Diplomarbeit

Phasenstruktur und Photonpropagator des 3D-abelschen Higgsmodells auf dem Gitter

Robert Feldmann

August 2004

Betreuer: PD Dr. habil. Arwed Schiller

Gutachter: PD Dr. habil. Arwed Schiller
Prof. Dr. Klaus Sibold

Institut für Theoretische Physik
Fakultät für Physik und Geowissenschaften
Universität Leipzig

meiner lieben Familie

Inhaltsverzeichnis

Einleitung **1**

1 Pfadintegrale und Gittereichtheorien **5**
1.1 Quantisierung mit Pfadintegralen 5
1.1.1 Pfadintegrale und Wick-Rotation 5
1.1.2 Funktionalintegrale 7
1.2 Die skalare Elektrodynamik 8
1.2.1 Eichinvarianz 9
1.2.2 Das komplex-skalare Feld in imaginärer Zeit 11
1.2.3 Die abelsche Eichtheorie in imaginärer Zeit 12
1.3 Die Rolle des Gitters 13
1.3.1 Diskretisierung und das Higgs-Feld 13
1.3.2 Eichfelder auf dem Gitter 15
1.3.3 Das abelsche Higgsmodell auf dem Gitter 19

2 Numerische Simulationen **21**
2.1 Monte-Carlo-Methoden 21
2.1.1 Markov-Prozesse 22
2.1.2 Metropolis-Algorithmus 23
2.1.3 Wärmebad-Algorithmus 27
2.2 Statistische Fehleranalyse 30
2.2.1 Autokorrelation 31
2.2.2 Binning und Jackknife 32
2.3 Reweighting 33
2.3.1 Einfaches Reweighting 33
2.3.2 Mehrfaches Reweighting 35

3 Phasenstruktur **37**
3.1 Phasenübergänge 37
3.2 Grenzfälle des abelschen Higgsmodells 39
3.3 Observablen 40
3.3.1 Wirkungsbestandteile 40

3.3.2 Topologische Observablen . . . 41
3.3.3 Suszeptibilität und Binder-Kumulanten . . . 42
3.4 Phasenstruktur für die Darstellung $Q = 1$ . . . 43
3.4.1 Das Gebiet erster Ordnung . . . 43
3.4.2 Das Gebiet kontinuierlichen Überganges . . . 45
3.4.3 Der Übergangspunkt . . . 46
3.4.4 Kritische Kopplungen . . . 48
3.4.5 Verhalten ausgewählter Observablen . . . 49
3.5 Phasenstruktur für die Darstellung $Q = 2$ . . . 49
3.5.1 Das Gebiet erster Ordnung . . . 49
3.5.2 Das Gebiet zweiter Ordnung . . . 50
3.5.3 Monopolketten . . . 52
3.5.4 Verhalten ausgewählter Observablen . . . 53

4 Der Photonpropagator **55**
4.1 Definition . . . 55
4.1.1 Der Propagator der abelschen Eichtheorie . . . 55
4.1.2 Der Propagator im abelschen Higgsmodell auf dem Gitter . . . 57
4.2 Landau-Eichfixierung . . . 59
4.2.1 Landau-Eichung und Dirac-Strings . . . 59
4.2.2 Der Fixierungsalgorithmus . . . 62
4.3 Der Propagator für $Q = 1$ . . . 65
4.3.1 Autokorrelationszeiten . . . 65
4.3.2 Die Auswirkung der Eichfixierung . . . 65
4.3.3 Ergebnisse für die transversale Strukturfunktion . . . 68
4.4 Der Propagator für $Q = 2$ . . . 69
4.4.1 Autokorrelationszeiten . . . 70
4.4.2 Ergebnisse für die transversale Strukturfunktion . . . 70

Zusammenfassung **75**

A Tabellen und Bilder **79**
A.1 Verhalten ausgewählter Observablen – $Q = 1$ . . . 80
A.2 Verhalten ausgewählter Observablen – $Q = 2$ . . . 82
A.3 Monopolketten . . . 83
A.4 Autokorrelationzeiten und Parameter der Propagatormessungen . . . 84

Danksagung **93**

Abbildungsverzeichnis

1.1 Visualisierung von Links und Plaquetten des kubisches Gitter 14

2.1 Auswirkung der Änderung eines Links auf umgebende Plaquetten 25
2.2 Autokorrelationsfunktionen und Autokorrelationszeiten 32
2.3 Normierte Histogramme; Grenzen des Reweightingbereichs 34

3.1 Histogramme des Higgskondensates; $Q = 1$ 43
3.2 Thermodynamischer Limes von latenter Wärme und Oberflächenspannung 44
3.3 Suszeptibilität und Binder-Kumulante; $Q = 1$, $\lambda = 0.005$ 45
3.4 Suszeptibilität und Binder-Kumulante; $Q = 1$, $\lambda = 0.02$ 46
3.5 Eingrenzung des Endpunktes 47
3.6 Phasenstruktur des abelschen Higgsmodells; $Q = 1$ 48
3.7 Suszeptibilität und Binder-Kumulante; $Q = 2$, $\lambda = 0.2$ 51
3.8 Skalierungsverhalten des dritten Momentes 51
3.9 Bestimmung von ν und $(1 + \alpha)/\nu$ 52
3.10 Metastabilität in der Monopoldichte und ANO-Stringdichte 53

4.1 Abhängigkeit zwischen Dirac-Stringdichte und Eichfunktional 61
4.2 Visualisierung einer Eichfeldkonfiguration 62
4.3 Abhängigkeit des Eichfunktionals und der Dirac-Stringdichte von η 64
4.4 Auswirkung der Erhöhung von η bzw. von N_G auf das Eichfunktional 65
4.5 Autokorrelationszeiten; $Q = 1$ 66
4.6 Impulsabhängigkeit von $p^2 D(p^2)$ 66
4.7 Abhängigkeit der Fitparameter des Propagators von η 67
4.8 Fitparameter des Propagators; $Q = 1$, $\lambda = 0.005$ 68
4.9 Fitparameter des Propagators; $Q = 1$, $\lambda = 0.02$ 69
4.10 Fitparameter des Propagators; $Q = 2$, $\lambda = 0.02$ 71
4.11 Fitparameter des Propagators; $Q = 2$, $\lambda = 0.08$ 72
4.12 Fitparameter des Propagators; $Q = 2$, $\lambda = 0.2$ 73

A.1 Das Verhalten von ρ^2, ρ_{mon} und ρ_{ano}; $Q = 1$, $\lambda = 0.005$ 80
A.2 Das Verhalten von ρ^2, ρ_{mon} und ρ_{ano}; $Q = 1$, $\lambda = 0.02$ 81
A.3 Das Verhalten von ρ^2, ρ_{mon} und ρ_{ano}; $Q = 2$, $\lambda = 0.02$ und $\lambda = 0.2$ 82

A.4 Visualisierung von Monopolketten 83

Tabellenverzeichnis

1.1 Analoge Größen der Quantenmechanik und Quantenfeldtheorie 8

3.1 Fitansätze für thermodynamische Größen; $Q = 1$ 46
3.2 Kritische Kopplungen κ_c in Abhängigkeit von λ; $Q = 1$ 48
3.3 Fitansätze für thermodynamische Größen; $Q = 2$ 49

A.1 Autokorrelationszeiten von ρ^2 und ρ_{mon}; $Q = 2$, $\lambda = 0.08$ 84
A.2 Autokorrelationszeiten von ρ^2 und ρ_{mon}; $Q = 2$, $\lambda = 0.02$ 85
A.3 Autokorrelationszeiten von ρ^2 und ρ_{mon}; $Q = 2$, $\lambda = 0.2$ 85

Einleitung

Motivation

Die rasante Entwicklung der Computertechnik in den letzten Jahren ging einher mit einem verstärkten Einsatz von Simulationsmethoden in allen Bereichen der Wissenschaft. Insbesondere hat sich der Einsatz von Monte-Carlo-Methoden zur Untersuchung komplexer physikalischer Modelle, z.B. von Gittereichtheorien, als eine sehr fruchtbare Anwendung statistischer Methoden herausgestellt [1][2]. Als wohl prominentestes Beispiel von Gittereichtheorien gestattet die Gitterformulierung der *Quantenchromodynamik* (QCD) eine nicht-störungstheoretische Beschreibung der Theorie der starken Wechselwirkung. Damit war es erstmals möglich ausgehend von Grundprinzipien, zu erklären, weshalb Quarks, fundamentale Bausteine der Materie, niemals einzeln beobachtet werden können. Stattdessen sind sie nur in farbneutralen Kombinationen aus meist 2 oder 3 Quarks anzutreffen.[1] Weiterhin erlaubt die Gitterformulierung, Aussagen über das physikalische Spektrum der Theorie, vorhandene Phasenübergänge und Eigenschaften bislang nicht beobachteter Teilchen, z.B. von Gluonbällen, zu gewinnen.

Besonderes Interesse gilt auch dem abelschen Higgsmodell[2], welches in seiner Vielschichtigkeit zwischen den einfachen und leichter zugänglichen Modellen der statistischen Physik und den komplexen, aber numerisch aufwändigeren[3] Modellen der Quantenfeldtheorie steht und vielfältige Anwendungsbereiche besitzt. So wird es z.B. in der Festkörperphysik als effektives Modell der Supraleitung [4] oder zur Beschreibung von Flüssigkristallen [5] verwendet. Aber auch in der Kosmologie im Zusammenhang mit der Beschreibung der Baryogenese, in Modellen kognitiver Netzwerke [6] und natürlich in der Teilchenphysik wird das abelsche Higgsmodell (AHM) diskutiert. Aus quantenfeldtheoretischer Sicht beschreibt das AHM die skalare Elektrodynamik und verfügt anstelle der fermionischen Ladungsträger der *Quantenelektrodynamik* über skalare Materiefelder. Die Freiheitsgrade des Modells sind demnach durch skalare Materiefelder (Higgsfelder) und abelsche Eichfelder gegeben.

In der statistischen Physik ist man an den Erwartungswerten der aus den Feldern gebildeten Observablen interessiert. Dazu ist die Berechnung von Funktionalintegralen nötig. Um eine numerische Auswertung zu ermöglichen, ist es natürlich, die Raum-Zeit als Träger dieser Felder zu diskretisieren und damit das Funktionalintegral durch hochdimensionale gewöhnliche Integrale zu ersetzen. So aufbereitet ist das System Methoden der statistischen Physik, speziell den Monte-Carlo-Verfahren, zugänglich.

Die Überführung des Systems auf das Raum-Zeit-Gitter ist allerdings nicht eindeutig. In dieser Arbeit

[1] Kürzlich konnten zudem Pentaquark-Zustände nachgewiesen werden, die aus 5 Quarks bestehen [3].

[2] In den jeweiligen Anwendungsgebieten heißt das Modell auch wahlweise Ginzburg-Landau-Modell mit U(1)-Eichfeld oder skalare Elektrodynamik

[3] In dieser Arbeit wird die neue Rechtschreibung verwendet.

wird das 3-dimensionale AHM in der *kompakten* Gitterformulierung ($cAHM_3$) untersucht. Damit besitzt es eine aus der QCD bekannte Eigenschaft: Den Einschluss von Testladungen [7]. Die Kompaktheit der Eichfelder ermöglicht die Existenz spezieller topologischer Defekte, d.h. von Monopolen/Antimonopolen (instantonartige Anregungen in 3 Dimensionen) und Strings. In der reinen U(1)-Eichtheorie oder bei lediglich schwacher Wechselwirkung zwischen Eichfeld und Materiefeld liegt ein dichtes Plasma aus topologischen Defekten vor, welches den Einschluss der Testladungen erwirkt [7]. Bei einer stärkeren Kopplung zwischen Eichfeld und Materiefeld geht das System in die Higgs-Phase über. Dabei sinkt die Anzahl der topologischen Defekte, Monopole und Antimonopole bilden neutrale Dipolpaare und der Einschluss wird zerstört [8]. Der Einfluss topologischer Defekte auf die Phasenstruktur und auf Korrelationsfunktionen ist Gegenstand aktueller Forschung.

Die Phasenstruktur des Modells ist bereits seit längerem von Interesse [9]. Trotz großer Anstrengungen bleiben aber weiter einige qualitative und viele quantitative Fragen offen. So ist z.B. die Art des Überganges zwischen den Phasen für große Selbstkopplungen des Modells im Falle einfach geladener Materiefelder (fundamentale Darstellung) umstritten. Da vermutlich kein gewöhnlicher Phasenübergang zweiter Ordnung vorliegt [8], wird ein Kosterlitz-Thouless-artiger Übergang vermutet [10]. Gleichzeitig wird eine negative anomale Dimension des Photonpropagators postuliert. Für kleine Selbstkopplungen liegt ein Phasenübergang erster Ordnung vor [11]. Diejenige Selbstkopplung zu bestimmen, bei welcher der Phasenübergang erster Ordnung verschwindet, wäre eine der zu betrachtenden quantitativen Aufgaben.

Kürzlich wurde die Phasenstruktur des $cAHM_3$ im Falle zweifach geladener Materiefelder untersucht [12]. Dies geschah allerdings im London-Limes, d.h. mit eingefrorenen radialen Freiheitsgraden des Materiefeldes. Eine Analyse der Phasenstruktur im vollen Modell erscheint wünschenswert.

Wichtige Eigenschaften des Modells lassen sich aus Korrelationsfunktionen gewinnen. Ein prominentes Beispiel stellt der Photonpropagator dar. Da dies eine eichabhängige Größe ist, muss vor ihrer Messung eine Eichfixierung vorgenommen werden. Aus verschiedenen Gründen, z.B. der gewünschten Transversalität des Propagators, wird dazu überlicherweise die Landau-Eichung gewählt. Die Eichfixierung ist ein höchst nicht-triviales Optimierungsproblem, zumal ihre Güte das gemessene Verhalten des Propagators stark beeinflusst. Eine genaue Analyse der auftretenden Probleme ist daher notwendig, um eine zuverlässige Messung der Propagatoreigenschaften zu ermöglichen.

Methodischer Ansatz

Der Hauptaugenmerk dieser Arbeit liegt auf der numerischen Untersuchung folgender Eigenschaften des kompakten 3-dimensionalen abelschen Higgsmodells auf dem Gitter mit einfach bzw. mit zweifach geladenen Materiefeldern:

- Analyse der qualitativen Phasenstruktur: die Art des Phasenübergangs, Unterscheidung der Phasen.
- Bestimmung der quantitativen Phasenstruktur: Messungen kritischer Kopplungen und Exponenten, Auffinden von Übergangspunkten.
- Untersuchung des Photonpropagators: Probleme bei der Eichfixierung, Eigenschaften des Propagators.

Die numerische Umsetzung erfolgt mit Methoden der statistischen Physik. Dabei kommen Monte-Carlo-Methoden, Reweighting-Algorithmen und Verfahren der Datenanalyse und Fehlerberechnung zum Einsatz.

Aufbau der Arbeit

1. Im ersten Kapitel wird zunächst der grundlegende Begriff des Funktionalintegrals wiederholt. Anschließend wird das abelsche Higgsmodell im Kontinuum betrachtet. Der folgende Übergang auf das Gitter wird etwas genauer ausgeführt, da das daraus resultierende Modell in seiner Gitterformulierung den Ausgangspunkt für die numerische Simulation darstellt.

2. Das zweite Kapitel beginnt mit Markov-Prozessen, die die Grundlage von Monte-Carlo-Simulationen bilden. Insbesondere werden die verwendeten Verfahren (Metropolis-Algorithmus, Wärmebad-Algorithmus) zunächst allgemein vorgestellt und anschließend auf das abelsche Higgsmodell adaptiert. Der darauf folgende Abschnitt widmet sich der Fehleranalyse. Im letzten Abschnitt dieses Kapitels werden Reweighting-Verfahren engeführt.

3. Das dritte Kapitel beschäftigt sich mit der Phasenstruktur des abelschen Higgsmodells. Nach der Einführung einiger Grundbegriffe werden Grenzfälle des Modells betrachtet. Danach folgt eine Definition der verwendeten Observablen. Die Ergebnisse der Analyse für den Fall einfach bzw. zweifach geladener Materiefelder werden nachfolgend vorgestellt.

4. Das letzte Kapitel ist dem Photonpropagator gewidmet. Nach einer Definition des Propagators wird das Eichfixierungsverfahren genau untersucht. In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse für den Propagator beschrieben und ausgewertet.

5. Abschließend erfolgt eine Zusammenfassung und ein Ausblick.

Kapitel 1

Pfadintegrale und Gittereichtheorien

1.1 Quantisierung mit Pfadintegralen

Auf Dirac [13] und Feynman [14] geht eine wichtige Umformulierung der Quantenmechanik, die sogenannte Pfadintegrale verwendet, zurück. Viele moderne Entwicklungen, insbesondere in der Gitterformulierung von Quantenfeldtheorien, stützen sich auf diesen Formalismus. Die Verwendung von Pfadintegralen gestattet auf klare und einfache Weise eine Behandlung der jeweiligen Theorie sowohl auf der Ebene der Störungstheorie, als auch nicht-störungstheoretische und numerische Untersuchungen. Weiterhin erlaubt sie eine neuartige Interpretation der Wahrscheinlichkeitsamplitude als „Summe über Historien".

In diesem Abschnitt soll die Verwendung von Pfad- und Funktionalintegralen motiviert werden. Anschließend an die Beschreibung von Pfadintegralen der Quantenmechanik werden Funktionalintegrale der Quantenfeldtheorie vorgestellt. Außerdem wird auf den Übergang zu imaginären Zeiten eingegangen. All dies geschieht naturgemäß sehr kurz. Eine detaillierte Behandlung findet sich in der Literatur, z.B. in den Standardwerken [15][16][17]. Weitere Quellen sind im Text aufgeführt.

1.1.1 Pfadintegrale und Wick-Rotation

In der Quantenmechanik lassen sich Matrixelemente zwischen verallgemeinerten Eigenzuständen der Ortsoperatoren im Heisenberg-Bild durch sogenannte Pfadintegrale ausdrücken. Sei der Hamiltonoperator eines 1-dimensionalen Systems von der Form

$$H = T + V, \qquad T = \frac{P^2}{2m}.$$

Dann gilt[1] (mit $x_{N+1} \equiv x'$) [18]

$$\langle x'|e^{-i(t'-t)H}|x\rangle = \langle x', t'|x, t\rangle = \lim_{N\to\infty} \mathcal{N}_N \int dx_1 \dots dx_N \delta(x - x_1) e^{i\sum_{k=1}^{N}((x_{k+1}-x_k)^2 \frac{m}{2\Delta t} - V(x_k)\Delta t)} \quad (1.1)$$

mit dem Normierungsfaktor $\mathcal{N}_N$

$$\mathcal{N}_N = \Big(\frac{m}{i2\pi\Delta t}\Big)^{N/2}.$$

[1] Im verwendeten Einheitensytem sei $\hbar = c = k_B = 1$

In formaler Schreibweise

$$\begin{aligned}\langle x', t'|x, t\rangle =& \mathcal{N}\int \mathcal{D}x e^{i\int_t^{t'} d\tau L(x(\tau),\dot{x}(\tau))} \\ =& \mathcal{N}\int \mathcal{D}x e^{i\mathcal{S}[x]},\end{aligned} \tag{1.2}$$

L und $\mathcal{S}$ bezeichnen hierbei die klassische Lagrangefunktion bzw. Wirkung

$$L(x,\dot{x}) = \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x) \qquad S[x] = \int d\tau L(x(\tau),\dot{x}(\tau)).$$

Der Normierungsfaktor $\mathcal{N}_N$ divergiert im Limes $N \to \infty$ und $\Delta t \to 0$. Der obige Ausdruck ist daher als Kurzform von (1.1) zu verstehen, wobei allerdings gezeigt werden muss, dass der Limes $N \to \infty$ existiert. Betrachtet man Erwartungswerte von Produkten von zeitgeordneten Ortsoperatoren

$$\langle x', t'|\mathcal{T}[x_N \dots x_1]|x, t\rangle$$

so findet man analog

$$\langle x', t'|\mathcal{T}[x_N \dots x_1]|x, t\rangle = \mathcal{N}\int \mathcal{D}x x(t_N)\dots x(t_1) e^{i\mathcal{S}[x]}.$$

Hierbei bezeichne $\mathcal{T}$ das zeitgeordnete Produkt von Operatoren $O_i \equiv O(t_i)$, d.h

$$\mathcal{T}[O(t_N)\dots O(t_1)] = O(t_{\sigma(N)})\dots O(t_{\sigma(1)}), \qquad t_{\sigma(N)} \geq \dots \geq t_{\sigma(1)}, \qquad \sigma \in Perm(N).$$

Um den Grenzfall $t \to -\infty$, $t' \to \infty$ zu betrachten, werden Energieeigenzustände eingefügt

$$\langle x', t'|x, t\rangle = \sum_n e^{-i(t'-t)E_n}\psi_n(x')\psi_n^*(x). \tag{1.3}$$

Wick-Rotation Eine Möglichkeit, den Limes $t' - t \to \infty$ zu vollziehen, besteht darin, zu imaginären Zeiten $t \to \theta = -it$ überzugehen. Diese analytische Fortsetzung bezeichnet man allgemein als Wick-Rotation [19]. Hierbei ist t eine reelle Zahl und θ imaginär. Dieser Kalkül ist konsistent, sofern überhaupt eine analytische Fortsetzung zu imaginären Zeiten existiert. In (1.3) verschwinden nun die oszillierenden Terme und im gesuchten Limes ist der Beitrag des eventuell entarteten Zustandes niedrigster Energie E_0 dominant.

Um die bereits erfolgte Wick-Rotation hervorzuheben, ist es in der Literatur üblich, anstelle von t die Variable τ zu verwenden. Mit

$$\begin{aligned}(x', \tau'|x, \tau) &:= \langle x', -i\tau'|x, -i\tau\rangle \\ \tilde{x}_k = \tilde{x}(\tau_k) &:= x(-i\tau_k)\end{aligned}$$

gilt folglich

$$\begin{aligned}(x', \tau'|x, \tau) &\xrightarrow{\tau'-\tau\to\infty} e^{-(\tau'-\tau)E_0}\psi_0(x')\psi_0^*(x) \\ (x', \tau'|\mathcal{T}[\tilde{x}_N \dots \tilde{x}_1]|x, \tau) &\xrightarrow{\tau'-\tau\to\infty} e^{-(\tau'-\tau)E_0}\psi_0(x')\psi_0^*(x)\langle E_0|\mathcal{T}[\tilde{x}_N \dots \tilde{x}_1]|E_0\rangle\end{aligned} \tag{1.4}$$

und somit

$$\langle E_0|\mathcal{T}[\tilde{x}_N \dots \tilde{x}_1]|E_0\rangle_E = \lim_{\tau'-\tau\to\infty} \frac{(x', \tau'|\mathcal{T}[\tilde{x}_N \dots \tilde{x}_1]|x, \tau)}{(x', \tau'|x, \tau)}. \tag{1.5}$$

Die Verwendung imaginärer Zeit ist auch aus einem anderen Grund sehr wichtig: Aus (1.2) ist erkenntlich, dass der Exponent bei großen Wirkungen rasch oszilliert anstatt zu verschwinden. Im Allgemeinen konvergiert daher das Funktionalintegral (1.2) nicht.

In imaginärer Zeit lässt sich die Ableitung des Pfadintegrals analog vollziehen:

$$\begin{aligned}(x', \tau'|x, \tau) =& \mathcal{N}' \int \mathcal{D}x e^{-\int_\tau^{\tau'} ds L_E(x(s), \dot{x}(s), s)} \\ =& \mathcal{N}' \int \mathcal{D}x e^{-\mathcal{S}_E[x]}.\end{aligned}$$

L_E bzw. S_E bezeichnen die euklidische Lagrangefunktion bzw. Wirkung. Die Bezeichnung „euklidisch“ stammt daher, dass die Metrik der Koordinaten x^μ bei Verwendung imaginärer Zeit von der Minkowski-Metrik zur euklidischen Metrik übergeht. Offenbar werden Wege mit größeren Wirkungen im Pfadintegral exponentiell unterdrückt und die Einführung eines geeigneten Maßes ist nun möglich. Da (1.5) nicht von den Positionen x, x' abhängt, ist es erlaubt, $x = x'$ zu fordern und über alle periodischen Randbedingungen zu integrieren. Der Vakuumerwartungswert eines zeitgeordneten Produktes von Ortsoperatoren lässt sich so durch Pfadintegrale in imaginärer Zeit ausdrücken:

$$\langle E_0|\mathcal{T}[\tilde{x}_N \dots \tilde{x}_1]|E_0\rangle_E = \lim_{\tau' - \tau \to \infty} \frac{\int_{x(\tau')=x(\tau)} \mathcal{D}x\, x(\tau_N) \dots x(\tau_1) e^{-\mathcal{S}_E[x]}}{\int_{x(\tau')=x(\tau)} \mathcal{D}x e^{-\mathcal{S}_E[x]}}. \tag{1.6}$$

Um Green-Funktionen im Minkowski-Raum zu erhalten, müssen die Vakuumserwartungswerte bzw. Übergangsamplituden nach ihrer Berechnung wieder auf die reelle Zeitachse analytisch fortgesetzt werden. Eine wichtige Bedingung dafür ist die Osterwalder-Schrader-Positivitätseigenschaft [20][21].

1.1.2 Funktionalintegrale

Relativistische Kovarianz und die Möglichkeit Prozesse zu beschreiben, bei denen Teilchen erzeugt und vernichtet werden können, sind Anforderungen, die eine relativistische Quantentheorie erfüllen muss. Dass Quantenfelder die Grundlage dieser Theorien bilden, kann aus verschiedenen Gründen motiviert werden, z.B. aus der Beschreibung elektromagnetischer Strahlung in einem Hohlraum. Diese bildet Moden aus, d.h. stehende Wellen verschiedener Frequenzen. Die Plancksche Strahlungformel folgt aus dem Ansatz, dass jede Mode als ein *quantisierter* harmonischer Oszillator aufgefasst wird. Das elektromagnetische Feld wird in quantisierter Formulierung durch ein Feld nicht wechselwirkender harmonischer Oszillatoren beschrieben.

Verschiedene Methodologien haben sich in der Vergangenheit herausgebildet. In der Quantenmechanik werden Ort und Impuls als die dynamischen Freiheitsgrade eines Teilchens quantisiert, indem sie zu Operatoren erhoben und Vertauschungsrelationen definiert werden. Bei der *kanonischen Quantisierung* einer Feldtheorie werden in analoger Weise kanonische Kommutationsrelationen zwischen Feldoperatoren postuliert. Dieser Formulismus bietet durch die Verwendung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ein intuitives Verständnis von Vielteilchenprozessen. Für Streuexperimente ist die Berechnung der Streumatrix, die Übergangsamplituden zwischen asymptotisch freien Zuständen beschreibt, sehr wichtig. Die Unitarität der Streumatrix lässt sich im kanonischen Formalismus leichter zeigen. Sofern die kanonische Quantisierung die Hamiltonsche Darstellung der Wirkung verwendet, werden Zeit und Raum unterschiedlich behandelt. Dadurch ist die relativistische Kovarianz der Theorie in Zwischenschritten oft nicht sichtbar.

Objekt	Quantenmechanik	Quantenfeldtheorie
klassischer Ausgangspunkt	Punktmechanik	klassische Feldtheorie
Freiheitsgrade	x(t),p(t)	$\phi(x,t)$, $\pi(x,t)$
Operatoren	Q,P	Φ, Π
Grundzustand	$\|E_0\rangle$	Vakuum $\|0\rangle$

Tabelle 1.1: Analoge Größen der Quantenmechanik und Quantenfeldtheorie

Das Konzept der Pfadintegrale lässt sich in Form von Funktionalintegralen auf Feldtheorien übertragen[2]. Ein wichtiger Grund für die Anwendung von Funktionalintegralen mag darin liegen, dass Eichtheorien mittels des kanonischen Formalismus nur sehr schwer zu handhaben sind. Funktionalintegrale ermöglichen hier einen leichteren Zugang. In den Bereichen, in denen beide Methoden parallel angewendet werden können, haben sie sich als äquivalent erwiesen.

Zwischen Quantenmechanik und Quantenfeldtheorie besteht eine formale Analogie (Tabelle 1.1). Viele Ergebnisse der Quantenmechanik können deshalb, bei entsprechender Vorsicht, in die Quantenfeldtheorie übertragen werden. Die Herleitung der Funktionalintegrale kann durch Verwendung kohärenter Zustände auf ähnlichem Weg wie im quantenmechanischen Fall erfolgen.

Die Vakuumerwartungswerte zeitgeordneter Produkte von Feldoperatoren in imaginärer Zeit (Schwinger-Funktionen) lassen sich in Analogie zum quantenmechanischen Fall aus Funktionalintegralen der euklidischen Wirkung bestimmen

$$\langle 0|\mathcal{T}F[\Phi]|0\rangle_E = \frac{\int \mathcal{D}\phi F[\phi]\, e^{-S_E[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi\, e^{-S_E[\phi]}}. \tag{1.7}$$

Es wird dabei über alle Feldkonfigurationen von ϕ integriert. Außerdem ist F ein Funktional, das Feldwerte verschiedener Raumzeiten miteinander verknüpft und die euklidische Wirkung S_E ein Integral der euklidischen Lagrangedichte $\mathcal{L}_E$ über die gesamte Raum-Zeit, d.h. $S_E[\phi] = \int d^dx \mathcal{L}_E(\phi, \partial_\mu\phi, x^\mu)$.

Sowohl (1.6) als auch die quantenfeldtheoretische Entsprechung (1.7) weisen eine formale Ähnlichkeit zu statistischen Ensemble-Mittelwerten auf. Tatsächlich bezeichnet man

$$Z = \int \mathcal{D}\phi\, e^{-S_E[\phi]}$$

oft als Zustandsumme und interpretiert den Term $e^{-S_E[\phi]}$ als Boltzmann-Verteilung eines kanonischen Ensembles. Die verwendeten numerischen Methoden dieser Arbeit beruhen auf dieser Korrespondenz.

1.2 Die skalare Elektrodynamik

Im vorherigen Abschnitt wurde die Quantisierung mittels Funktionalintegralen vorgestellt. Die Grundidee bestand darin, Erwartungswerte von Operatoren durch Funktionalintegrale auszudrücken. Diese Funktionalintegrale verwenden damit einerseits die klassische Lagrangefunktion, erlauben andererseits Fluktuationen der Freiheitsgrade, welche nicht den Euler-Lagrange-Gleichungen entsprechen. Man spricht in diesem Fall von Quantenfluktuationen.

[2] Aus Analogie spricht man häufig auch in diesem Fall von „Pfadintegralen“.

Eine der einfachsten Eichtheorien ist die skalare Elektrodynamik. Mit ihrer Hilfe soll zunächst das Prinzip der Eichinvarianz in reeller Zeit vorgestellt werden. Anschließend wird der Übergang zu imaginären Zeiten vollzogen. Die skalare Elektrodynamik kann zudem als Zugang zum abelschen Higgsmodell verstanden werden.

1.2.1 Eichinvarianz

Klassische Feldgleichungen können durch ein Variationsprinzip ausgehend von der Wirkung

$$S = \int \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi, x^\mu) d^d x$$

abgeleitet werden [22]. Im Folgenden wird der metrische Tensor $g_{\mu\nu}$ der Minkowski-Metrik in nachstehender Konvention verwendet.

$$g_{00} = 1, \qquad g_{ii} = -1 \text{ falls } i \in \{1, \ldots, d-1\}, \qquad g_{\mu\nu} = 0 \text{ falls } \mu \neq \nu$$

Für Variationen, die auf dem Rand eines d-dimensionalen Gebietes verschwinden, sind das Prinzip der stationären Wirkung und die Euler-Lagrange-Gleichungen für klassische Felder äquivalent.

$$\delta S = 0 \Longleftrightarrow \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} = 0$$

Sei ein skalares Feld mit reellen Feldkomponenten ϕ_1, ϕ_2 gegeben. Alternativ kann es als komplexes skalares Feld[3] mit den Komponenten ϕ, ϕ^* aufgefasst werden.

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + i\phi_2)$$
$$\phi^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - i\phi_2)$$

Die Anwendung der Euler-Lagrange-Gleichungen auf die Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = (\partial_\mu \phi)(\partial^\mu \phi^*) - m^2 \phi \phi^* \tag{1.8}$$

ergibt

$$(\Box + m^2)\phi = 0$$
$$(\Box + m^2)\phi^* = 0,$$

wobei ϕ, ϕ^* als unabhängige Feldkomponenten aufgefasst werden. Eine Symmetrie offenbart sich bei einer Phasenverschiebung von ϕ bzw. ϕ^* um einen ortsfesten Betrag, d.h.

$$\phi \to e^{-i\Lambda}\phi \qquad \phi^* \to e^{i\Lambda}\phi^*$$

[3] Das skalare Feld wird auch als Higgs-Feld bezeichnet.

lässt die Lagrangedichte invariant. Diese Transformationen lassen sich als Wirkung von Elementen der Gruppe U(1) auf die Felder auffassen. Durch die Betrachtung einer infinitesimalen Phasenverschiebung ergibt sich der Noether-Strom zu

$$J^\mu = i(\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*). \tag{1.9}$$

Analog folgt für die erhaltene Ladung

$$Q = i \int (\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t}) d^{d-1}x.$$

Die obige Transformation ist ein Beispiel für eine globale Eichtransformation. An jedem Punkt der Raum-Zeit wird die Phase des Feldes um einen festen Wert geändert. Sofern die Phase eines Feldes aber keine physikalische Aussagekraft besitzt, sollte es erlaubt sein, die Phase des Feldes an jedem Punkt um einen beliebigen Wert zu verändern. Das Postulat einer *lokalen* Eichinvarianz hat wichtige physikalische Konsequenzen.

Dass die Lagrangedichte (1.8) unter einer lokalen Eichtransformation

$$\phi \to \phi' = e^{-i\Lambda(x)}\phi \qquad \phi^* \to (\phi^*)' = e^{i\Lambda(x)}\phi^*$$

nicht invariant bleibt, ist offensichtlich, da (im Folgenden $\Lambda = \Lambda(x)$)

$$\partial_\mu \phi' = e^{-i\Lambda}(\partial_\mu \phi - i\phi \partial_\mu \Lambda) \neq e^{-i\Lambda}\partial_\mu \phi = (\partial_\mu \phi)'.$$

Die Ableitung des Feldes transformiert sich demnach nicht *kovariant*, d.h. sie transformiert sich anders als das Feld unter lokalen Eichtransformationen. Bei Betrachtung infinitesimaler Transformationen berechnet sich die Variation der Lagrangedichte $\mathcal{L}$ nach wenigen Zwischenschritten zu

$$\delta \mathcal{L} = J^\mu \partial_\mu \Lambda.$$

Hier wurde der Noether-Strom (1.9) verwendet. Um die Forderung der lokalen Eichinvarianz zu erfüllen, erweitert man die Lagrangedichte zunächst um den Term

$$\mathcal{L}_1 = -qJ^\mu A_\mu$$

und fordert weiterhin, dass sich das neue Feld unter Eichtransformationen obigen Typs wie folgt verhält:

$$A_\mu \to A_\mu + \frac{1}{q}\partial_\mu \Lambda.$$

Die Konstante q legt die Stärke der Kopplung zwischen Eichfeld und skalarem Feld fest.

