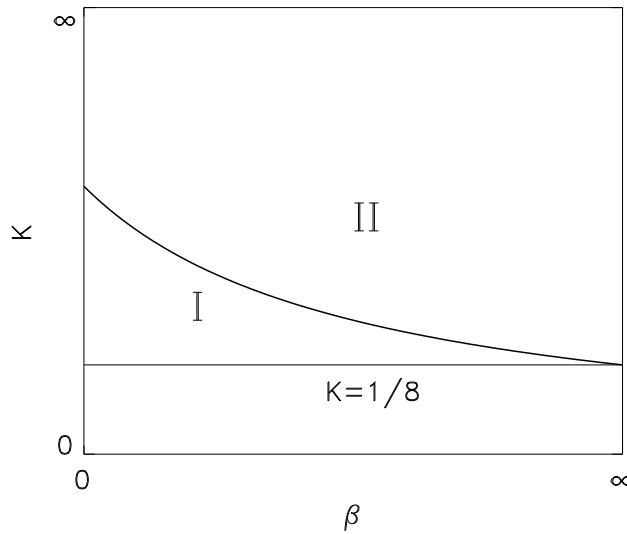


Abbildung 16.5: Phasendiagramm der SU(2)-Eichtheorie mit Gluinos in der adjungierten Darstellung. Die dicke Linie trennt die Phasen I und II, in denen das Gluino-Kondensat $\langle \bar{\lambda}\lambda \rangle$ unterschiedliches Vorzeichen hat. Für $\beta \rightarrow \infty$ oder $g \rightarrow 0$ liegt die Phasengrenze beim kritischen Hoppingparameter für freie Wilson-Fermion $K = 1/8$.

Abbildung 16.5 zeigt das Phasendiagramm, wie man es auf Grund der Analogie zur QCD erwartet. Sollte die von KOVNER und SHIFMAN vorhergesagte symmetrische Phase mit verschwindendem Gluino-Kondensat $\langle \bar{\lambda}\lambda \rangle = 0$ existieren, so würde sie zwischen

den beiden Phasen I und II liegen.

Um den kritischen Hoppingparameter zu bestimmen, kann man die Masse des a-Pion zunächst als Anhaltspunkt nehmen. Der Ansatz für die Masse aus der QCD lautet

$$m_\pi^2 \propto \frac{1}{K}. \quad (16.4)$$

Für die Sigma-Masse wird ein analoges Verhalten erwartet, nur daß die Masse endlich bleibt bei $K_c(\pi)$.

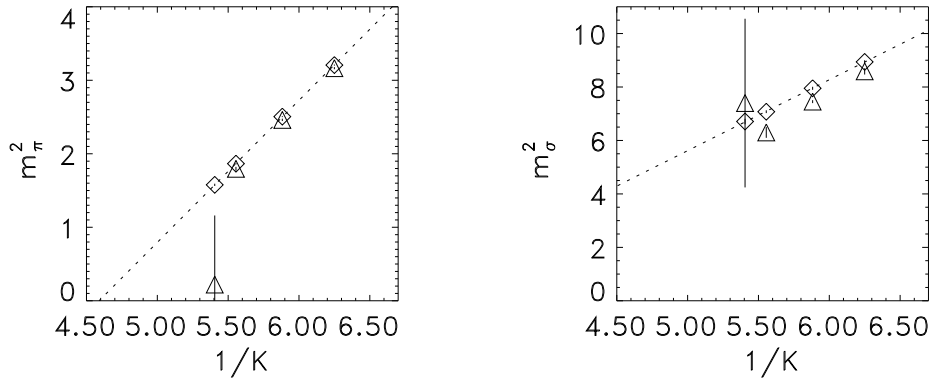


Abbildung 16.6: Abschätzung des kritischen Hoppingparameters K_c aus dem Verschwinden der a-Pion Masse. Links die Werte für das a-Pion aus der quenched (\diamond) und unquenched (\triangle) Simulation, rechts der gleiche Plot für das a-Sigma. Die gepunktete Linie ist der lineare Fit $m^2 - 1/K$ für die quenched Daten.

In Abbildung 16.6 sind die quadrierten Massen des a-Pion und des a-Sigma gegen den inversen Hoppingparameter aufgetragen. Dargestellt sind sowohl die Resultate aus quenched als auch aus den unquenched Simulationen. Die quenched Daten stammen aus einem selbsterstellten Programm zur Simulation reiner SU(2)-Eichtheorie mit Heatbath und Overrelaxation als Update-Algorithmen. Die quenched Daten liegen im Log-Log-Plot für alle vier K -Werte auf einer Geraden. Der extrapolierte Wert für K_c ist 0.2179(5). In [KM97] wird $K_c = 0.2151(3)$ auf dem $8^3 \cdot 16$ Gitter angegeben und in [DGHV97] $K_c = 0.18752(9)$ auf dem $16^3 \cdot 32$ Gitter allerdings bei $\beta = 2.6$. Vergleicht man die Werte mit dem Phasendiagramm Abbildung 16.5, so steht dies im Einklang mit den Erwartungen. Bei steigendem β sinkt der kritische Hoppingparameter. Wieviel davon auf finite-size- und wieviel auf finite-a-Effekte zurückgeht, läßt sich zu Zeit nicht sagen. Bei den Massen beachte man, daß in [KM97] und der vorliegenden Arbeit der gleiche Fitansatz benutzt wird. In [DGHV97] ist das Vorgehen etwas anders.

Da die a-Pion-Masse aus den Simulationen mit dynamischen Fermionen bei $K = 0.185$ einen sehr großen Fehler hat, kann das kritische K im Vergleich zu den quenched-Simulationen nur grob abgeschätzt werden. Aus einem gewichteten Fit an die drei Werte

bei $K = 0.16, 0.17, 0.18$ erhält man $K_c = 0.2171(1)$, also kaum eine Abweichung vom quenched-Fall. Die Hinzunahme von $K = 0.185$ ändert daran nichts, da das Gewicht dieses Datenpunktes wegen des großen Verhältnisses der Fehler sehr klein ist. Sollte die Masse wirklich so stark abfallen, wie es die Messungen zeigen, so wird sich der Wert zu $K_c \approx 0.19 - 0.20$ verschieben.

Auf dem $6^3 \cdot 12$ Gitter haben wir mit dem Programm auf der T3E aus den Massen bei $K = 0.16, 0.17, 0.18$ $K_c = 0.201(8)$ bestimmt, was die Annahme bestätigt.

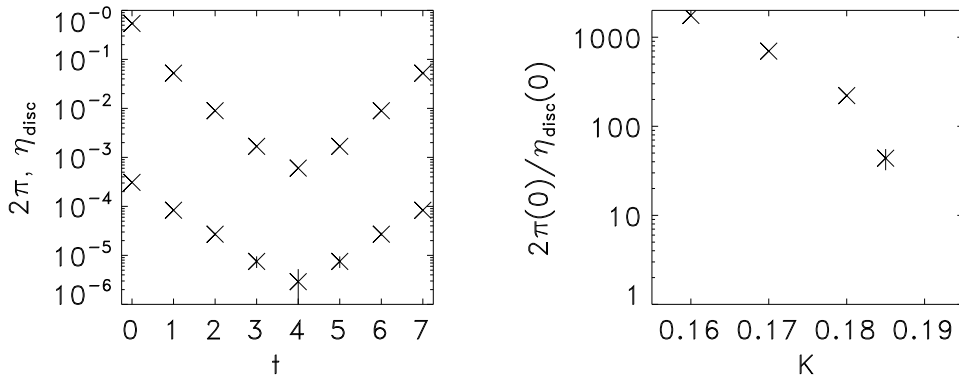


Abbildung 16.7: Vergleich des verbundenen und des unverbundenen Anteils des η^- Zustandes. Der linke Plot zeigt die beiden Anteile bei $K = 0.16$. η_{disc} ist der untere der beiden Teilpropagatoren. Der obere entspricht zweimal dem π -Propagator. Rechts ist das Verhältnis $2\pi(0)/\eta_{\text{disc}}(0)$ der Teilpropagatoren geplottet.

Die Daten bestätigen das Verhalten, daß man aus der OZI-Approximation erwartet. Der verbundene Anteil geht für einen kritischen Wert K_c eindeutig gegen Null. Betrachtet man den vollen Propagator, so zeigen die Daten aus Tabelle 16.2, daß die Masse des a -Eta $^-$ bei Annäherung an K_c offensichtlich durch den unverbundenen Anteil stabilisiert wird und nicht gegen Null geht.

Die ersten Messungen des unverbundenen Anteils bei $K = 0.17$ ergaben ein Verhältnis des verbundenen zum unverbunden Anteil von etwa 1000. Die Masse unterscheidet sich daher von der a -Pion Masse auch nur im Promillebereich. In Abbildung 16.7 sind links der verbundene und unverbundene Anteil bei $K = 0.16$ geplottet. Beide Propagatoren lassen sich mit der zur Verfügung stehenden Statistik bis zur maximalen Entfernung bestimmen. Das Verhältnis

$$\nu_t = \frac{2C_{\pi_a}(t)}{C_{\eta_a^+}^{\text{disc}}(t)} \quad (16.5)$$

ist für alle t größer als 1000. Dies ändert sich, wenn man näher an den kritischen Punkt $K = K_c$ kommt. Im rechten Plot ist das Verhältnis ν_t als Funktion von K aufgetragen.