Die Wirkung ist eine einheitenlose Größe. Daher folgt unter Berücksichtigung von (1.8) und (1.9), dass qA_μ die gleichen Einheiten wie ∂_μ besitzt. Dies ist konsistent mit dem Transformationsverhalten von A_μ. Damit gilt

$$\delta(\mathcal{L} + \mathcal{L}_1) = -q(\delta J^\mu)A_\mu.$$

Nach Addition eines dritten Terms

$$\mathcal{L}_2 = q^2 A_\mu A^\mu \phi^* \phi$$

folgt wie gewünscht $\delta(\mathcal{L}+\mathcal{L}_1+\mathcal{L}_2) = 0$. Um die Forderung der lokalen Eichinvarianz zu erfüllen, wurde ein neues Feld A_μ mit speziellem Transformationsverhalten eingeführt, ein sogenanntes Eichfeld. Um dieses Feld als neuen Freiheitsgrad aufzufassen, ist es nötig, einen kinetischen Term hinzuzufügen.

$$\mathcal{L}_3 = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$$

Dieser Term ist offenbar eichinvariant, wobei der Feldstärke-Tensor $F_{\mu\nu}$ als die äußere Ableitung des Eichfeldes gegeben ist:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.$$

Das Eichfeld ist folglich mit dem elektromagnetischen Potential identisch. Aus der Zusammenfassung aller eben gewonnenen und betrachteten Terme entsteht die Lagrangedichte der skalaren Elektrodynamik:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{SED} =& \mathcal{L} + \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 + \mathcal{L}_3 \\ =& (\partial_\mu + iqA_\mu)\phi(\partial^\mu - iqA^\mu)\phi^* - m^2\phi\phi^* - \frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \\ =& (D_\mu\phi)(D^\mu\phi^*) - m^2\phi\phi^* - \frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu}.\end{aligned} \tag{1.10}$$

Wie man leicht nachprüft, transformiert sich die kovariante Ableitung des Feldes $D_\mu\phi = (\partial_\mu + iqA_\mu)\phi$ unter Eichtransformationen tatsächlich kovariant, d.h. wie das Feld selbst.

$$\begin{aligned}D_\mu\phi &\to e^{-i\Lambda(x)}D_\mu\phi \\ D_\mu\phi^* &\to e^{i\Lambda(x)}D_\mu\phi^*\end{aligned}$$

Dies ist ein Beispiel dafür, dass sich eine Theorie in eine eichinvariante Theorie überführen lässt, indem partielle Ableitungen durch kovariante Ableitungen obiger Form ersetzt werden, die sogenannte minimale Substitution. Im betrachteten Fall beschreibt das skalare Feld freie Teilchen, da in der Lagrangedichte $\mathcal{L}$ höchstens Terme quadratisch im Feld ϕ vorkommen. Die Eichinvarianz bleibt gewahrt, wenn eine Selbstwechselwirkung vierten Grades (quartisch) $\mathcal{L}_4 = -g(\phi\phi^*)^2$ hinzukommt.

$$\mathcal{L}^*_{SED} = \mathcal{L}_{SED} - g(\phi\phi^*)^2 \tag{1.11}$$

Dabei beschreiben g und m „nackte“, d.h. nicht renormierte Parameter der Theorie. In den folgenden Abschnitten wird diese Lagrangedichte in euklidischer Raum-Zeit formuliert und unter Verwendung eines Raum-Zeit-Gitters diskretisiert.

1.2.2 Das komplex-skalare Feld in imaginärer Zeit

Die Lagrangedichte $\mathcal{L}^*_{SED}$ soll nun in euklidischer Raum-Zeit, d.h. in imaginärer Zeit, ausgedrückt werden. Dazu wird als einfaches Beispiel zunächst der nicht eichinvariante komplex-skalare Anteil $\mathcal{L}$ untersucht. Die zu (1.8) gehörige Wirkung ist durch

$$\begin{aligned}S =& \int d^dx(\partial_\mu\phi)(\partial^\mu\phi^*) - m^2\phi\phi^* \\ =& -\int d^dx\phi(x)(\partial_\mu\partial^\mu + m^2)\phi^*(x)\end{aligned} \tag{1.12}$$

gegeben. Bei der partiellen Integration wird angenommen, dass die Oberflächenterme verschwinden. Die Fortsetzung zu imaginärer Zeit ($x^0 \to -ix^d$ bzw. $x^i \to x^i$, falls $i \neq 0$) führt auf die Substitution $\partial_0 \to i\partial_d$. Mit diesen Ersetzungen folgt

$$\tilde{S} = i \int d^d\tilde{x}\tilde{\phi}(\tilde{x})(-\Box_E + m^2)\tilde{\phi}^*(\tilde{x})$$

Hier wurde der euklidische Laplace-Operator $\Box_E$ verwendet[4]

$$\Box_E = \partial_\mu\partial_\mu.$$

Außerdem gilt $d\tilde{x} = dx^1 \dots dx^d$ und das Wick-rotierte Feld werde mit $\tilde{\phi}(\tilde{x}) = \phi(-ix^d, x^1, \dots, x^{d-1})$ bezeichnet. Durch die Ersetzung

$$e^{iS} \to e^{i\tilde{S}} = e^{-S_E}$$

ermöglicht der Exponent im Funktionalintegral eine exponentielle Unterdrückung von Feldkonfigurationen mit großer Wirkung. Die euklidische Wirkung ergibt sich daher zu[5]

$$S_E = -i\tilde{S} = \int d^dx\phi(x)(-\Box_E + m^2)\phi^*(x).$$

1.2.3 Die abelsche Eichtheorie in imaginärer Zeit

Falls keine Materiefelder vorhanden sind, gelten in der abelschen Eichtheorie die Maxwellschen Gleichungen für das Vakuum. Insbesondere ist die Lagrangedichte des freien elektromagnetischen Feldes im Minkowski-Raum durch

$$\mathcal{L}_3 = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = -\frac{1}{4}(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) \tag{1.13}$$

und die entsprechende Wirkung durch

$$S = -\frac{1}{4}\int d^dx F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{1.14}$$

gegeben. Die Lagrangedichte ist invariant unter Eichtransformationen

$$A_\mu \to A_\mu + \frac{1}{q}\partial_\mu\Lambda. \tag{1.15}$$

$\Lambda = \Lambda(x)$ ist eine beliebige differenzierbare Funktion. Die zu dieser Lagrangedichte gehörigen Bewegungsgleichungen sind die inhomogenen Maxwellgleichungen, hier allerdings mit verschwindender Stromdichte.

$$\partial_\nu F^{\nu\mu} = \partial_\nu(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu) = (\delta^\mu_\nu\Box - \partial_\nu\partial^\mu)A^\nu = 0 \text{ und somit } (g_{\mu\nu}\Box - \partial_\mu\partial_\nu)A^\nu$$

$g_{\mu\nu}$ ist der metrische Tensor der Minkowski-Metrik.

$$g_{00} = 1, \qquad g_{ii} = -1 \text{ falls } i \neq 0, \qquad g_{\mu\nu} = 0 \text{ falls } \mu \neq \nu$$

Die Verwendung von $g_{\mu\nu}$ anstelle von $-g_{\mu\nu}$ ist Konvention. Die Änderung der Koordinaten und Ableitungen unter einer Wick-Rotation wurde im vorherigen Abschnitt beschrieben. Das entsprechende Verhalten

[4] Hier und im folgenden wird über gleiche Indizes $\mu \in \{1, \dots, d\}$ summiert.
[5] Die Tilde-Symbole werden im Weiteren wieder weggelassen, sofern möglich.

des elektromagnetischen Potentials bestimmt sich aus der Forderung, dass es in imaginärer Zeit einer zu (1.15) analogen Eichtransformationsregel gehorchen soll. Deshalb gilt

$$A^0 \to iA_d.$$

Die Wirkung (1.14) in reeller Zeit geht damit in die Wirkung

$$\tilde{S} = \frac{i}{4}\int d^d x F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}$$

über. Demnach gilt

$$S_E := \frac{1}{4}\int d^d x F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} \tag{1.16}$$

sowie

$$L_E := \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}. \tag{1.17}$$

Die euklidische Wirkung der skalaren Elektrodynamik mit quartischer Selbstwechselwirkung ergibt sich sofort aus (1.12),(1.11) und (1.16) durch minimale Substitution, da sich die kovariante Ableitung $D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu$ beim Übergang zu imaginärer Zeit wie die partielle Ableitung transformiert.

$$S_E^{SED} = \int d^d x \left[(D_\mu\phi)(D_\mu\phi^*) + m^2\phi\phi^* + g(\phi\phi^*)^2 + \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}\right] \tag{1.18}$$

Im Folgenden werden stets euklidische Lagrangedichten und Wirkungen angenommen. Der Index E entfällt daher.

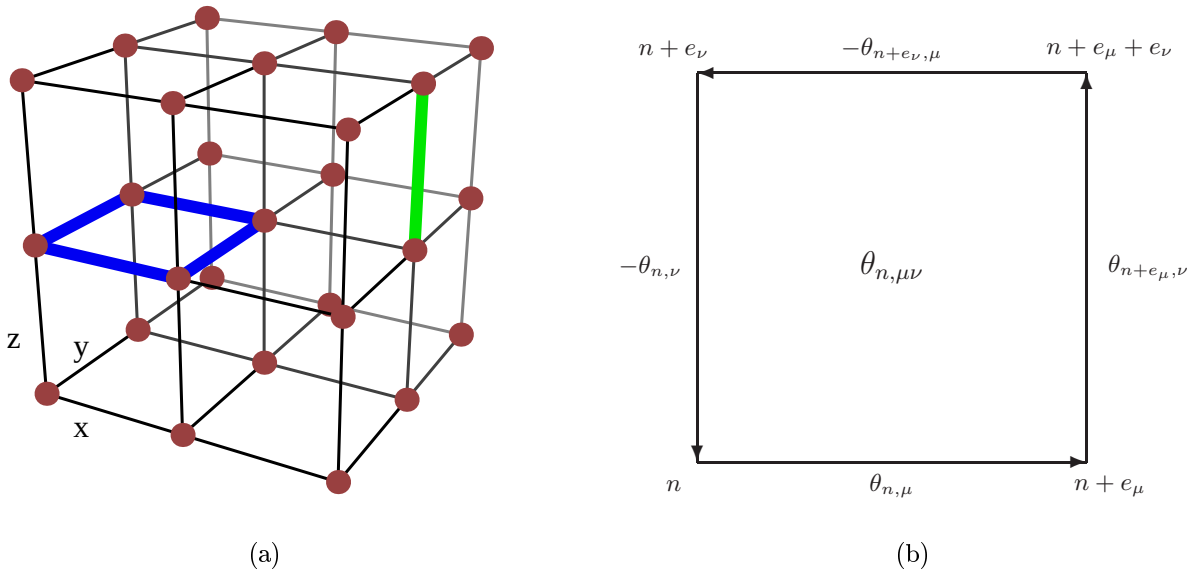
1.3 Die Rolle des Gitters

Die Einführung eines Raum-Zeit-Gitters kann zunächst als Möglichkeit gesehen werden, Funktionalintegrale über Felder mathematisch präzise zu definieren. Dabei wird ein Funktionalintegral in ein sehr hoch- aber endlichdimensionales Mehrfachintegral umgewandelt. Weiterhin bietet die Diskretisierung einen natürlichen Ansatzpunkt für die numerische Simulation. Als einen dritten Vorteil sollte man anführen, dass die Gitterregularisierung als Vorstufe zur Renormierung die momentan einzige nicht-störungstheoretische Regularisierungsmethode darstellt, welche die Eichinvarianz strikt erhält [18]. Aufgrund der Diskretisierung im Ortsraum sind die fouriertransformierten Felder periodisch im Impulsraum. Sie können daher auf die erste Brillouin Zone beschränkt werden, was effektiv der Einführung einer Impulsschranke entspricht. Aspekte der Renormierung werden im Weiteren Verlauf jedoch nicht betrachtet, insbesondere auch nicht der Kontinuumslimes einer auf dem Gitter formulierten Theorie. Stattdessen soll die Theorie bei endlichem Gitterabstand als Beschreibung eines statistischen Systems aufgefasst werden.[6]

1.3.1 Diskretisierung und das Higgs-Feld

Die Diskretisierung entspricht der Verwendung eines d-dimensionalen (hyper-)kubischen Gitters mit der Seitenlänge L und dem Gitterabstand a (Abbildung 1.1). Häufig werden zudem periodische Randbedingungen postuliert. Damit stellt das so definierte Gitter einen diskretisierten (Hyper-)Torus dar. Die

[6] Weitreichende und gut verständliche Einführungen in das Gebiet der Gittereichtheorie sind in [23] und [24] zu finden. Sehr lesenswert ist auch [2].



(a) (b)

Abbildung 1.1: **(a)** Ein 3^3 kubisches Gitter. Alle Gitterpunkte, ein Link in der z-Richtung (grün/hell) und eine xy Plaquette (blau/dunkel) sind hervorgehoben. Links, die Gitterplätze aufgrund periodischer Randbedingungen verbinden, sind nicht abgebildet.**(b)** Eine Plaquette in der $\mu\nu$ Richtung; es gilt stets $\mu < \nu$.

Anzahl der Gitterpunkte beträgt $(L/a)^d$. Den Übergang $L \to \infty$ bezeichnet man als thermodynamischen Limes. Das Volumen des Torus wächst dabei bei gleichbleibendem Gitterabstand. Den Grenzfall $a \to 0$, der Kontinuumslimes, beschreibt eine Feldtheorie im endlichen Volumen. Beide Limes entsprechen einer unendlichen Anzahl von Gitterplätzen und damit Systemen mit unendlich vielen Freiheitsgraden. Ist man schließlich an einer Physik im unendlich ausgedehnten, kontinuierlichen Raum interessiert und möchte ausgehend vom endlichen Gitter diesen Übergang vollziehen, so wird üblicherweise erst der thermodynamische Limes und anschließend der Kontinuumslimes genommen. Letzteres ist im Fall von wechselwirkenden Theorien oft eine höchst nicht-triviale Aufgabe.

Auf dem Gitter Γ können nun auf natürliche Weise Ableitungen und Integrale definiert werden. Die Vorwärtsableitung Δ eines Feldes $\phi : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{K}, \quad \mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ in Richtung des Einheitsvektors e_μ ist definiert als

$$\Delta_\mu \phi(x) = \frac{1}{a}(\phi(x + ae_\mu) - \phi(x)).$$

Das Integral geht auf dem Gitter in eine Summe über

$$\int d^d x \phi(x) \longrightarrow \int_\Gamma dx \phi(x) := a^d \sum_{x \in \Gamma} \phi(x).$$

Der euklidische d'Alembert Operator auf dem Gitter $\Box_{E,\Gamma}$ errechnet sich zu

$$\Box_{E,\Gamma}\phi = \frac{1}{a^2} \sum_\mu (\phi(x + ae_\mu) + \phi(x - ae_\mu) - 2\phi(x)).$$

Durch Einschränkung auf das Gitter erhält man aus einem stetigen Feld seine diskretisierte Version. Mit diesen Definitionen soll nun die Wirkung (1.12) mit zusätzlicher Selbstwechselwirkung diskretisiert

werden, d.h. $S \to S_\Gamma$. In jedem Fall soll gelten

$$S_\Gamma[\phi] \xrightarrow[a\to 0]{} S[\phi].$$

Diese Vorschrift bestimmt die Gitterwirkung jedoch nicht eindeutig. Im Allgemeinen existieren viele verschiedene Gitterwirkungen, welche den gleichen Kontinuumslimes besitzen. Dies muss aber nicht als Nachteil angesehen werden, sondern ermöglicht die Verwendung von optimierten Gitterwirkungen, welche sich dem Kontinuumslimes schneller nähern. Die Wirkung der komplex-skalaren Theorie mit quartischer Selbstwechselwirkung S_H ist im Kontinuum gegeben durch

$$S_H[\phi] = \int d^d x (\partial_\mu \phi)(\partial_\mu \phi^*) + m^2 \phi\phi^* + g(\phi\phi^*)^2.$$

Eine dazu entsprechende Gitterwirkung kann nun mittels Ersetzung der partiellen Ableitungen und Integrale definiert werden.

$$S_{H,\Gamma}[\phi] = \int_\Gamma d^d x (\Delta_\mu \phi(x))(\Delta_\mu \phi^*(x)) + m^2 \phi(x)\phi^*(x) + g(\phi(x)\phi^*(x))^2 \tag{1.19}$$

Durch die Diskretisierung geht das Funktionalintegral in ein gewöhnliches Mehrfachintegral über

$$\mathcal{D}\phi \to \prod_n d\phi(na). \tag{1.20}$$

Anstelle des dimensionsbehafteten Ortsvektors $x = (x_1, \ldots, x_d)$ werden nun die ganzzahligen Tupel $n = (n_1, \ldots, n_d)$ mit $x = na$ verwendet. Der Index Γ zur Kennzeichnung der Gittergrößen wird im Folgenden weggelassen. Die Gitterwirkung 1.19 lässt sich in für numerische Berechnungen zugänglicher Form durch dimensionlose Größen ausdrücken:

$$S_H[\phi] = \sum_n \left(-\kappa \sum_\mu \Re(\phi_n \phi^*_{n+e_\mu}) + \phi_n \phi^*_n + \lambda(\phi_n \phi^*_n - 1)^2 - \lambda \right). \tag{1.21}$$

Hierbei bezeichnet $\Re(c)$ den Realteil einer komplexen Variablen c und es gilt:

$$\begin{aligned} \phi_n &= \frac{\sqrt{2} a^{d/2-1}}{\sqrt{\kappa}} \phi(na) \\ 1 - 2\lambda &= \frac{1}{2}(2d + a^2 m^2)\kappa \\ \kappa^2 &= \frac{a^{d-4} 4\lambda}{g}. \end{aligned}$$

Der Gitterabstand a tritt in dieser Formulierung nicht mehr explizit auf.

1.3.2 Eichfelder auf dem Gitter

Die Eichinvarianz einer skalaren Theorie lässt sich durch Substitution der partiellen Ableitungen durch kovariante Ableitungen sicherstellen (siehe Abschnitt 1.2.1). Auf dem Gitter wird dieser Weg durch die Forderung nach strikter Eichinvarianz, d.h. Eichinvarianz in allen Ordnungen des Gitterabstandes erschwert. Im Weiteren werden daher Paralleltransporter diskutiert. Mit ihrer Hilfe lässt sich eine kovariante Ableitung definieren, welche die Eichinvarianz strikt erfüllt.

Sei ein Feld Φ als Abbildung des Raum-Zeit-Gitters M nach $M \times \mathbb{C}$ gegeben. Das skalare Higgsfeld ϕ ist durch die Projektion von Φ auf die zweite Komponente, d.h. $\phi = \mathrm{pr}_2 \circ \Phi$, gegeben. Weiterhin transformiere sich das Feld ϕ nach einer eindimensionalen Darstellung D der Gruppe $U(1)$

$$\phi(x) \to \phi'(x) = D(\Lambda(x))\phi(x).$$

Diese Darstellungen sind von der Form

$$\Lambda(x) = e^{-i\alpha} \to D(\Lambda(x)) = e^{-iQ\alpha}, \quad Q \in \mathbb{Z}. \tag{1.22}$$

Q werde als Ladung bezeichnet. Da $\phi(x)$ und $\phi(y)$ für $x \neq y$ Elemente verschiedener Kopien des Raumes $\mathbb{C}$ darstellen, sind Produkte der Form $\phi(x)\phi(y)$ im Allgemeinen nicht sinnvoll. Um Felder an verschiedenen Punkten der Raum-Zeit vergleichen zu können, ist es daher nötig, beide zu einem gemeinsamen Punkt zu transportieren. Diese Ausgabe kommt dem Paralleltransporter zu, d.h. sei $\phi(x) \in \mathbb{C}_x$ und $\phi(y) \in \mathbb{C}_y$, dann definiert der Paralleltransporter $U(s_{x,y})$ für jede Kurve $s_{x,y}$ der Raum-Zeit von x nach y eine lineare Abbildung von $\mathbb{C}_x \to \mathbb{C}_y$. Für die Transporter gelte weiterhin [24]

- $U(\emptyset) = \mathbb{1}$, hierbei bezeichne $\emptyset$ einen Weg der Länge null.
- $U(r)U(s) = U(rs)$, wobei der Weg rs als Komposition von r und s definiert wird.
- $U(-s) = U^\dagger(s)$, wobei $-s$ durch $-s_{x,y} = s_{y,x}$ gegeben ist.

Aus diesen zusätzlichen Forderungen folgt aus Konsistenzgründen sofort die Transformationseigenschaft des Transporters unter Eichtransformationen

$$U(s_{x,y}) \to U'(s_{x,y}) = \Lambda(y)U(s_{x,y})\Lambda^{-1}(x).$$

Die kovariante Ableitung betrachtet Differenzen zwischen nahe benachbarten Punkten x und $x + \Delta x$, wobei die dortigen Feldwerte in einen gemeinsamen Punkt transportiert werden. Für Kurven zwischen x und $x + \Delta x$, die nicht wesentlich von einer kürzesten (geodätischen) abweichen, findet man im Grenzfall $\Delta x \to dx$

$$U(s_{x,x+dx}) = 1 - iqA_\mu(x)dx_\mu \tag{1.23}$$

mit den infinitesimalen Erzeugenden A_μ. Die Verwendung der Bezeichnung A_μ wird sogleich verständlich, wenn man das kovariante Differential von ϕ definiert:

$$D\phi(x) = D_\mu\phi(x)dx_\mu := D(U(s_{x+dx,x}))\phi(x + dx) - \phi(x).$$

Damit ergibt sich die kovariante Ableitung im Kontinuumslimes zu

$$D_\mu\phi(x) = (\partial_\mu + iqQA_\mu(x))\phi(x).$$

Dies deckt sich mit der Definition der kovarianten Ableitung aus Abschnitt 1.2.1. Sei nun $\Lambda(x) = e^{-i\alpha(x)}$, dann folgt mithilfe des Transformationsgesetzes des Paralleltransporters für die Erzeugenden A_μ

$$A_\mu(x) \to A'_\mu(x) = A_\mu(x) + \frac{1}{q}\partial_\mu\alpha(x).$$

Im Kontinuumslimes entspricht die Verwendung von Transportern der Substitution partieller Ableitungen durch kovariante Ableitungen. Den Transportern als globale Objekte stehen die Eichfelder als infinitesimale Erzeugende gegenüber. Auf einem Gitter mit *endlichem* Gitterabstand lässt sich daher strikte Eichinvarianz durch Verwendung von Transporten anstelle der aus Eichfelder konstruierten kovarianten Ableitungen garantieren. Die Notwendigkeit von Transportern folgt demnach logisch aus differentialgeometrischer Sicht. Die Transformationseigenschaften der Felder und Transporter bedingen, dass Ausdrücke der Form

$$\Re(\phi^*(x)D(U(s_{y,x}))\phi(y))$$

reell und eichinvariant sind. Damit lässt sich (1.21) in eichinvariante Form bringen. Aufgrund (1.23) können Transporter für beliebige Kurven durch Schwinger-Linienintegrale ausgedrückt werden.

$$U(s_{x,y}) = e^{-iq\int_s A_\mu(z)dz_\mu}$$

Um den elementaren Transporter (Linkvariable) zu definieren, werde nun der kürzeste Weg $s_{x,y}$ zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten $x, y = x + ae_\mu$ in μ-Richtung betrachtet. Der elementare Transporter dieses Links ist dann durch

$$U(s_{x,y}) = e^{-iqa\tilde{A}_\mu(x)}$$

gegeben. Der Integralmittelwert $\tilde{A}_\mu$ (μ fest)

$$\tilde{A}_\mu(x) = \frac{1}{a}\int_s A_\mu(z)dz_\mu$$

entspricht im Kontinuum dem Eichfeld. Alternativ kann man ein Gittereichfeld A'_μ basierend auf der Analogie zu (1.23) einführen.

$$U(s_{x,y}) = 1 - iqaA'_\mu$$

Die Abstände werden im Folgenden in Gittereinheiten gemessen und Felder als Funktionen einheitenloser Gitterabstände betrachtet.

Die Dynamik des freies Eichfeldes wird im Kontinuum durch (1.16) beschrieben. Diese Wirkung kann auf das Gitter in zwei verschiedenen Wegen übertragen werden. In der kompakten Formulierung werden die Linkvariablen durch „Linkwinkel“ $\theta_{n,\mu} \in [-\pi, \pi)$ dargestellt.

$$U_\mu(n) = e^{-i\theta_{n,\mu}} \tag{1.24}$$

Der Träger des Linkwinkels $\theta_{n,\mu}$ ist der Link (n, μ) (Abbildung 1.1). Linkwinkel hängen auf einfache Weise mit der Gitterversion des Eichfeldes zusammen:

$$\theta_{n,\mu} = aq\tilde{A}_\mu(n) \tag{1.25}$$

$$\sin(\theta_{n,\mu}) = aqA'_\mu(n). \tag{1.26}$$

Im Kontinuumslimes entsprechen sowohl $\tilde{A}_\mu$ als auch A'_μ dem Eichfeld A_μ. In der nichtkompakten Formulierung wird der Feldstärketensor direkt diskretisiert, d.h. ohne Transporter zu verwenden. Die direkt vom Eichfeld abgeleiteten Linkwinkel sind dann nicht mehr beschränkt. Beide Formulierungen sind im Grenzfall $a \to 0$ äquivalent, unterscheiden sich jedoch bei endlichen Gittergrößen in der Phasenstruktur und dem Vorhandensein bestimmter topologischer Defekte.

Nun kann (1.16) in einer kompakten Formulierung auf dem Gitter definiert werden. Dabei soll zum einen die strikte Eichinvarianz weiterhin gewahrt sein, zum anderen soll die entsprechende Gitterwirkung nur auf Linkvariablen zurückgreifen. Geschlossene Schleifen aus Produkten von Linkvariablen sind nach obigem Transformationsgesetz der Transporter eichinvariant. Eine kleinste geschlossene Schleife von Links bezeichnet man als Plaquette. Die auf ihr lebende Plaquettevariable

$$U_{\mu\nu}(n) := U_\nu^\dagger(n) U_\mu^\dagger(n+e_\nu) U_\nu(n+e_\mu) U_\mu(n)$$

ist eichinvariant. Außerdem gilt nach Definition

$$U_{\mu\nu}(n) = e^{-iqa^2 F_{\mu\nu}(n)}.$$

$F_{\mu\nu}(n)$ stellt die diskretisierte Version des elektromagnetischen Feldstärketensors dar.

$$F_{\mu\nu}(n) = \frac{1}{a}\left[(\tilde{A}_\nu(n+e_\mu) - \tilde{A}_\nu(n)) - (\tilde{A}_\mu(n+e_\nu) - \tilde{A}_\mu(n))\right] \tag{1.27}$$

Die Wilson-Wirkung, welche die Dynamik des Eichfeldes auf dem Gitter beschreibt, ist als Summe über Plaquetten P definiert

$$\begin{aligned} S_G[U] :=& \beta \sum_P \left[1 - \frac{1}{2}(U_P + U_P^\dagger)\right] \\ =& \beta \sum_n \sum_{\mu<\nu} \left[1 - \frac{1}{2}(U_{\mu\nu}(n) + U_{\mu\nu}^\dagger(n))\right]. \end{aligned}$$

Im Kontinuumslimes soll diese Wirkung gegen die Wirkung des freien elektromagnetischen Feldes (1.16) konvergieren. Man sieht leicht, dass daher

$$\beta = \frac{1}{q^2 a^{4-d}}$$

gelten muss. In drei Dimensionen ist die Kopplungsgröße β demnach invers proportional zum Gitterabstand. Verwendet man die Darstellung (1.24) der elementaren Transporter, so lässt sich zu jeder Plaquettevariablen ein Plaquettewinkel $\theta_{n,\mu\nu} \in [-\pi, \pi)$ definieren (Abbildung 1.1)

$$U_{\mu\nu}(n) = e^{-i\theta_{n,\mu\nu}}$$

mit

$$\theta_{n,\mu\nu} = [\theta_{n,\mu} + \theta_{n+e_\mu,\nu} - \theta_{n,\nu} - \theta_{n+e_\nu,\mu}]_{2\pi}. \tag{1.28}$$

Die Schreibweise $[\ldots]_{2\pi}$ soll andeuten, dass der Klammerinhalt modulo 2π berechnet wird. Die Wilson-Wirkung S_G kann deshalb auch in der Form

$$S_G[U] = \beta \sum_P \left[1 - \cos\theta_P^{\text{plaq}}\right] = \beta \sum_n \sum_{\mu<\nu} [1 - \cos\theta_{n,\mu\nu}] \tag{1.29}$$

geschrieben werden. Um die Wilson-Wirkung in Pfadintegralen zu verwenden, muss auch hier ein Maß definiert werden. Ein unter der Gruppenwirkung invariantes Maß ist durch

$$\mathcal{D}U = \prod_{n,\mu} d\theta_{n,\mu}$$

gegeben.

1.3.3 Das abelsche Higgsmodell auf dem Gitter

Das Higgsfeld lässt sich in Polarkoordinaten durch Betrag und Winkel ausdrücken.

$$\phi_n = \rho_n e^{i\varphi_n}, \quad \varphi \in [-\pi, \pi). \tag{1.30}$$

In dieser Parametrisierung und unter Verwendung der Definitionen (1.22) sowie (1.24) haben Eichtransformationen die Gestalt

$$\begin{aligned} \varphi_n &\to [\varphi_n - Q\alpha_n]_{2\pi} \\ \theta_{n,\mu} &\to [\theta_{n,\mu} - \alpha_n + \alpha_{n+e_\mu}]_{2\pi}. \end{aligned} \tag{1.31}$$

Im vorherigen Abschnitt wurden alle Wirkungsbestandteile von (1.18) auf dem Gitter in eichinvarianter Weise definiert. In kompakter Formulierung gilt für den Bestandteil S_H

$$S_H[\phi] = \sum_n \left(-\kappa \sum_\mu \Re(\phi^*_{n+e_\mu} D(U_\mu(n))\phi_n) + \phi_n\phi^*_n + \lambda(\phi_n\phi^*_n - 1)^2 - \lambda \right) \tag{1.32}$$

$$= \sum_n \left(-\kappa \sum_\mu \rho_n\rho_{n+e_\mu} \cos(\varphi_{n+e_\mu} + Q\theta_{n,\mu} - \varphi_n) + \rho_n^2 + \lambda(\rho_n^2 - 1)^2 - \lambda \right). \tag{1.33}$$

Die Wirkung des abelschen Higgsmodells S_{AHM} ergibt sich als Summe von S_H und S_G. Konstante Terme in der Wirkung haben keinen Einfluß auf Erwartungswerte und werden daher weggelassen.

$$\begin{aligned} S_{AHM} = &-\beta \sum_P \cos\theta_P^{\text{plaq}} - \kappa \sum_n \sum_\mu \rho_n\rho_{n+e_\mu} \cos(\varphi_{n+e_\mu} + Q\theta_{n,\mu} - \varphi_n) \\ &+ \sum_n (\rho_n^2 + \lambda(\rho_n^2 - 1)^2) \end{aligned} \tag{1.34}$$

Die Zustandsumme ist gegeben als

$$Z_{AHM} = \int_{-\pi}^{\pi} \prod_n \frac{d\varphi_n}{2\pi} \int_0^\infty \prod_n \rho_n d\rho_n \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{n,\mu} \frac{d\theta_{n,\mu}}{2\pi} \exp(-S_{AHM}),$$

wobei im Vergleich zu (1.20) die Jacobi-Determinante durch den Übergang zu Polarkoordinaten zu berücksichtigen ist und aus Normierungsgründen Produkte von 2π hinzugekommen sind. Die fundamentale Darstellung des Higgsmodells ($Q = 1$) bezeichnet man auch als Higgsmodell mit einfach geladenen Materiefeldern. Analog spricht man von mehrfach geladenen Materiefeldern im Fall $Q > 1$. In der vorliegenden Arbeit werden die Spezialfälle $Q = 1$ und $Q = 2$ betrachtet. Obwohl sie eine formale Ähnlichkeit aufweisen, unterscheiden sie sich aufgrund des unterschiedlichen Kopplungsterms in ihrem Phasenverhalten. Der London-Limes wird durch $\lambda \to \infty$ definiert und erwirkt ein „Einfrieren“ der radialen Freiheitsgrade ρ des Higgs-Feldes. Die Phasenstruktur bei kleinem λ unterscheidet sich sowohl quantitativ als auch qualitativ von der Phasenstruktur im Limes $\lambda \to \infty$.

Kapitel 2

Numerische Simulationen

2.1 Monte-Carlo-Methoden

Aus dem Blickfeld der Quantenfeldtheorie lassen sich Vakuumerwartungswerte von Operatoren durch ein Pfadintegral ausdrücken. Weiterhin wurde dargelegt, dass sich derartige Integrale statistisch beschreiben lassen, nämlich als Momente einer Verteilung, die wesentlich durch einen Boltzmann-Faktor e^{-S} bestimmt ist. Der Erwartungswert einer statistischen Größe X lässt sich bei bekannter Verteilung p aus Summe (bzw. Integral[1]) über alle Zustände (Konfigurationen) c eines Zustandsraumes $\mathcal{C}$ berechnen.[2]

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_{c \in \mathcal{C}} p(c) X(c)}{\sum_{c \in \mathcal{C}} p(c)} \tag{2.1}$$

Der Nenner stellt auch bei nicht-normierter Verteilung p sicher, dass $\langle 1 \rangle = 1$ gilt. In diesem Abschnitt werden Verfahren vorgestellt, derartige Erwartungswerte effektiv zu berechnen. Diese Verfahren werden als Monte-Carlo Verfahren bezeichnet, da sie als wesentliches Merkmal (Pseudo-)Zufallszahlen [25] verwenden. Einen Grund, der den Gebrauch von Monte-Carlo-Verfahren nahelegt, liefert das folgende Beispiel:

Ein d-dimensionales Ising-System sei auf einem Gitter mit L^d Gitterplaetzen definiert. Jedem Gitterplatz wird ein Freiheitsgrad zugeordnet, der die Werte 1 oder -1 einnehmen kann. Um einen Erwartungswert exakt zu berechnen, müssen nun $2^{(L^d)}$ Zustände addiert werden. Selbst ein recht kleines 10x10 Gitter in 2 Dimensionen führt zu 2^{100} (!) Summanden. Ein heutiger Hochleistungsrechner bräuchte für die Summation über alle Zustände mehr als 10^{85}s, d.h. ca. 10^{77} Jahre.

Die grundlegende Schwierigkeit besteht demnach darin, dass die Anzahl der Zustände mit der Systemgröße exponentiell anwächst. Bei hinreichenden Systemgrößen sind Erwartungswerte so nicht mehr durch vollständige Enumeration bestimmbar. Man ist daher auf Näherungsverfahren angewiesen. Monte-Carlo-Verfahren bestimmen Folgen (Stichproben) $\tilde{C}$ von Konfigurationen durch sukzessives Auswählen gemäß einer Verteilung ρ von Konfigurationen aus C. Der Erwartungswert der statistischen Größe X wird dann

[1] Numerisch werden Integrale durch Diskretisierung des Zustandsraumes wieder in Summen überführt.

[2] In der Wahrscheinlichkeitstheorie spricht man indessen von Elementarereignissen und Ereignisräumen, hier soll allerdings von der physikalischen Sprechweise Gebrauch gemacht werden.

durch das gewichtete Mittel über den Zuständen der Stichprobe

$$\langle X \rangle \approx \hat{X} := \frac{\sum_{c \in \tilde{C}} \rho^{-1}(c) p(c) X(c)}{\sum_{c \in \tilde{C}} \rho^{-1}(c) p(c)} \tag{2.2}$$

abgeschätzt. Übliche (nicht-normierte) Verteilungen stellen $\rho \equiv 1$ (einfache Stichprobenwahl bzw. *simple sampling*) und $\rho = p$ (gewichtete Stichprobenwahl bzw. *importance sampling*) dar. Im ersten Fall werden die Konfigurationen gleichverteilt aus dem Zustandsraum ausgewählt. Da die Wahrscheinlichkeit vieler Zustände sehr gering ist, bestimmt ein kleiner Anteil der gewählten Zustände den Erwartungswert, während die restlichen gewählten Zustände nur sehr wenig zum Ergebnis beitragen. Allerdings lässt sich eine derartige Auswahl oft leicht bewerkstelligen, wodurch die einfache Stichprobenwahl für bestimmte Aufgabenstellungen eine wichtige Rolle spielt, z.B. bei der Analyse von Kettenpolymeren und bei überkreuzungsfreien Wegen (*self avoiding walks*).

Bei einer gewichteten Stichprobenwahl hingegen werden die Konfigurationen nach der gegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung p ausgewählt. Somit wird effektiv eine Summation über Zustände, die nur gering den Erwartungswert beeinflussen, verhindert. Als Spezialfall von (2.2) ergibt sich jetzt der Schätzer für den Erwartungswert aus dem Mittelwert der Observablen für die Zustände der Folge $\tilde{C}$. Obwohl die gewichtete Stichprobenwahl bei gleicher Größe der Stichproben wesentlich genauere Schätzwerte bietet, ist es in der Praxis nicht immer leicht, Zustände gemäß einer Verteilung p effektiv aus dem Zustandsraum auszuwählen. In Abhängigkeit von p existieren verschiedene Möglichkeiten. Falls die Verteilung eine analytische Stammfunktion besitzt, so lässt sich mittels der Inversionmethode die gewünschte Verteilung aus einer uniformen Verteilung erzeugen [25]. In anderen Fällen führt eine Koordinatentransformation zum Ziel, so z.B. bei der Gaußverteilung, vgl. Abschnitt 2.1.3. Diese Verfahren überführen letztlich die gewichtete Stichprobenwahl in eine einfache Stichprobenwahl bezüglich transformierter Variablen.

Es bleibt zu klären, wie man bei Verteilungen vorgeht, bei denen derartige Transformationen nicht möglich sind. Eine Methode besteht darin, die Verteilung dynamisch zu generieren, wobei Ereignisse *abhängig* voneinander ausgewählt werden. Mathematisch definieren solche Algorithmen Markov-Prozesse, auf die im nächsten Abschnitt kurz eingegangen werden soll. Ein darauf aufbauender Algorithmus wurde von Metropolis et al. [26] vorgestellt. Für die numerischen Simulationen wurden dieser Algorithmus und das in einem weiteren Abschnitt zu erläuternde Wärmebad-Verfahren verwendet. Die Abhängigkeit der einzelnen Ereignisse muss bei einer Fehlerbetrachtung natürlich berücksichtigt werden. Darauf wird in Abschnitt 2.2 einzugehen sein. Anschließend werden Umgewichtungsverfahren (*Reweighting*) vorgestellt, welche es erlauben, gemessene Daten effektiv zu verwenden.

2.1.1 Markov-Prozesse

Ein stochastischer Prozess ist eine Abfolge von Zuständen, bei der das Auftreten eines bestimmten Zustandes nicht deterministisch aus anderen Zuständen abgeleitet werden kann. Ein homogener Markov-Prozess ist ein stochastischer Prozess, bei dem die Übergangswahrscheinlichkeit des Systems den Zustand c_2 zu erreichen, nur von dem vorherigen Zustand c_1 und damit nicht explizit von der Zeit (Homogenität) und von Zuständen des Systems zu früheren Zeiten abhängt. Wenn der aktuelle Zustand und alle Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen Zuständen bekannt sind, kann somit die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten eines beliebigen zukünftigen Zustandes berechnet werden, d.h. ohne Kenntnis der Vergangenheit. In dieser

Sprechweise wurde von diskreten Zeitpunkten ausgegangen. Derartige Markov-Prozesse bezeichnet man als Markov-Ketten. Es lässt sich zeigen [27], dass diese Prozesse einer *Master*-Gleichung genügen:

$$P(c, t+1) - P(c, t) = \sum_{c'} [P(c', t) P(c' \to c) - P(c, t) P(c \to c')].$$

Hierbei bezeichne $P(c, t)$ die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System zum Zeitpunkt t im Zustand c befindet. $P(c' \to c)$ gibt die bedingte Wahrscheinlichkeit an, dass das System zum Zeitpunkt t den Zustand c einnimmt, wenn es sich zum vorhergehenden Zeitpunkt $t-1$ im Zustand c' befand. Aufgrund der angenommenen Homogenität der Markov-Ketten gilt dies für alle Zeiten t. Einer stationären Wahrscheinlichkeitsverteilung ab einem Zeitpunkt t_0 entspricht

$$P(c, t+1) - P(c, t) = 0, \quad \forall c \in C, \ \forall t \geq t_0.$$

In einer stationären Verteilung $P(c, t) \to P_E(c)$ gilt demnach für jeden Zustand c

$$\sum_{c'} [P_E(c') P(c' \to c) - P_E(c) P(c \to c')] = 0. \tag{2.3}$$

Um im Gleichgewicht eine gewünschte Verteilung P_E zu erhalten, werden folgende Forderungen an die Übergangswahrscheinlichkeiten gestellt:

1. Irreduziblität, d.h. die Wahrscheinlichkeit, einen beliebigen Zustand von einem anderen beliebigen Zustand zu erreichen, ist für (mindestens) eine bestimmte Anzahl von Markov-Schritten von Null verschieden.

2. Detailliertes Gleichgewicht (*detailed balance*), d.h. $P_E(c') P(c' \to c) - P_E(c) P(c \to c') = 0$. Diese hinreichende Bedingung für die Stationarität ist eine stärkere Forderung als (2.3).

Es lässt sich zeigen, dass unter diesen Voraussetzungen jede anfängliche Wahrscheinlichkeitsverteilung gegen die gewünschte Verteilung P_E konvergiert und stationär ist [28].

2.1.2 Metropolis-Algorithmus

Der von Metropolis et al. entwickelte Algorithmus soll in diesem Abschnitt zunächst in allgemeiner Form vorgestellt und anschließend auf das abelsche Higgsmodell angewendet werden. Um eine Verteilung der Form $P_E(c) \propto e^{-S(c)}$ zu erzeugen, genügt es nach obigen Abschnitt zu zeigen, dass die Bedingungen von Irreduzibilität und detailed balance erfüllt sind. Letztere liest sich in diesem Fall als:

$$e^{-S(c)} P(c \to c') = e^{-S(c')} P(c' \to c).$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit $P(c \to c')$ zwischen zwei Zuständen c, c' wird im Metropolis-Algorithmus zweistufig berechnet.

1. Vorschlag: Zunächst wird zu einem gegebenen Zustand c ein Folgezustand c' mit einer Wahrscheinlichkeit P_0 derart ausgewählt, dass gilt

$$P_0(c \to c') = P_0(c' \to c). \tag{2.4}$$

2. Akzeptanzkontrolle: In einem zweiten Schritt wird der vorgeschlagene Folgezustand tatsächlich akzeptiert oder verworfen. Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit ist durch

$$P_1(c \to c') = \min[1, e^{S(c)-S(c')}]$$

gegeben.

Man kann sich leicht davon überzeugen, dass die detailed balance erfüllt ist. Sei $S(c') \leq S(c)$, dann gilt jedenfalls

$$P(c' \to c) = P_0(c' \to c)e^{S(c')-S(c)} = P(c \to c')e^{S(c')-S(c)}.$$

Falls jedoch $S(c') > S(c)$, so

$$P(c \to c') = P_0(c' \to c)e^{S(c)-S(c')} = P(c' \to c)e^{S(c)-S(c')}.$$

Ob die Forderung der Irreduziblität erfüllt ist, muss gesondert geprüft werden. Eine notwendige Bedingung ist z.B., dass sich die Wirkungen von Ausgangszustand und Folgezustand, $S(c)$ und $S(c')$, unterscheiden dürfen.

Dieser Algorithmus soll nun auf den vorliegenden Fall adaptiert werden. Im letzten Kapitel wurden zwei Arten von Freiheitsgraden des abelsche Higgsmodells vorgestellt. Zum einen die Freiheitsgrade des Higgsfeldes, welche durch komplexe Zahlen an den Gitterplätzen dargestellt werden, zum anderen die Freiheitsgrade des diskretisierten Eichfeldes, die durch Linkwinkel gegeben sind (siehe 1.3.2). Higgsfreiheitsgrade und Eichfreiheitsgrade werden separat und in alternierender Reihenfolge aktualisiert.

Aktualisierung des Eichfeldes Oft ist es nicht sinnvoll, gleichzeitig eine Änderung in vielen Linkvariablen vorzuschlagen, da die Wirkung oft so stark abnimmt, dass die Akzeptanzwahrscheinlichkeit dieses Änderungsvorschlages gering ist. Die Linkvariablen werden daher der Reihe nach betrachtet und einzeln aktualisiert. Ein vollständiger Durchlauf durch das Gitter wird als Monte-Carlo Sweep bezeichnet. Im ersten Schritt des Metropolis Verfahrens wird ausgehend von dem aktuellen Linkwinkel $\theta_{n,\mu}$ (n, μ fest) eine Änderung vorgeschlagen.

$$\theta_{n,\mu} \to \theta'_{n,\mu} \equiv \theta_{n,\mu} + t\tau \mod 2\pi \tag{2.5}$$

Hierbei ist τ eine Zufallszahl aus dem Intervall $[-0.5, 0.5)$ und $t \in [0, \pi]$ ein Skalenfaktor. Man erkennt, dass bei einer Vorschlagsregel dieser Gestalt die Bedingung (2.4) erfüllt ist. Ein größerer Skalenfaktor führt zwar einerseits zu einer kleineren Akzeptanzwahrscheinlichkeit, anderseits senkt er die Korrelation zwischen aufeinanderfolgenden Linkwinkeln. Üblicherweise wählt man t daher so, dass die Akzeptanzwahrscheinlichkeit ungefähr 50 Prozent beträgt. Der vorgeschlagene Linkwinkel muss in einem zweiten Schritt einer Akzeptanzkontrolle unterzogen werden. Ausgehend von der Wirkung des abelschen Higgsmodells (1.34) sieht man, dass bei einer Aktualisierung des Linkwinkels $\theta_{n,\mu}$ nicht alle Terme zur Wirkungsdifferenz dS beitragen. Anstelle von (1.34) kann man daher folgende Wirkung verwenden:

$$\begin{aligned} S_{\text{loc}}^{\theta_{n,\mu}} &= -\beta \sum_{P,(n,\mu)\in\partial P} \cos(\theta_P^{\text{plaq}}) - \kappa\rho_n\rho_{n+e_\mu}\cos(-\phi_n + Q\theta_{n,\mu} + \phi_{n+e_\mu}) \\ &= -\beta \sum_{\nu\neq\mu} [\cos(\theta_{n,\mu} + a) + \cos(\theta_{n,\mu} + b)] - \kappa\rho_n\rho_{n+e_\mu}\cos(-\phi_n + Q\theta_{n,\mu} + \phi_{n+e_\mu}) \end{aligned} \tag{2.6}$$

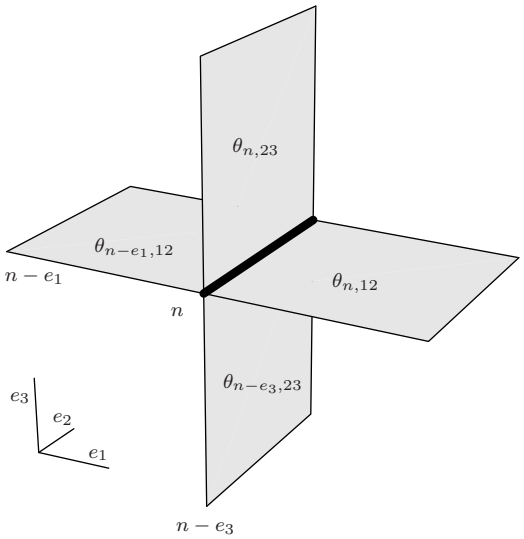


Abbildung 2.1: Links und Plaquetten auf einem 3D-Gitter. Eine Änderung des Links $(n, 2)$ wirkt sich auf vier umgebende Plaquetten aus.

mit

$$\begin{aligned} a &= \theta_{n+e_\mu,\nu} - \theta_{n,\nu} - \theta_{n+e_\nu,\mu} \\ b &= -\theta_{n-e_\nu,\mu} - \theta_{n-e_\nu+e_\mu,\nu} + \theta_{n-e_\nu,\nu}. \end{aligned}$$

Der erste Term von S_{loc} beschreibt eine Summe über alle Plaquetten, bei denen der Link (n, μ) im Rand vorkommt (Abbildung 2.1). Durch Umschreiben der Wirkungsdifferenz $dS = S_{\text{loc}}^{\theta'_{n,\mu}} - S_{\text{loc}}^{\theta_{n,\mu}}$ lässt sich die Anzahl der numerisch sehr zeitaufwändigen Aufrufe trigonometrischer Funktionen erheblich reduzieren (von 8 auf 5 pro Akzeptanztest). Somit erhält man

$$\begin{aligned} dS =& 2\beta \sin(w) \sum_{\nu \neq \mu} \left[\sin(v_1) + \sin(v_2)\right] \\ & - \kappa \rho_n \rho_{n+e_\mu} \left[\cos(-\phi_n + Q\theta'_{n,\mu} + \phi_{n+e_\mu}) - \cos(-\phi_n + Q\theta_{n,\mu} + \phi_{n+e_\mu})\right], \end{aligned}$$

wobei a, b wie oben definiert sind, sowie

$$\begin{aligned} v_1 &= a + \frac{\theta'_{n,\mu} + \theta_{n,\mu}}{2} \\ v_2 &= b + \frac{\theta'_{n,\mu} + \theta_{n,\mu}}{2} \\ w &= \frac{\theta'_{n,\mu} - \theta_{n,\mu}}{2} \end{aligned}$$

gilt.

Aktualisierung des Higgsfeldes In den meisten Messungen wurde das Higgsfeld durch einen Wärmebad-Algorithmus aktualisiert, auf den im nächsten Abschnitt genauer eingegangen wird. In gewissen Parameterbereichen war dies aber nicht möglich und der Metropolis-Algorithmus kam stattdessen zur

Anwendung. Hierbei wurden Winkel φ und Betrag ρ des Higgsfeldes $\phi = \rho e^{i\varphi}$ getrennt voneinander aktualisiert. Der Änderungsvorschlag des Winkel φ_n ergibt sich als

$$\varphi_n \to \varphi_n' \equiv \varphi_n + f\chi \mod 2\pi.$$

$f \in [0, \pi]$ ist ein Skalenfaktor, $\chi \in [-0.5, 0.5]$ eine Zufallszahl, vgl. (2.5). Für die Akzeptanzkontrolle muss die Wirkungsdifferenz

$$\begin{aligned} dS = &- \kappa \sum_{n,\mu} \rho_n \rho_{n+e_\mu} \cos(-\varphi_n' + Q\theta_{n,\mu} + \varphi_{n+e_\mu}') \\ &+ \kappa \sum_{n,\mu} \rho_n \rho_{n+e_\mu} \cos(-\varphi_n + Q\theta_{n,\mu} + \varphi_{n+e_\mu}) \end{aligned}$$

berechnet werden. Wie im Fall der Eichfeldaktualisierung lässt sich auch dieser Ausdruck etwas vereinfachen. Nach analoger Rechnung erhält man

$$dS = 2\kappa\rho_n \sin(w) \sum_\mu \left[\rho_{n+e_\mu} \sin(v_1) + \rho_{n-e_\mu} \sin(v_2)\right] \tag{2.7}$$

mit

$$\begin{aligned} v_1 &= -Q\theta_{n,\mu} - \varphi_{n+e_\mu} + \frac{\varphi_n' + \varphi_n}{2} \\ v_2 &= Q\theta_{n-e_\mu,\mu} - \varphi_{n-e_\mu} + \frac{\varphi_n' + \varphi_n}{2} \\ w &= \frac{\varphi_n' - \varphi_n}{2}. \end{aligned}$$

Um die Korrelation zwischen den Zuständen der Markov-Kette zu verringern, werden oft zusätzliche, mikrokanonische Aktualisierungsschritte verwendet, welche die Wirkung nicht verändern. Der Vorfaktor von (2.7) ergibt sofort die triviale Lösung $\varphi_n' \equiv \varphi_n \mod 2\pi$. Die nicht-trivialen Lösung(en) folgen dann aus der Bedingung

$$\sum_\mu \left[\rho_{n+e_\mu} \sin(v_1) + \rho_{n-e_\mu} \sin(v_2)\right] \stackrel{!}{=} 0.$$

Der allgemeine Ansatz $\varphi_n' \equiv \varphi_n + 2\alpha \mod 2\pi$ ergibt

$$\begin{aligned} v_1 &= -Q\theta_{n,\mu} - \varphi_{n+e_\mu} + \varphi_n^{old} + \alpha = \hat{v}_1 + \alpha \\ v_2 &= Q\theta_{n-e_\mu,\mu} - \varphi_{n-e_\mu} + \varphi_n^{old} + \alpha = \hat{v}_2 + \alpha. \end{aligned}$$

Aus obiger Bedingung folgt somit

$$\tan(\alpha) = -\frac{\sum_\mu \left[\rho_{n+e_\mu} \sin(\hat{v}_1) + \rho_{n-e_\mu} \sin(\hat{v}_2)\right]}{\sum_\mu \left[\rho_{n+e_\mu} \cos(\hat{v}_1) + \rho_{n-e_\mu} \cos(\hat{v}_2)\right]}.$$

α eindeutig im Bereich $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ gegeben. Die nicht-triviale Lösung $\varphi_n' \equiv \varphi_n + 2\alpha \mod 2\pi$ ist daher eindeutig.

Die Trennung des komplexen Higgsfeldes in Winkel und Betrag entspricht einem Übergang zu Polarkoordinaten, d.h.

$$d\phi \to d\varphi \rho d\rho.$$

Bei der Aktualisierung der Higgslänge kann dies entweder durch eine entsprechende Verteilung bei der Auswahl oder durch eine veränderte Wirkung berücksichtigt werden. Hier wurde letzterer Weg gewählt. Desweiteren stellt sich die Frage, wie man mit einer vorgeschlagenen negativen Higgslänge umgeht. Eine Möglichkeit besteht darin, derartige Vorschläge zurückzuweisen und den alten Wert der Higgslänge zu behalten. Andererseits kann man als Vorschlag auch den Absolutbetrag verwenden. Es zeigt sich, dass in beiden Fällen die *detailed balance* gilt und somit Vorschläge für ρ aus einer Gleichverteilung ausgewählt werden. Es wurde demnach die Vorschlagsregel

$$\rho_n \to \rho'_n = |\rho_n + r\xi|$$

verwendet. $r \in [0, \infty)$ bzw. $\xi \in [-0.5, 0.5)$ bezeichnen Skalenfaktor bzw. Zufallszahl. Die Wirkungsdifferenz ergibt sich zu

$$\begin{aligned} dS = &-(\rho'_n - \rho_n)\kappa \sum_\mu \left[\rho_{n+e_\mu} \cos(\varphi_n - Q\theta_{n,\mu} - \varphi_{n+e_\mu}) + \rho_{n-e_\mu} \cos(\varphi_n + Q\theta_{n-e_\mu,\mu} - \varphi_{n-e_\mu})\right] \\ &+ \left((\rho'_n)^2 - (\rho_n)^2\right)\left(1 + \lambda((\rho'_n)^2 + (\rho_n)^2 - 2)\right) - \log(\rho'_n/\rho_n). \end{aligned} \tag{2.8}$$

2.1.3 Wärmebad-Algorithmus

Anstelle des eben beschriebenen Metropolis-Algorithmus kam für die Aktualisierung des Higgsfeldes oft eine Methode zum Einsatz, die in [29] für das SU(2) Higgsmodell beschrieben und hier auf den abelschen Fall adaptiert wurde. Wird ein bestimmer Freiheitsgrad f aktualisiert, so lässt sich die Wirkungsänderung als Differenz einer lokalen Wirkung $S_{\text{loc}}(f; U(f))$ beschreiben, welche durch die Umgebung[3] $U(f)$ parameterisiert und eine Funktion des betrachteten Freiheitsgrades ist. In einem Wärmebad-Verfahren entspricht der neue Wert f' des betrachteten Freiheitsgrades einer Zufallsvariablen mit einer Verteilung

$$\propto e^{-S_{\text{loc}}(f'; U(f'))}.$$

Der ursprüngliche Wert hat damit auf die Wahl des neuen Wertes keinen direkten Einfluß. Eine indirekte Beeinflussung, über die Umgebung als Mittler, findet jedoch statt. Im Vergleich zum Metropolis-Algorithmus sind somit aufeinanderfolgende Zustände weniger stark korreliert.

Obwohl das Problem der Generierung einer Verteilung der Form $e^{-S(c)}$ dahingehend vereinfacht wurde, dass stets ein Freiheitsgrad nach dem anderen aktualisiert wird und lediglich eine eindimensionale Verteilung der Form $e^{-S_{\text{loc}}(f)}$ zu erzeugen nötig ist, stellt auch diese Aufgabe oft genug ein Problem dar. Im obig zitierten Wärmebad-Algorithmus wird daher aus der lokalen Wirkung ein Gaußscher Anteil separiert $S_{\text{loc}} = S_{\text{Gauß}} + S_{\text{Rest}}$, da sich eine Gauß-Verteilung numerisch effizient erzeugen lässt. Die zwei wesentlichen Bestandteile des Algorithmus sind:

1. Der Vorschlag für den neuen Wert des Freiheitsgrades wird aus einer Gauß-Verteilung $e^{-S_{\text{Gauß}}}$ erzeugt.

2. Anschließend wird durch einen Metropolis-Akzeptanztest mit der Akzeptanzwahrscheinlichkeit $e^{-S_{\text{Rest}}}$ die korrekte Verteilung $e^{-S_{\text{loc}}}$ sichergestellt.

Nur der erste Schritt entspricht einem reinem Wärmebad-Verfahren. Der betrachtete Algorithmus ist somit im engeren Sinne ein Hybrid-Algorithmus.

[3] Die Wechselwirkungen sind i.d.R. lokal, wodurch die Umgebung durch eine kleine Zahl von benachbarten Freiheitsgraden gegeben ist.

Separation des Gaußschen Anteils Zunächst ist es nötig, die Wirkung etwas umzuschreiben, um den Gaußschen Anteil identifizieren zu können. Komplexe Zahlen $a = a^R + ia^I$ lassen sich durch 2x2 Matrizen der Form

$$a = \begin{pmatrix} a^R & -a^I \\ a^I & a^R \end{pmatrix} \quad a^\dagger = \begin{pmatrix} a^R & a^I \\ -a^I & a^R \end{pmatrix}$$

darstellen. Komplexwertige Higgs- und Eichfelder können nun als derartige Matrizen bzw. gegebenenfalls als Spaltenvektoren $a = (a^R, a^I)^T$ aufgefasst werden. Es gilt:

$$\Re(\phi^\dagger_{n+e_\mu} D(U_\mu(n))\phi_n) = \Re(\phi^\dagger_n D(U^\dagger_\mu(n))\phi_{n+e_\mu}) = \tag{2.9}$$

$$= (\phi^R_n, \phi^I_n) \begin{pmatrix} \cos(Q\theta_{n,\mu}) & -\sin(Q\theta_{n,\mu}) \\ \sin(Q\theta_{n,\mu}) & \cos(Q\theta_{n,\mu}) \end{pmatrix} (\phi^R_{n+e_\mu}, \phi^I_{n+e_\mu})^T \tag{2.10}$$

$$= \phi^T_n R^Q_{n,\mu} \phi_{n+e_\mu}. \tag{2.11}$$

Hier wurde eine verallgemeinerte Rotationsmatrix

$$R^Q_{n,\mu} = \begin{pmatrix} \cos(Q\theta_{n,\mu}) & -\sin(Q\theta_{n,\mu}) \\ \sin(Q\theta_{n,\mu}) & \cos(Q\theta_{n,\mu}) \end{pmatrix}$$

verwendet. Die lokale Wirkung S_{loc} bezüglich einer Änderung des Higgsfeldes am Gitterpunkt n (vgl. (1.32)) ist somit durch

$$S_{\text{loc}}(\phi_n) = -\kappa \sum_\mu \phi^T_n R^Q_{n,\mu} \phi_{n+e_\mu} - \kappa \sum_\mu \phi^T_{n-e_\mu} R^Q_{n-e_\mu,\mu} \phi_n \tag{2.12}$$

$$+ \phi^T_n \phi_n + \lambda[\phi^T_n \phi_n - 1]^2 \tag{2.13}$$

gegeben. Der Ansatz

$$S_{\text{loc}}(\phi_n) = (\phi_n - b_n)^T(\phi_n - b_n) + \lambda(\phi^T_n \phi_n - 1)^2 \tag{2.14}$$

führt mittels Koeffizientenvergleich zu

$$b_n = \frac{\kappa}{2} \sum_\mu \left[R^Q_{n,\mu} \phi_{n+e_\mu} + R^Q_{n-e_\mu,\mu} \phi_{n-e_\mu} \right],$$

wobei von ϕ_n unabhängige Terme weggelassen wurden. Einsetzen von (1.30) ergibt explizit

$$b^R_n = \frac{\kappa}{2} \sum_\mu \left[\rho_{n+e_\mu} \cos(Q\theta_{n,\mu} + \varphi_{n+e_\mu}) + \rho_{n-e_\mu} \cos(Q\theta_{x-e_\mu,\mu} - \varphi_{n-e_\mu}) \right]$$

$$b^I_n = \frac{\kappa}{2} \sum_\mu \left[\rho_{n+e_\mu} \sin(Q\theta_{n,\mu} + \varphi_{n+e_\mu}) - \rho_{n-e_\mu} \sin(Q\theta_{x-e_\mu,\mu} - \varphi_{n-e_\mu}) \right].$$

Die lokale Wirkung kann nun in der Form (2.14) ausgedrückt werden. Der Einfluß der Umgebung wird durch die Koeffizienten b_n erfasst.

Erhöhung der Akzeptanzrate Eine Verbesserung des Algorithmus besteht darin, anstelle von $S_{\text{Gauß}} = (\phi_n - b_n)^T(\phi_n - b_n)$ die Verteilung $S_{\text{Gauß}} = \alpha(\phi_n - \alpha^{-1}b_n)^T(\phi_n - \alpha^{-1}b_n)$ zu verwenden, wobei $\alpha \in \mathbb{R}_+$ zunächst frei gewählt werden kann. Der Ansatz

$$S_{\text{loc}}(\phi_n) = \alpha(\phi_n - \alpha^{-1}b_n)^T(\phi_n - \alpha^{-1}b_n) + \lambda(\phi^T_n \phi_n - v^2_\alpha)^2 - c_\alpha$$

führt auf die endgültige Form der lokalen Wirkung. Der Vergleich

$$(\phi_n - b_n)^T(\phi_n - b_n) + \lambda(\phi_n^T\phi_n - 1)^2 = \alpha(\phi_n - \alpha^{-1}b_n)^T(\phi_n - \alpha^{-1}b_n) + \lambda(\phi_n^T\phi_n - v_\alpha^2)^2 - c_\alpha$$

ergibt

$$\begin{aligned} v_\alpha^2 =& 1 + \frac{\alpha - 1}{2\lambda} \\ c_\alpha =& \frac{b_n^T b_n}{\alpha} + \frac{(\alpha-1)^2}{4\lambda} + \alpha - 1. \end{aligned}$$

Eine Änderung von α bewirkt eine Verschiebung des Maximums der Gauß-Verteilung auf $\phi_n^{max} = \frac{b_n}{\alpha}$. Außerdem wird die Varianz dieser Verteilung beeinflusst. Die (normierte) Akzeptanzwahrscheinlichkeit der aus der Gauß-Verteilung erzeugten Änderungsvorschläge

$$p_{acc}(\phi_n) = \frac{1}{Z_{\text{acc}}} e^{-\lambda(\phi_n^T\phi_n - v_\alpha^2)^2}$$

ist ebenfalls von α abhängig. α sollte möglichst so gewählt werden, dass die Akzeptanzrate, d.h. der Erwartungswert der Akzeptanzwahrscheinlichkeit bei normalverteilten Vorschlägen, maximal wird.

$$\begin{aligned} \langle p_{acc}\rangle =& \frac{1}{Z_{\text{acc}} Z} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} d\phi_n^R d\phi_n^I e^{-\lambda(\phi_n^{R^2} + \phi_n^{I^2} - v_\alpha^2)^2} e^{-\alpha[(\phi_n^R - \alpha^{-1}b_n^R)^2 + (\phi_n^I - \alpha^{-1}b_n^I)^2]} e^{c_\alpha} && (2.15) \\ =& \frac{1}{Z_{\text{acc}} Z} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} d\phi_n^R d\phi_n^I e^{-S_{\text{loc}}\phi_n} && (2.16) \\ =& \max && (2.17) \end{aligned}$$

Für die Normierungen Z, Z_{acc} findet man

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} d\phi_n^R d\phi_n^I e^{-\alpha[(\phi_n^R - \alpha^{-1}b_n^R)^2 + (\phi_n^I - \alpha^{-1}b_n^I)^2]} e^{c_\alpha} = \frac{\pi}{\alpha} e^{c_\alpha}$$

bzw.

$$\begin{aligned} Z_{\text{acc}} =& \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} d\phi_n^R d\phi_n^I e^{-\lambda(\phi_n^{R^2} + \phi_n^{I^2} - v_\alpha^2)^2} = \int_0^{\infty}\int_{-\pi}^{\pi} r dr d\varphi e^{-\lambda(r^2 - v_\alpha^2)^2} \\ =& \pi \int_{-v_\alpha^2}^{\infty} dz e^{-\lambda z^2} = \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{l_\alpha\sqrt{\lambda}}, \quad l_\alpha \in [1,2]. \end{aligned}$$

Da lokale Wirkung S_{loc} gar nicht und Z_{acc} nur schwach von α abhängen, folgt aus der Extremalbedingung (2.17) sofort

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\frac{1}{Z} = \frac{\partial}{\partial\alpha}\frac{\alpha}{\pi}e^{-\alpha} = 0.$$

Dies führt auf

$$1 - \alpha\frac{\partial}{\partial\alpha}c_\alpha = 0$$

und folglich auf eine kubische Gleichung in α

$$2\lambda(b_n^{R^2} + b_n^{I^2}) = \alpha^3 - \alpha^2(1 - 2\lambda) - 2\lambda\alpha.$$

Da die kubische Gleichung in jedem Aktualisierungsschritt zu lösen ist, was einigen numerischen Aufwand bedeutet, wurde eine Näherungslösung verwendet. Für nicht zu große b_n und λ gilt

$$\alpha_{opt} \approx \frac{3 + 2\lambda + \sqrt{1 + 4(1 + 4b_n^{R^2} + 4b_n^{I^2})\lambda(1+\lambda)}}{4(1+\lambda)}.$$

Erzeugung der Gauß-Verteilung Um die Felder ϕ_n^R, ϕ_n^I mit einer Gauß-Verteilung zu erzeugen, geht man zu Polarkoordinaten über.

$$\begin{aligned} d\phi_n^R d\phi_n^I e^{-\alpha[(\phi_n^R-\alpha^{-1}b_n^R)^2+(\phi_n^I-\alpha^{-1}b_n^I)^2]}e^{c_\alpha} =& dxdye^{-\alpha(x^2+y^2)} \\ =& rdrd\varphi e^{-\alpha r^2} = \frac{1}{2\alpha}e^{-u}dud\varphi \end{aligned}$$

Wenn man u mit einer Verteilung $\propto e^{-u}$ generiert[4] und φ uniform aus $[0,\pi)$ erzeugt, so sind die Variablen x, y normalverteilt. Analog erhält man die normalverteilten Felder

$$\begin{aligned} \phi_n^R =& \frac{b_n^R}{\alpha} + \sqrt{\frac{u}{\alpha}}\cos\varphi \\ \phi_n^I =& \frac{b_n^I}{\alpha} + \sqrt{\frac{u}{\alpha}}\sin\varphi \end{aligned}$$

Reflexionsschritte Um Autokorrelationen weiter zu senken, wurden Reflexionsschritte

$$\phi_n \to \phi_n' = 2\frac{b_n}{\alpha} - \phi_n$$

verwendet. Der Gaußsche Anteil ist invariant unter einer derartigen Reflexion, jedoch trifft dies nicht auf die Gesamtwirkung zu. Ein Reflexionsvorschlag wird mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{\text{ref}} = \min[1, e^{S_{\text{loc}}(\phi_n)-S_{\text{loc}}(\phi_n')}]$$

angenommen.