Der Wert von ν_t wird mit steigendem K schnell kleiner und liegt bei $K = 0.185$ bereits im Bereich von 50. Auf größeren Gittern und noch näher am kritischen Punkt wird der unverbundene Anteil dominieren, während der verbundene gegen Null geht. Das $a\text{-}\eta^-$ kann somit am kritischen Punkt eine endliche Masse behalten, die der Masse des $a\text{-}\eta^+$, des 0^+ -Glueballs und des Gluino-Glueballs χ entsprechen sollte, wenn die Annahme zutrifft, daß diese Teilchen zum niedrigsten Supermultiplett gehören.

16.5 Massensplitting

In der QCD hat das η' -Meson eine Masse, die aufgrund topologischer Effekte höher liegt, als man es naiv erwartet. Darum ist man sehr daran interessiert, die Masse $m_{\eta'}$ aus „first principles“-Rechnungen zu bestimmen. Gemessen wird dazu das Verhältnis[VKG97]

$$R(t) = \frac{\langle \eta'(t)\eta'(0) \rangle_{2\text{-loop}}}{\langle \eta'(t)\eta'(0) \rangle_{1\text{-loop}}}. \quad (16.6)$$

Der Index 1-loop bezeichnet den verbundenen Anteil und der Index 2-loop den unverbundenen.

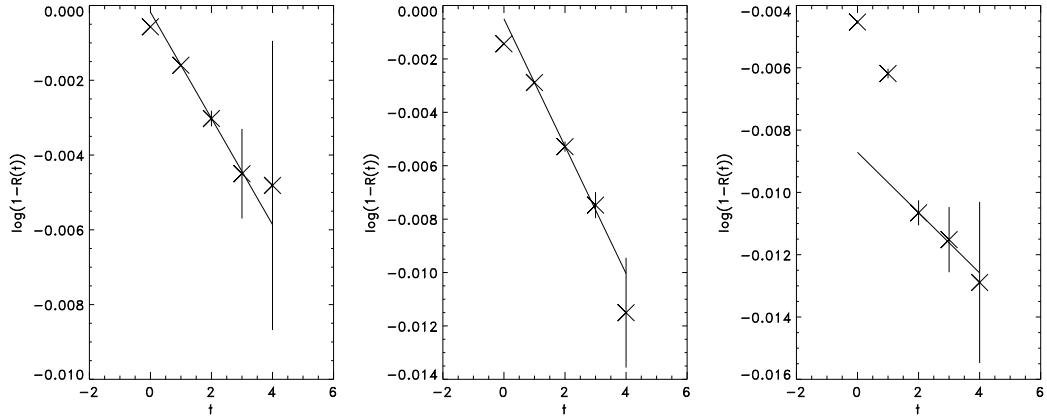


Abbildung 16.8: Verhältnis $R(t)$ des unverbundenen zum verbundenen Anteil des η'_a -Propagators. Die Gerade ist aus einem Fit an die Form Gl. 16.8. Von links nach rechts sind die Daten für $K = 0.16, 0.17, 0.18$ dargestellt.

Für Simulationen mit dynamischen Fermionen erwartet man für $R(t)$ das asymptotische Verhalten

$$R(t) = \frac{N_v}{N_f} [1 - Be^{-\Delta m t}]. \quad (16.7)$$

N_f ist die Zahl der dynamischen Fermionflavours, und N_v ist die Zahl der Valenzfermionen. Das Massensplitting Δm gibt die Differenz zwischen der η' -Masse und dem Mittelwert der

K	Fitintervall	Δm
0.16	1-4	0.00018(21)
0.17	1-4	0.00050(18)
0.18	2-4	0.0087(20)

Tabelle 16.3: Ergebnisse für das Massensplitting aus dem Verhältnis $R(t)$ des unverbundenen zum verbundenen Anteil des η_a^- -Propagators.

anderen acht Mesonen des niedrigsten SU(3)-Oktetts an, also gerade den topologischen Beitrag.

Geht man in unserem Modell von einem analogen Verhalten der Größe $R(t)$ aus, so kann man aus den Messungen des verbundenen und unverbundenen Anteils des pseudo-skalaren η_a^- ein eventuelles Massensplitting im Supermultiplett untersuchen. Bei unseren Simulationen ist $N_f = N_v$, und der Vorfaktor ergibt sich damit zu Eins. Zur Bestimmung von Δm habe ich

$$\log(1 - R) = -\Delta m t + \log B \quad (16.8)$$

aufgetragen und über einen geeigneten Bereich für t einen gewichteten linearen Fit gemacht. Abbildung 16.8 zeigt die Daten und die Fits, Tabelle 16.3 enthält die Ergebnisse des Fits in numerischer Form. Δm ist in allen Fällen sehr klein. Für $K = 0.16$ ist es mit Null verträglich. Bei $K = 0.17$ liegt es im 3σ -Bereich und bei $K = 0.18$ im 4σ -Bereich. Aufgrund der Fehler der Datenpunkte und der kleinen Werte für Δm wird man aus den Messungen auf dem $4^3 \cdot 8$ Gitter kein QCD-analoges Massensplitting erwarten. Dies steht im Einklang mit der durch die Supersymmetrie erzeugten Massenentartung.

Kapitel 17

Zusammenfassung und Ausblick

Wie ich in der Einleitung bereits gesagt habe, ist dieses Projekt in zweifacher Hinsicht eine Pilotstudie. Zum einen geht es darum, den Lüscher-Algorithmus zur Simulation von dynamischen Fermionen in der von I. MONTVAY formulierten Zwei-Schritt-Variante zu testen. Zum anderen soll die Definition supersymmetrischer Modelle als Kontinuumslikes von Gittermodellen untersucht werden. Zum jetzigen Zeitpunkt können zu beiden Punkten noch keine endgültigen Aussagen gemacht werden.

Zunächst möchte ich auf den Algorithmus eingehen. Die Abhängigkeit von der Polynomordnung wurde in [Mon96] untersucht. Für das Zwei-Schritt-Verfahren ergaben sich schon bei niedrigen Ordnungen des ersten Polynoms $\overline{P}_{\overline{n}}(x)$ von \overline{n} unabhängige Meßwerte. Die Güte von \overline{P} läßt sich auch aus der Akzeptanzrate im Noisy-Korrektur-Schritt ablesen. Ist diese hoch, so approximiert \overline{P} die Funktion $x^{-\alpha}$ bereits hinreichend gut. Das in dieser Arbeit benutzte Polynom mit $\overline{n} = 16$ zeigt über einen breiten Bereich von Werten des fermionischen Hoppingparameters K Akzeptanzraten von über 85%. Die Raten fallen erst bei $K = 0.185$, wo etwa 10% der Konfigurationen einen oder mehrere Eigenwerte kleiner als die untere Grenze des Fitintervalls haben. Erfahrungen mit Polynomen aus der Chebyshev-Approximation zeigen zwar, daß auch in diesem Fall richtige Ergebnisse resultieren, aber dies müßte in unserem Fall erst noch überprüft werden.

Im Gegensatz zum Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus, bei dem die Matrixinversion aufgrund schlechter werdender Konditionszahl der Fermionmatrix sensitiv auf den chiralen Limes ist, muß man für den Lüscher-Algorithmus für jeden Parametersatz die kleinsten Eigenwerte bestimmen und die Approximation dementsprechend wählen. In [JLJ96] wird für die Ein-Schritt-Variante gezeigt, daß sie vom Rechenaufwand vergleichbar ist mit dem Kramers-Algorithmus, der wiederum eng mit dem Hybrid-Monte-Carlo verwandt ist. Im Fall des Super-Yang-Mills-Modells scheiden beide Verfahren aus, da hier die Wurzel der Fermiondeterminante eingeht. Als Vergleich kann man den Langevin- oder R-Algorithmus verwenden, der den Nachteil hat, daß man die Integrationsschrittweite zu $\delta\tau = 0$ extrapolieren muß. Dies ist in [DG96] gemacht worden, und die Autoren stellen auch in diesem Fall einen gleichhohen Rechenaufwand fest. Aus unserer Erfahrung mit dem Langevin-Algorithmus im Higgs-Yukawa-Modell wissen wir, daß der Rechenaufwand beim Langevin bis zu 20 mal größer ist als beim Hybrid-Monte-Carlo, was im Widerspruch zu den vorigen Aussagen steht.

Den Vorteil durch even-odd-Zerlegung in der Matrixmultiplikation kann man auch im Lüscher-Algorithmus ausnutzen. Erste Tests auf der T3E und der Quadrics mit dieser Variante zeigen eine deutlich reduzierte Autokorrelationszeit. Die Ordnung des ersten Polynoms sinkt nochmals um einen Faktor 1.5 bis 2, und damit sinkt auch der Rechen- und Speicheraufwand.