2.2 Statistische Fehleranalyse

Sei $\mathcal{O}$ eine Sequenz (Messreihe) von Zufallsvariablen O_i mit jeweils der gleichen Verteilung. Die Ergodenhypothese besagt, dass im thermodynamischen Gleichgewicht der Mittelwert dieser Zufallsgrößen im Limes unendlicher langer Sequenzen gegen ihren Erwartungswert (Ensemblemittelwert) konvergiert. Für statistisch unabhängige Zufallvariablen O_i innerhalb einer Messreihe folgt die Ergodenhypothese sofort aus dem zentralen Grenzwertsatz. In Markov-Prozessen sind die Werte der Zufallsgröße einer Messreihe im Allgemeinen jedoch korreliert. Die Ergodenhypothese stellt in diesem Fall eine Forderung dar, deren Erfülltheit erst die Möglichkeit der Schätzung von Erwartungswerten bedingt. Allgemein gilt: Der Erwartungswert $\langle O\rangle$ einer Zufallsgröße O wird als Mittel über M *unabhängige* Realisierungen von Messreihen der Länge N im Limes $M \to \infty$ definiert [30]

$$\langle O\rangle = \lim_{M\to\infty}\frac{1}{M}\sum_{j=1}^{M} O^j.$$

Die Varianz einer Zufallsgröße ist durch Erwartungswerte definiert

$$\sigma_O^2 = \langle (O - \langle O\rangle)^2\rangle = \frac{1}{M}\sum_{j=1}^{M}(O^j - \langle O\rangle)^2.$$

[4] Sei r eine gleichverteilte Zufallszahl $\in [0,1)$. Die Variable $u = -\ln(1-r)$ ist dann eine Zufallszahl $\in [0,\infty)$ mit der Verteilung e^{-u}.

Im Speziellen ergeben sich Erwartungswert und Varianz von Einzelmessung O_i bzw. Mittelwert $\bar{O} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} O_i$ durch die Substitutionen $O \to O_i$ bzw. $O \to \bar{O}$.

In der Praxis ist meist eine einzelne Messreihe gegeben. Falls ihre Einzelmessungen O_i unkorreliert[5] sind, lassen sich Erwartungswerte und Varianzen durch Schätzer approximativ bestimmen. Dies ist elementare Statistik und man findet[6]

$$\widehat{\langle O \rangle} = \widehat{\langle \bar{O} \rangle} := \bar{O} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} O_i$$

$$\widehat{\sigma^2_{O_l}} := \overline{(O-\bar{O})^2} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(O_i - \overline{O})^2$$

$$\widehat{\sigma^2_{\bar{O}}} := \frac{1}{N-1}\widehat{\sigma^2_{O_l}}.$$

2.2.1 Autokorrelation

Wenn die Einzelmessungen O_i unkorreliert sind, gilt

$$\sigma^2_{\bar{O}} = \frac{\sigma^2_{O_l}}{N}, \quad l \text{ beliebig}$$

Bei korrelierten Messungen findet man stattdessen [30]

$$\sigma^2_{\bar{O}} = \frac{\sigma^2_{O_l}}{N} 2\tau_{\mathrm{int},O}$$

d.h. effektiv eine Reduktion von N abhängigen Messwerten in $N_{eff} = \frac{N}{2\tau_{\mathrm{int},O}}$ unabhängige Messungen der Zufallgröße O. Die integrierte Autokorrelationszeit $\tau_{\mathrm{int},O}$ lässt sich mittels

$$\tau_{\mathrm{int},O} = \frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{N} A_O(k)(1 - \frac{k}{N}) \tag{2.18}$$

aus der Autokorrelationsfunktion $A_O(k)$ bestimmen, wobei

$$A_O(k) = \frac{\langle O_l O_{l+k}\rangle - \langle O_l\rangle^2}{\langle O_l^2\rangle - \langle O_l\rangle^2}$$

Die Autokorrelationsfunktion fällt üblicherweise im Limes $k \to \infty$ exponentiell ab (Abbildung 2.2). Dies erlaubt die Definition der exponentiellen Autokorrelationszeit $\tau_{\mathrm{exp},O}$.

$$\lim_{k\to\infty} A_O(k) = a e^{-\frac{k}{\tau_{\mathrm{exp},O}}}$$

Exponentielle und integrierte Autokorrelationszeit stimmen im Allgemeinen nicht exakt überein. Für den Spezialfall einer bivariaten Zeitreihe findet man z.B.

$$\tau_{\mathrm{int},O} = \tau_{\mathrm{exp},O}[1 + \frac{1}{12\tau^2_{\mathrm{exp},O}} - \ldots]$$

[5] d.h. $\langle O_i O_j\rangle = \delta_{ij}\langle O_i^2\rangle + (1-\delta_{ij})\langle O_i\rangle\langle O_j\rangle$

[6] Die Schätzer sind hier durch ˆ gekennzeichnet; für die Varianz des Mittelwertes ist der *Bias-korrigierte* Schätzer angegeben.

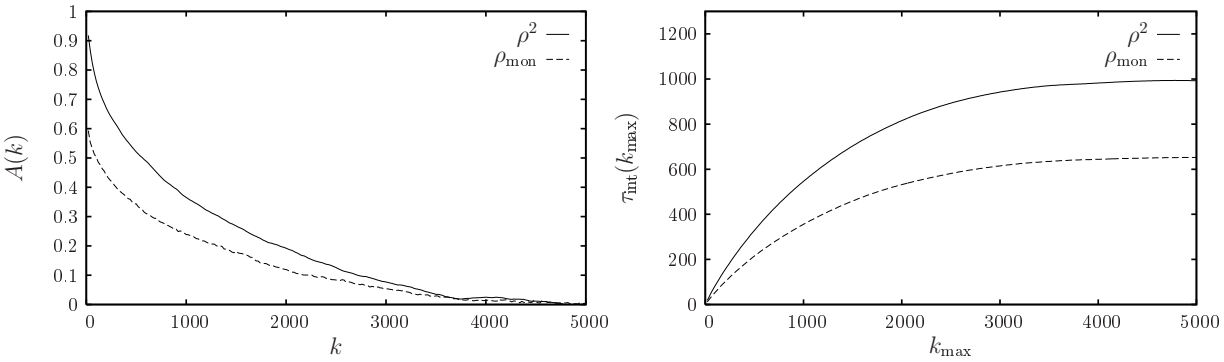


Abbildung 2.2: **(a)** Autokorrelationsfunktion und **(b)** integrierte Autokorrelationszeit der quadrierten Higgslänge ρ^2 und der Monopoldichte ρ_{mon}. Das abelsche Higgsmodell wurde auf einem 24^3 Gitter mit den Parametern $Q = 1$, $\beta = 2.0$, $\kappa = 0.3769$, $\lambda = 0.02$ simuliert. Es wurden über $1000\tau_{\mathrm{int}}$ Messungen durchgeführt.

Oft ist die exakte Berechnung (2.18) zu aufwändig und $\tau_{\mathrm{int},O}$ wird selbstkonsistent über einen rekursiven Algorithmus bestimmt. Man verwendet ($\frac{k_{\mathrm{max}}}{N} \ll 1$)

$$\tau_{\mathrm{int},O} \approx \tau_{\mathrm{int},O}^{k_{\mathrm{max}}} = \frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{k_{\mathrm{max}}} A_O(k)$$

und berechnet ausgehend von $k_{\mathrm{max}} = 1$ die Approximationen $\tau_{\mathrm{int},O}^{k_{\mathrm{max}}}$ für wachsendes k_{max}. Falls

$$k_{\mathrm{max}} > 6\tau_{\mathrm{int},O}^{k_{\mathrm{max}}} \approx 6\tau_{\mathrm{exp},O}$$

so tragen weitere Summanden nur noch vernachlässigbar zur Schätzung von $\tau_{\mathrm{int},O}$ bei und der Algorithmus wird beendet.

Die Autokorrelationszeit der Messreihe wird als Maximum der Autokorrelationszeiten aller gemessenen Observablen abgeschätzt. Dies ist allerdings problematisch, falls weitere „versteckte“ Korrelationen in nicht betrachteten Größen vorhanden sind.

2.2.2 Binning und Jackknife

Eine einfache Möglichkeit, den statistischen Fehler von Schätzungen von Erwartungswerten zu berechnen, bietet die Binning-Analyse. Dabei wird die Messreihe in N_B gleichgroße, paarweise disjunkte Blöcke aufgeteilt und jeder Block als eine unabhängige Messung betrachtet. Man erhält einen Schätzer $\hat{O}_{B,i}$ für den Erwartungswert $\langle O_B \rangle$ in jedem Block i und schätzt die Varianz von $\bar{O}_B = \frac{1}{N_B}\sum_{i=1}^{N_B} \hat{O}_{B,i}$ durch

$$\widehat{\sigma^2_{\bar{O}_B}} = \frac{1}{N_B(N_B-1)} \sum_{i=1}^{N_B} (\hat{O}_{B,i} - \bar{O}_B)^2$$

ab. Voraussetzung ist natürlich, dass die Blocklänge mindestens $2\tau_{O,\mathrm{int}}$ beträgt und die Anzahl N_B hinreichend groß ist. Zur Abschätzung des Erwartungswertes $\langle O_B \rangle$ wird $\hat{O}_{B,i}$ mit dem Schätzfehler $\sqrt{\widehat{\sigma^2_{\bar{O}_B}}}$ verwendet. Da $\tau_{O,\mathrm{int}}$ im Allgemeinen nicht bekannt ist, muss bei einer gründlichen Analyse eine Zerlegung

mit variabler Anzahl N_B erfolgen. Das Verwenden genügend großer Binlängen und hinreichend vieler Binblöcke wird durch das Erreichen eines Plateaus im berechneten Fehler signalisiert. Da diese Analyse sehr aufwändig ist, verwendet man oft eine geeignete, feste Anzahl von Bins und prüft, ob die Binlänge nach konservativer Schätzung der Autokorrelationszeit mindestens $2\tau_{O,\mathrm{int}}$ entspricht.

Ein anderes häufig eingesetzes Verfahren ist die Jackknife-Analyse. Hierbei wird die Messreihe der Länge N in N_J gleichgroße, überlappende Blöcke eingeteilt. Ein Jackknife-Block wird üblicherweise durch das Entfernen eines Binning-Blocks aus der Messreihe gebildet. Der Erwartungswert wird in jedem Jackknife-Block geschätzt. Die einzelnen Schätzer sind durch die Wiederverwendung der Messwerte trivial korreliert. Diese triviale Korrelation hat jedoch einen gänzlich anderen Ursprung als die temporale Korrelation der Werte der Messgröße in einem Markov-Prozess [31] und wird durch einen zusätzlichen Faktor $(N_J - 1)^2$ im Schätzer der Varianz berücksichtigt.

$$\widehat{\sigma^2_{\bar{O}_J}} = \frac{N_J - 1}{N_J} \sum_{i=1}^{N_J} (\hat{O}_{J,i} - \bar{O}_J)^2$$

Die Bezeichnungen $\hat{O}_{J,i}$ (Schätzer im Jachknife-Block i) und $\bar{O}_J$ (Mittelwert der Schätzer $O_{J,i}$) sind analog den in der Binning-Analyse verwendeten definiert.

2.3 Reweighting

Um das Verhalten einer Messgröße über einen gewissen Parameterbereich zu bestimmen, scheint es nötig zu sein, viele Messreihen bei verschiedenen Parameterwerten durchzuführen. *Reweighting* stellt hier ein Monte-Carlo Methoden eigenes Verfahren dar, aus einer Messreihe mit einem gewählten Parametersatz Ergebnisse bei nahe benachbarten Parametersätzen zu erhalten. Die Wiederverwendung von Messdaten führt zu erheblicher Einsparung von Rechenzeit. Die Grundidee des Reweighting ist sehr einfach und wurde in der heutigen Form von Ferrenberg und Swendsen [32][33] vorgestellt. Oft unterscheidet man, ob eine Messreihe (einfaches Reweighting - *single histogram method*) oder mehrere Messreihen (mehrfaches Reweighting - *multi histogram method*) zur Extrapolation verwendet werden. Der anglizistische Name ist etwas irreführend, da das Verwenden von Histogrammen nicht notwendig ist.

2.3.1 Einfaches Reweighting

In Monte-Carlo Verfahren werden Erwartungswerte nach (2.2) abgeschätzt. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_\beta(c)$ im Gleichgewicht bei gegebener Kopplung β sei wie in den vorangegangenen Abschnitten von der Form $P_\beta(c) \propto e^{-\beta S(c)}$.[7] Bei der gewichteten Stichprobenwahl und gegebener Kopplung β_0 erfolgt die Auswahl der Zustände einer Messreihe aus der Boltzmann Verteilung $\propto e^{-\beta_0 S(c)}$. Der Schätzer $\hat{X}_{\beta_0}$ wird anschließend aus (2.2) bestimmt. Aus der gleichen Stichprobe $\tilde{C}$ lässt sich jedoch auch der Schätzer $\hat{X}_\beta$ für den Erwartungswert bei einer anderen Kopplung β ermitteln:

$$\hat{X}_\beta = \frac{\sum_{c\in\tilde{C}} e^{-(\beta-\beta_0)S(c)} X(c)}{\sum_{c\in\tilde{C}} e^{-(\beta-\beta_0)S(c)}} \tag{2.19}$$

[7] Das abelschen Higgsmodell besitzt mehrere Kopplungsparameter. Die hier dargelegten Verfahren lassen sich ohne weiteres auf den Fall mehrerer Kopplungsparameter übertragen.

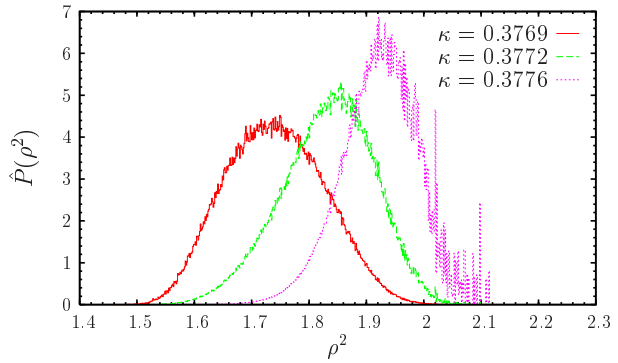


Abbildung 2.3: Das normierte Histogramm von ρ^2, gemessen bei $\kappa = 0.3769$ und durch Reweighting gewonnenen bei anderen κ Werten. $\kappa = 0.3776$ liegt nicht mehr im gültigen Reweightingbereich. Die Messparameter entsprechen denen aus Abbildung 2.2.

Dies ist Reweighting in seiner einfachsten Form und es ermöglicht, die Ergebnisse von Messreihen bei verschiedenen Kopplungsparametern aus einer einzigen Messreihe zu bestimmen. Einen äquivalenten, auf Histogrammen basierenden, Zugang ermöglicht (2.1).

Den Schätzer des Erwartungswertes von X bei einer festen Kopplung β_0 erhält man auch aus

$$\hat{X}_{\beta_0} = \frac{\sum_{s,x} x \hat{P}_{\beta_0}(s,x)}{\sum_{s,x} \hat{P}_{\beta_0}(s,x)},$$

mit Schätzern $\hat{P}_{\beta_0}(s,x)$ für die (nicht normierte) Wahrscheinlichkeitsdichte $P_{\beta_0}(s,x) = g(s,x)e^{-\beta_0 s}$. Die Anzahl $g(s,x)$ der Zustände mit den Werten s bzw. x von S bzw. X wird als Zustandsdichte bezeichnet. Die Schätzer der Wahrscheinlichkeitsdichte sind üblicherweise in der Form von 2-dimensionalen Histogrammen gegeben. Dabei erfolgt zunächst eine Einteilung aller möglichen Werte von (S,X) in K Klassen. Die N Messungen der Messreihe werden anschließend diesen Klassen zugeordnet. $N(s,x)$ gibt die Anzahl der Messungen an, welche die Energie s und Wert x der Zufallsgröße besitzen. Die relative Häufigkeit $N(s,x)/N$ einer Klasse dient als (unnormierter) Schätzer für die Wahrscheinlichkeitsdichte. K sollte nicht zu klein gewählt werden, um systematische Fehler aufgrund der Diskretisierung auszuschließen. Damit der relative statistische Fehler in jeder Klasse gering bleibt, sollten die Klassen hinreichend viele Messergebnisse umfassen. Deshalb darf K auch nicht zu groß gewählt werden.

Der Schätzer des Erwartungswertes der Zufallsgröße bei einer Kopplung β ergibt sich nun zu

$$\begin{aligned}\hat{X}_\beta =& \frac{\sum_{s,x} x \hat{P}_\beta(s,x)}{\sum_{s,x} \hat{P}_\beta(s,x)} \\ =& \frac{\sum_{s,x} x \hat{P}_{\beta_0}(s,x) e^{-(\beta-\beta_0)s}}{\sum_{s,x} \hat{P}_{\beta_0}(s,x) e^{-(\beta-\beta_0)s}}\end{aligned}$$

Falls $X = S$ gilt, vereinfachen sich obige Formeln entsprechend, und man erhält ein eindimensionales Histogramm. In (Abbildung 2.3) ist ein derartiges Histogramm dargestellt. Im Folgenden werde aus Gründen der Einfachheit stets von einem eindimensionalen Histogramm ausgegangen.

Die Reweighting Methode kann nur bei nahe benachbarten Kopplungen verwandt werden und dies hat folgenden Grund. Der relative Fehler in einer Histogrammklasse mit N unabhängigen Einträgen beträgt $\frac{1}{\sqrt{N}}$. Der Fehler ist bei statistisch seltenen Zuständen demnach sehr hoch. Aus der Abbildung ist aber ersichtlich, dass die Schätzung der Wahrscheinlichkeitsdichte durch seltene Zustände bestimmt wird, sofern der betrachtete Kopplungsparameter zu stark von dem der ursprünglichen Messreihe abweicht.

Der Fehler dieser Schätzung ist dann sehr hoch und das Verfahren ist nicht mehr anwendbar. Die starken Fluktuationen des Histogramms für $\kappa = 0.3776$ in Abbildung 2.3 signalisieren das Verlassen des erlaubten Reweightingbereiches.

Um den Gültigkeitsbereich von auf Reweighting beruhenden Messergebnissen zu erfassen, kann man sich, wie eben angedeutet, auf Histogramme stützen. Eine genauere Analyse findet sich in [34]. Alternativ kann man den Gültigkeitsbereich durch das Kriterium

$$|\langle S\rangle(\beta) - \langle S\rangle(\beta_0)| < \sigma_S(\beta_0)$$

definieren. Sofern die Wahrscheinlichkeitsdichte nicht sehr asymmetrisch ist, stimmen Mittelwert und Maximum näherungsweise überein. Bei einer normalverteilten Wahrscheinlichkeitsdichte ist so der erlaubte Reweightingbereich durch die Halbwertsbreite gegeben. Man findet [35][36]

$$\frac{|\beta_0 - \beta|}{\beta} < \frac{1}{\sqrt{C(\beta_0)V}}.$$

Die spezifische Wärme $C(\beta_0)$ wird aus der Messreihe bei der Kopplung β_0 bestimmt.

Paralleles Reweighting in n Parametern lässt sich durch das Verwenden $n+1$-dimensionaler Histogramme bzw. Adaption von (2.19) ermöglich. Die maximale Anzahl der benötigten Histogrammklassen wächst allerdings sehr schnell mit n. Oft weicht man dann auf andere Verfahren aus [36].

2.3.2 Mehrfaches Reweighting

Um den Verlauf einer Messgröße über einen größeren Kopplungsbereich studieren zu können, ist es nötig, die Ergebnisse mehrerer Messreihen zu kombinieren. Ausgehend von einfachem Reweighting kann zwar das Verhalten der Messgröße in der Umgebung der Stützstellen bestimmt werden, jedoch ist noch unklar, wie man daraus einen möglichst stetigen Verlauf der Messgröße über den gesamten Kopplungsbereich erhält. Zwei unterschiedliche Methoden sind häufig anzutreffen:

Kombination von einfachem Reweighting Die einfachste Idee besteht darin, an jedem Stützpunkt ein Reweighting zur betrachteten Kopplung durchzuführen und dort die Messgröße und ihren Fehler zu berechnen. Anschließend werden die Einzelergebnisse fehlergewichtet kombiniert. Sei eine Menge von Messergebnissen $\bar{X}_i$ mit entsprechendem Fehler σ_i für eine bestimmte Kopplungsstärke gegeben. Den besten Schätzer für den wahren Wert der Messgröße $\langle X\rangle$ stellt

$$\hat{X} = \hat{\sigma}^2 \sum_i \bar{X}_i/\sigma_i^2, \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{\sum_j 1/\sigma_j^2} \tag{2.20}$$

dar. Dieser Schätzer ist optimal in dem Sinne, dass seine Varianz $\hat{\sigma}^2 = \langle(\hat{X} - \langle X\rangle)^2\rangle$ minimal ist [35]. Das eben dargestellte Verfahren ergibt eine Schätzung für Messgröße und Fehler, wobei Autokorrelationen der individuellen Messgröße X in optimaler Weise berücksichtigt werden können. Sofern die betrachtete Kopplung außerhalb des Reweightingbereiches eines Stützpunktes liegt muss dieser aus der Mittelung ausgeschlossen werden, da hierfür keine genaue Fehlerbestimmung möglich ist. Für die Kopplungen, bei denen eine Stützstelle gerade nicht mehr verwendet werden darf, kann dann in der Schätzung der Messgröße ein Sprung auftreten. Dies kann hinderlich sein, wenn z.B. das Maximum einer Messgröße zu bestimmen ist.

Ferrenberg-Swendsen Reweighting Ein anderes Verfahren wurde zuerst von Ferrenberg und Swendsen [37] vorgeschlagen. In einem Monte-Carlo-Verfahren mit gewichteter Stichprobenwahl beträgt die Wahrscheinlichkeit einen Zustand s mit der Energie S auszuwählen

$$P(s) = g(s)\frac{e^{-\beta s}}{Z}$$

Hier wird die *normierte* Wahrscheinlichkeitsdichte P verwendet. Der Zustandssumme Z als Normierungsfaktor wird im Weiteren eine wichtige Rolle zukommen. Momentan ist weder die Zustandssumme noch die Zustandsdichte $g(s)$ bekannt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte lässt sich allerdings aus einem Histogramm abschätzen. Dazu wird der Wertebereich von S diskretisiert und für jeden Stützpunkt i gibt $N_i(s)$ die Anzahl der Messwerte mit Wert s an. In jeder Messreihe der Länge n_i erhält man so eine Schätzung für die Zustandsdichte

$$\hat{g}_i(s) = \frac{N_i(s)}{n_i}\frac{Z_i}{e^{-}\beta_i s}$$

Der Fehler σ_i dieser Schätzung ist durch die Standardabweichung des mittleren Histogrammes $\overline{N_i(s)}$ gegeben. Man findet [35]

$$\sigma_i^2 = \frac{g(s)}{n_i}\frac{Z_i}{e^{-\beta_i s}}.$$

Die optimale Schätzung der Zustandsdichte erhält man nach (2.20) zu

$$\hat{g}(s) = \frac{\sum_i N_i(s)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{-\beta_j s}}$$

Die Zustandssummen Z_k, welche ebenfalls noch unbestimmt sind, werden aus der Selbstkonsistenzbedingung

$$Z_k = \sum_s g(s)e^{-\beta_k s} = \sum_s \frac{\sum_i N_i(s)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{(\beta_k-\beta_j)s}}$$

iterativ bestimmt. Für die Zustandssumme bei einer beliebiger Kopplungsstärke β gilt damit

$$Z_\beta = \sum_s \frac{\sum_i N_i(s)}{\sum_j n_j Z_j^{-1} e^{(\beta-\beta_j)s}}.$$

Der Schätzer $\hat{f}(s)$ für den Erwartungswert $\langle f(s)\rangle$ ergibt sich dann zu

$$\hat{f}(s) = \frac{1}{Z_\beta}\sum_s f(s)g(s)e^{-\beta s}$$

Durch die Verwendung mehrdimensionaler Histogramme lässt sich dieses Ergebnis für mehrere Kopplungsparameter bzw. für nicht-energieartige Zufallsgrößen verallgemeinern. Eine Umformulierung ohne Bezug auf Histogramme ist ebenfalls möglich [35].

Reweighting à la Ferrenberg-Swendsen führt zu sehr glatten Verläufen der Messgröße über den betrachteten Bereich des Kopplungsparameters. Die Implementierung ist allerdings aufwändig und auch eine Fehleranalyse im Allgemeinen schwierig.

Kapitel 3

Phasenstruktur

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Phasenstruktur des 3D-abelschen Higgsmodells. Zunächst werden Grundbegriffe aus der Theorie der Phasenübergänge eingeführt. Dies geschieht sehr knapp, auf die reichlich vorhandene, weiterführende Literatur sei hingewiesen. Anschließend werden Grenzfälle des abelschen Higgsmodells diskutiert und die in diesen Limes bekannten Ergebnisse zusammengefasst. Nach der Definition der betrachteten Observablen werden Resultate der Phasenstrukturanalyse in der fundamentalen Darstellung $Q = 1$ und in der Darstellung mit zweifach geladenen Materiefeldern ($Q = 2$) vorgestellt.

3.1 Phasenübergänge

Naturgesetze zeichnen sich durch eine hohe Symmetrie aus, z.B. Translations- und Rotationsinvarianz. Verschiedene Phasen (Aggregatzustände) von Materie lassen sich oft durch die jeweils realisierte Untergruppe klassifizieren. Äußere Bedingungen (z.B. Temperatur, äußere Felder, ...) legen fest, welche der möglichen Phasen tatsächlich eingenommen wird. Durch Veränderung dieser Bedingungen kann Materie ihren Phasenzustand verändern. Es findet ein Phasenübergang statt. Die Klassifikation von Phasenübergängen nach Ehrenfest verwendet die freie Energie bzw. ein anderes geeignetes thermodynamisches Potential. Ein Phasenübergang ist vom Typ *erster Ordnung*, wenn eine partielle Ableitung des thermodynamischen Potentials nicht stetig ist. Sofern mindestens eine n-te Ableitung des Potentials unstetig ist und alle niedrigeren Ableitungen stetig sind, liegt ein Phasenübergang n-ter Ordnung vor. Kontinuierliche Phasenübergänge ($n \geq 2$) sind von besonderer Bedeutung, da unter ihrem Einfluß *kritische Phänomene* auftreten. Beispielhaft dafür sind die kritische Opaleszenz in binären Flüssigkeiten und das Einsetzen von Ferromagnetismus in ferromagnetischen Materialien zu nennen. In der kritischen Region wird das Verhalten vieler Observablen durch kritische Exponenten bestimmt. So ist das Verhalten der Korrelationslänge nahe der kritischen Kopplung von der Form[1]

$$\xi \sim |t|^{-\nu}, \quad t = \frac{T - T_c}{T_c}. \tag{3.1}$$

Hierbei bezeichne ν den kritischen Exponenten und (T_c) T die (kritische) Kopplung. In vielen Modellen lassen sich ebenso kritische Exponenten für andere Größen finden, so skaliert im Ising-Modell die

[1] Allgemein wird der Exponent μ einer Funktion $f(\tau)$, d.h. $f(\tau) \sim \tau^{\mu}$, wie folgt definiert: $\mu = \lim_{\tau \to 0} \frac{\mathrm{d} \ln f(\tau)}{\mathrm{d} \ln \tau}$.

spezifische Wärmekapazität C_V wie

$$C_V = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_V \sim |t|^{-\alpha}.$$

Die Energiedichte sei mit e bezeichnet.

Zwei Modelle gehören in die gleiche *Universalitätsklasse*, wenn sie die gleichen kritischen Exponenten aufweisen. Experimente und Computersimulationen belegen, dass die Eigenschaft, einer bestimmten Klasse zuzugehören, nur von wenigen Parametern wie der Dimension des Systems und Anzahl der Komponenten des Ordnungsparameters abhängt. Insbesondere spielen die Topologie des Gitters und die genauen Kopplungsstärken der Wechselwirkungen keine Rolle. Dieses nicht-triviale Verhalten, die *Universalität*, kann durch den Renormierungsgruppenansatz erklärt werden.

Prinzipiell könnten kritische Exponenten direkt aus ihrer Definition bestimmt werden, d.h. die entsprechenden Observablen werden in einer Umgebung der kritischen Kopplung gemessen und anschließend wird durch einen Fit der Exponent bestimmt. Allerdings ist dieses Verfahren mit einigen Problemen behaftet, die seine Anwendung in der Praxis ausschließen. So ist das vorausgesetzte Skalenverhalten nur nahe der kritischen Kopplung gültig. Oftmals ist es schwierig zu entscheiden, welche Messwerte zur kritischen Region gehören und welche nicht. Zudem muss die kritische Kopplung genau bekannt sein. Entscheidend ist außerdem, dass hinreichend große Systeme betrachtet werden, um *Finite-Size*-Effekte auszuschließen.

Der *Finite-Size-Scaling* Ansatz erlaubt es nun, diese Probleme zu umgehen. Phänomenologisch wird hierbei eine Skalenhypothese vorausgesetzt. Mit Methoden der Renormierungstheorie lässt diese sich auch streng begründen. Der singuläre Anteil der freien Energiedichte $f_{\text{sing}} = -\frac{kT}{V} \ln Z$ eines Systems skaliere wie

$$f_{\text{sing}} \sim |t|^{2-\alpha} \mathcal{F}_{\pm}(L/\xi).$$

Die Korrelationslänge im unendlich ausgedehnten System gehorche dabei (3.1). Die Skalenfunktion $\mathcal{F}_{\pm}$ hat die Eigenschaften:

$$\mathcal{F}_{\pm}(x) = \text{const}, \text{ für } x \gg 1$$
$$\mathcal{F}_{\pm}(x) \sim x^{\alpha/\nu}, \text{ für } x \to 0.$$

Die Vorzeichen von $\mathcal{F}_{\pm}$ beziehen sich auf die verschiedenen Seiten der Annäherung an den Phasenübergang. Durch Differenzieren der freien Energiedichte ergibt sich das Skalenverhalten der entsprechenden Momente, z.B. gilt für (den singulären Anteil der) die spezifische Wärmekapazität

$$C_V = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2}\right)_V \sim |t|^{-\alpha} \mathcal{C}_{\pm}(L/\xi).$$

Nach einer Umdefinition der entsprechenden Skalenfunktion z.B. $\hat{\mathcal{C}}_{\pm}(x) = x^{-\alpha} \mathcal{C}_{\pm}(x^{\nu})$ findet man

$$C_V \sim L^{\alpha/\nu} \hat{\mathcal{C}}_{\pm}(L^{1/\nu}|t|).$$

In der Nähe des kritischen Punktes $t \to 0$ ist die Korrelationslänge ξ des unendlich ausgedehnten Systems größer als die Gitterlänge L eines System endlicher Größe, d.h. $L/\xi \to 0$. Insbesondere folgt aus den Skalierungsverhalten der Skalenfunktion $\hat{\mathcal{C}}_{\pm}(x) = \text{const}$ und somit für $x \to 0$

$$C_V \sim L^{\alpha/\nu}.$$

Analog folgt aus der Skalenhypothese für das n-te Moment der freien Energie für $t \to 0$

$$\frac{\partial^n f}{\partial T^n} \sim L^{(n-2+\alpha)/\nu}.$$

Aus der Kenntnis zweier verschiedener Momente lassen sich demnach sowohl ν als auch α direkt bestimmen. Tatsächlich lassen sich beide Exponenten allein aus dem dritten Moment bestimmen, da dieses eine spezielle Struktur mit Maximum und Minimum aufweist. Diese Methode wurde vor kurzem erfolgreich eingesetzt, um die Phasenstruktur des abelschen Higgsmodells im London-Limes zu untersuchen [38][12]. Weiterhin kann ν aus dem Verhalten der pseudokritischen Kopplung bestimmt werden. Nach dem Skalenansatz ist die Skalenfunktion $\tilde{\mathcal{C}}_\pm$ nur von der dimensionlosen Skalenvariablen $L^{1/\nu}|t|$ abhängig. Bei festgehaltener Gittergröße ist das Maximum der Wärmekapazität durch das Maximum der Skalenfunktion bei $x_{\max} = L^{1/\nu} t_{L,\max}$ gegeben. Da die Position des Maximums aber nicht von L abhängt, gilt

$$T_{L,\max} = T_c(1 + x_{\max} L^{-1/\nu}). \tag{3.2}$$

Die Skalenhypothese ist allerdings nur gültig nahe des kritischen Punktes und für nicht zu kleine Gitter. Unter Umständen müssen daher Korrekturterme berücksichtigt werden. Eine genauere Betrachtung dazu findet sich in [39]. Da hierzu eine sehr gute Qualität der Messdaten erforderlich ist, ermittelt man praktischerweise ν anderweitig und nutzt (3.2), um T_c genau zu bestimmen.

3.2 Grenzfälle des abelschen Higgsmodells

Die prinzipielle Phasenstruktur wurde durch die Pionierarbeit von Fradkin und Shenker [9] vor einiger Zeit untersucht. In drei Dimensionen zerfällt das Phasendiagramm in eine symmetrische-*confined* Phase und eine Higgs-*deconfined* Phase. Die erste Bezeichnung bezieht sich auf das Higgskondensat ρ^2 und beschreibt seine thermodynamischen Eigenschaften. Die kompakte U(1)-Eichtheorie weist zudem topologische Defekte in Form von Monopolen und Dirac-Strings auf. Der permanente Einschluss (*confinement*) von Testladungen in der reinen Eichtheorie wird durch die Ankopplung von Materiefeldern zerstört. Der thermodynamische Übergang kann demnach durch einen confined-deconfined Übergang topologischer Defekte [10][8] erklärt werden.

Für $Q = 0$ (nicht-geladene Materiefelder) entkoppeln Eichfelder und Materiefelder. Im London-Limes fällt dieses Modell in die Universalitätsklasse des 3DXY-Modells und besitzt einen kritischen Punkt bei $\kappa_c \approx 0.453$ [38].

Für die fundamentale Darstellung $Q = 1$ ist bekannt, dass kein gewöhnlicher Phasenübergang zweiter Ordnung mit lokalem Ordnungsparameter existiert. Tatsächlich wird jedoch vermutet, dass in der fundamentalen Darstellung $Q = 1$ ein confinement-deconfinement Phasenübergang durch Kosterlitz-Thouless-artiges Binden der Monopole in Dipolpaare stattfindet [10]. Es wurde gezeigt [10][40], dass ein derartiger Phasenübergang durch kritische Fluktuationen des Materiefeldes hervorgerufen werden könnte, welche dann mit einer negativen anomalen Dimension des Eichfeldpropagators einhergehen [41][42]. Das Verhalten des Eichfeldpropagators wird in einem späteren Kapitel eingehend untersucht. Die Situation ändert sich, wenn zweifach geladene Materiefelder ($Q = 2$) vorhanden sind. Eine kürzlich erfolgte Studie belegt, dass dann im London-Limes ein Phasenübergang zweiter Ordnung existiert [38][12]. Dabei wurden sich kontinuierlich verändernde kritische Exponenten α, ν entlang der kritischen Line im β-κ-Parameterraum festgestellt.

Für schwache Ankopplungen des Materiefeldes (kleine κ) verhält sich das System mit $Q = 1$ qualitativ wie die $U(1)$-Eichtheorie und befindet sich in der symmetrischen (confined) Phase. Für große κ (Higgsphase) sinkt die Monopoldichte und das Monopolplasma weicht einem dünnen Dipolgas. Die Bedingung $\kappa \to \infty$ führt auf $\varphi_{n+e_\mu} + Q\theta_{n,\mu} - \varphi_n = 2\pi l_{n,\mu}$ mit $l_{n,\mu} \in \mathbb{Z}$. In der unitären Eichung $\forall n(\varphi_n = 0)$ ergibt dies die Bedingung

$$\theta_{n,\mu} = \frac{2\pi}{Q} l_{n,\mu}, \quad \theta_{n,\mu} \in [-\pi, \pi).$$

Für $Q = 1$, und somit $\forall n \forall \mu(\theta_{n,\mu} = 0)$, reduziert sich das Modell auf die ϕ^4-Theorie und ist trivial im London-Limes. Das Modell mit $Q = 2$ ist im London-Limes äquivalent zur $\mathbb{Z}_2$-Eichtheorie, welches sich in der Universalitätsklasse des 3D-Ising-Modells befindet.

Das System ist für $\beta \to \infty$ äquivalent zum 2-komponentigen ϕ^4-Modell (Ginzburg-Landau Modell ohne Eichfeld). Dies gilt für alle Q und ist aus der folgenden Überlegung einsichtig.[2] Der besagte Grenzfall führt für den Plaquettewinkel $\theta_P^{\text{plaq}} = d\theta + 2\pi s_P$ zur Bedingung $\theta_P^{\text{plaq}} = 0$. Somit folgt $d\theta = -2\pi s_P$. Das Verschwinden der zweimaligen äußeren Ableitung ($d^2 = 0$) und ein unendlich großes, einfach zusammenhängendes Gitter vorausgesetzt, gilt unter Verwendung des Poincaré-Lemmas für die Linkvariable $\theta_{n,\mu} = d\chi_n + 2\pi l_{n,\mu}$, d.h. sie ist eine reine Eichtransformation. Damit reduziert sich der Wechselwirkungsterm des Modells auf $-\kappa \sum_{n,\mu} \rho_n \rho_{n+e_\mu} \cos(d\phi_n + Q d\chi_n)$. Die Substitution $\phi \to \phi' = \phi + Q\chi$ ermöglicht ein Ausintegrieren der Freiheitsgrade von ϕ und man erhält die Wirkung des 2-komponentigen ϕ^4-Modells:

$$S_{\phi^4_{(2)}} = -\kappa \sum_{n,\mu} \rho_n \rho_{n+e_\mu} \cos(d\phi'_n) + \sum_n (\rho_n^2 + \lambda(\rho_n^2 - 1)^2)$$

Eine Bestimmung kritischer Kopplungen und Exponenten dieses Modells findet sich in [43]. Im London-Limes geht dieses Modell in das 3D-XY Modell über. $\lambda \to 0$ führt zum Gaußschen Modell.

Für kleine quartische Selbstkopplungen ist bekannt, dass in der fundamentalen Darstellung $Q = 1$ ein Phasenübergang erster Ordnung existiert [11].

3.3 Observablen

Wirkungsbestandteile von (1.34) und topologische Messgrößen stellen wichtige Observablen dar, die während der Monte-Carlo-Simulationen gemessen wurden.

3.3.1 Wirkungsbestandteile

Die Gesamtwirkung des abelschen Higgsmodells (1.34) setzt sich aus Eichwirkung S_{gauge}, Linkwirkung S_{link} und Higgsanteil S_ρ zusammen. Es gilt

$$S_{AHM} = \beta S_{\text{gauge}} + \kappa S_{\text{link}} + \lambda S_\rho + \sum_n \rho_n^2$$

[2] Differentialformen auf dem Gitter werden im nächsten Abschnitt besprochen.

mit

$$S_{\text{gauge}} = -\sum_P \cos\theta_P^{\text{plaq}}$$
$$S_{\text{link}} = -\sum_n \sum_\mu \rho_n \rho_{n+e_\mu} \cos(\varphi_{n+e_\mu} + Q\theta_{n,\mu} - \varphi_n)$$
$$S_\rho = \sum_n (\rho_n^2 - 1)^2.$$

Eine, besonders für das Gebiet des Phasenübergangs erster Ordnung, wichtige Observable ist die normierte quadrierte Higgslänge (Higgskondensat) $\rho^2 = \frac{1}{L^3}\sum_n \rho_n^2$. Mit ihrer Hilfe lässt sich die dimensionslose Oberflächenspannung definieren als

$$\sigma = \frac{\beta^2}{2L^2} \ln \frac{P_{\max}(\rho^2)}{P_{\min}(\rho^2)}. \tag{3.3}$$

$P_{\max}(\rho^2)$ bzw. $P_{\min}(\rho^2)$ bezeichnen Maximalwert bzw. Minimalwert des Histogramms von ρ^2 nach einem Reweighting und werden wie folgt berechnet: Im Gebiet eines Phasenüberganges erster Ordnung weist das Histogramm eine Zwei-Peak-Struktur auf. Dabei entsprechen beide Peakpositionen nährungsweise dem mittleren Wert von ρ^2 in den entsprechenden koexistierenden Phasen. Durch Reweighting lässt sich das Verhältnis beider Phasen unter anderem derart justieren, dass beide Peaks die gleiche Höhe aufweisen, d.h. der jeweilige Wert des Higgskondensates die gleiche Wahrscheinlichkeitsdichte besitzt, vgl. Abbildung 3.1(a). Die Fläche $2L^2$ in (3.3) entspricht den hypothetischen Minimalflächen, welche das Gitter in zwei Gebiete mit koexistierenden Phasen aufteilen.

Die latente Wärme L_{lat}, angegeben in Kontinuumseinheiten, ist proportional zum Peakabstand im Histogramm, d.h.

$$\frac{L_{\text{lat}}}{g_3^2} = \frac{1}{2}\kappa\beta\Delta\langle\rho^2\rangle. \tag{3.4}$$

3.3.2 Topologische Observablen

Topologische Observablen lassen sich sinnvollerweise durch die Verwendung von Differentialformen auf dem Gitter definieren [44][45]. Eine Differentialform vom Rang k auf dem Gitter ist eine Funktion ϕ über den k-dimensionalen Zellen c_k des Gitters. Beispielsweise bildet das Higgsfeld (Eichfeld) eine 0-Form (1-Form). Die aus dem Kontinuum bekannten Begriffe der äußeren Ableitung und des Skalarproduktes von k-Formen übertragen sich in folgender Weise auf das Gitter:

$$(d\phi)_{c_{k+1}} = \sum_{c_k \in \partial c_{k+1}} \text{sign}(c_k)\phi_{c_k}$$
$$(\phi,\psi) = \sum_{c_k} \phi_{c_k}\psi_{c_k}, \quad \phi,\psi \text{ } k\text{-Formen}.$$

Zu jeder k-Form des 3-dimensionalen Gitters existiert eine duale $(3-k)$-Form $*\phi$ auf dem dualen Gitter, analog entspricht einer k-dimensionalen Zelle c_k eine $(3-k)$-dimensionale Zelle $*c_k$. Das Kodifferential $\delta = *d*$ ist adjungiert zur äußeren Ableitung, d.h $(\delta\phi,\psi) = (\phi, d\psi)$. Der Hodge-Sternoperator erfüllt in 3 Dimensionen für alle k-Formen $*^2 = \text{id}$.

Der Plaquettewinkel θ^{plaq} ist eine 2-Form und erfüllt (1.28), d.h.

$$\theta^{\text{plaq}} = d\theta + 2\pi s$$

Die ganzzahlige 2-Form s ist derart gewählt, dass $\theta^{\text{plaq}} \in [-\pi, \pi)$ für jede Plaquette gilt. Dirac-Strings werden durch die 1-Form $*s$ repräsentiert, (Anti-)Monopole durch die 0-Form $*j$, wobei gilt

$$j = \frac{1}{2\pi} d\theta^{\text{plaq}} = ds.$$

Aufgrund von $\delta * s = *j$ bilden Dirac-Strings entweder geschlossene Schleifen oder verbinden Monopole ($*j > 0$) mit Antimonopolen ($*j < 0$). Aus dem Kalkül folgt sofort die Eichinvarianz der (Anti-)Monopole. Dirac-Strings hingegen stellen eichabhängige Größen dar: Unter einer kompakten Eichtransformation $\theta \to \theta' = \theta + d\alpha + 2\pi m$ ändert sich zwar nicht die auf das Intervall $[-\pi, \pi)$ eingeschränkte Plaquettevariable $\theta^{\text{plaq}} \to \theta^{\text{plaq}'} = d\theta + 2\pi s' + 2\pi dm = \theta^{\text{plaq}}$, und somit auch nicht j, wohl aber die 2-Form $s \to s' = s - dm$.

Abrikosov-Nielsen-Olesen-Strings $*\sigma$ (*ANO-Strings*) sind im Gegensatz zu den Dirac-Strings eichinvariante Linienobjekte des dualen Gitters [46][47]:

$$*\sigma = \frac{1}{2\pi}(*d\theta^{\text{link}} - Q * \theta^{\text{plaq}}) = *dl - Q * s.$$

Die 1-Form $\theta^{\text{link}} = d\varphi + Q\theta + 2\pi l$ ist invariant unter Eichtransformationen. Hier ist wieder $l \in \mathbb{Z}$ derart gewählt, dass θ^{link} im Intervall $[-\pi, \pi)$ liegt. Aus der Definition der ANO-Strings folgt unmittelbar die Relation $\delta * \sigma = Q * j$. Daher bilden auch diese Strings geschlossene Schleifen oder enden an (Anti-)Monopolen. Im Gegensatz zu Dirac-Strings sind mit jedem (Anti-)Monopol Q ANO-Strings verbunden.

Monopoldichte ρ_{mon}, Dirac-Stringdichte ρ_{Dirac} und ANO-Stringdichte ρ_{ano} sind definiert als normierte Summe über alle 3- bzw. 2-dimensionalen Elementarzellen des Gitters, d.h.

$$\rho_{\text{mon}} = \frac{1}{V}\sum_c |j_c|, \quad \rho_{\text{Dirac}} = \frac{1}{N_{\text{plaq}}}\sum_P |s_P|, \quad \rho_{\text{ano}} = \frac{1}{N_{\text{plaq}}}\sum_P |\sigma_P|.$$

3.3.3 Suszeptibilität und Binder-Kumulanten

Aus den Momenten einer jeden Observablen O lassen sich verallgemeinerte Suszeptibilität χ_O und Binder-Kumulante B_O definieren:

$$\chi_O = \frac{1}{V}\left[\langle O^2\rangle - \langle O\rangle^2\right], \quad B_O = \frac{1}{3}\left(1 - \frac{\langle O^4\rangle}{3\langle O^2\rangle\langle O^2\rangle}\right).$$

Sofern ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt, ist eine Zwei-Peak-Struktur in einer geeigneten Observablen O zu erwarten. Seien O_1 und O_2 die Mittelwerte der beiden Peaks, dann gilt [48]

$$\langle O^2\rangle \to c_1 O_1^2 + c_2 O_2^2, \quad \langle O^4\rangle \to c_1 O_1^4 + c_2 O_2^4$$

mit $c_1 + c_2 = 1$ und folglich $B_O \neq 0$. Für große Volumina V skaliert die Kumulante näherungsweise mit dem inversen Gittervolumen, d.h. $B_O = c + e/V$, mit zu bestimmenden Konstanten c und e.

Sei nun ein Phasenübergang zweiter Ordnung gegeben und die Observable O normalverteilt. Dann gilt im thermodynamischen Limes

$$B_O = -\frac{2}{3}, \quad \text{falls } \langle O\rangle = 0$$
$$B_O \sim L^{\alpha/\nu - d}, \quad \text{falls } \langle O\rangle \neq 0.$$

3.4 Phasenstruktur für die Darstellung $Q = 1$

Die seit längerem bekannte Phasenstruktur für die Darstellung $Q = 1$ wurde in gewissen Parameterbereichen bereits intensiv untersucht, so z.B. in einer kürzlich erfolgten Studie bei $\beta = 1.1$ [49]. Die folgende Analyse fand bei der Eichkopplung $\beta = 2.0$ statt. Diese Wahl erfolgte u.a., um für die anschließenden Propagatormessungen einen Vergleich zu früheren Arbeiten [50][51] zu ermöglichen. Das Eichfeld wurde mit einem Metropolis-Algorithmus (vgl. Abschnitt 2.1.2) aktualisiert. Für das Higgsfeld kam der in Abschnitt 2.1.3 beschriebene Wärmebad-Algorithmus zum Einsatz. Reweighting à la Ferrenberg-Swendsen ermöglichte die genaue Bestimmung pseudokritischer Kopplungen aus den Messdaten. Die kritischen Kopplungen wurden anschließend durch Extrapolation gewonnen. Das Fitten der Daten fand mit gnuplot v3.8j statt, welches einen Marquardt-Levenberg Algorithmus verwendet.[3] Zur Darstellung der Daten wurde ebenfalls gnuplot genutzt. Die Berechnung der statistischen Fehler erfolgte mit dem Jackknife-Verfahren. Fitfehler wurden mittels gnuplot bestimmt.

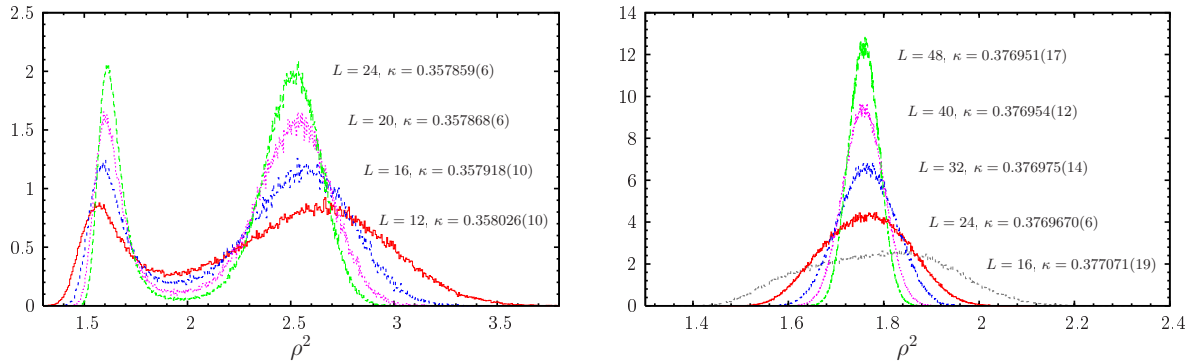
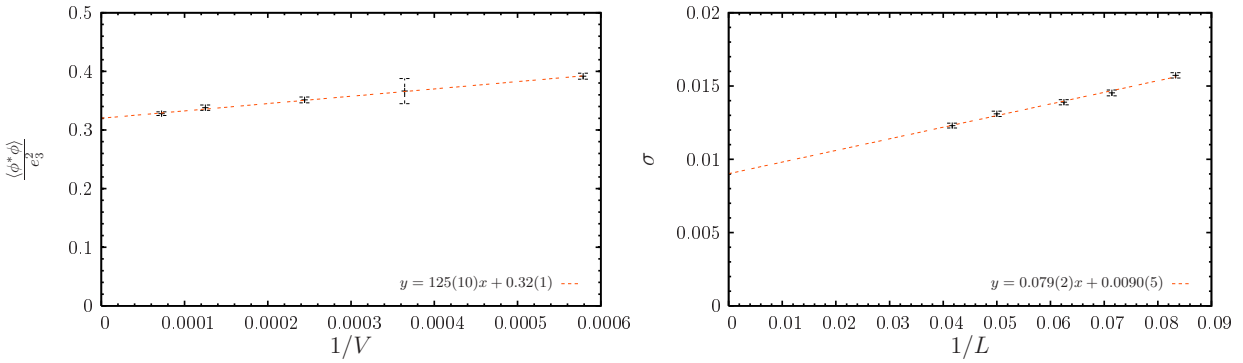


Abbildung 3.1: Histogramme des Higgskondensates bei verschiedenen Gitterlängen L, (a) $\lambda = 0.005$, pseudokritisches κ gegeben durch gleiche Peakhöhe (b) $\lambda = 0.02$, pseudokritisches κ gegeben durch das Maximum der Suszeptibilität χ_{ρ^2}

3.4.1 Das Gebiet erster Ordnung

Bei fixierten β kann sich das System je nach Wahl von κ in der symmetrischen Phase oder der Higgsphase befinden. Erstere zeichnet sich durch ein dichtes Monopolgas aus, sowie durch ein linear mit dem Abstand anwachsendes Potential zwischen Testladungen und daraus resultierendem Einschluss der Testladungen [52]. Sie wird bei kleiner Wechselwirkungskopplung κ realisiert. In Bezug auf die skalaren Freiheitsgrade bezeichnet man diese Phase als symmetrisch. Für wachsende κ erreicht das System die Higgsphase, in der das einschliessende Potential unterdrückt wird, das Monopolplasma einem dünnen Gas aus Monopol-Antimonopol Dipolpaaren weicht und nur kurzreichweitige Kräfte zwischen Testladungen wirken. Aufgrund des Einflusses des Higgsfeldes kommt es zur *String-Brechung*, welche effektiv zur Abflachung des Potentials zwischen den Ladungen bei größeren Abständen führt [52].

[3] Die Fitfunktion einschließlich Fitparameter und ihren Fehlern ist in den entsprechenden Diagrammen in der Form y=f(x) dargestellt. Die Variablen x,y beziehen sich naturgemäß auf Abzisse und Ordinate.



(a) (b)

Abbildung 3.2: Berechnung von (a) latenter Wärme (b) Oberflächenspannung im thermodynamischen Limes bei $\lambda = 0.005$

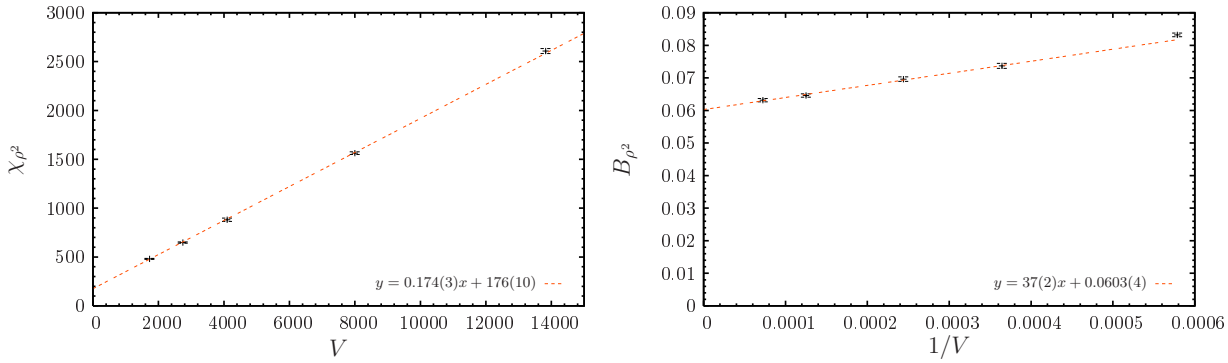
Der Übergang zwischen den Phasen ist für kleine quartische Selbstkopplung λ von erster Ordnung. Für große λ ist der Übergang kontinuierlich. Ob ein echter Phasenübergang (eventuell von Kosterlitz-Thouless Typ) vorliegt, ist umstritten [53][40]. Eine wichtige Aufgabe dieses Kapitels besteht in der Abgrenzung des Gebietes erster Ordnung vom kontinuierlichen Übergangsgebiet. Die so ermittelten Selbstkopplungen λ und Wechselwirkungskopplungen κ ermöglichen eine gezielte Messung der Propagatoren in den entsprechenden Gebieten.

In Abbildung 3.1 (a) wird ein Histogramm der quadratischen Higgslänge ρ^2 für verschiedene Gittergrößen bei einer Selbstkopplung $\lambda = 0.005$ aufgezeigt. Messungen bei unterschiedlichen Werten der Kopplung κ wurden mittels Ferrenberg-Swendsen Reweigting vereint. Dies geschah jeweils für verschiedene Gittergrößen zwischen $L = 12$ und $L = 24$. Pseudokritische Kopplungen können nach verschiedenen Kriterien definiert werden. Hier wurde dasjenige κ gewählt, bei dem beide Maxima der prominenten Zwei-Peak-Struktur im Histogramm des Higgskondensates die gleiche Höhe aufweisen.

Deutlich ist in der Abbildung das typische Verhalten eines Phasenübergangs erster Ordnung erkennbar. Mit steigender Gittergröße wachsen die Peaks und werden gleichzeitig schmaler. Ihr Abstand bleibt im thermodynamischen Limes endlich und führt zu einer nichtverschwindenen latenten Wärme (3.4). Die Wahrscheinlichkeit, dass die Observable einen Wert zwischen den beiden Maxima annimmt, sinkt mit der Gittergröße. Die Oberflächenspannung (3.3) bleibt im thermodynamischen Limes endlich. Die Berechnung der Oberflächenspannung und der latenten Wärme durch einen entsprechenden Fitansatz, vgl. Tabelle 3.1, findet sich in Abbildung 3.2 und ergibt

$$\frac{L_{\text{lat}}}{g_3^2} = 0.32(1), \quad \sigma = 0.0090(5).$$

Ein weiteres Indiz für einen Phasenübergang stellt die Volumenabhängigkeit der Suszeptibilität χ_{ρ^2} von ρ^2 dar. Man erwartet in diesem Fall eine Skalierung $\chi_{\rho^2} \sim L^3$. Dieses Verhalten wird, wie Abbildung 3.3 (a) zeigt, tatsächlich beobachtet. Die Binder-Kumulante B_{ρ^2} bleibt bei einem Phasenübergang erster Ordnung endlich. In Abbildung 3.3 (b) ist die Kumulante über dem inversen Volumen aufgetragen. Eine Berücksichtigung führender Korrekturterme im Fitansatz ergibt im thermodynamischen Limes $B_{\rho^2} = 0.0603(4)$.



(a) (b)

Abbildung 3.3: Volumenabhängigkeit der Suszeptibilität χ_{ρ^2} (a) und der Binder-Kumulante B_{ρ^2} (b) bei $\lambda = 0.005$

Unter Zuhilfenahme von (3.2) und unter Kenntnis des Exponenten ν lässt sich die kritische Kopplung[4] κ_c im thermodynamischen Limes sehr genau bestimmen. Für einen Phasenübergang erster Ordnung gilt $\nu = 1/3$. Korrekturterme sind daher in erster Näherung proportional zum Gittervolumen. Auf einem endlichen Gitter müssen die pseudokritischen Kopplungen verschiedener Messgrößen nicht übereinstimmen. Dies gilt natürlich nicht im thermodynamischen Limes, weshalb die Berechnung von κ_c mithilfe verschiedener Messgrößen eine gewisse Fehlerkontrolle erlaubt. Zu berücksichtigen ist hierbei, dass die betrachteten Messgrößen oft nicht unabhängig voneinander sind. Die pseudokritischen Kopplungen wurden jeweils über das Minimum der Binder-Kumulante und über gleiche Peakhöhen definiert. Eine Berechnung der kritischen Kopplung κ_c (bei $\beta = 2.0$, $\lambda = 0.005$) ergab:

$$\kappa_c = 0.357827(9).$$

3.4.2 Das Gebiet kontinuierlichen Überganges

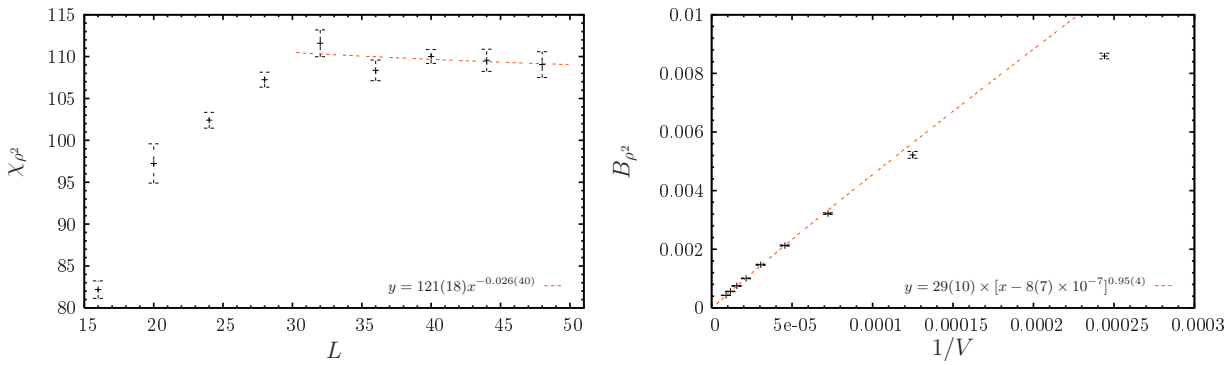
Für $\lambda = 0.02$ kann ein Phasenübergang erster Ordnung ausgeschlossen werden. Ein bei kleinen Gittern vorhandenes Zwei-Peak Signal verschwindet, sofern auf genügend großen Gittern gemessen wird (Abbildung 3.1(b)). Da das Kriterium gleicher Peakhöhen mangels Zwei-Peak-Struktur hier nicht anwendbar ist, wurde neben dem Minimum der Binder-Kumulante die maximale Suszeptibilität als Kriterium für die pseudokritische Kopplung herangezogen. In Abbildung 3.4(a) ist die Suszeptibilität χ_{ρ^2} explizit dargestellt. Ersichtlich wird die Bestimmung der Skalierung durch starke Korrekturterme bei kleinen Gitterlängen $L \leq 28$ erschwert. Größere Gitter weisen im Allgemeinen in der kritischen Region höhere Autokorrelationszeiten auf und erfordern höheren Rechenaufwand. Die durch einen Fit bestimmten Werte für α/ν sind im Rahmen ihrer Fehler mit Null konsistent.[5] Ein Fit unter Verwendung der Gittergrößen $L = 32$ bis $L = 48$ führte auf

$$\alpha/\nu = -0.026(40).$$

Das Verhalten entspricht damit qualitativ demjenigen im London-Limes [8]. Insbesondere deutet die fehlende Skalierung der Suszeptibilität nicht auf einen Phasenübergang zweiter Ordnung mit stark von

[4] Auch wenn genaugenommen ein Phasenübergang erster Ordnung keine kritische Region aufweist, spricht man doch von kritischen Kopplungen und kritischen Exponenten.

[5] Die Ergebnisse können durchaus vom Fitalgorithmus abhängen, sollten jedoch im Rahmen ihrer Fehler konsistent sein.



(a) (b)

Abbildung 3.4: Volumenabhängigkeit der Suszeptibilität χ_{ρ^2} (a) und der Binder-Kumulante B_{ρ^2} (b) bei $\lambda = 0.02$, zusätzliche Fitkurven sind eingetragen

Null verschiedenem α hin.

Die Binder-Kumulante verschwindet im thermodynamischen Limes, vgl. Abbildung 3.4(b). Dies ist konsistent mit der Annahme, dass hier kein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt. Die kritische Kopplung wurde zu

$$\kappa_c = 0.376932(10)$$

bestimmt.

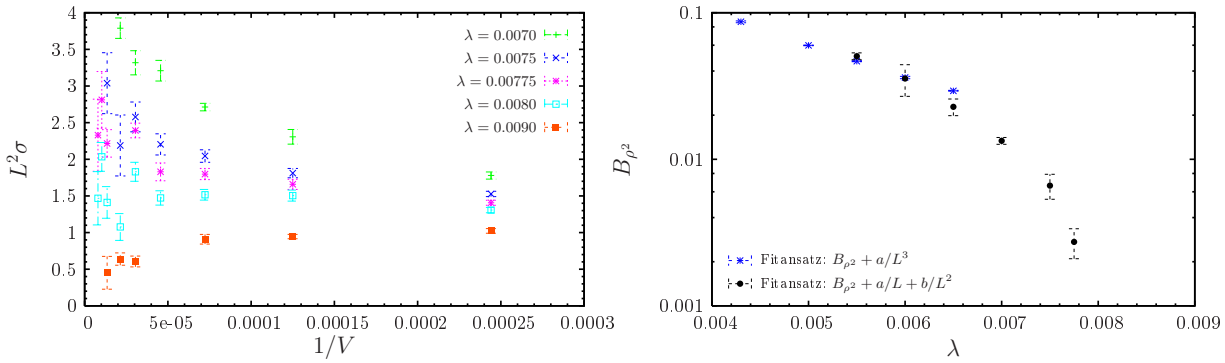
3.4.3 Der Übergangspunkt

Eine interessante Fragestellung besteht darin herauszufinden, bei welcher quartischen Selbstkopplung λ^{EP} sich das Phasenübergangsverhalten ändert. Der fragliche Endpunkt wurde durch eine Analyse der Oberflächenspannung, latenten Wärme und Binder-Kumulante des Higgskondensates eingegrenzt.

Im Falle eines Phasenüberganges erster Ordnung sollte die mit L^2 multiplizierte Oberflächenspannung divergieren, nach Abbildung 3.5(a) ist dies offenbar für $\lambda^{\mathrm{EP}} \geq 0.0080$ nicht der Fall. Eine weitere Eingrenzung des Endpunktes erfordert die Bestimmung obiger Observablen im thermodynamischen Limes. Ober-

Observable	Korrekturterme	Parameterbereich
Oberflächenspannung	$\sigma_L = \sigma + a/L$	alle λ
latente Wärme	$\frac{L_{\mathrm{lat},L}}{g_3^2} = \frac{L_{\mathrm{lat}}}{g_3^2} + a/L^3$	$\lambda < 0.0065$
	$\frac{L_{\mathrm{lat},L}}{g_3^2} = \frac{L_{\mathrm{lat}}}{g_3^2} + a/L$	$0.0065 \leq \lambda < 0.00825$
	$\frac{L_{\mathrm{lat},L}}{g_3^2} = aL^{-b}$	$\lambda \geq 0.00825$
Binder-Kumulante	$B_{\rho^2,L} = B_{\rho^2} + a/L^3$	$\lambda < 0.0065$ & $\lambda > 0.0100$
	$B_{\rho^2,L} = B_{\rho^2} + a/L + b/L^2$	$0.0065 \leq \lambda \leq 0.0100$
Kopplung	$\kappa_{c,L} = \kappa_c + aL^{-1/\nu}$	alle λ

Tabelle 3.1: Die verwendeten Fitansätze und der durch χ^2/Freiheitsgrad bestimmte gültige Parameterbereich des Ansatzes ($Q = 1$)



(a) (b)

Abbildung 3.5: Volumenabhängigkeit der mit L^2 multiplizierten Oberflächenspannung (a); Minimum der Binder-Kumulante (b); Sofern ein Phasenübergang erster Ordung vorliegt, divergiert $L^2\sigma$ und das Minimum der Kumulante verschwindet nicht.

flächenspannung, latenten Wärme und Binder-Kumulante nehmen in diesem Grenzfall endliche Werte an, sofern ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt. Sie verschwinden im thermodynamischen Limes im Falle eines kontinuierlichen Überganges. Allerdings wird die Bestimmung dieses Grenzwertes durch Korrekturen aufgrund der endlichen Gittergrößen erschwert. Je nach Ansatz dieser Korrekturterme können die extrapolierten Ergebnisse deutlich voneinander abweichen. Da in der Nähe des Endpunktes die führenden Korrekturterme unbekannt sind, wurde zur Auswahl der geeigneten Terme die jeweilige Fitqualität χ^2/Freiheitsgrad herangezogen. Für die Oberflächenspannung, latente Wärme und Binder-Kumulante wurden die in Tabelle 3.1 angegebenen Fitansätze verwendet. Die Eingrenzung des Endpunktes erfolgte nach zwei Kriterien. Beginnend bei kleinen λ sinkt ab einen gewissen λ_1 der Wert der entsprechenden Observablen stark. Ab λ_2 verschwinden die Werte der Observablen im thermodynamischen Limes. Der gesuchte Endpunkt λ^{EP} wurde durch die Abschätzung $\lambda_1 < \lambda^{EP} < \lambda_2$ eingegrenzt.

Eine Untersuchung der Binder-Kumulante unter der Fragestellung ihres Verschwindens im thermodynamischen Limes ergibt $0.0065 < \lambda^{EP} < 0.0080$. In Abbildung 3.5 (b) sind die Ergebnisse beider verwendeten Fitansätze dargestellt. Für $\lambda = 0.0080$ verschwindet die Binder-Kumulante im thermodynamischen Limes. Auf analoge Weise erhält man aus der Oberflachenspannung $0.0065 < \lambda^{EP} < 0.0075$. Die latente Wärme hingegen erweist sich als problematisch. Hier war die Auswahl des geeigneten Fitansatzes nicht immer eindeutig. Daher ist nur eine sehr grobe Abschätzung möglich: $0.0070 < \lambda^{EP} < 0.0095$. Der Punkt, bei dem das Phasenübergangsverhalten erster Ordnung endet und ein kontinuierlicher Übergang stattfindet, wird somit bei fixierten $\beta = 2.0$ zu

$$0.0065 < \lambda^{\mathrm{EP}} < 0.0080$$

bestimmt.[6]

[6] Eine genauere Eingrenzung des fraglichen Endpunktes kann durch eine Analyse von Yang-Lee-Nullstellen der Zustandssumme erfolgen. Dies liegt außerhalb des Rahmens dieser Diplomarbeit.