Die nicht-hermitesche Variante ist zur Zeit noch nicht implementiert. Sollte hier eine erneute Reduktion des Rechenaufwandes pro unabhängiger Konfiguration eintreten, wie man es aufgrund der ersten Ergebnisse aus der QCD erwartet, so sollte der Lüscher-Algorithmus in der Zwei-Schritt-Variante eine bessere Performance zeigen als die verschiedenen Versionen des Hybrid-Monte-Carlo.

Abschließend bleibt festzustellen, daß noch einiges an Arbeit erforderlich ist, um den Lüscher-Algorithmus mit seinen Varianten ähnlich gut im Griff zu haben, wie die Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmen. Bei letzteren hat man fast zehn Jahre gebraucht, um alle Einzelheiten der algorithmischen Parameter und der Verbesserungsmöglichkeiten zu verstehen. Ein wesentlicher Vorteil des Lüscher-Algorithmus bliebe selbst bei gleichem Rechenaufwand die frei wählbare Zahl der Fermionflavour.

Die physikalischen Aussagen, die sich aus den hier vorgestellten Simulationen ergeben, sind noch mit Vorsicht zu behandeln. Bisher konnten weder Finite-Size-Effekte noch Effekte durch die endliche Gitterkonstante untersucht werden. Weitere Messungen auf größeren Gittern und bei höherem β sind hierzu nötig. Behält man dies im Hinterkopf, so lassen sich aus den Daten einige Trends ableiten.

Die Masse des verbundenen Anteils des a -Eta $^-$ verschwindet bei einem bestimmten Wert K_c . Gleichzeitig wird der unverbundene Anteil stärker und sorgt dafür, daß die Masse bei K_c endlich bleibt. Von den gebundenen Zuständen des niedrigsten Supermultipletts zeigt allein der Gluino-Glueball χ noch deutlich Abweichungen von den anderen drei gemessenen Zuständen G_{0+} , η_a^+ und η_a^- , die wir mit den Zuständen aus [VY82] identifizieren (s. 12.2.2). Erste Rechnungen auf dem $6^3 \cdot 12$ Gitter zeigen, daß diese Massen nahezu konstant bleiben und der Gluino-Glueball sich zu niedrigeren Massen verschiebt, was die quenched Resultate in [DGHV97] bestätigt. Die Aussichten in diesem Punkt sind also gut.

Am kritischen Punkt ist die chirale Invarianz nicht-störungstheoretisch spontan gebrochen, und man erwartet zwei Vakua, in denen das Fermion-Kondensat ein umgekehrtes Vorzeichen hat. In [KS97] wird die Existenz einer zweiten Phase mit restaurierter chiraler Symmetrie vorhergesagt. Ob die langen Autokorrelationszeiten bei $K = 0.185$ durch einen der beiden aus den Vorhersagen folgenden Phasenübergängen herrühren, läßt sich noch nicht sagen. Zuerst muß man ausschließen, daß es sich um einen algorithmischen Effekt handelt, dann erst kann man versuchen, die physikalischen Vorgänge aufzulösen.

Die Bestimmung des kritischen Werts von K bedarf ebenfalls noch einiger Untersuchungen. Das relevante Gebiet ist durch die hier durchgeführten Simulationen mit dynamischen Gluinos und den vorhergehenden quenched-Simulationen hinreichend genau abgesteckt. Die ersten Testläufe des Zwei-Schritt-Verfahrens mit even-odd Zerlegung lassen hoffen, daß man hier mit endlichem Rechenaufwand zum Ziel gelangt.

Geht man aufgrund der vorliegenden Messungen davon aus, daß das von CURCI und VENEZIANO vorgeschlagene Programm zur nicht-störungstheoretischen Behandlung supersymmetrischer Modelle durchführbar ist, dann muß man zum Vergleich mit den Ergebnissen der Kontinuumstheorie noch die renormierten Größen bestimmen. Insbesondere das Gluino-Kondensat als zentraler Parameter des Modells steht dabei im Vordergrund.

Ist im Fall des $SU(2)$ -Super-Yang-Mills-Modells die Übereinstimmung der Resultate gezeigt, dann kann man den Weg weiterverfolgen, indem man andere Eichgruppen betrachtet und Materiefelder hinzunimmt. Mit diesen erweiterten Modellen lassen sich die diversen, auf den Seiberg-Witten-Lösungen beruhenden Aussagen zum Verhalten von Theorien mit verschiedenen Kombinationen von Flavour- und Colourzahlen untersuchen.

Wie man sieht, liefert daß Forschungsgebiet, das mit diesem Projekt eröffnet wurde, Arbeit für mehrere Jahre. Vielleicht wird parallel zu den Simulationen an einem der großen Beschleuniger das erste supersymmetrische Partnerteilchen entdeckt. Vielleicht werden die Teilchen auch auf Grund von Vorhersagen aus Gittersimulationen gefunden.

Teil IV

Anhang

Anhang A

Higgs-Yukawa-Modell

A.1 Tabellen zum Abschnitt 9.1

In diesem Anhang sind die Daten, die bei der Bestimmung der kritischen Werte des skalaren Hoppingparameters verwendet wurden, noch einmal in Tabellen zusammengefaßt.

κ	m_σ	v_R	$\mu_{R\psi}$
0.10	2.1(3)	0.066(6)	0.034(6)
0.12	1.6(4)	0.067(10)	-0.010(5)
0.14	1.69(16)	0.061(9)	-0.010(6)
0.16	1.34(16)	0.077(9)	-0.008(6)
0.18	1.20(16)	0.076(9)	-0.009(7)
0.20	0.91(14)	0.072(10)	-0.007(8)
0.22	0.67(8)	0.089(15)	0.063(11)
0.24	0.45(9)	0.123(16)	0.110(10)
0.26	0.41(10)	0.146(21)	0.220(11)
0.28	0.89(18)	0.33(3)	0.416(25)
0.30	1.02(10)	0.41(5)	0.529(5)
0.32	1.73(29)	0.52(4)	0.607(37)
0.34	1.41(16)	0.45(5)	0.663(7)
0.36	1.30(11)	0.62(3)	0.72(4)
0.38	1.82(22)	0.70(5)	0.738(9)
0.40	1.79(14)	0.66(4)	0.794(12)

Tabelle A.1: Daten zu den Abbildungen 9.3, 9.5 und 9.6 für $G_\psi = 0.3$. Aufgelistet sind die Masse des σ -Teilchens, renormierte Vakuum Erwartungswerte und die ψ -Fermionmasse.

κ	m_σ	v_R	$\mu_{R\psi}$	g_R
0.10	1.3(3)	0.048(3)	0.040(40)	9290.0(1013.0)
0.12	1.5(6)	0.041(2)	0.010(10)	19964.0(1967.0)
0.14	1.3(2)	0.052(2)	0.064(3)	10958.0(1010.0)
0.16	1.1(2)	0.060(3)	0.094(4)	336.0(34.0)
0.18	1.0(2)	0.105(4)	0.185(4)	81.0(6.0)
0.20	0.7(2)	0.155(5)	0.306(6)	131.0(8.0)
0.203	0.55(7)	0.172(1)	0.340(20)	31.5(4.0)
0.21	0.60(10)	0.202(2)	0.409(10)	21.0(5.0)
0.22	0.8(2)	0.240(5)	0.496(6)	21.0(1.0)
0.23	0.9(2)	0.287(6)	0.580(7)	26.0(1.0)
0.24	0.8(2)	0.333(8)	0.661(8)	88.0(4.0)

Tabelle A.2: Daten zu den Abbildungen 9.3, 9.5 und 9.6 für $G_\psi = 0.45$. Aufgelistet sind die Masse des σ -Teilchens, renormierte Vakuumerwartungswerte, die ψ -Fermionmasse und die renormierte quartische Selbstkopplung.

κ	m_σ	$\mu_{R\psi}$	v_R
0.120	1.0(1)	0.145(4)	0.334(8)
0.125		0.169(6)	0.396(7)
0.130		0.163(4)	0.407(7)
0.135		0.192(6)	0.465(7)
0.140		0.190(7)	0.479(8)
0.145		0.204(5)	0.559(7)
0.150		0.233(3)	0.598(7)
0.155		0.243(7)	0.654(10)
0.160		0.273(7)	0.690(11)
0.165		0.293(9)	0.760(16)
0.170	1.3(2)	0.293(10)	0.787(14)
0.180		0.320(4)	0.867(7)

Tabelle A.3: Daten zu den Abbildungen 9.5 und 9.6 für $G_\psi = 0.6$. Aufgelistet sind die Masse des σ -Teilchens, renormierte Vakuumerwartungswerte und die ψ -Fermionmasse. Die σ -Masse konnte nur an drei Punkten bestimmt werden, an denen ich mit höherer Statistik gemessen habe.

κ	m_σ	v_R	$\mu_{R\psi}$
0.23	0.71(5)	0.021(1)	0.0361(7)
0.245	0.66(8)	0.035(1)	0.050(1)
0.25	0.57(5)	0.052(2)	0.070(1)
0.255	0.50(5)	0.048(1)	0.071(2)
0.2575	0.40(10)	0.072(3)	0.092(4)
0.2585	0.30(10)	0.114(4)	0.157(2)
0.26	0.31(3)	0.129(3)	0.180(3)
0.262	0.63(10)	0.154(5)	0.211(2)
0.27	0.80(20)	0.218(4)	0.309(4)

Tabelle A.4: Daten zu den Abbildungen 9.3, 9.5 und Abbildung 9.6 für $G_\psi = 0.3$. Aufgelistet sind die Masse des σ -Teilchens, renormierte Vakuum Erwartungswerte und die ψ -Fermionmasse.