λ	0.0043	0.0050	0.0055	0.0060	0.0065	0.0070
$\kappa_c(\lambda)$	0.356714(14)	0.357827(9)	0.358609(4)	0.359361(10)	0.360112(4)	0.360855(3)
λ	0.0075	0.00775	0.0080	0.00825	0.0085	0.00875
$\kappa_c(\lambda)$	0.361570(3)	0.361922(2)	0.362276(2)	0.362624(2)	0.362970(2)	0.363316(2)
λ	0.0090	0.00925	0.0095	0.00975	0.0100	0.0200
$\kappa_c(\lambda)$	0.363657(3)	0.363997(3)	0.364332(4)	0.364661(4)	0.364999(6)	0.376932(10)

Tabelle 3.2: Kritische Kopplungen κ_c für $Q = 1$ bei fixiertem $\beta = 2.0$ und veränderlicher quartischer Selbstkopplung λ im thermodynamischen Limes. Der Fitfehler ist angegeben.

3.4.4 Kritische Kopplungen

Die kritische Kopplung κ_c ist als Extrapolation der pseudokritischen Kopplungen $\kappa_{c,L}$ bei endlichen Gittergrößen in den thermodynamischen Limes gegeben. Die pseudokritischen Kopplungen wurden durch die Kriterien bzgl. des Higgskondensates definiert : Minimum der Binder-Kumulante, gleiche Höhe der Histogramme bei auflösbarer Zwei-Peak-Struktur bzw. Maximum der Suszeptibilität. Allgemein erwies sich die Skalierung der pseudokritischen Kopplungen als gering. Das durch die Binder-Kumulante bestimmte $\kappa_{c,L}$ wuchs mit dem Gittervolumen leicht an, die jeweils anders definierten pseudokritischen Kopplungen veringerten sich hingegen. Aus jeder Kopplungsdefinition ergab sich ein Schätzungwert für die kritische Kopplung im thermodynamischen Limes. Diese Schätzwerte wurden nach (2.20) fehlergewichtet kombiniert. Da bei der Herleitung dieser Formel statistische Unabhängigkeit vorausgesetzt wurde, ist zur Fehlerabschätzung der maximale Fehler aus den jeweiligen Fits verwendet worden.

In jedem Fall wurde jedoch sichergestellt, dass die einzelnen Schätzungen der kritischen Kopplung im Fehlerintervall des gemittelten Schätzwertes lagen. Um die Extrapolation nach (3.2) durchführen zu können, wurde zunächst der unbekannte Exponent ν geschätzt. Da jede nach einem der obigen Kriterien definierte pseudokritische Kopplung das Skalierungsverhalten (3.2) besitzt, kann für eine Bestimmung von ν sinnvollerweise ihre Differenz verwendet werden. Dann entfällt ein Fitparameter (κ_c) und es gilt:

$$\Delta\kappa_{c,L} = aL^{-1/\nu}.$$

Für alle $\lambda \leq 0.0100$ wurde $1/\nu = 2.9(4)$ gefunden. Im Falle von $\lambda = 0.0200$ wurde hingegen $1/\nu = 1.7(5)$ bestimmt. Die Extrapolation wurde daher mit den Werten $1/\nu = 3$ ($\lambda \leq 0.0100$) und $1/\nu = 1.5$

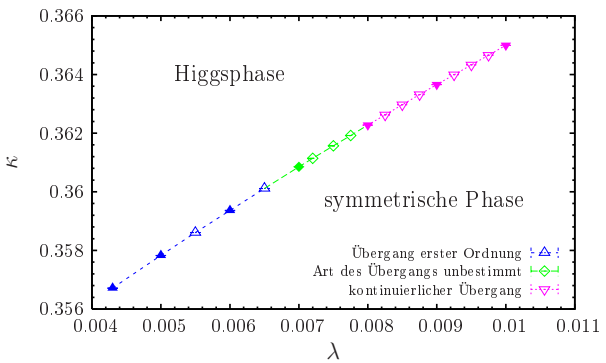


Abbildung 3.6: Die Phasenstruktur des abelschen Higgsmodells in der fundamentalen Darstellung nahe des Endpunktes für fixiertes $\beta = 2.0$. Fehlerbalken der kritischen Linie sind aufgrund ihrer Kleinheit nicht darstellbar. Messpaare (κ_c, λ_c) sind aus Darstellungsgründen durch Geraden verbunden. Messergebnisse mit (leer) und ohne (ausgefüllt) Verwendung von Reweighting im Selbstkopplungsparameter λ sind entsprechend abgebildet.

($\lambda = 0.0200$) durchgeführt.

Die ermittelten kritischen Kopplungen sind in Tabelle 3.2 angegeben. Die Phasenstruktur des Modells im betrachteten Parameterbereich ist in Abbildung 3.6 dargestellt.

3.4.5 Verhalten ausgewählter Observablen

Das Verhalten der topologischen Variablen ρ_{mon} und ρ_{ano}, sowie des Higgskondensates ρ^2 nahe der kritischen Kopplung κ_c für fixiertes $\beta = 2.0$ und wahlweise quartische Selbstkopplungen $\lambda = 0.005$ und $\lambda = 0.02$ ist im Anhang A abgebildet.

3.5 Phasenstruktur für die Darstellung $Q = 2$

Die Bemerkungen zu verwendeten Algorithmen und Methoden aus Abschnitt 3.4 übertragen sich weitgehend auf den Fall $Q = 2$. Ein wichtiger Unterschied stellt eine Modifikation der Eichfeldaktualisierung dar. Dabei wird anstelle von (2.5) der geänderte Vorschlag

$$\theta_{n,\mu} \to \theta'_{n,\mu} \equiv \theta_{n,\mu} + t\tau + \frac{2\pi}{Q}\tau' \mod 2\pi \tag{3.5}$$

verwendet, wobei $\tau' \in \{0, \ldots, Q-1\}$ eine von τ unabhängige Zufallszahl darstellt. Für große κ ist das Eichfeld $\theta_{n,\mu}$ auf Belegungen der Art $\theta_{n,\mu} \in \{-\pi, 0\}$ eingeschränkt. Eine Steuerung der Akzeptanzwahrscheinlichkeit der Eichfeldaktualisierung nach (2.5) führt zu sehr kleinen Skalenfaktoren t, da eine Änderung des Eichwinkels um π üblicherweise eine große Wirkungsänderung zur Folge hat. Es ist klar, dass mit (3.5) ein Steckenbleiben in einer speziellen $\mathbb{Z}_2$ Konfiguration der Eichwinkel verhindert wird. Ein anderer Ausweg besteht darin, auf Akzeptanzsteuerung ganz zu verzichten [38]. Die Effizienz dieses Verfahrens bleibt jedoch nachzuweisen.

3.5.1 Das Gebiet erster Ordnung

Für eine quartische Selbstkopplung von $\lambda = 0.02$ weist das System einen Phasenübergang erster Ordnung auf. Neben einem beobachteten metastabilen Verhalten bezüglich einer Änderung der Kopplung κ und der entsprechenden Zwei-Peak-Struktur im Histogramm von ρ^2 unterstützen die in den thermodynamischen Limes extrapolierten Werte der Oberflächenspannung, latenten Wärme und Binder-Kumulante diese Annahme. Aufgrund der hohen Oberflächenspannung war eine Messung thermodynamischer Größen nur auf

Observable	Korrekturterme	Parameterbereich
Oberflächenspannung	$\sigma_L = \sigma + a/L$	$\lambda = 0.02$
Latente Wärme	$\frac{L_{\mathrm{lat},L}}{g_3^2} = \frac{L_{\mathrm{lat}}}{g_3^2} + a/L^3$	$\lambda = 0.02$
Binder-Kumulante	$B_{\rho^2,L} = B_{\rho^2} + a/L^3$	$\lambda = 0.02$
	$B_{\rho^2,L} = B_{\rho^2} + a/L^2 + b/L^3$	$\lambda = 0.2$

Tabelle 3.3: Die verwendeten Fitansätze und der durch χ^2/Freiheitsgrad bestimmte gültige Parameterbereich für $Q = 2$ Messungen

relativ kleinen Gittern mit Gitterlängen $L = 8, 10, 12, 14$ möglich. Die extrapolierten Werte sind daher mit höheren Fehlern behaftet als im Falle der $Q = 1$–Studie. Mit den Fitansätzen aus Tabelle 3.3 ergibt sich

$$\frac{L_{\text{lat}}}{g_3^2} = 0.42(3), \quad \sigma = 0.025(6), \quad B_{\rho^2} = 0.058(5)$$

Die kritische Kopplung wurde zu

$$\kappa_c = 0.41870(6)$$

bestimmt.

3.5.2 Das Gebiet zweiter Ordnung

Die Vermutung, dass für eine Selbstkopplung $\lambda = 0.2$ ein Übergang zweiter Ordnung vorliegt, wird durch mehrere Faktoren gestützt. So ist für genügend große Gitter keine Zwei-Peak-Struktur erkennbar. Ein Phasenübergang erster Ordnung kann aber auch aus dem Verschwinden der Binder-Kumulante (Abbildung 3.7(a)) und der Analyse des Skalierungsverhaltens der Suszeptibilität des Higgskondensates ρ^2 ausgeschlossen werden. Letztere skaliert nicht linear mit dem Volumen (Abbildung 3.7(b)). Dass diese Größe überhaupt skaliert (und nicht wie etwa im Falle $Q = 1$ einen konstanten Wert annimmt, vgl. Abbildung 3.4(a)) deutet auf einen tatsächlichen Phasenübergang hin. Im London-Limes wurde ein Phasenübergang zweiter Ordnung bereits nachgewiesen [12]. Ein weiteres Indiz stellt das starke Anwachsen der Autokorrelationszeit mit der Gittergröße dar (*critical slowing-down*). Diese hohe Autokorrelationszeit schränkte die den Messungen zugänglichen Gitterlängen auf $L \leq 28$ ein. Es wurden demnach Messungen auf Gittern der Seitenlängen $L = 8, 10, 12, 16, 20, 24, 28$ durchgeführt.

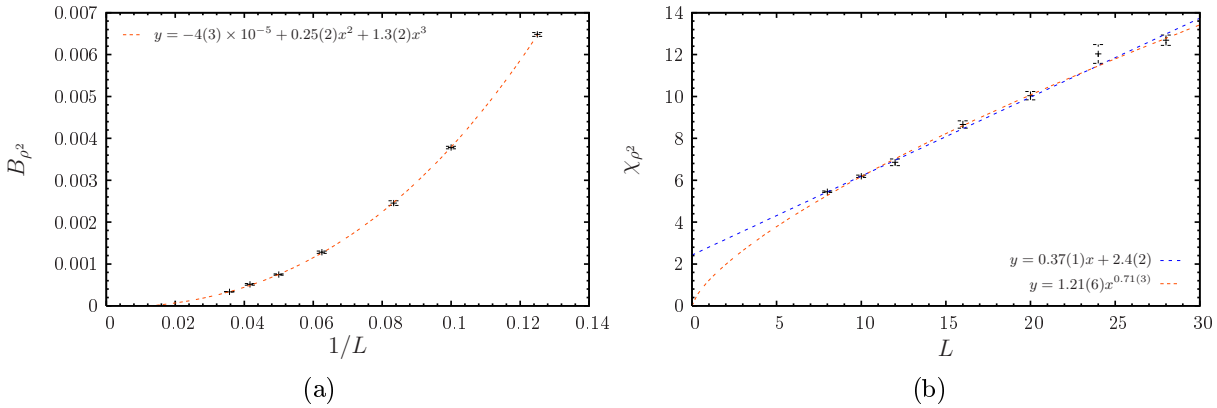
Zur Extrapolation der Daten in den thermodynamischen Limes müssen geeignete Fitansätze gewählt werden. Viele Ansätze der Finite-Size-Scaling Theorie benötigen dazu jedoch die Kenntnis entsprechender Exponenten. Sofern diese nicht vorliegen, können sie als Parameter allgemeiner Fitfunktionen aus den vorhandenen Daten bestimmt werden. Dazu ist allerdings eine sehr gute Datenqualität notwendig. Andererseits kann man versuchen, die Daten durch Terme invers zu Potenzen der Gitterlänge anzupassen. Welcher Fitansätz der geeignete ist, kann durch die Fitqualität χ^2/Freiheitsgrad bestimmt werden. Hier wird nun folgender Weg eingeschlagen: Zunächst erfolgt durch eine Analyse des dritten Momentes $M_{3,S_{\text{link}}}$ des Wirkungsbestandteiles S_{link} eine Bestimmung der kritischen Exponenten ν und α. Anschließend wird eine Überprufung der Hyperskalenrelation vorgenommen und die kritische Kopplung ermittelt.

Das dritte Moment einer Observablen O ist dabei definiert als

$$M_{3,O} = \frac{1}{V}\langle (O - \langle O\rangle)^3\rangle = \frac{1}{V}\left[\langle O^3\rangle - 3\langle O^2\rangle\langle O\rangle + 2\langle O\rangle^3\right].$$

Dieses Verfahren kam bereits bei entsprechenden Untersuchungen im London-Limes zum Einsatz [38][54]. Dort geben die Autoren an, dass sich die Bestimmung der kritische Exponenten aus dritten Momenten von Wirkungsbestandteilen als günstiger erwies, als eine traditionelle Analyse des Skalierungsverhaltens ihrer Suszeptibilitäten.

Die Analyse von $M_{3,S_{\text{link}}}$ nutzt das Skalierungsverhalten der in Abbildung 3.8 dargestellten Zwei-Peak-Struktur. Aus der Kopplungsdifferenz $\Delta\kappa$ beider Extrema lässt sich der Exponent ν bestimmen. Aus dem Abstand ΔM_3 von Maximum und Minimum des dritten Momentes hingegen ergibt sich $(1+\alpha)/\nu$. Durch



(a) (b)

Abbildung 3.7: Abhängigkeit der Binder-Kumulante und Suszeptibilität des Higgskondensates von der Gittergröße

Einsetzen von ν gewinnt man so den Exponenten α. In Abbildung 3.9 sind die entsprechenden Kopplungsdifferenzen bzw. Peakabstände über der verwendeten Gitterlänge in einem doppel-logarithmischen Plot aufgetragen.

Um zu verhindern, dass das Verwenden zu kleiner Gitterlängen die ermittelten Werte der kritischen Exponenten verfälscht, wurde der lineare Fit jeweils mit den $m = 7, \ldots, 3$ größten Gittern durchgeführt. Für $m \leq 6$ stimmen die ermittelten Werte für die Exponenten jeweils überein. Die Schwankungen der ermittelten Werte in Abhängigkeit von m dienen zur Fehlerabschätzung. Die kritischen Exponenten wurden nach diesem Verfahren zu

$$\nu = 0.490(15), \quad (1+\alpha)/\nu = 3.0(1), \quad \text{und somit } \alpha = 0.47(10)$$

bestimmt. Diese Werte sind konsistent mit der Annahme $\nu = 1/2$ und $\alpha = 1/2$. Als wichtige Folgerung ist damit die Hyperskalenrelation $\alpha = 2 - d\nu$ erfüllt. Für Systeme unterhalb ihrer kritischen Dimension (ab der die Molekularfeld-Näherung exakt wird) ist dies generell zu erwarten. Hier kann diese Relation als nicht-trivialer Test der verwendeten Methode angesehen werden.

Ein traditioneller Weg der Bestimmung kritischer Exponenten besteht in der Messung zweiter Momente (z.B. Suszeptibilität) einer geeigneten Messgröße (hier des Higgskondensates). In Abbildung 3.7(b) wurde die Suszeptibilität mit einem bezüglich der Gitterlänge linearen Fit und einem Potenzfit beschrieben. Beide Ansätze sind konsistent mit den vorhandenen Daten. Das Verhältnis α/ν kann so zu $0.7 \lessapprox \alpha/\nu \lessapprox 1$

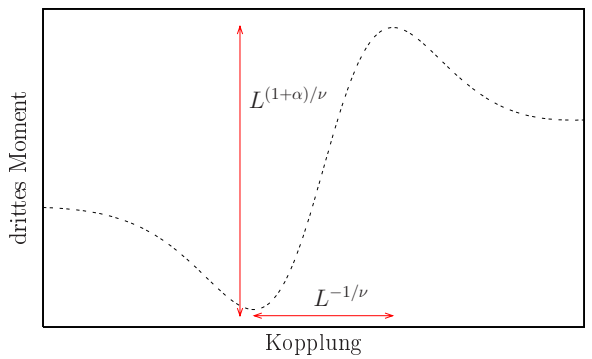


Abbildung 3.8: Das dritte Moment eines Wirkungsbestandteiles weist eine Zwei-Peak-Struktur auf. Ihr Skalierungsverhalten ermöglicht die Bestimmung von ν und α. Nach [38]

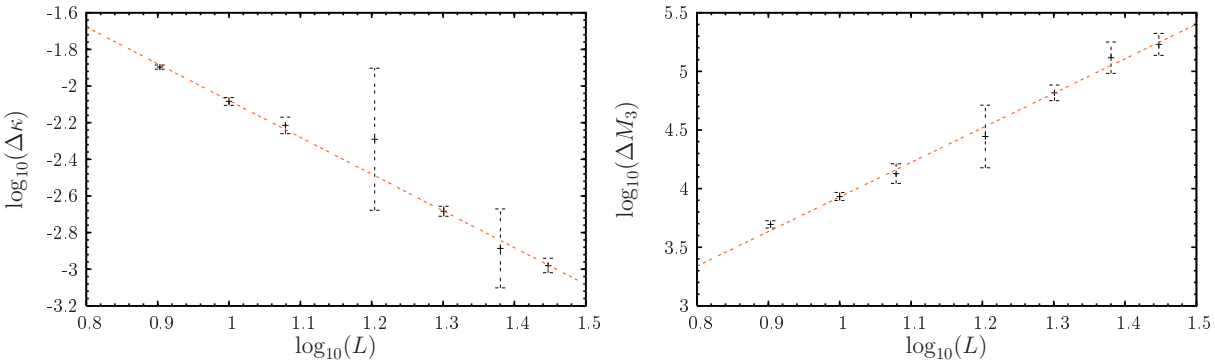


Abbildung 3.9: Bestimmung von ν (a) und $(1+\alpha)/\nu$ (b) aus dem Verhalten des dritten Momentes von S_{link}

abgeschätzt werden. Ausgehend von obig ermittelten Exponenten gilt $\alpha/\nu \approx 1$. Die Verwendung der Suszeptibilität liefert somit zumindest ein konsistentes Ergebnis.

Bedingt durch spürbaren Einfluss von Korrekturtermen zweiter und höherer Ordnung erwies es sich als schwierig, die kritische Kopplung genau zu bestimmen. Nach folgenden zwei Fitansätzen, welche beide die Daten sehr gut beschreiben, wurde die entsprechende kritische Kopplung zu

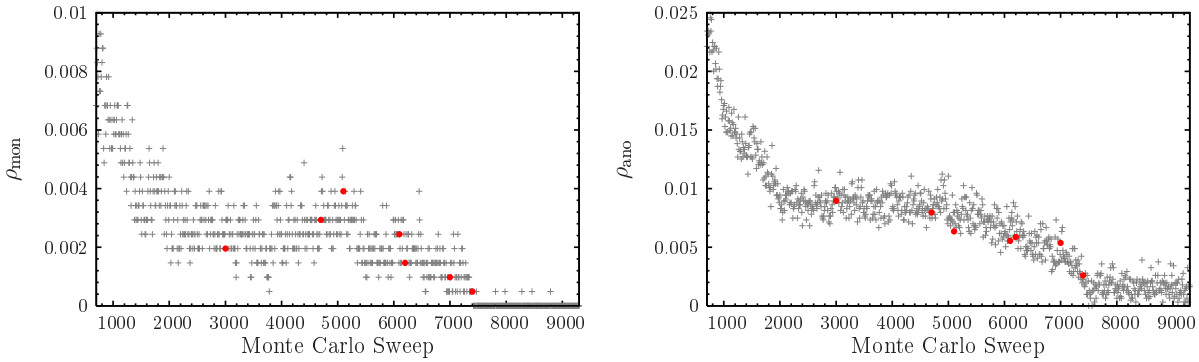
$$\kappa_c = 0.5518(4), \text{ Ansatz: } \kappa_{c,L} = \kappa_c + a_1/L^2 + a_2/L^3$$
$$\kappa_c = 0.5533(5), \text{ Ansatz: } \kappa_{c,L} = \kappa_c + a_1/L + a_2/L^3$$

errechnet. Nachfolgend wird daher der Wert $\kappa_c = 0.5526(12)$ verwendet.

3.5.3 Monopolketten

Eine Betrachtung der Monopoldichten und anderer topologischer Messgrößen für $\kappa \gtrsim \kappa_c$ deutete überraschenderweise auf ein metastabiles Verhalten hin. In Abbildung 3.10 sind Monopol-und ANO-Stringdichte während einer ungewöhlich langen Thermalisierungphase dargestellt. Ausgehend von einem „Warmstart“ relaxiert das System zunächst zu einer geringeren Anzahl von Monopolen und ANO-Strings. Diese Reduktion wird nach ca. 2000 Sweeps unterbrochen und ein metastabiles Regime erreicht. Da hier $\kappa \gg \kappa_c$ gilt, sollten die Dichten der topologischen Messgrößen näherungsweise verschwinden. Nach ca. 7400 Sweeps sinken Monopoldichte und ANO-Stringdichte tatsächlich und der Gleichgewichtszustand wird eingenommen. Die zwischenzeitliche Metastabilität wurde bei verschiedenen Selbstkopplungen λ jeweils in der Higgsphase festgestellt. Dabei wurden Relaxationszeiten bis zu 250000 Sweeps beobachtet.

An den in Abbildung 3.10 markierten Messungpunkten wurden die Monopol- und ANO-Stringpositionen aufgenommen. Die zugehörigen Abbildungen finden sich in Anhang A. Sie lassen sich wie folgt qualitativ verstehen. Wie weiter oben beschrieben, bilden ANO-Strings entweder geschlossene Schleifen oder enden an (Anti-)Monopolen. Da jeweils $Q = 2$ ANO-Strings von jedem (Anti-)Monopol ausgehen, bilden die durch die ANO-Strings induzierten topologischen Objekte geschlossene Linien, auf denen die (Anti-)Monopole kettenartig aufgereiht scheinen. Die topologische Stuktur dieser Monopolketten lässt sich durch die Zahl von Windungen um das Torusgitter in den drei möglichen Richtungen beschreiben. Eine Änderung der Windungszahl ist bei lokalen Aktualisierungsverfahren nur möglich, wenn sich zwei



(a) (b)

Abbildung 3.10: Monopoldichte (a) und ANO-Stringdichte (b) in Abhängigkeit der Monto Carlo Zeit. Ein metastabiles Verhalten wird beobachtet. Für die hervorgehobenen Messwerte sind die Positionen der Monopole und ANO-Strings im Anhang dargestellt.

Monopolketten in einer Elementarzelle des Gitters treffen, d.h. eine Überschneidung auf dem dualen Gitter vorliegt. Die Persistenz der Metastabilität erklärt sich nun eventuell daraus, dass dieser Fall bei einer geringen ANO-Stringdichte selten eintritt. Eine weiterführende Analyse von Monopolketten findet sich in [55].

3.5.4 Verhalten ausgewählter Observablen

Die in Abschnitt 3.4.5 beschriebenen Observablen sind im Anhang A für die quartischen Selbstkopplungen $\lambda = 0.02$ und $\lambda = 0.2$ nahe der kritischer Kopplung κ_c abgebildet.

Kapitel 4

Der Photonpropagator

4.1 Definition

4.1.1 Der Propagator der abelschen Eichtheorie

Sei die euklidischen Wirkung einer skalaren Feldtheorie in der Pfadintegraldarstellung gegeben und die Impulsfreiheitsgrade bereits ausintegriert.

$$S[\phi] = \int d^4x \frac{1}{2}\phi(x)M\phi(x) + \lambda V[\phi] =: \frac{1}{2}(\phi, M\phi) + \lambda V[\phi]$$

Hier wurde eine suggestive[1] und abkürzende Schreibweise für das Integral eingeführt. Das erzeugende Funktional $Z_\lambda[J]$ ist definiert als

$$Z_\lambda(J) = \mathcal{N}^{-1} \int \mathcal{D}\phi \; e^{-S[\phi]+(J,\phi)} \tag{4.1}$$

Dies kann auch als

$$Z_\lambda(J) = \int d\mu_M(\phi) e^{-\lambda V(\phi)+(J,\phi)}.$$

geschrieben werden, wobei das Maß

$$d\mu_M(\phi) = (\det 2\pi M^{-1})^{-\frac{1}{2}} D\phi e^{-\frac{1}{2}(\phi, M\phi)}$$

verwendet wurde. Die Normierungskonstante $\mathcal{N}$ wurde hierbei geeignet gewählt. Im Falle einer freien Theorie $\lambda = 0$ lässt sich das erzeugende Funktional leicht berechnen. Sofern man den Ausdruck (4.1) nicht als formalen Ausdruck auffaßt, muss die euklidische Raum-Zeit diskretisiert werden. Dadurch wird das Funktionalintegral über unendlich viele Feldkonfigurationen in ein gewöhnliches Mehrfachintegral über endlich viele Freiheitgrade überführt. Dieses Integral zerfällt in das Produkt einfacher Gaußintegrale [18]. Man findet

$$Z_0(J) = \int d\mu_M(\phi) e^{(J,\phi)} = e^{\frac{1}{2}(J, M^{-1}J)}. \tag{4.2}$$

[1] Auf dem Gitter geht das Integral in ein Summe über und dem Integralkern eines Operators M entspricht eine Matrix usw.

Der Propagator $C(x',x)$ einer Theorie mit dem Feld ϕ kann als 2-Punkt-Green-Funktion definiert werden: [2]

$$C(x',x) = \langle 0|\mathcal{T}[\phi(x')\phi(x)]|0\rangle =: \langle\phi(x')\phi(x)\rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi\phi(x)\phi(x')\ e^{-S[\phi]}}{Z_\lambda(0)}$$
$$= \left[\frac{1}{Z_\lambda(0)}\frac{\delta^2}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)}Z_\lambda(J)\right]_{J=0}.$$

Allgemein lässt sich die n-Punkt-Green-Funktion aus dem erzeugenden Funktional durch entsprechendes funktionales Ableiten gewinnen:

$$G^{(n)}(x_1,\ldots,x_n) = \left[\frac{1}{Z_\lambda(0)}\frac{\delta^n}{\delta J(x_1)\ldots\delta J(x_n)}Z_\lambda(J)\right]_{J=0}.$$

Wenn die Lagrangedichte nur quadratisch vom Feld abhängt, kann der Propagator gleich aus der Lagrangedichte abgelesen werden. Aus dem Vergleich mit (4.2) zeigt sich, dass der Propagator $C(x',x)$ der freien Theorie dem inversen Integralkern des quadratischen Anteils der Lagrangedichte entspricht.

Verschiedene Lagrangedichten, die dieselbe Wirkung bestimmen, sind physikalisch äquivalent. Durch partielle Integration kann die Lagrangedichte (1.17) in eine jeweils geignetere umgeformt werden.[3] Anstelle von (1.17) kann also auch $\mathcal{L}_1$ bzw. $\mathcal{L}_2$ verwendet werden, mit

$$\mathcal{L}_1 = -\frac{1}{2}A_\mu(\delta_{\mu\nu}\Box_E - \partial_\mu\partial_\nu)A_\nu$$

bzw.

$$\mathcal{L}_2 = -\frac{1}{2}A_\mu(\delta_{\mu\nu}\Box_E)A_\nu - \frac{1}{2}(\partial_\nu A_\nu)^2.$$

Die Wirkung (1.16) wird dadurch nicht beeinflußt. Nach diesem Prozedere kann aus $\mathcal{L}_1$ der inverse Propagator $D^{-1}_{\mu\nu}$ abgelesen werden:

$$D^{-1}_{\mu\nu} \propto \delta_{\mu\nu}\Box_E - \partial_\mu\partial_\nu.$$

Leider besitzt dieser Operator kein Inverses, da sein Kern nicht-trivial ist [56]. Sei $f = \partial_\nu g$ eine Gradientenfunktion, dann gilt

$$D^{-1}_{\mu\nu}\partial_\nu g \propto (\delta_{\mu\nu}\Box_E\partial_\nu - \partial_\mu\Box_E)g = 0$$

Ein Ausweg besteht darin, eine Eichfixung an dem Feld A_μ vorzunehmen. Dazu wird zur Lagrangedichte ein Eichfixierungsterm hinzugefügt.

$$\begin{aligned}\mathcal{L} =& \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_{GF}\\ =& -\frac{1}{2}A_\mu(\delta_{\mu\nu}\Box_E - \partial_\mu\partial_\nu)A_\nu + \frac{1}{2\lambda}(\partial_\mu A_\mu)^2\end{aligned} \tag{4.3}$$

Diese Lagrangedichte ist unter Verwendung von partiellen Integrationen äquvialent zu

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}A_\mu(\delta_{\mu\nu}\Box_E - (1-\frac{1}{\lambda})\partial_\mu\partial_\nu)A_\nu$$

Es ergeben sich die Bewegungsgleichungen

$$(\delta_{\mu\nu}\Box_E - (1-\frac{1}{\lambda})\partial_\mu\partial_\nu)A_\nu = 0,$$

[2] Falls verschiedene Felder bzw Feldkomponenten existieren, so werden entsprechend viele Propagatoren bzw. Propagatorkomponenten definiert und die Definition entsprechend verallgemeinert.

[3] Unter der Annahme, dass A_μ im Unendlichen verschwindet.

sowie der inverse Propagator:

$$D^{-1}_{\mu\nu} = -\delta_{\mu\nu}\Box_E + (1 - \frac{1}{\lambda})\partial_\mu\partial_\nu.$$

Man geht nun über zur Impulsdarstellung und gewinnt als den inversen Operator den Photonpropagator $D_{\mu\nu}$ im Impulsraum.

$$D_{\mu\nu}(p) = \frac{1}{p^2}(\delta_{\mu\nu} + (\lambda - 1)\frac{p_\mu p_\nu}{p^2}) \tag{4.4}$$

Gebräuchliche Eichfixierungsbedingungen sind $\lambda = 1$ (Feynman-Eichung) und $\lambda = 0$ (Landau-Eichung). Im letzteren Fall erzwingt der Lagrange-Multiplikator die Divergenzfreiheit des Eichfeldes, d.h. $\partial_\mu A_\mu = 0$, vgl. (4.3).

4.1.2 Der Propagator im abelschen Higgsmodell auf dem Gitter

Der Photonpropagator im Kontinuum ist als 2-Punkt Korrelationsfunktion des Eichfeldes definiert. Im Impulsraum ist der Propagator $D_{\mu\nu}$ daher gegeben als[4]

$$D_{\mu\nu}(\vec{p}) = \langle \tilde{A}_\mu(\vec{p})\tilde{A}_\mu(-\vec{p})\rangle \tag{4.5}$$

Hierbei bezeichne $\tilde{A}_\mu$ die Fouriertransformierte des Eichfeldes A_μ. Der Propagator ist per Definition eichabhängig. In dieser Arbeit wurde die Landau-Eichung gewählt, da diese kovariante Eichung in vielen Untersuchungen von Eichpropagatoren in QED, z.B. [57][58][59], und QCD, z.B. [60][61][62][63], verwendet wurde. Auf dem Gitter ist diese Eichung durch die Minimierung des Eichfunktionals $\mathcal{G}$ gegeben

$$\mathcal{G}[\alpha] = \sum_{n,\mu} \cos(\theta_{n,\mu} - \alpha_{n,\mu} + \alpha_{n+e_\mu,\mu}) \to \max \tag{4.6}$$

Aus der notwendigen Forderung

$$\frac{\delta\mathcal{G}[\alpha]}{\delta\alpha(n)} = 0$$

folgt

$$\sum_\mu [\sin(\theta_{n,\mu}) - \sin(\theta_{n-\mu,\mu})] = 0 \tag{4.7}$$

Dies entspricht im Kontinuumslimes $\partial_\mu A_\mu = 0$, also der Landau-Eichung. Auf dem Gitter in drei Dimensionen wird der Propagator analog zu (4.5) definiert. Die Identifikation des Eichfeldes mit einer entsprechenden Gittergröße ist allerdings nicht eindeutig. Im Weiteren wird die Sinus-Darstellung (1.26) in modifizierter Form verwendet. Da das Eichfeld $A_{x,\mu}$ auf dem Gitter durch Links repräsentiert wird, dient die Menge $\{x \mid x = n + \frac{1}{2}e_\mu\}$ als sein natürlicher Träger.

$$A_{n+\frac{1}{2}e_\mu,\mu} = \frac{1}{qa}\sin(\theta_{n,\mu}) = \sqrt{\frac{\beta}{a}}\sin(\theta_{n,\mu})$$

Allerdings verkörpert der Gitterabstand a keinen der Simulation direkt zugänglichen Parameter. Es wird daher die bis auf den Vorfaktor äquivalente Identifikation

$$A_{n+\frac{1}{2}e_\mu,\mu} = \sin(\theta_{n,\mu})$$

[4]Vektoren werden nur besonders gekennzeichnet, falls Verwechslungen zu befürchten sind

verwendet. Auf dem Gitter ist das fouriertransformierten Eichfeld durch den folgenden Ausdruck gegeben

$$\tilde{A}_{\vec{k},\mu} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} \sum_n e^{2\pi i \sum_{\nu=1}^3 \frac{k_\nu (n\nu + \frac{1}{2}\delta_{\nu\mu})}{L}} A_{n+\frac{1}{2}e_\mu,\mu}$$

Der (einheitenlose) Photonpropagator[5] im Impulsraum ergibt sich damit nach (4.5) als

$$D_{\mu\nu}(\vec{p}) = \langle \tilde{A}_\mu(\vec{k}) \tilde{A}_\mu(-\vec{k}) \rangle$$

Die Gitterimpulse p_μ hängen mit den ganzzahligen Fourierimpulsen k_μ wie folgt zusammen [6]

$$p_\mu(k_\mu) = \frac{2}{a} \sin \frac{\pi k_\mu}{L_\mu}, \quad k_\mu \in \{0, \pm 1, \ldots, \pm \frac{L_\mu}{2}\}$$

Im Fall eines Systems bei Temperatur null (gleiche Gitterlängen in zeitlicher und räumlicher Richtung) ist der Propagator im Kontinuumslimes rotationsinvariant, d.h. eine Funktion des Impulsbetrages. Der allgemeinste Ansatz für einen rotationsinvarianten und reellen Tensor zweiter Stufe $D_{\mu\nu}$ ist

$$D_{\mu\nu}(\vec{p}) = P_{\mu\nu}(\vec{p}) D(p^2) + \frac{p_\mu p_\nu}{p^2} \frac{F(p^2)}{p^2} \tag{4.8}$$

Der transversale Projektionsoperator $P_{\mu\nu}$ ist durch

$$P_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} - \frac{p_\mu p_\nu}{p^2} \tag{4.9}$$

gegeben und besitzt, wie man leicht nachprüft, die Eigenschaften

$$P_{\mu\nu} P_{\nu\lambda} = P_{\mu\lambda}, \quad P_{\mu\mu} = d - 1$$

Die transversalen (D) und longitudinalen (F) skalaren Strukturfunktionen lassen sich aus dem Propagator wie folgt herausprojizieren[7]

$$\begin{aligned} F(p^2) =& p_\mu D_{\mu\nu}(\vec{p}) p_\nu \\ D(p^2) =& \frac{1}{d-1} P_{\nu\mu}(\vec{p}) D_{\mu\nu}(\vec{p}) = \frac{1}{d-1} \left[D_{\mu\mu}(\vec{p}) - \frac{F(p^2)}{p^2} \right] \end{aligned}$$

Als Folge der auf einem endlichen Gitter nur näherungsweise erfüllten Rotationsvarianz streuen die Strukturfunktionen für benachbarte Impulsbeträge (Abbildung 4.6). Aus dem Vergleich von (4.8) und (4.9) mit (4.4) ist ersichtlich, dass der Propagator der reinen Eichtheorie im Kontinuum in der Landau-Eichung transversal und masselos ist, d.h.

$$F(p^2) = 0, \quad D(p^2) = \frac{1}{p^2} \tag{4.10}$$

Erstere Eigenschaft wird in der Landau-Eichung generell erwartet. Im Fall des abelschen Higgsmodells ist die transversale Strukturfunktion allerdings nicht mehr von obiger einfacher Gestalt. Es wurde ad hoc folgender Zusammenhang angenommen

$$D(p^2) = \frac{Z m^{2\alpha}}{\beta(p^{2(1+\alpha)} + m^{2(1+\alpha)})} + C \tag{4.11}$$

[5] In Kontinuumseinheiten gilt stattdessen $D^C_{\mu\nu} = \beta/a \; D_{\mu\nu}$.
[6] Die Seitenlängen der betrachteten Gitter seien ganzzahlig.
[7] Aufgrund der Rotationsinvarianz der Strukturfunktionen sei $\vec{p}$ ein beliebiger Impulsvektor mit $\vec{p}^2 = p^2$.

Dieser Ansatz beinhaltet vier Fitparameter. Er wurde bereits erfolgreich angewendet um den Photonpropagator der reinen $U(1)$ Eichtheorie [51] und den Propagator im London Limes des abelschen Higgsmodells zu beschreiben [50]. Ähnliche Ansätze wurden in [60][61] zur Charakterisierung des Gluonpropagator verfolgt. Den Fitparametern kann folgende Bedeutung zugewiesen werden:

- Z ist der Renormalisierungsfaktor der Wellenfunktion
- m die Masse des Propagators
- α die anomale Dimension
- C stellt einen Kontaktterm dar.

Wie in [51] gezeigt, stimmt der Massenparameter mit der Polyakov-Näherung [7] für die durch das Monopol-Antimonopol Plasma erzeugten Debye-Masse überein. Der Parameter C entspricht einer δ-artigen Kontaktwechselwirkung und hat keinen langreichweitigen Einfluss.

4.2 Landau-Eichfixierung

Nachfolgende Ergebnisse beziehen sich auf das Higgsmodell in der fundamentalen Darstellung $Q = 1$ mit $\beta = 2.0$ und für die quartische Selbstkopplung $\lambda = 0.02$. Typischerweise wurde auf 40^3 Gittern gemessen. Bei anderen Selbstkopplungen und in der Darstellung $Q = 2$ wurde dasselbe qualitative Verhalten festgestellt.

4.2.1 Landau-Eichung und Dirac-Strings

Die Eichfixierung (4.6) wird praktisch realisiert [51][64] als Abfolge *lokaler* Eichtransformationen im folgenden Sinne: Die bezüglich eines Gitterplatzes n lokalen Transformationsfelder α_m besitzen die Form

$$\alpha_m = \eta\omega\delta_{n,m}$$

Eich- und Higgsfelder transformieren sich dann nach (1.31). Es sei zunächst $\eta = 1$, die Bedeutung dieses Vorfaktors als Überrelaxationsparameter wird weiter unten beschrieben. Jede Eichtransformation kann in eine Sequenz lokaler Eichtransformationen zerlegt werden. Dasjenige ω bei dem das Eichfunktional in einem lokalen Fixierungsschritt maximal erhöht wird, lässt sich leicht aus Bedingung (4.6) bestimmen. Ein lokaler Fixierungschritt maximiert lokal das Eichfunktional

$$\begin{aligned}\mathcal{G}^{\mathrm{loc}}(\omega) &= \sum_{\mu} \left(\cos(\theta_{n,\mu} - \omega) + \cos(\theta_{n-e_\mu,\mu} + \omega)\right) \to \max \\ &= \cos(\omega) \sum_{\mu} \left(\cos\theta_{n,\mu} + \cos\theta_{n-e_\mu,\mu}\right) + \sin(\omega) \sum_{\mu} \left(\sin\theta_{n,\mu} - \sin\theta_{n-e_\mu,\mu}\right) \end{aligned} \tag{4.12}$$

Die Forderung $\frac{\partial}{\partial\omega}\mathcal{G}^{\mathrm{loc}} = 0$ ergibt schließlich

$$\tan(\omega) = \frac{\sum_\mu \left(\sin\theta_{n,\mu} - \sin\theta_{n-e_\mu,\mu}\right)}{\sum_\mu \left(\cos\theta_{n,\mu} + \cos\theta_{n-e_\mu,\mu}\right)} \tag{4.13}$$

Die $\mathcal{G}^{\mathrm{loc}}$ maximierende Lösung ist eindeutig modulo 2π.

Der grundlegende Ablauf des Eichfixierungsalgorithmus besteht in der sukzessiven Anwendung lokaler Eichtransformationen, bis sich das Eichfunktional unter ihrer Wirkung nicht mehr wesentlich ändert. Eine genaue Beschreibung des Algorithmus findet sich im nächsten Abschnitt. Es ist nicht garantiert, dass durch eine Folge lokal optimaler Fixierungsschritte ein globales Maximum des Eichfunktionals tatsächlich erreicht wird oder erreichbar ist. Es gibt verschiedene Ansätze einem derartigen Maximierungsproblem in hochdimensionalen Räumen zu begegnen.

Eine Möglichkeit bietet die Überrelaxation (*overrelaxation*). Durch die Wahl von $\eta \in (1, 2]$ wird nicht die lokal optimale Eichtransformation verwendet. Auf diese Weise erhöht sich oft die Konvergenzgeschwindigkeit des Algorithmus [65]. Zudem wird das Festsetzen in einem lokalem Maximum in gewissem Umfang vermieden. Schnellste Konvergenz wurde für $\eta \approx 1.8$ erzielt, dies deckt sich mit den Ergebnissen aus [51]. Für die Wahl $\eta = 2$ bleibt das Eichfunktional invariant. Im Weiteren wird aus Analogie mit Spiegelungsschritten in Monte-Carlo Aktualisierungsverfahren dieser Fall als mikrokanonisch bezeichnet, obwohl hier strenggenommen keine Wirkung sondern ein Eichfunktional konstant bleibt. Die Möglichkeit der Verwendung mikrokanonischer Fixierungsschritte wurde in dieser Arbeit (in etwas abgewandelter Form) erstmalig ausgenutzt.

Indem der Fixierungsalgorithmus auf verschiedene eichäquivalente Startkonfigurationen angewendet wird, d.h. auf die ursprünglichen Felder oder auf N_G Kopien der ursprünglichen Feldkonfigurationen, die durch z.B. zufallsbestimmte Eichtransformationen auseinander hervorgehen, kann das Maximierungsproblem weiter entschärft werden. In diesem Fall wählt man dasjenige Maximum mit dem größten Eichfunktional als globales Maximum. Dem liegt die Annahme zugrunde, dass sich eine oder im günstigen Fall mehrere Startkonfigurationen im Attraktionsgebiet eines globalen Maximums befindet. Die Werte nicht eichinvarianter Observablen im besten gefundenen Maximum hängen bei ungenügender Qualität der Eichfixierung von der Anzahl N_G der eichäquivalenten Kopien ab. Umgekehrt signalisiert ein Plateau der Observablenwerte in Abhängigkeit von N_G eine hinreichend gute Eichfixierung. Für die folgende Diskussion wurde $\eta = 1.8$ gewählt. Dies führt zu einer schnellen Konvergenz des Eichfixierungsalgorithmus. Es wird später klar werden, dass diese Wahl für die Messung des Propagators nicht vorteilhaft ist.

Eine genauere Untersuchung des Eichfixierungsalgorithmus enthüllte einen direkten Zusammenhang zwischen Eichfunktional des lokalen Maximums und der dort gemessenen Dirac-Stringdichte. Speziell führt eine Maximierung des Eichfunktionals zur Minimierung der Dirac-Stringdichte, dies deckt sich mit [51]. Dieses Verhalten ist ein echtes Ergebnis der Landau-Eichung und wurde nicht algorithmisch implementiert. Tatsächlich lässt sich in der Villain-Approximation dieser Zusammenhang analytisch zeigen [51].

In der symmetrischen und in Higgsphase ist das Problem der Maximierung des Eichfunktionals von unterschiedlicher Qualität. In Abbildung 4.1 ist die Dirac-Stringdichte über dem Eichfunktional für 195 eichfixierte Konfigurationen aufgetragen. In einem Fall wurde lediglich die Originalkonfiguration fixiert, d.h. $N_G = 0$, im anderen Fall wurden N_G zusätzliche Versuche durchgeführt. Zum einen ist ersichtlich, das die Dirac-Stringdichte linear mit dem Eichfunktional abnimmt. Weiterhin ist offensichtlich, dass in keiner der beiden Phasen ein Fixierungsversuch ausreichend ist. In der Higgsphase genügen anscheinend 61 Versuche, um das globale Maximum tatsächlich zu finden. Indizien dafür sind die geringe Streuung des Eichfunktionals knapp unter 0.955, sowie die effektive Reduktion der Dirac-Stringdichte um ca 75%. In der symmetrischen Phase ist das Verhalten jedoch anders. Sogar mit $N_G = 170$ zusätzlichen Versuchen ist die Minimierung der Dirac-Stringdichten und die Maximierung des Eichfunktionals weniger effizient.

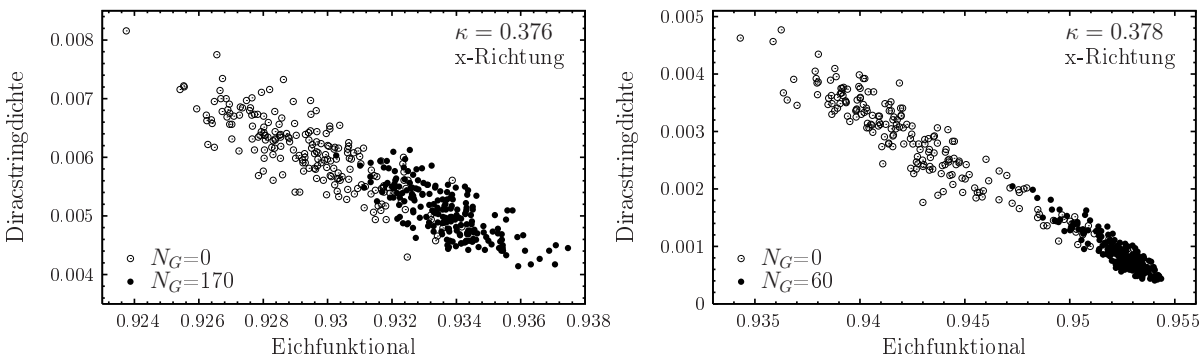
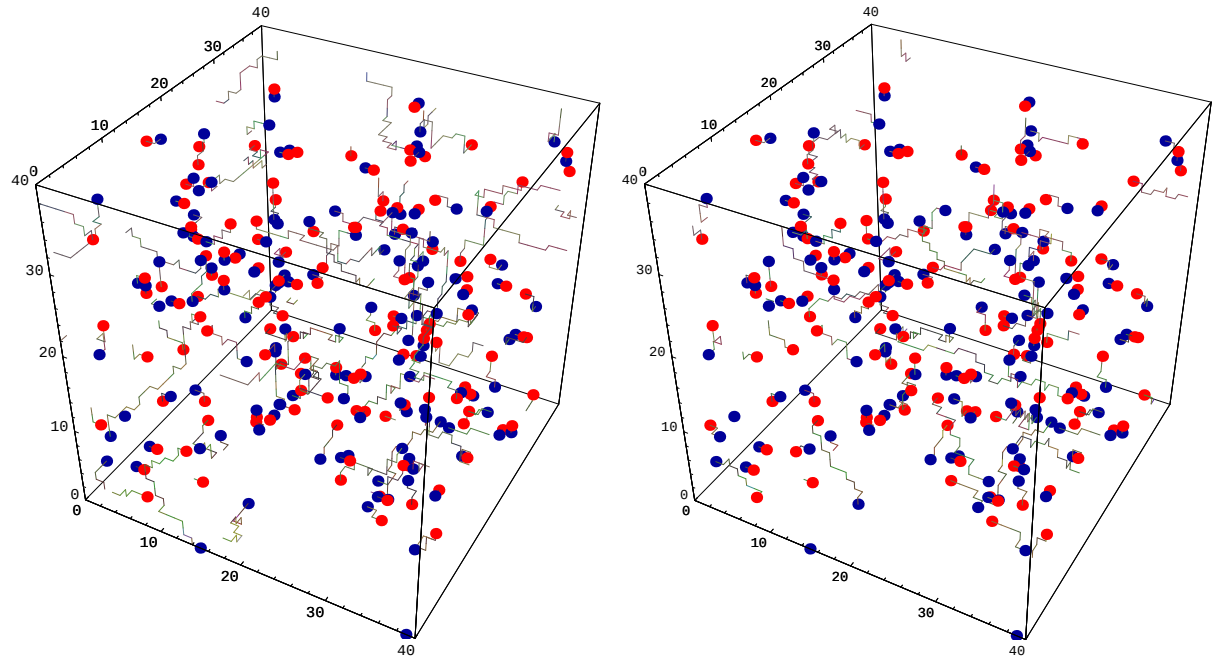


Abbildung 4.1: (a) Eichfixierung mit 1 bzw. 171 Versuchen in der symmetrischen Phase, $\kappa = 0.376$ (b) Eichfixierung mit 1 bzw 61 Versuchen in der Higgsphase, $\kappa = 0.378$

Die große Streuung des Eichfunktionals lässt vermuten, dass das globale Maximum hier selten erreicht wird. Die Auswirkungen einer nicht hinreichend genauen Eichfixierung auf den Propagator werden in einem nachfolgenden Abschnitt vorgestellt.

Die eichabhängigen Dirac-Strings auf dem dualen Gitter bilden entweder offene Diraclinien, die paarweise Monopole und Antimonopole verbinden, oder sie formen geschlossene Schleifen. In der symmetrischen Phase sind große Ansammlungen von Dirac-Strings vorhanden und es ist nicht möglich einzelne Schleifen aufzulösen. Dieses gitterbedingte Problem stammt daher, dass die Zusammengehörigkeit und der Verlauf beim Zusammentreffen mehrerer Diraclinien/Schleifen innerhalb einer Gitterzelle nicht festgestellt werden kann. Lokale Fixierungsschritte können zum Schrumpfen und letztendlichen Verschwinden von Diracschleifen führen. Aus der gemessenen Dirac-Stringdichte lässt sich schlussfolgern, dass keine das Gitter umspannenden Diraclinien vorhanden sind. Eine persistente Existenz derartiger Diraclinien wäre auf das Fehlen globaler Aktualisierungen der Eichfelder zurückzuführen. Ihr Einfluss auf den Propagator im Falle der reinen Eichtheorie wurde in [66] genauer untersucht. Da derartige Diraclinien hier nicht auftreten, scheinen globale Eichfixierungsschritte unnötig und lokale Eichfixierungsalgorithmen ausreichend für die Minimierung der Dirac-Stringdichte zu sein. Monopolpaare verbindende Diraclinien können durch eine Eichtransformation nicht verschwinden. Allerdings kann sich ihr Verlauf und damit ihre Länge im Laufe der Eichfixierung ändern.

Die Ausnutzung der Korrespondenz zwischen Dirac-Stringdichte und Eichfunktional deutet auf ein mögliches Szenario des Maximierungsproblems. Ein lokales Maximum des Eichfunktionals tritt demnach ein, sofern keine Diracschleifen mehr vorhanden sind und Monopolpaare verbindende Diraclinien ihre Länge individuell minimiert haben, zumindest soweit dies mit einer Eichtransformation möglich ist. Die Paarung der Monopole und Antimonopole wird bei der Eichfixierung frühzeitig festgelegt und ist dann, bei einer geringen Zahl von Dirac-Strings, nur schwer änderbar. Ein globales Maximum entspricht einer speziellen Paarung mit minimaler Dirac-Stringdichte. In der symmetrischen Phase existiert ein dichtes Plasma aus Monopolen und Antimonopolen mit neutraler Gesamtladung (Abbildung 4.2). Daher ist eine Vielzahl von Paarungen möglich und die Anzahl der lokalen Maxima des Eichfunktionals groß. In der Higgsphase herrscht ein dünnes Gas aus Dipolen, d.h. nahe benachbarten Monopol-Antimonopolpaaren,



(a) (b)

Abbildung 4.2: Visualisierung einer Eichkonfiguration: Monopole (rot/hell), Antimonopole (blau/dunkel) und Dirac-Strings (Linien) sind nach einer Eichfixierung in der symmetrischen Phase ($\kappa = 0.376$) dargestellt. Ausgehend von der gleichen nicht-eichfixierten Konfiguration wurde der optimierte Fixierungsalgorithmus (siehe Text) angewendet. Im Fall (a) wurde der Überrelaxationsparameter $\eta = 1.9$ verwendet, in (b) dagegen $\eta = 1.997$. Die Eichkonfiguration (b) besitzt eine geringere Dichte von Dirac-Strings und ein höheres Eichfunktional. Die Auswirkung von η auf die Eichfixierung wird im Text erläutert. Monopole belegen in beiden Fällen die gleichen Gitterplätze, da sie eichinvariant und so nicht von Parametern des Fixierungsalgorithmus abhängig sind.

vor. Somit sind wesentlich weniger Paarungen möglich. Zudem ist das globale Maximum auf dem Niveau der Dirac-Stringdichten in vielen Fällen eindeutig. Die optimale Paarung wird durch die Dipolstruktur bereits impliziert. Dieses Bild erklärt, weshalb es in der symmetrischen Phase im Vergleich zur Higgsphase so schwierig ist, ein globales Maximum des Eichfunktionales zu finden. Die Komplexität dieses Problems ist vergleichbar mit dem Auffinden von Grundzuständen in Spingläsern. Allerdings sind weitere Studien nötig, um dieses Szenario zu erhärten, vgl. insbesondere [51] und [67].

4.2.2 Der Fixierungsalgorithmus

Der Algorithmus in seiner einfachsten Form besteht aus folgenden grundlegenden Schritten

1. Erzeugen neuer (kontinuierlicher) Felder aus den originalen Feldern bzw. durch Anwendung einer Zufallseichtransformation.

2. Anwenden lokaler Eichtransformationen ($\eta \in [1, 2]$) auf die neuen Felder sukzessive bezüglich jedes Gitterplatzes. Die Wirkung aller Eichtransformationen wird in einer einzigen Eichtransformation G_i aufsummiert.

3. Beenden, sofern die Änderung des Eichfunktionals unter ein kritischen Wert fällt.

4. N_G mal: Beginn bei 1), ansonsten: Diejenige von allen Eichtransformationen $G_i \in \{1, \ldots, N_G + 1\}$ wählen, die zum größten Eichfunktional führt.

Nun können eichinvariante Observablen gemessen werden. Daran anschliessend wird der Monte-Carlo-Algorithmus fortgesetzt.

Ein Algorithmus, der diesem Schema streng folgt, wird im Weiteren als rein kontinuierlicher Fixierungsalgorithmus bezeichnet. Die Eichfixierung mit kontinuierlichen kompakten Feldern ist sehr zeitaufwändig. Im Sinne eines äquivalenten, aber schnelleren Algorithmus wurden in dieser Arbeit mehrere Verbesserungen eingeführt. Die Implementationen wurden besonders in der symmetrischen Phase getestet, da dies die bezüglich Maximierung des Eichfunktionals kritische Region darstellt. Zunächst wurden die Auswirkungen der Einschränkung der Linkvariablen auf die diskrete Untergruppe $\mathbb{Z}_N \subset U(1)$ untersucht.

Hierbei werden Linkwinkel und folglich auch die Eichtransformationen auf diskrete Werte $\in \mathbb{Z}_N$ abgebildet. Die Diskretisierung bietet den entscheidenen Vorteil, dass kostspielige, trigonometrische Funktionen in (4.13) nicht mehr verwendet werden müssen. Stattdessen werden für alle N Belegungen der diskreten Linkwinkel die Werte dieser Funktionen einmal zu Beginn des Programmes berechnet und in einer Tabelle abgelegt.

Eine weitere Beschleunigung wurde durch eine Präselektion erzielt. Die Idee besteht darin, $N_G + 1$ diskrete Fixierungsversuche durchzuführen, allerdings nur bis zum Erreichen einer schwachen Abbruchgrenze (ξ_P). Dann wird diejenige Eichtransformation, die zum bislang größten Eichfunktional führt, auf die ursprüngliche Feldkonfiguration angewendet. Anschliessend werden die so erhaltenen, noch nicht exakt eichfixierten Felder, einer weiteren Eichfixierung mit einem harten Abbruchkriterium unterzogen, d.h. die erlaubte Änderung des Eichfunktionales ist sehr klein. Der Präselektion liegt die intuitive Vorstellung zugrunde, dass während der Präselektionsphase der Algorithmus eine spezielle Paarung von Monopolen und Antimonopolen auswählt. Im zweiten Schritt findet lediglich eine Feinabstimmung statt, d.h. vorhandene Diracschleifen werden entfernt und Monopol-Antimonopolpaare verbindende Diraclinien minimieren ihre Länge. Es erscheint plausibel, dass daher dem ersten Schritt eine besondere Bedeutung zukommt, will man ein globales Maximum des Eichfunktionals tatsächlich finden.

Beide Ideen wurden derart kombiniert, dass in der Präselektionsphase die diskrete Eichfixierung mit einem Überrelaxationsparameter η_P eingesetzt wurde. Anschliessend wurde die diskrete Eichfixierung, die das bislang größte Eichfunktional ergab, in den Bereich $[-\pi, \pi)$ abgebildet und auf die Ausgangsfelder angewendet. Die gewonnenen kontinuierlichen Felder wurden nun einer Eichfixierung mit einem Überrelaxationsparameter η_F unterworfen, bis ein hartes Abbruchkriterium erfüllt war. Dieser Algorithmus wird im Folgenden als optimierter Eichfixierungsalgorithmus bezeichnet. Im Vergleich zum kontinuierlichen Algorithmus ist der optimierte Algoritmus etwa 10-mal schneller.

Erste Tests zeigten zunächst, dass der optimierte Fixierungsalgorithmus mit $N = 256$ auf einem 40^3 Gitter im Mittel zu einem geringeren Eichfunktional führte. Wurden jedoch $N = 65536$ Diskretisierungsstufen verwendet, so ergaben optimierter und rein kontinuierlicher Fixierungsalgorithmus im Rahmen der statistischen Fehler dasselbe maximale Eichfunktional. Die speziellen Werte fur N erklären sich aus der Implementierung der $\mathbb{Z}_N$ als C-short bzw. C-integer Zahlen. Die genaue Wahl der Abbruchkriterien hängt von der Eichfunktionallandschaft und damit von Gittergröße, Kopplungparametern und Überrelaxationsparametern η_P, η_F ab. Durch Ergebnisse entsprechender Tests wurden die Abbruchgrenzen

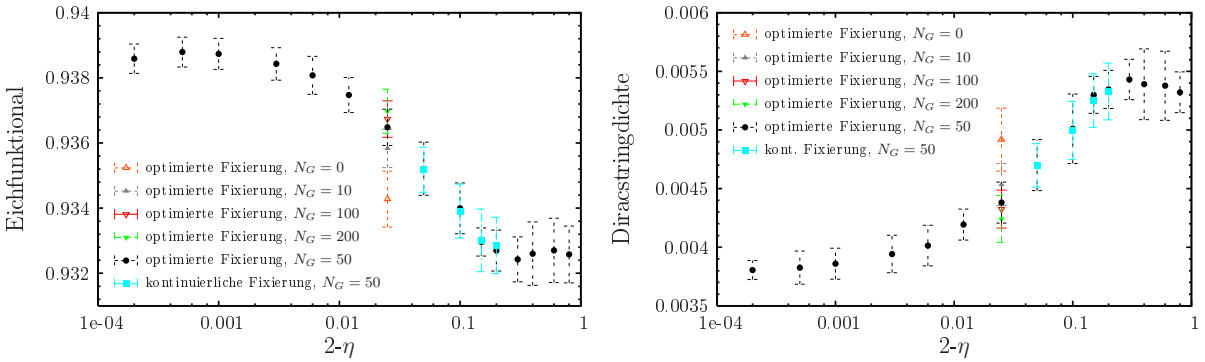


Abbildung 4.3: (a) Eichfunktional und (b) Dirac-Stringdichte nach der Eichfixierung mit dem optimierten bzw. kontinuierlichen Algorithmus in Abhängigkeit von η. Die Algorithmen sind im Text beschrieben.

geeignet gewählt. Insbesondere wurde sichergestellt, dass die Bedingung (4.7) stets hinreichend gut erfüllt war.

Es wurde oben angedeutet, das $\eta_P = 1.8$ zwar zu einer schnellen Konvergenz des Fixierungsalgorithmus führt, jedoch aus einem anderen Grund nicht vorteilhaft sei. In Abbildung 4.3 ist das Eichfunktional bzw. die Dirac-Stringdichte für verschiedene Wahlen $\eta_P \lesssim 2$ dargestellt. Nur für Werte von $\eta_P \approx 2$ wird ein neues Plateau mit höheren Eichfunktionalen und ca 30% geringeren Dirac-Stringdichten erreicht. Zum Vergleich sind die Ergebnisse des rein kontinuierlichen Algorithmus mit den entsprechenden Wahlen für η dargestellt. Wie oben erwähnt stimmen sie mit den Resultaten der optimierten Eichfixierung im Rahmen der Fehler überein.

Eine andere Realisierung der Eichfixierung ist durch die alternierende Anwendung mikrokanonischer ($\eta = 2$) und nicht-mikrokanonischer ($\eta < 2$) Fixierungsschritte gegeben. Dies führte im Vergleich zur Eichfixierung mit $\eta_P \approx 2$ zu sehr ähnlichem Konvergenzverhalten. Dabei wurde der relative Anteil der mikrokanonischen Fixierungsschritte erhöht, so dass im Mittel das gleiche Eichfunktional wie im Fall des optimierten Fixierungsalgorithmus mit gegebenen η_P erreicht wurde. Es wurde in beiden Fällen eine ähnliche Zahl von lokalen Fixierungsschritten N_{iter} benötigt.

Unglücklicherweise steigt N_{iter} stark an, wenn man versucht, durch die Wahl von η_P zu höheren Eichfunktionalen zu gelangen. Die Wahl von $\eta_P = 1.997$ anstelle von $\eta_P = 1.80$ bewirkt einen $15-20$fachen Anstieg der Anzahl von Fixierungsschritten. Derjenige Wert von $\eta_P \lessapprox 2$, bei dem (aus Gründen des Rechenaufwands) noch mindestens 50 unabhängige Messungen des Photonpropagators vorgenommen werden konnten, war $\eta_P = 1.997$. Dieser Wert befindet sich am Rand des neuen Plateaus mit höherem Eichfunktional und einer geringeren Dirac-Stringdichte.

Für $2-\eta = 0.02$ ist zusätzlich der Einfluss der Anzahl der Fixierungsversuche N_G+1 auf Eichfunktional und Dirac-Stringdichte aufgezeigt. Es stellte sich heraus, dass das Verringern von $2-\eta$ wesentlich effektiver ist, bezogen auf die Gesamtanzahl der Eichfixierungsschritte $N_{\text{iter}} \times (N_G + 1)$, als das Erhöhen von N_G, um ein vergleichbares Eichfunktional zu erzielen.

Nach diesen Untersuchungen wurden die Eichfixierungsparameter standardmäßig wie folgt gewählt: Als schwaches Abbruchkriterium wurde $\xi_P = 1/(3 \times L^3)$ verwendet, als hartes Abbruchkriterium $\xi_F =$

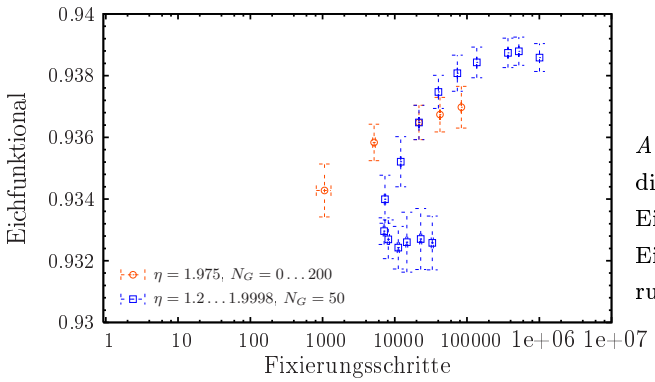


Abbildung 4.4: Das erreichte Eichfunktional bezogen auf die Anzahl der nötigen Fixierungsschritte $N_{\text{iter}} \times (N_G + 1)$. Eine Erhöhung von η führt effektiv zu einem höheren Eichfunktional als eine gesteigerte Anzahl von Fixierungsversuchen $N_G + 1$

$10^{-8}/(3 \times L^3)$ mit $L = 40$. Die Überrelaxationsparameter wurden zu $\eta_P = 1.997$ und $\eta_F = 1.9$ bestimmt. Desweiteren wurde $N_G = 50$ festgelegt.

4.3 Der Propagator für $Q = 1$

Alle Messungen wurden bei einer fixierten Eichkopplung $\beta = 2.0$ durchgeführt. Die Wahl lässt sich damit begründen, dass bei kleineren β das Monopolplasma in der symmetrischen Phase dichter ist, welches die Eichfixierung zusätzlich erschwert. Wählt man β hingegen zu groß, sinkt die Monopoldichte rapide und ihr Einfluss auf die Propagatormasse kann nicht mehr studiert werden. Außerdem ermöglicht $\beta = 2.0$ einen Vergleich zu früheren Arbeiten im London-Limes.

4.3.1 Autokorrelationszeiten

Um die Korrelationen aufeinanderfolgender Propagatormessungen abschätzen zu können, wurden die integrierten Autokorrelationszeiten τ_{int} der Monopoldichten ρ_{mon} und der quadratischen Higgslänge ρ^2 nach der in Abschnitt 2.2.1 beschriebenen selbstkonsistenten Methode bestimmt. In der symmetrischen Phase ist die Autokorrelationszeit $\tau_{\rho_{\text{mon}}}$ wesentlich größer als die entsprechenden Korrelationszeit τ_{ρ^2}. Wie in Abbildung 4.5 dargestellt, beträgt die maximale gemessene Autokorrelationszeit im Phasenübergangsgebiet erster Ordung ca. $\mathcal{O}(100)$. Da bei den betrachteten Gittergrößen ($L = 40$) kein Tunneln auftritt, entsprechen diese Werte den Korrelationszeiten in den jeweiligen metastabilen Phasen. Im Falle der größeren quartischen Selbstkopplung werden höhere Autokorrelationszeiten bis zu $\mathcal{O}(1000)$ an den Messpunkten beobachtet. Die Autokorrelationanalyse wurde verwendet, um die Messintervalle des Propagators geeignet einzustellen und damit statistisch (fast) unabhängige Feldkonfigurationen zur Propagatormessung auszuwählen.

4.3.2 Die Auswirkung der Eichfixierung

Um den Propagator auf einem 40^3 Gitter zu messen, erfolgten Messungen von 50 (fast) unabhängigen Konfigurationen (getrennt durch 720 Monte-Carlo Sweeps) in der symmetrischen Phase und 100 Konfigurationen (getrennt durch 360 Sweeps) in der Higgsphase jeweils für die beiden quartischen Selbstkopplungen $\lambda = 0.005$ und $\lambda = 0.02$. Die Gitterlänge $L = 40$ wurde aus verschiedenen Gründen gewählt. Ein größeres

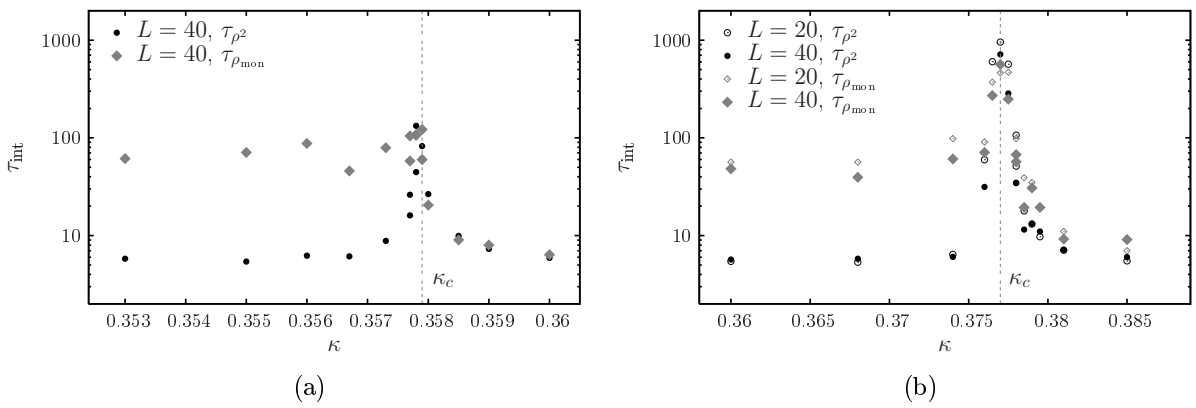


Abbildung 4.5: Autokorrelationszeiten in der Umgebung von κ_c auf dem 20^3 bzw. 40^3 Gitter bei (a) $\lambda = 0.005$ (b) $\lambda = 0.02$

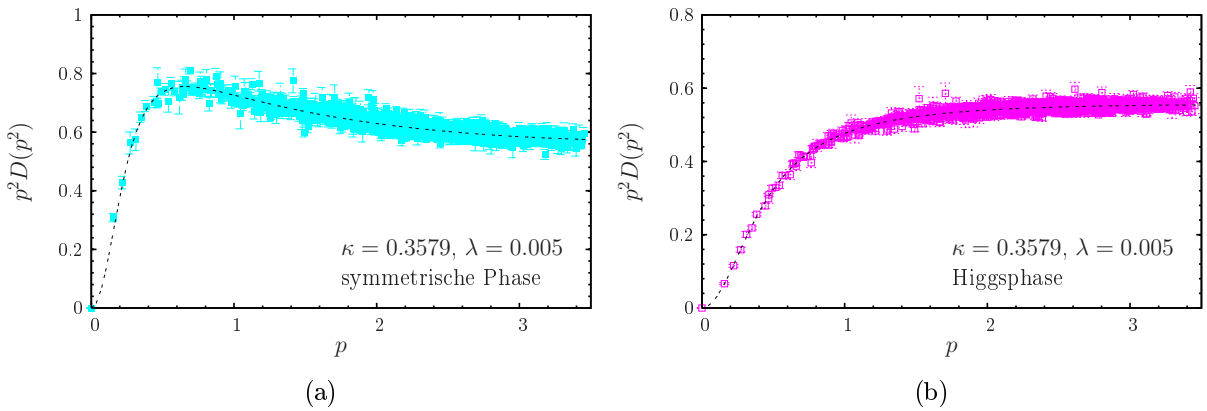


Abbildung 4.6: Impulsabhängigkeit von $p^2D(p^2)$ für $\lambda = 0.005$ bei $\kappa = 0.3579$ in der metastabilen Region (a) in der symmetrischen Phase (b) in der Higgsphase

Gitter verringert den Einfluss von Randtermen und führt zu geringeren Schwankungen in verschiedenen thermodynamischen Observablen, z.B. der Monopoldichte. Außerdem verhindert diese Wahl ein Tunneln zwischen den metastabilen Phasen für kleine Selbstkopplungen λ. Die Eigenschaften des Propagators in beiden metastabilen Phasen konnten so unabhängig voneinander untersucht werden. Schließlich erlaubt ein größeres Gitter eine höhere Anzahl von Stützstellen zur Bestimmung des Propagators bei kleinen Impulsen, also in jenem Impulsbereich, der großen Einfluss auf die Fitergebnisse besitzt. In Abbildung 4.6 ist exemplarisch der mit p^2 multiplizierte Strukturfaktor $D(p^2)$ in der metastabilen Region bei kleinen Selbstkopplungen dargestellt. Das System befand sich dabei abhängig von den Startbedingungen jeweils in einer mit der symmetrischen oder der Higgsphase assoziierten metastabilen Phase.