κ	m_σ	v_R	$\mu_{R\psi}$
0.18	0.55(5)	0.030(3)	0.044(3)
0.2	0.16(9)	0.099(3)	0.188(7)
0.203	0.22(8)	0.124(1)	0.221(5)
0.205	0.60(3)	0.141(3)	0.258(9)
0.21	0.67(3)	0.179(2)	0.343(10)
0.22	0.68(4)	0.233(6)	0.466(19)

Tabelle A.5: Daten zu den Abbildungen 9.3, 9.5 und 9.6 für $G_\psi = 0.45$. Aufgelistet sind die Masse des σ -Teilchens, renormierte Vakuum Erwartungswerte und die ψ -Fermionmasse.

A.2 Plots zum Abschnitt 9.2

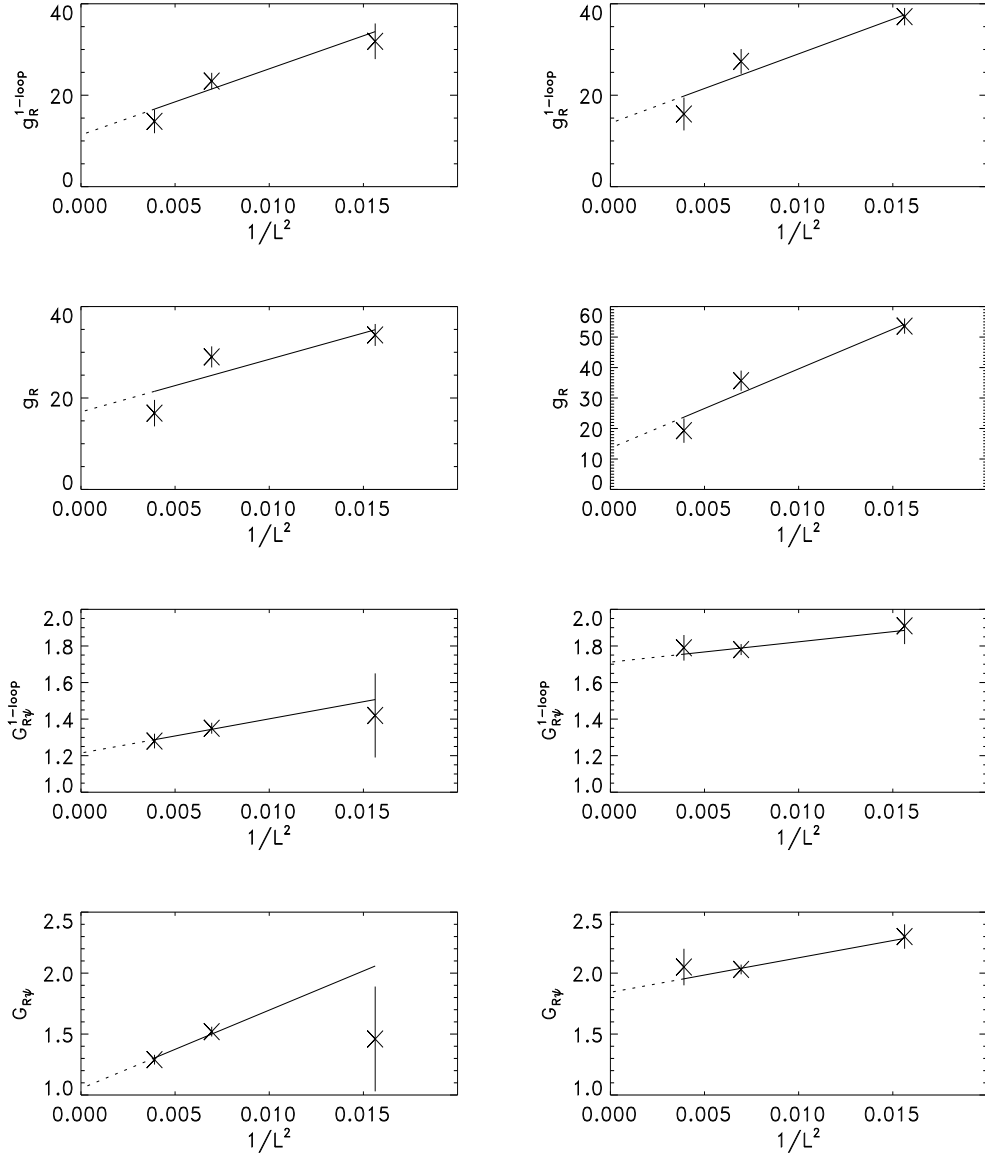


Abbildung A.1: $1/L^2$ Extrapolation für die Parameter g_R und $G_{R\psi}$. Die linke Spalte zeigt die Plots für $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.26)$, die rechte die für $(G_\psi, \kappa) = (0.45, 0.203)$. Von oben nach unten sind die Größen g_R^{1-loop} , g_R , $G_{R\psi}^{1-loop}$ und $G_{R\psi}$ aufgetragen.

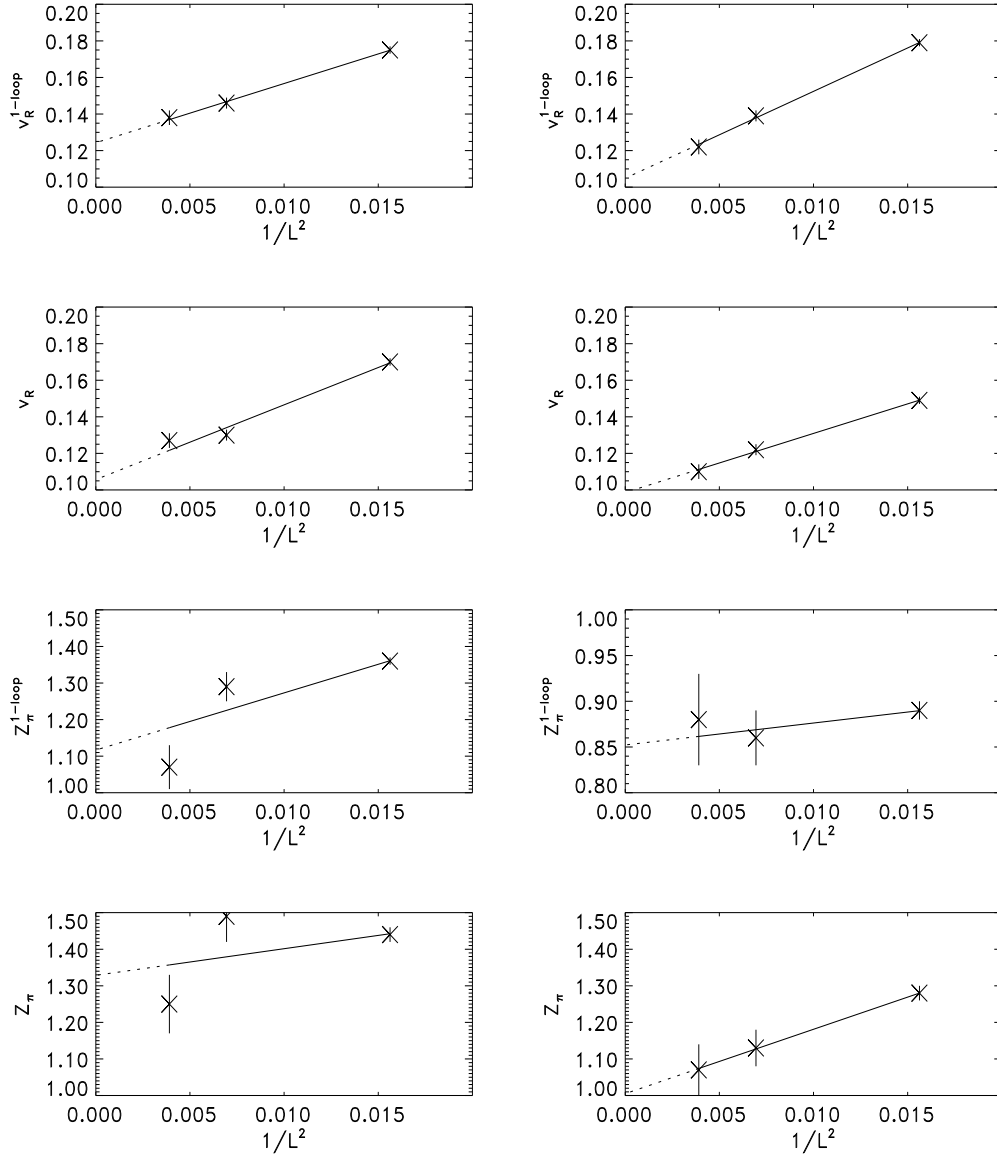


Abbildung A.2: Parameter und Anordnung wie in Abbildung A.1. Von oben nach unten sind die Größen v_R^{1-loop} , v_R und z_π aufgetragen.

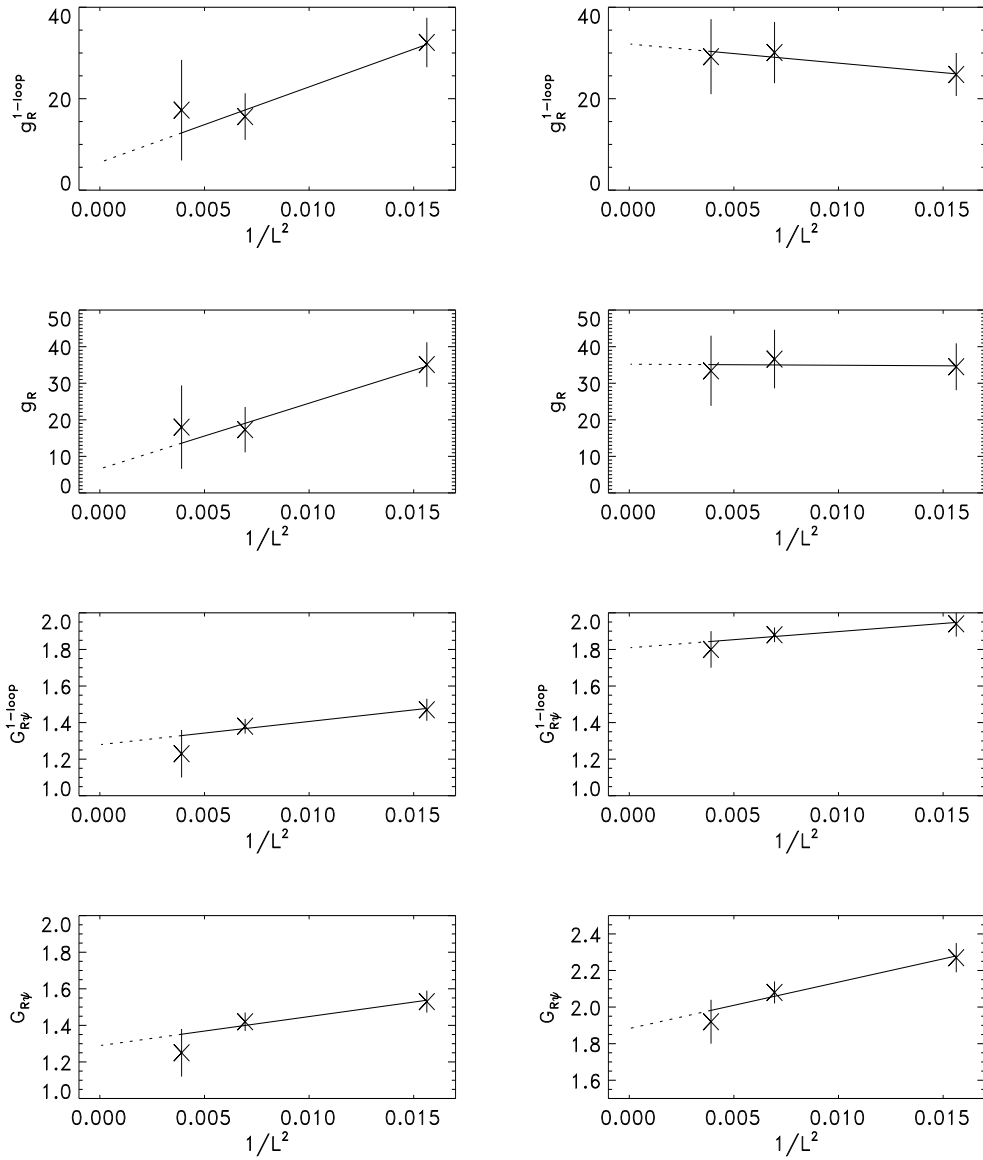


Abbildung A.3: $1/L^2$ Extrapolation für die Parameter g_R und $G_{R\psi}$. Die linke Spalte zeigt die Plots für $(G_\psi, \kappa) = (0.3, 0.27)$, die rechte die für $(G_\psi, \kappa) = (0.45, 0.21)$. Von oben nach unten sind die Größen g_R^{1-loop} , g_R , $G_{R\psi}^{1-loop}$ und $G_{R\psi}$ aufgetragen.

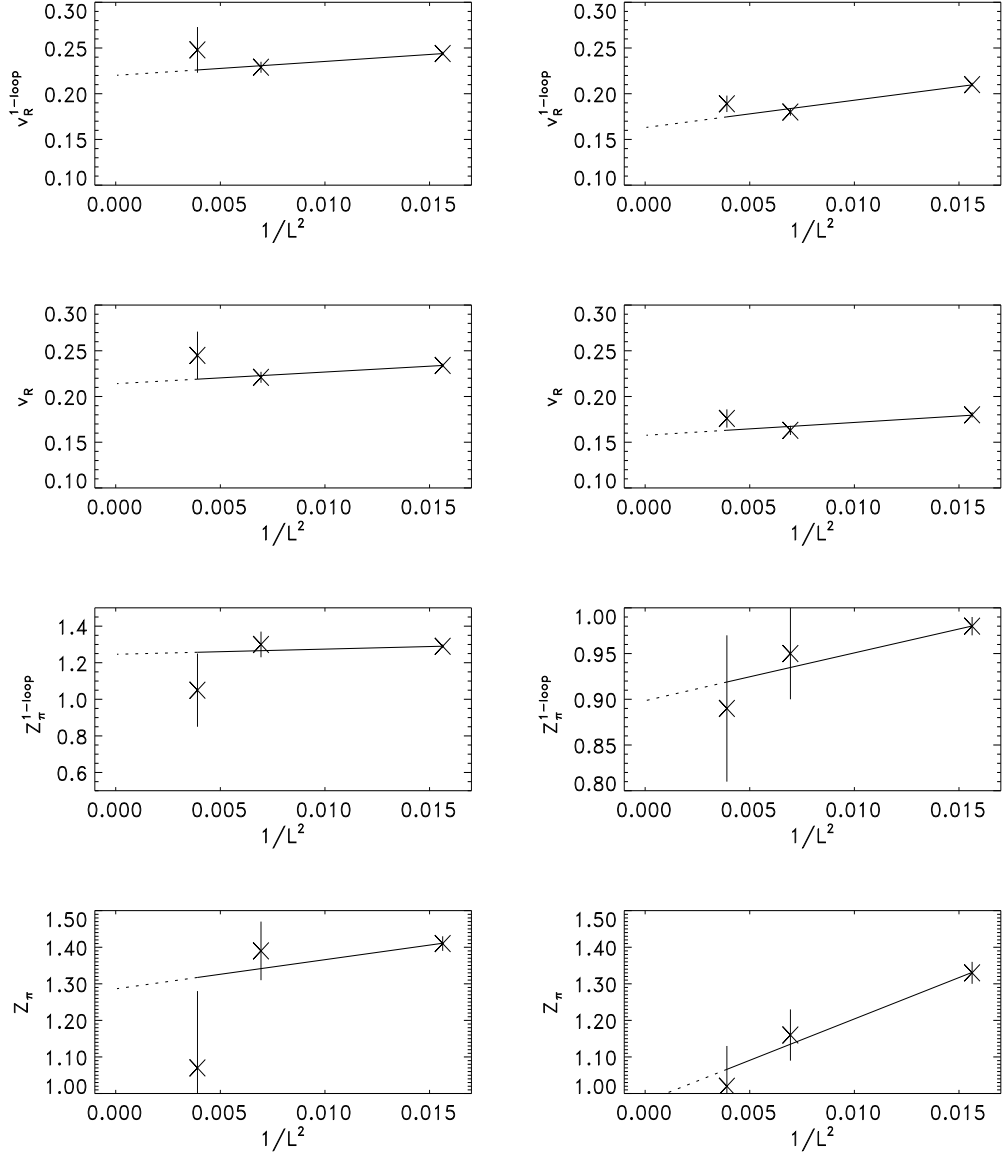


Abbildung A.4: Parameter und Anordnung wie in Abbildung A.3. Von oben nach unten sind die Größen v_R^{1-loop} , v_R und z_π aufgetragen.

Anhang B

Super-Yang-Mills-Modell

B.1 Grassmann-Zahlen und wie man mit ihnen rechnet

Die komplexen Zahlen erhält man aus den reellen Zahlen durch Einführung der imaginären Einheit i

$$z = a + i b, \quad i^2 = -1. \quad (\text{B.1})$$

Grassmann-Zahlen erhält man analog durch die Konstruktion

$$g = u + \theta v, \quad \theta^2 = 0 \quad (\text{B.2})$$

und $u, v \in \mathbf{R}$ oder \mathbf{C} . θ bezeichnet man als Generator. Generatoren treten gewöhnlich im Zusammenhang mit Algebren auf, und so kann man aus N Generatoren θ^a eine Grassmann-Algebra aufbauen, die über den Anti-Kommutator

$$\theta^a \theta^b + \theta^b \theta^a = 0 \quad (\text{B.3})$$

definiert ist. Für $a = b$ folgt hieraus sofort $(\theta^a)^2 = 0$. Aufgrund der Nilpotentheit der Generatoren gilt für jede Funktion $F(\theta)$

$$F(\theta) = f_1 + f_2 \theta, \quad (\text{B.4})$$

da alle höheren Terme der Taylor-Entwicklung identisch Null sind. Die allgemeinste Form einer Funktion der zwei Grassmann-Variablen θ und $\bar{\theta}$ lautet dementsprechend

$$G(\theta, \bar{\theta}) = g_0 + g_1 \theta + g_2 \bar{\theta} + g_{12} \bar{\theta} \theta. \quad (\text{B.5})$$

Man kann aufbauend auf diese Eigenschaften auch eine konsistente Analysis mit Grassmann-Zahlen konstruieren. Dazu definiert man die Ableitung durch

$$\frac{\partial}{\partial \theta^a} 1 = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial}{\partial \theta^a} \theta^b = \delta^{ab} \quad (\text{B.6})$$

mit dem Kronecker-Symbol δ^{ab} . Die Definition, wie sie hier angegeben ist, bezieht sich auf die von links wirkende Ableitung. Diese unterscheidet sich durch den antikommutierenden Charakter der θ von der Rechts-Ableitung

$$\frac{\partial}{\partial \theta^a}(\theta^b \theta^c) = -(\theta^b \theta^c) \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial \theta^a}. \quad (\text{B.7})$$

Im Gegensatz zur gewöhnlichen Analysis, in der Differentiation und Integration entgegengesetzt wirkende Operationen sind, wirken sie in diesem Fall gleichartig

$$\int d\theta \, 1 = 0 \quad \text{und} \quad \int d\theta^a \theta^b = \delta^{ab}. \quad (\text{B.8})$$

Somit erhält man zum Beispiel mit Gl. B.5

$$\int d\bar{\theta} d\theta \, G(\bar{\theta}, \theta) = -g_{12}. \quad (\text{B.9})$$

Ein wichtiges Integral, das im Zusammenhang mit fermionischen Modellen auftritt, ist das Gaußsche Integral mit Grassmann-Variablen. Der skalare Fall mit zwei Variablen

$$\int d\bar{\theta} d\theta \, e^{-a\bar{\theta}\theta} = \int d\bar{\theta} d\theta \, 1 - a\bar{\theta}\theta = a \quad (\text{B.10})$$

zeigt den Weg zum interessanten Fall mit $2N$ Variablen

$$\int d^N \bar{\theta} \, d^N \theta \, e^{-\bar{\theta} A \theta} = \det A \quad (\text{B.11})$$

mit der $N \times N$ Koeffizientenmatrix A . Im Gegensatz zum Fall mit komplexen Zahlen tritt hier die Determinante und nicht ihr inverses auf.

B.2 Tabellen zum Abschnitt 16

K	Plaquette	Polyakov-Loop	Creutz-Ratio $e^{-\chi^2_2}$
0.0	0.6072(2)	0.0659(4)	0.7468(4)
0.16	0.6147(5)	0.0678(15)	0.758(2)
0.17	0.6176(4)	0.0717(15)	0.765(1)
0.18	0.6232(3)	0.0794(12)	0.778(1)
0.185	0.6276(6)	0.0814(21)	0.787(2)

Tabelle B.1: Numerische Daten zu Abbildung 16.2.

K	quenched non-noisy	unquenched noisy	unquenched non-noisy
0.16	11.685(2)	11.778(11)	11.662(1)
0.17	11.571(2)	11.592(6)	11.528(2)
0.18	11.427(3)	11.267(11)	11.334(2)
0.185	11.342(3)	11.126(60)	11.221(4)

Tabelle B.2: Numerische Daten zu Abbildung 16.3. Die non-noisy-Werte wurden aus dem inversen Propagator bestimmt, die noisy-Werte aus dem entsprechenden Noisy-Estimator.

Teil V

Bibliographie

Literaturverzeichnis

- [A⁺87] M. Albanese et al., *Glueball Masses and String Tension in Lattice QCD*, Phys. Lett. **192B** (1987), 163.
- [A⁺96] J. Amundson et al., *Report of the Supersymmetry Theory Subgroup*, hep-ph/9609374.
- [AB⁺94] M. Aguilar-Benitez et al., *Review of Particle Properties*, Phys. Rev. **D50** (1994), 1173.
- [ABdF⁺95] C. Alexandrou, A. Borrelli, P. de Forcrand, A. Galli, und F. Jegerlehner, *Full QCD with the Luscher Local Bosonic Action*, Nucl. Phys. **B456** (1995), 296, hep-lat/9506001.
- [AGDKM96] L. Alvarez-Gaume, J. Distler, C. Kounnas, und M. Marino, *Softly Broken N=2 QCD*, Int. J. Mod. Phys. **A11** (1996), 4745, hep-th/9604004.
- [ASPY95] O. Aharony, J. Sonnenschein, M.E. Peskin, und S. Yankielowicz, *Exotic Non-supersymmetric Gauge Dynamics from Supersymmetric QCD*, Phys. Rev. **D52** (1995), 6157, hep-th/9507013.
- [BB83] B. Berg und A. Billoire, *Glueball Spectroscopy in Four-Dimensional SU(3) Lattice Gauge Theory. 1*, Nucl. Phys. **B221** (1983), 109.
- [BB89] B. A. Berg und A. H. Billoire, *Pure Lattice Gauge Theory in Intermediate Volumes. 1*, Phys. Rev. **D40** (1989), 550.
- [BBC⁺93] R. Barrett, M. Berry, T. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, und H. van der Vorst, *Templates for the Solution of Linear Systems : Building Blocks for Iterative Methods*, Society for Industrial & Applied Mathematics, 1993.
- [BdF⁺92] W. Bock, A.K. De, Ch. Frick, K. Jansen, und T. Trappenberg, *Search for an Upper Bound of the Renormalized Yukawa Coupling in a Lattice Fermion Higgs Model*, Nucl. Phys. **B371** (1992), 683.
- [BdFG96] A. Borrelli, P. de Forcrand, und A. Galli, *Nonhermitian Exact Local Bosonic Algorithm for Dynamical Quarks*, Nucl. Phys. **B477** (1996), 809, hep-lat/9602016.

- [Ber92] B. A. Berg, *Double Jackknife Bias Corrected Estimators*, Comp. Phys. Commun. **69** (1992), 7.
- [Bin79] K. Binder, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Springer, Berlin, 1979.
- [BJ95] W.E. Burcham und M. Jobes, *Nuclear and Particle Physics*, Longman Scientific & Technica, Harlow(England), 1995.
- [BNTW96] J. Bagger, U. Nauenberg, X. Tata, und A. White, *Summary of the Supersymmetry Working Group*, hep-ph/9612359.
- [BTLO97] R.C. Brower, T.Ivanenko, A.R. Levi, und K.N. Orginos, *Chronological Inversion Method for the Dirac Operator*, Nucl. Phys. **B484** (1997), 353.
- [BW92] J. Bagger und J. Wess, *Supersymmetry and Supergravity*, Princeton University Press, Princeton, 1992.
- [CH77] A. Chodos und J. B. Healy, *Spectral Degeneracy of the Lattice Dirac Equation as a Function of Lattice Shape*, Nucl. Phys. **B127** (1977), 426.
- [CM67] S. Coleman und J. Mandula, *All Possible Symmetries of the S Matrix*, Phys. Rev. **159** (1967), 1251.
- [CMT87] B. Carpenter, C. Michael, und M. J. Teper, *0+ and 2+ Glueball Masses from Large Lattices in SU(2) Lattice Gauge Theory*, Phys. Lett. **198B** (1987), 511.
- [Cre80a] M. Creutz, *Asymptotic Freedom Scales*, Phys. Rev. Lett. **45** (1980), 313.
- [Cre80b] M. Creutz, *Monte Carlo Study Of Quantized SU(2) Gauge Theory*, Phys. Rev. **D21** (1980), 2308.
- [CSVW93] H. Chen, J. Sexton, A. Vaccarino, und D. Weingarten, *Glueball Mass Predictions of the Valence Approximation to Lattice QCD*, hep-lat/9308010.
- [CV87] G. Curci und G. Veneziano, *Supersymmetry and the Lattice: a Reconciliation?*, Nucl. Phys. **B292** (1987), 555.
- [DG96] A. Donini und M. Guagnelli, *Hybrid Molecular Dynamics for Lattice Supersymmetry*, Phys. Lett. **B383** (1996), 301–306, hep-lat/9605010.
- [DGHV97] A. Donini, M. Guagnelli, P. Hernandez, und A. Vladikas, *Quenched Spectroscopy for the N=1 Super-Yang-Mills Theory*, hep-lat/9708006.
- [Din96] Michael Dine, *Supersymmetry phenomenology (with a broad brush)*, hep-ph/9612389.

- [DKPR87] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton, und D. Roweth, *Hybrid Monte Carlo*, Phys. Lett. **B195** (1987), 216.
- [DPS85] M. J. Duncan, R. Philippe, und M. Sher, *Theoretical Ceiling on Quark Masses in the Standard Model*, Phys. Lett. **153B** (1985), 165.
- [DS94] M. Dine und Y. Shirman, *Some Explorations in Holomorphy*, Phys. Rev. **D50** (1994), 5389–5397, hep-th/9405155.
- [E⁺96] N. Eicker et al., *Evaluating Sea Quark Contributions to Flavor Singlet Operators in Lattice QCD*, Phys. Lett. **B389** (1996), 720, hep-lat/9608040.
- [Eli75] S. Elitzur, *Impossibility of Spontaneously Breaking Local Symmetries*, Phys. Rev. **D12** (1975), 3978.
- [Fer96] S. Ferrara, *Recent Developments in Nonperturbative Quantum Field Theory*, hep-th/9610085.
- [FF64] D.K. Faddejew und W.N. Faddejewa, *Numerische Methoden der Linearen Algebra*, R. Oldenbourg, München, 1964.
- [FHN⁺94] A. Frommer, V. Hannemann, B. Nockel, T. Lippert, und K. Schilling, *Accelerating Wilson Fermion Matrix Inversions by Means of the Stabilized Biconjugate Gradient Algorithm*, Int. J. Mod. Phys. **C5** (1994), 1073, hep-lat/9404013.
- [FP89] H. Flyvbjerg und H. G. Petersen, *Error Estimates on Averages of Correlated Data*, J. Chem. Phys. **91** (1989), 461.
- [Fri93] Ch. Frick, *Nicht-perturbative Untersuchung einer starken Yukawa-Kopplung im Standardmodell auf dem Gitter*, Ph.D. thesis, RWTH Aachen, 1993.
- [GG82] L. Girardello und M. T. Grisaru, *Soft Breaking of Supersymmetry*, Nucl. Phys. **B194** (1982), 65.
- [GGH⁺95] U. Glässner, S. Güsken, H.Hoeber, Th. Lippert, X. Luo, G.Ritzenhöfer, K. Schilling, und G. Siegert, *QCD with Dynamical Wilson Fermions: First Results from SESAM*, hep-lat/9510001.
- [GL71] Yu. A. Golfand und E. P. Likhtman, *Extension of the Algebra of Poincare Group Generators and Violation of P Invariance*, JETP Lett. **13** (1971), 323.
- [GLT⁺87] S. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R. L. Renken, und R. L. Sugar, *Hybrid Molecular Dynamics Algorithms for the Numerical Simulation of Quantum Chromodynamics*, Phys. Rev. **D35** (1987), 2531.

- [GP89] M.F.L. Golterman und D.N. Petcher, *The Decoupling of Righthanded Neutrinos in Chiral Lattice Gauge Theories*, Phys. Lett. **B225** (1989), 159.
- [Has90] A. Hasenfratz, *The Standard Model from Action to Answers*, From Actions to Answers, 1990.
- [HH86] A. Hasenfratz und P. Hasenfratz, *The Continuum Limit of an $SU(2)$ Gauge Theory with a Scalar Doublet*, Phys. Rev. **D34** (1986), 3160.
- [HJL⁺87] A. Hasenfratz, K. Jansen, Ch. B. Lang, Th. Neuhaus, und H. Yoneyama, *The Triviality Bound of the Four Component Φ^{**4} Model*, Phys. Lett. **199B** (1987), 531.
- [HLS75] R. Haag, J.T. Lopuszanski, und M. Sohnius, *All Possible Generators of Supersymmetries of the S Matrix*, Nucl. Phys. **B88** (1975), 257.
- [HN88] A. Hasenfratz und T. Neuhaus, *Upper Bound Estimate for the Higgs Mass from the Lattice Regularized Weinberg-Salam Model*, Nucl. Phys. **B297** (1988), 205.
- [HSSB82] J. E. Hirsch, R. L. Sugar, D. J. Scalapino, und R. Blankenbechler, *Monte Carlo Simulations Of One Dimensional Fermion Systems*, Nucl. Phys. **B26** (1982), 5033.
- [JL95] K. Jansen und C. Liu, *Kramers Equation Algorithm for Simulations of QCD with Two Flavors of Wilson Fermions and Gauge Group $SU(2)$* , Nucl. Phys. **B453** (1995), 375, hep-lat/9506020.
- [JL97] K. Jansen und C. Liu, *Study of Liapunov Exponents and the Reversibility of Molecular Dynamics Algorithms*, Nucl. Phys. B Proc. Suppl. **53** (1997), 974, hep-lat/9607057.
- [JLJ96] K. Jansen, C. Liu, und B. Jegerlehner, *Performance Tests of the Kramers Equation and Boson Algorithms for Simulations of QCD*, Phys. Lett. **B375** (1996), 255, hep-lat/9512018.
- [KFM⁺94] Y. Kuramashi, M. Fukugita, H. Mino, M. Okawa, und A. Ukawa, *η' Meson Mass in Lattice QCD*, Phys. Rev. Lett. **72** (1994), 3448.
- [KM97] G. Koutsoumbas und I. Montvay, *Gluinos on the Lattice: Quenched Calculations*, Phys. Lett. **B398** (1997), 130–134, hep-lat/9612003.
- [Knu81] D. E. Knuth, *The Art of Computer Programming: Seminumerical Algorithms*, 2 ed., Bd. II, Addison–Wesley, Reading, Massachusetts, 1981.
- [KS81] L. H. Karsten und J. Smit, *Lattice Fermions: Species Doubling, Chiral Invariance and the Triangle Anomaly*, Nucl. Phys. **B183** (1981), 103.

- [KS97] A. Kovner und M. Shifman, *Chirally Symmetric Phase of Supersymmetric Gluodynamics*, Phys. Rev. **D56** (1997), 2396–2402, hep-th/9702174.
- [Lan95] P. Langacker, *Implication of Precision Experiments*, Precision Tests of the Standard Elektroweak Model, World Scientific, Singapore, 1995.
- [Lat94] F. Karsch, J. Engels, E. Laermann, und B. Petersson (Herausgeber), *Lattice 94*, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.), Bd. 42, 1995.
- [Lat96] C. Bernard, M. Goltermann, M. Ogilvie, und J. Potvin (Herausgeber), *Lattice 96*, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.), Bd. 53, 1997.
- [Lin95] L. Lin, *Study of the Decoupling of Heavy Fermions in a $Z(2)$ Scalar Fermion Model*, Phys. Lett. **B347** (1995), 341, hep-lat/9501020.
- [LMWM91] L. Lin, I. Montvay, H. Wittig, und G. Münster, *A $U(1)_L \otimes U(1)_R$ Symmetric Yukawa Model in the Phase with Spontaneously Broken Symmetry*, Nucl. Phys. **B355** (1991), 511.
- [Lüs94] M. Lüscher, *A New Approach to the Problem of Dynamical Quarks in Numerical Simulations of Lattice QCD*, Nucl. Phys. **B418** (1994), 637.
- [LW87] M. Lüscher und P. Weisz, *Scaling Laws and Triviality Bounds in the Lattice Φ^4 Theory. 1. One Component Model in the Symmetric Phase*, Nucl. Phys. **B290** (1987), 25.
- [LW88] M. Lüscher und P. Weisz, *Scaling Laws and Triviality Bounds in the Lattice Φ^4 Theory. 2. One Component Model in the Phase with Spontaneous Symmetry Breaking*, Nucl. Phys. **B295** (1988), 65.
- [LW89] M. Lüscher und P. Weisz, *Scaling Laws and Triviality Bounds in the Lattice Φ^4 Theory. 3. N Component Model*, Nucl. Phys. **B318** (1989), 705.
- [LW92] L. Lin und H. Wittig, *An $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ Symmetric Yukawa Model in the Symmetric Phase*, Z. Phys. **C54** (1992), 331.
- [MM94] I. Montvay und G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice*, Cambridge University Press, Cambridge UK, 1994.
- [Mon] I. Montvay, *Nonperturbative Approach to Scalar - Fermion Theories*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **B4**, 443.
- [Mon87] I. Montvay, *A CHIRAL $SU(2)_L \times SU(2)_R$ GAUGE MODEL ON THE LATTICE*, Phys. Lett. **199B** (1987), 89.
- [Mon95] I. Montvay, *Tuning to $N=2$ Supersymmetry in the $SU(2)$ Adjoint Higgs-Yukawa Model*, Nucl. Phys. **B445** (1995), 399, hep-lat/9503009.

- [Mon96] I. Montvay, *An Algorithm for Gluinos on the Lattice*, Nucl. Phys. **B466** (1996), 259, hep-lat/9510042.
- [Mon97a] I. Montvay, *Quadratically Optimized Polynomials for Fermion Simulations*, hep-lat/9707005.
- [Mon97b] I. Montvay, *SUSY on the Lattice*, to appear in the Lattice 97 Proceedings (1997).
- [Mor89] I. Morgenstern, *Quantum-Monte-Carlo Simulations for Fermionic Systems*, Z. Phys. **B77** (1989), 267.
- [MP93] G. Münster und M. Plagge, *Study of the Complex Fermion Determinant in a $U(1)_L \otimes U(1)_R$ Symmetric Yukawa Model*, Phys. Lett. **B301** (1993), 213.
- [MRR⁺53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, und E. Teller, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Chem. Phys. **21** (1953), 1087.
- [Mün81] G. Münster, *High Temperature Expansions for the Free Energy of Vortices, respectively the String Tension in Lattice Gauge Theories*, Nucl. Phys. **B180** (1981), 23.
- [MW87] I. Montvay und P. Weisz, *Numerical Study of Finite Volume Effects in the Four- Dimensional Ising Model*, Nucl. Phys. **B290** (1987), 327.
- [Nak91] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*, Adam Hilger, Bristol, 1991.
- [NN81a] H. B. Nielsen und M. Ninomiya, *Absence of Neutrinos on a Lattice. 1. Proof by Homotopy Theory*, Nucl. Phys. **B185** (1981), 20.
- [NN81b] H. B. Nielsen und M. Ninomiya, *Absence of Neutrinos on a Lattice. 2. Intuitive Topological Proof*, Nucl. Phys. **B193** (1981), 173.
- [NN81c] H. B. Nielsen und M. Ninomiya, *No Go Theorem for Regularizing Chiral Fermions*, Phys. Lett. **105B** (1981), 219.
- [NN82] H. B. Nielsen und M. Ninomiya, *Errata*, Nucl. Phys. **B195** (1982), 541.
- [Not95] B. Nottelmann, *Perturbative Untersuchung der skalaren Propagatoren in einem $SU(2)_L \otimes SU(2)_R$ -Yukawa-Modell auf dem Gitter*, Master's thesis, WWU Münster, 1995.
- [NSVZ83] V. A. Novikov, M. A. Shifman, A. I. Vainshtein, und V. I. Zakharov, *Exact Gell-Mann-Low Function of Supersymmetric Yang-Mills Theories from Instanton Calculus*, Nucl. Phys. **B229** (1983), 381.

- [Pla93] M. Plagge, *Nichtstörungstheoretische Untersuchungen im gitterregularisierten Higgs–Yukawa–Modell mit Spiegelfermionen*, Ph.D. thesis, WWU Münster, 1993.
- [Sei94] N. Seiberg, *The Power of Holomorphy: Exact Results in 4-D Susy Field Theories*, hep-th/9408013.
- [Sei95] N. Seiberg, *Electric - Magnetic Duality in Supersymmetric Nonabelian Gauge Theories*, Nucl. Phys. **B435** (1995), 129, hep-th/9411149.
- [Sok] A. D. Sokal, *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms*.
- [SS75a] A. Salam und J. Strathdee, *Feynman Rules for Superfields*, Nucl. Phys. **B86** (1975), 142.
- [SS75b] A. Salam und J. Strathdee, *On Superfields and Fermi-Bose Symmetry*, Phys. Rev. **D11** (1975), 1521–1535.
- [SVZ86] M. A. Shifman, A. I. Vainshtein, und V. I. Zakharov, *Exact Gell-Mann-Low Function in Supersymmetric Electrodynamics*, Phys. Lett. **166B** (1986), 334.
- [SW94a] N. Seiberg und E. Witten, *Electric - Magnetic Duality, Monopole Condensation, and Confinement in $N=2$ Supersymmetric Yang-Mills Theory*, Nucl. Phys. **B426** (1994), 19, hep-th/9407087.
- [SW94b] N. Seiberg und E. Witten, *Monopoles, Duality and Chiral Symmetry Breaking in $N=2$ Supersymmetric QCD*, Nucl. Phys. **B431** (1994), 484, hep-th/9408099.
- [Tep87] M. Teper, *An Improved Method for Lattice Glueball Calculations*, Phys. Lett. **183B** (1987), 345.
- [VKG97] L. Venkataraman, G. Kilcup, und J. Grandy, *The Staggered η' with Smeared Operators*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **53** (1997), 259, hep-lat/9609007.
- [VY82] G. Veneziano und S. Yankielowicz, *An Effective Lagrangian for the Pure $N=1$ Supersymmetric Yang-Mills Theory*, Phys. Lett. **113B** (1982), 231.
- [Wil74] K. Wilson, *Confinement of Quarks*, Phys. Rev. **D10** (1974), 2445.
- [Wit82] E. Witten, *An $SU(2)$ Anomaly*, Phys. Lett. **117B** (1982), 324.
- [Wit92] H. Wittig, *Study of a Chiral Lattice Yukawa Model with Mirror-Fermions*, Ph.D. thesis, Universität Hamburg, 1992.
- [WZ74] J. Wess und B. Zumino, *Supergauge Transformations in Four Dimensions*, Nucl. Phys. **B70** (1974), 39.

Am Schluß dieser Arbeit möchte ich mich bedanken

- bei Herrn Prof. Dr. Gernot Münster, der es mir ermöglicht hat doch noch Elementarteilchenphysik zu betreiben und immer für Fragen und Diskussionen zur Verfügung stand.
- bei Herrn Dr. István Montvay, der zusätzlich noch die Supersymmetrie ins Spiel brachte. Die Besuche am DESY und die Gespräche mit ihm waren immer sehr anregend.
- bei Klaus Spanderen für die vielen sinnvollen und „unsinnvollen“ Diskussionen zur Physik, zum Computer und zum Rest der Welt.
- bei Bodo „mit dem De-bugger“ Junglas. Ohne seinen Doppelprozessor-200Mhz-PentiumPro-128 MB RAM-4.3 GB HD- \TeX -Server hätte das Zusammenschreiben womöglich noch länger gedauert.
- bei Jochen Heitger für die zahlreichen Diskussionen zur Physik und zum Stand der EDV im Fachbereich.
- bei Dr. Hermann Dilger für fachliche Tips und gute Kochrezepte.
- bei Dr. Markus Plagge, der mich bei der optimalen Rechenzeitausnutzung auf der Quadrics mit wertvollen Informationen versorgt hat.
- bei meinen „Mit-im-Zimmer-Sitzenden“, zunächst Sabine Klessinger (später Rotsch) und Peter Hoppe und in der Schlußphase Silke Luckmann, Christian Demmer und Johannes Göttker-Schnetmann. Ich hoffe sie haben immer einen Platz gefunden, den ich nicht belegt hatte.
- bei allen bisher Genannten, der gesamten Arbeitsgruppe des Instituts für Theoretische Physik I und den vielen Mitarbeitern im DFG Schwerpunkt DYNAMISCHE FERMIONEN für vier angenehme und lehrreiche Jahre.

Ein besonderer Dank geht an

- meine Frau Petra Krause-Talkenberger, die mich immer unterstützt und meine Arbeit aus geisteswissenschaftlicher Sicht kommentiert hat und darüber hinaus auch das abschließende Korrekturlesen meiner Dissertation übernommen hat.
- meine Eltern, Schwiegereltern und dem Rest der Familie, die nie daran gezweifelt haben, daß ich doch noch einmal fertig werde und dann *richtig* arbeiten muß.

Persönliche Daten

Name	Talkenberger, Dirk Eduard
Geburtstag	23.10.1965
Geburtsort	Duisburg
Familienstand	verheiratet, keine Kinder
Staatsangehörigkeit	deutsch
Adresse	Schöppingenweg 109, 48149 Münster
Eltern	Ruth Talkenberger, geb. Senicar Karl Talkenberger

Schulbildung

01.08.1972 – 31.07.1976	Grundschule, Duisburg-Laar
01.08.1976 – 21.05.1985	Käthe-Kollwitz-Gymnasium, Duisburg-Ruhrort; Abschluß Abitur

Studium

01.10.1985 – 31.03.1989	Physik Diplom, Universität Duisburg Gesamthochschule; Vordiplom 25.10.1988
07.10.1988 – 31.03.1990	Physik Diplom, Bergische Universität Gesamthochschule Wuppertal
01.04.1990 – 31.03.1993	Physik Diplom, Universität Duisburg Gesamthochschule; Diplom 21.12.1992, Diplomarbeit in theoretischer Physik

Tätigkeiten

09.07.1984 – 18.08.1984	Sachtleben Chemie GmbH; Aushilfstätigkeit
01.07.1985 – 11.08.1985	Sachtleben Chemie GmbH; Aushilfstätigkeit
21.07.1986 – 16.04.1993	Thyssen Stahl AG, Duisburg; Arbeit als Werkstudent im Bereich der Thyssen-Forschung; insgesamt 14 Praktika
02.05.1988 – 31.07.1988	Laboratorium für Theoretische Festkörperphysik, Universität Duisburg Gesamthochschule; studentische Hilfskraft
17.09.1990 – 15.02.1993	Laboratorium für Theoretische Tieftemperaturphysik, Universität Duisburg Gesamthochschule; studentische Hilfskraft

Tätigkeiten – Fortsetzung

17.05.1993 – 17.06.1993	Laboratorium für Theoretische Tieftemperaturphysik, Universität Duisburg Gesamthochschule; Werkvertrag
03.05.1993 – 31.03.1994	Institut für Theoretische Physik I, Westfälische-Wilhelms- Universität Münster; wissenschaftliche Hilfskraft
01.04.1994 – 30.09.1997	Institut für Theoretische Physik I, Westfälische-Wilhelms- Universität Münster; wissenschaftlicher Mitarbeiter

Dissertation

01.05.1993 –	Dissertation bei Prof. Dr. G. Münster am Institut für Theoretische Physik I der Westfälische-Wilhelms-Universität Münster
--------------	---