Der Propagator wird durch den Fitansatz (4.11) sowohl in der symmetrischen Phase als auch in der Higgsphase gut beschrieben. Bei kleinen κ besitzt $p^2D(p^2)$ ein Maximum bei mittleren Impulsen, welches in der Higgsphase verschwindet. Unabhängig davon verschwindet $p^2D(p^2)$ bei sehr kleinen Impulsen. Die Strukturfunktion des Propagators im abelschen Higgsmodell wächst damit langsamer für $p \to 0$ als im Falle eines freien Propagators (4.10). Nach dem Fitansatz ist die transversale Strukturfunktion sogar

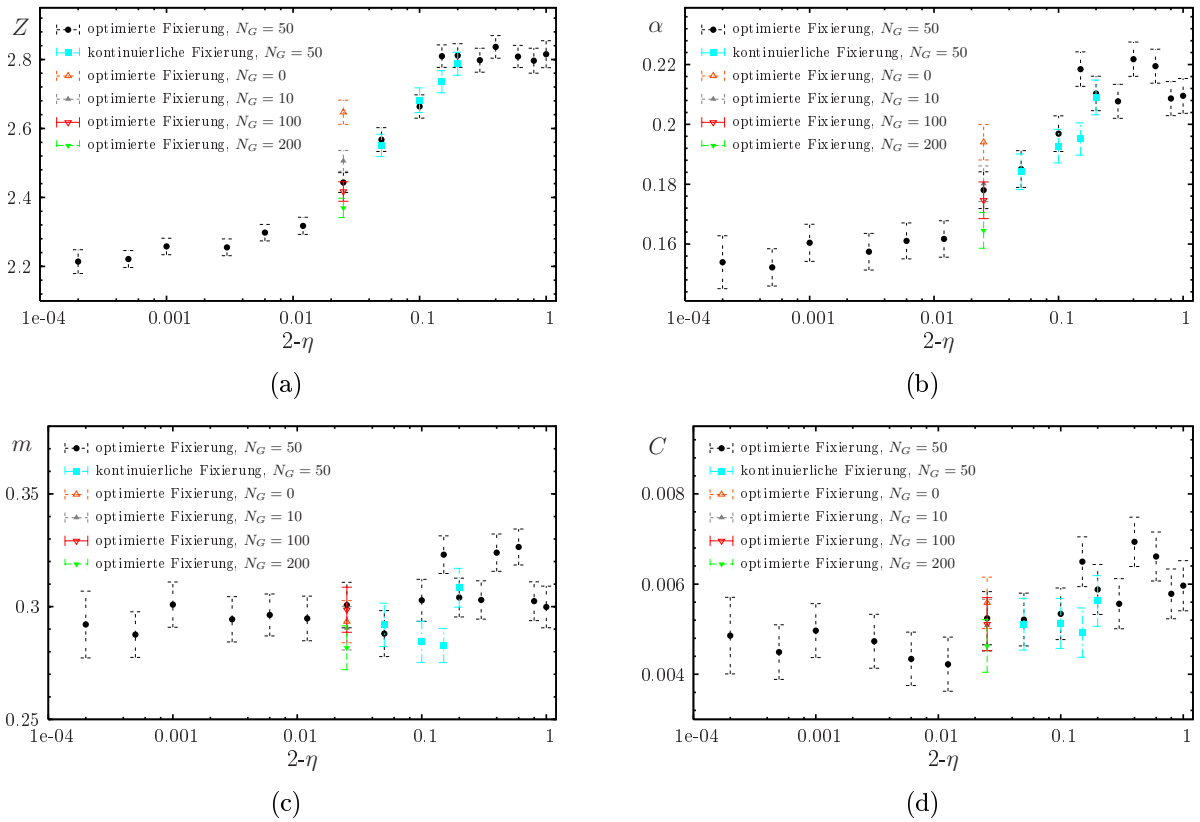


Abbildung 4.7: Die Fitparameter (a) Z, (b) α, (c) m und (d) C in Abhängigkeit von η

endlich für $p \to 0$.

Da in jedem lokalen Maximum des Eichfunktionals die longitudinale Strukturfunktion des Propagators verschwindet, kann aus ihrem Verhalten nicht auf die Qualität der Eichfixierung geschlossen werden. Der Einfluss einer ungenügenden Fixierung auf die transversale Strukturfunktion hingegen ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Die Abhängigkeit der Fitparameter Z und α von dem Überrelaxationsparameter η ist evident. Diese Fitparameter imitieren damit das Übergangsverhalten (für $2 - \eta = 10^{-1} \ldots 10^{-2}$) von Eichfunktional und Dirac-Stringdichte (vgl. Abbildung 4.3) zwischen zwei Plateaus. Dies lässt stark vermuten, dass zwischen Dirac-Stringdichte und den Fitparametern Z bzw. α ein enger Zusammenhang besteht. Es ist nicht auszuschließen, dass das verwendete $\eta = 1.997$ nicht hinreichend groß ist, um weitere Änderungen unter die Prozent-Grenze zu senken. Vermutlich ist für eine detaillierte Studie der Einsatz neuer Algorithmen notwendig bzw. eine um einiges höhere Rechenleistung. Der Vergleich der dargestellten Fitergebnisse mit den Resultaten, die mit $\eta = 1.8$ für die reine $U(1)$ Eichtheorie [51] bzw. das abelsche Higgsmodell im London Limes [50] erzielt wurden, zeigt, dass dort Z und α vermutlich ca. 20-30% zu groß sind. Masse m und Kontaktterm C sind näherungsweise unabhängig von η. Dies deutet darauf hin, dass sie durch den (eichunabhängigen) Monopolanteil bestimmt werden.

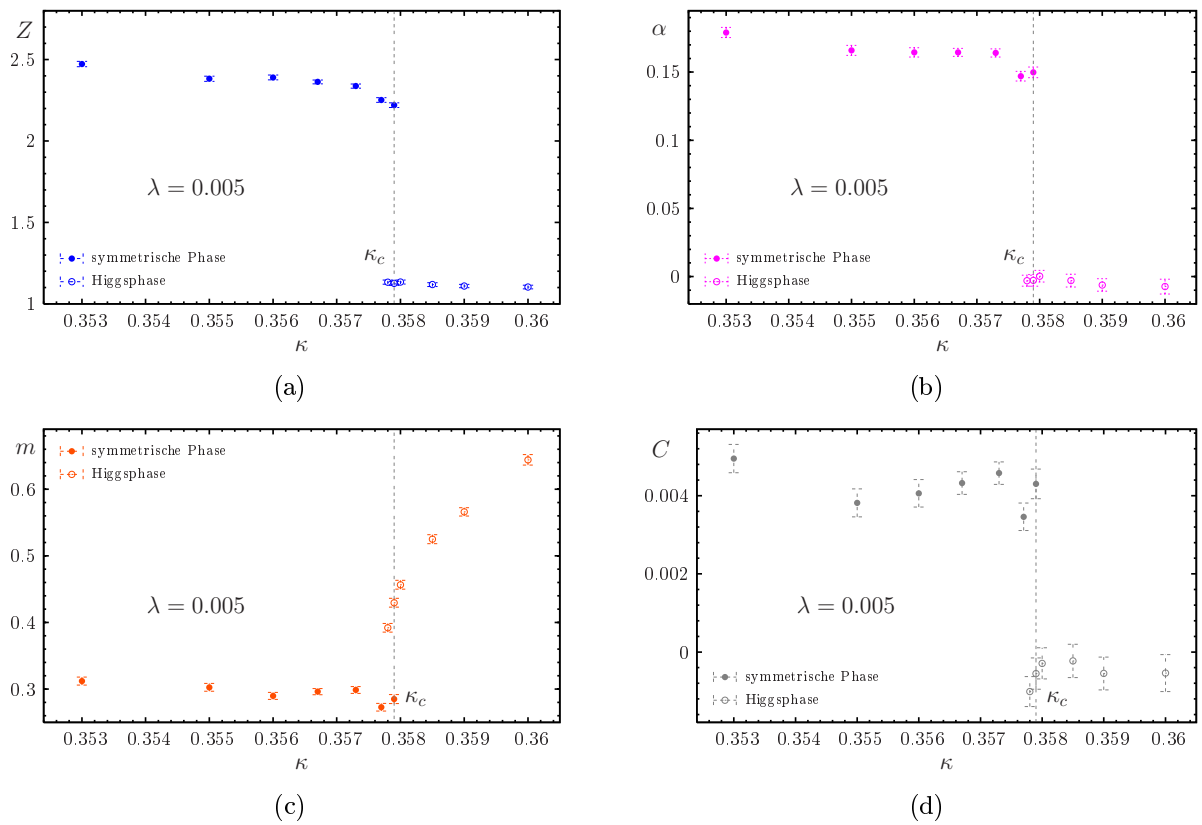


Abbildung 4.8: Die Fitparameter des Propagators auf einem 40^3 Gitter bei $\lambda = 0.005$ als Funktion von κ: (a) Z, (b) α, (c) m, (d) C

4.3.3 Ergebnisse für die transversale Strukturfunktion

Die Fitparameter für die Messungen bei kleiner quartischer Selbstkopplung nahe des Phasenüberganges erster Ordnung werden in Abbildung 4.8 gezeigt. Alle Parameter weisen eine Diskontinuität am (zum unendlichen Volumen extrapolierten) kritischen κ_C auf. Eine metastabile Region ist deutlich zu erkennen. Durch Annäherung an κ_C aus der Richtung höherer bzw. niedriger κ wird die jeweilige metastabile Phase erreicht. Die anomale Dimension α springt von einem deutlich positiven Wert in der symmetrischen Phase auf null in der Higgsphase. Die stark mit κ anwachsende Masse des Propagators in der Higgsphase wird durch den Higgsmechanismus hervorgerufen. Für kleine κ bedingt das dichte Monopolgas eine Debyemasse der Propagators. Die Masse ist in diesem Gebiet nur schwach von der Kopplung κ abhängig in Übereinstimmung mit dem Verhalten der Monopoldichte (Abbildung A.1).

Die Ergebnisse der Fitparameter für große Selbstkopplungen $\lambda = 0.02$ stimmen qualitativ mit denjenigen im London Limes überein (Abbildung 4.9). Damit lässt sich schlussfolgern, dass der Propagator hauptsächlich durch die kompakte Phase des Higgsfeldes beeinflusst wird. Nahe κ_C weist die Masse ein klares Minimum auf. Dieses wird durch das Wechselspiel von Debyemasse (verringert sich mit wachsendem κ im Einklang mit der Monopoldichte) und pertubativer Higgsmasse (wächst mit κ stark an) hervorgerufen. Die anomale Dimension sinkt kontinuierlich von positiven Werten auf Null und wird nirgends eindeutig negativ. Man kann daher schlussfolgern, dass das kompakte Eichfeld einen positiven Beitrag

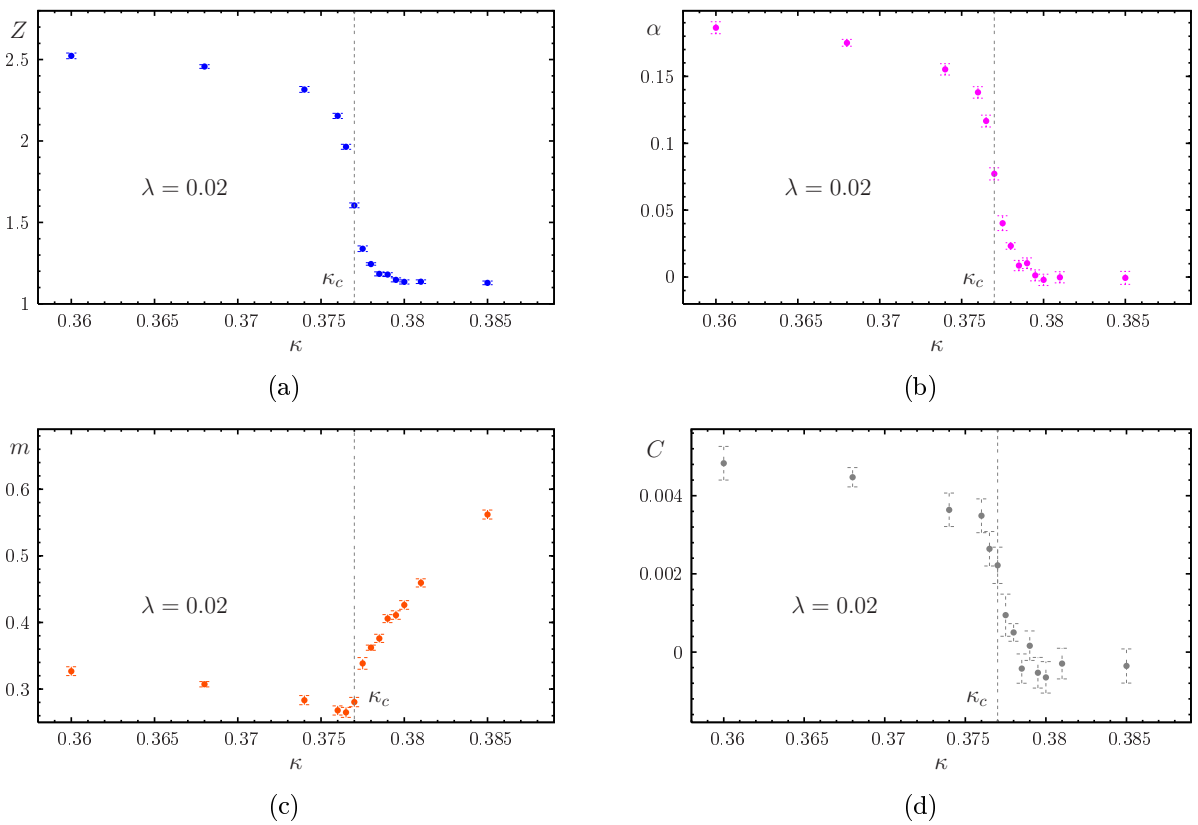


Abbildung 4.9: Die Fitparameter des Propagators auf einem 40^3 Gitter bei $\lambda = 0.02$ als Funktion von κ: (a) Z, (b) α, (c) m, (d) C

zur anomalen Dimension bewirkt, der einen eventuell negativen Beitrag durch das dynamische Higgsfeld aufwiegt [40][41].

Der Übergang der Fitparameter ist kontinuierlich für große λ und nicht stetig im Gebiet des Phasenüberganges erster Ordnung.

4.4 Der Propagator für $Q = 2$

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Ergebnisse wurden mit den gleichen Methoden erzielt, welche im vorangegangenen Abschnitt ausführlich besprochen wurden. Der Propagator wurde bei drei verschiedenen Kopplungen $\lambda = 0.02$ (tief im Bereich 1.Ordnung), $\lambda = 0.08$ (Übergangsbereich 1.→2. Ordnung) und $\lambda = 0.2$ (2.Ordnung) gemessen. Während die Gittergröße $L = 40$ für kleine quartische Selbstkopplungen nützlich ist, um ein Tunneln zwischen den metastabilen Phasen zu vermeiden, stellt diese Gittergröße für größere Kopplungen ein Problem dar. In diesem Fall liegt ein Phasenübergang zweiter Ordnung vor. Hier ist, bedingt durch ein starkes Anwachsen der Autokorrelationszeit mit der Gittergröße in der kritischen Region, bei gleichem Aufwand von Rechenzeit auf größeren Gittern eine geringere Anzahl statistisch unabhängiger Messungen möglich.

4.4.1 Autokorrelationszeiten

Um die sehr zeitaufwändige Eichfixierung effizient einzusetzen, wurden Messungen des Propagators in Abständen $\gtrapprox 2\tau_{\text{int}}$ durchgeführt. Die integrierten Autokorrelationszeiten der Observablen ρ^2 und ρ_{mon} sind im Anhang in den Tabellen A.2-A.3 aufgeführt. Es wurden keine Observablen mit wesentlich höheren Autokorrelationszeiten gemessen. Es sind die Anzahl der Propagatormessungen, das Intervall zwischen aufeinanderfolgenden Messungen, der verwendete Überrelaxationsparameter η_P und das schwache Abbruchkriterium ξ_P angegeben. Nicht-erwähnte Größen entsprechen den Werten für die $Q = 1$ Messungen.

4.4.2 Ergebnisse für die transversale Strukturfunktion

Für die transversale Strukturfunktion $D(p^2)$ wurde der Fitansatz (4.11) verwendet. Die Ergebnisse für die drei Bereiche $\lambda = 0.02$ (Gebiet erster Ordnung), $\lambda = 0.08$ und $\lambda = 0.02$ (Gebiet zweiter Ordnung) sind in den Abbildungen 4.10-4.12 dargestellt.

Erwartungsgemäß imitiert die Strukturfunktion das sprunghafte Verhalten der thermodynamischen Größen am Phasenübergang erster Ordnung (Abbildungen 4.10). Die ebenfalls sichtbare Hysterese deutet auf einen stark ausgeprägten Phasenübergang erster Ordnung hin. Ein qualitativer Unterschied zum Verhalten in der fundamentalen Darstellung $Q = 1$ findet sich in der anomalen Dimension. In der metastabilen Region der Higgsphase wird α negativ. Die Masse bleibt endlich und verhält sich damit ähnlich zum Fall $Q = 1$, nimmt jedoch wesentlich kleinere Werte an.

Die Ergebnisse von $\lambda = 0.08$ und $\lambda = 0.2$ sind qualitiv gleich, obwohl für das kleinere λ nicht mit Sicherheit geklärt ist, ob es sich hier um eine Phasenübergangsbereich zweiter Ordnung oder (schwacher) erster Ordnung handelt. Ausgehend von positiven Werten tief in der symmetrischen Phase wird in der Umgebung der kritischen Kopplung κ_c die anomale Dimension negativ. Das Minimum fällt im Rahmen der Genauigkeit mit der kritischen Kopplung zusammen. Mit wachsenden κ steigt α wieder an und strebt zu verschwindenden Werten. Für kleine κ ist zu vermuten, dass die Ladung des Higgsfeldes keine ausschlaggebende Rolle spielt. In diesem Fall sind die Ergebnisse von $Q = 2$ mit denen von $Q = 1$ vergleichbar. Insofern lässt sich ein positives α analog zu $Q = 1$ durch das Plasma von Monopolen und Antimonopolen und damit verbundenen Abschirmeffekten erklären.

Ein ähnliches Verhalten wie die anomale Dimension weisen auch der Renormierungsfaktor Z und die Masse m auf. Letztere nimmt in der kritischen Region sehr kleine Werte an und verhält sich damit anders als im Fall $Q = 1$ (vgl. Abbildung 4.9). Die anomale Dimension wird negativ, erreicht aber nicht den vorhergesagten Wert $\alpha \approx -0.5$ [10]. Die Berechnung stützt sich unter anderem auf die Annahme einer verschwindenen Masse. Dass α tatsächlich einen größeren Wert annimmt, könnte so als Indiz für eine nicht-verschwindende Masse des Propagators gewertet werden. Weiterhin ist der Einfluss der Monopolketten (vgl. Abschnitt 3.5.3) auf das Propagator- und Phasenstrukturverhalten weitgehend unverstanden. Es erscheinen daher weitere Studien nötig, um die Frage nach einer verschwindenden Propagatormasse endgültig zu klären.

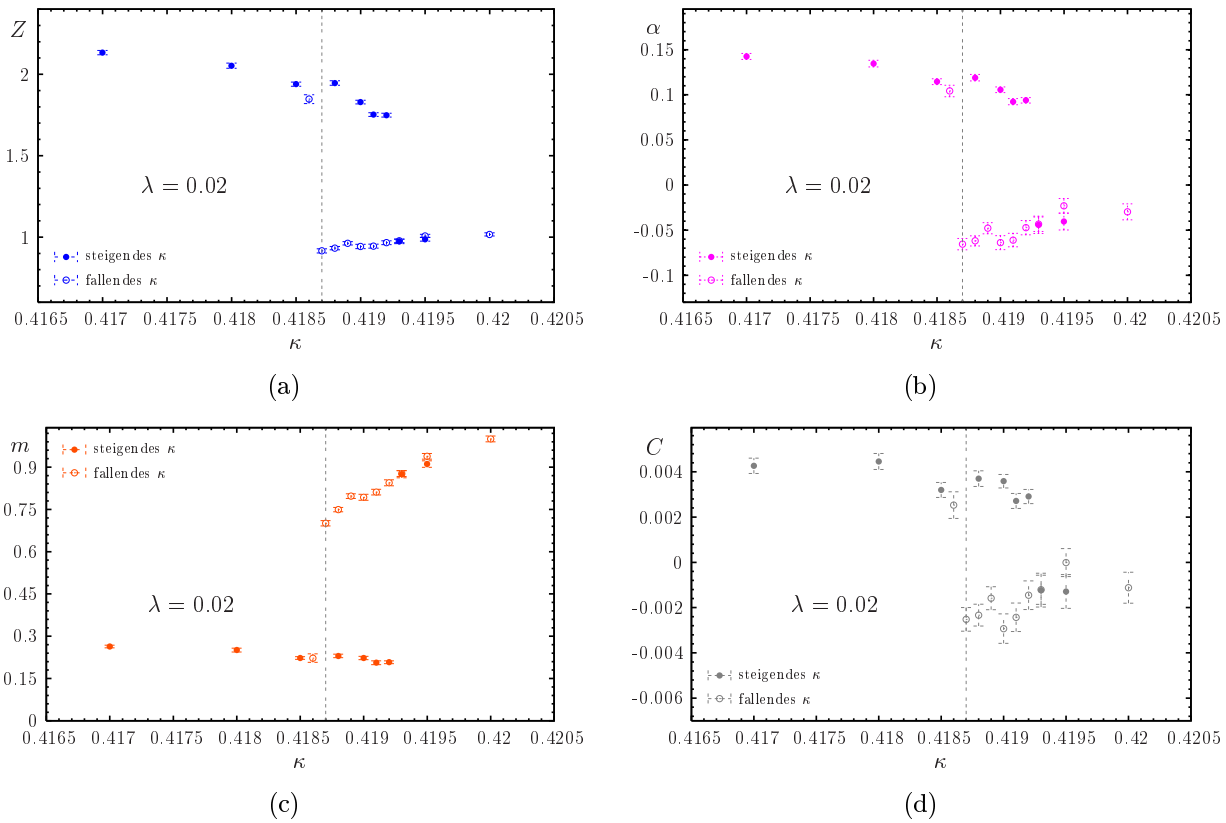


Abbildung 4.10: Die Fitparameter des Propagators auf einem 40^3 Gitter bei $\lambda = 0.02$ als Funktion von κ: (a) Z, (b) α, (c) m, (d) C

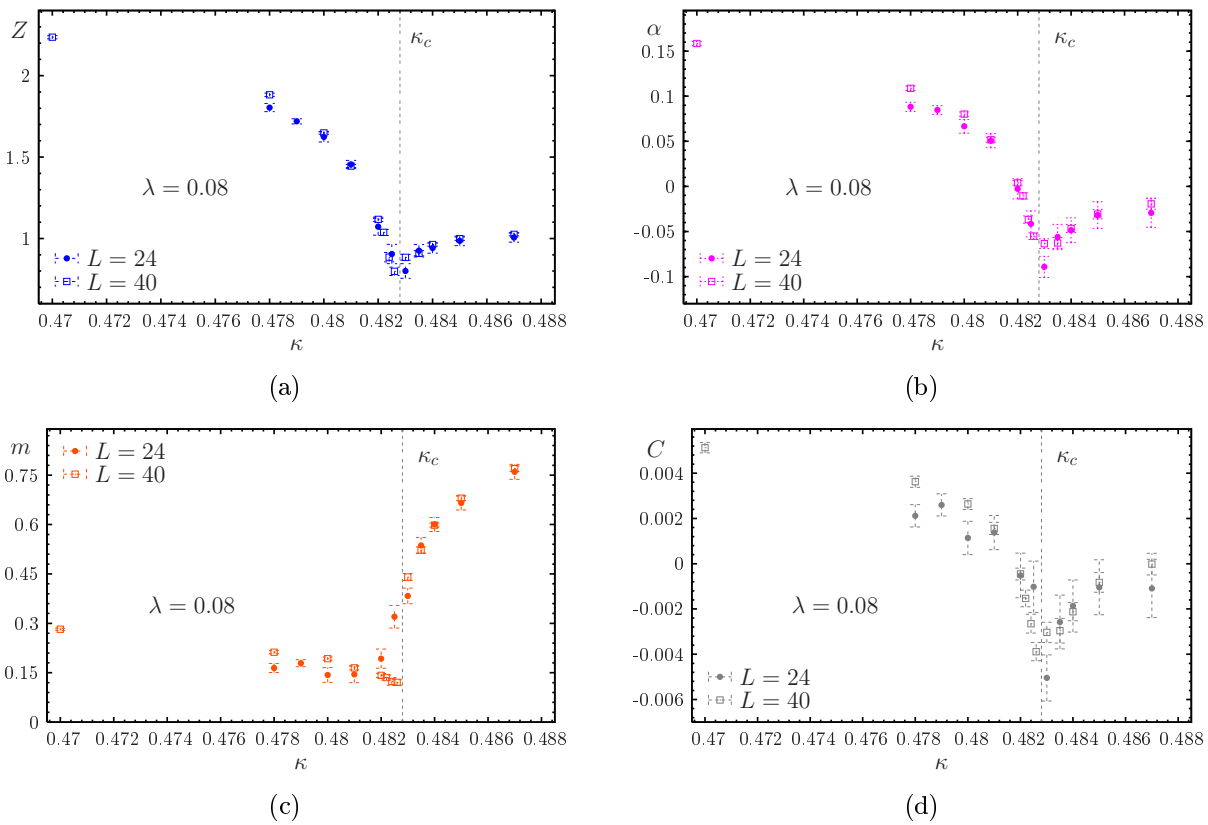


Abbildung 4.11: Die Fitparameter des Propagators bei $\lambda = 0.08$ als Funktion von κ: (a) Z, (b) α, (c) m, (d) C

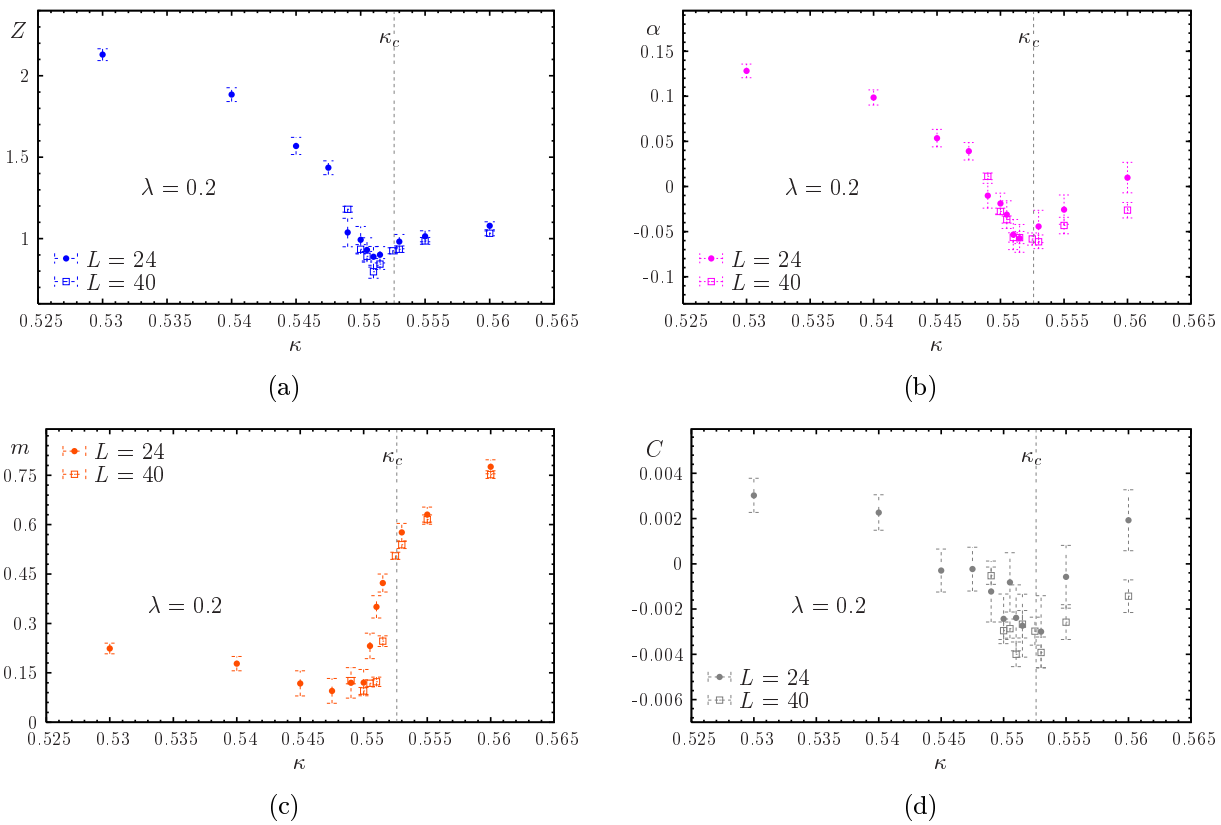


Abbildung 4.12: Die Fitparameter des Propagators bei $\lambda = 0.2$ als Funktion von κ: (a) Z, (b) α, (c) m, (d) C

Zusammenfassung

Die Arbeit beschäftigte sich mit Aspekten der Phasenstruktur und dem Photonprogator des 3D-abelschen Higgsmodells in der kompakten Gitterformulierung. Als einfachste Eichtheorie mit angekoppelten geladenen Materiefeldern ist sie Gegenstand aktueller Forschung.

Neben einer Wiederholung und Erweiterung quantenfeldtheoretischer Grundlagen bestand meine Vorbereitung in der Erarbeitung der Grundprinzipien von Gittereichtheorien. Eine weitere wesentliche Komponente der vorliegenden Arbeit ist der Umgang mit Monte-Carlo-Verfahren und weiteren Methoden der numerischen statistischen Physik. Insbesondere wurden folgende Elemente algorithmisch realisiert:

- Neben der Adaption eines Metropolis-Algorithmus wurde ein Wärmebad-Algorithmus implementiert. Da letzterer eine geringere Autokorrelationszeit besitzt, ist er, sofern möglich, der Anwendung des Metropolis-Algorithmus vorzuziehen. Es wurden weiterhin diverse Programme zur Fehleranalyse nach der Jackknife-Methode erarbeitet.

- Zur Bestimmung von Erwartungswerten von Observablen über einen größeren Kopplungsbereich und zur Kombination von Messreihen bei verschiedenen Kopplungen kam Reweighting nach dem Kombinationsverfahren und nach der Ferrenberg-Swendsen-Methode zum Einsatz. Damit war es möglich, durch die Betrachtung von Suszeptibilitäten und Binder-Kumulanten den Phasenübergang qualititiv (Art des Überganges) und quantitativ (kritische Kopplungen) zu beschreiben.

- Während sich die Messung von Wirkungsbestandteilen und topologischen Observablen als wenig problematisch herausstellte, erwies sich die Bestimmung des Photonpropagators (als eine nichtlokale eichabhängige Observable) als herausfordernd. Eine genaue Analyse des gebräuchlichen Algorithmus zur Eichfixierung ermöglichte hier substanzielle Verbesserungen. Dazu wurde einerseits eine effektivere Verwendung der Überrelaxation postuliert. Zum anderen ermöglichte der Einsatz einer Präselektion in Verbindung mit Eichtransformationen einer diskreten Untergruppe der U(1) eine Beschleunigung des Algorithmus um eine Größenordnung.

Die Implementation und der Einsatz der eben beschriebenen Simulations- und Analyseverfahren erlaubte eine genaue Bestimmung der Phasenstruktur des Modells und eine Charakterisierung des Photonpropagators bei einer fixierten Eichkopplung $\beta = 2.0$. Die wesentlichen Ergebnisse sind im einzelnen:

- Die Phasenstruktur des Modells wurde in den zwei Darstellungen ($Q = 1$, $Q = 2$) untersucht. In der fundamentalen Darstellung findet bei Variation von κ für kleine Selbstkopplungen $\lambda < \lambda^{\mathrm{EP}}$ ein Phasenübergang erster Ordnung statt. Diese bei anderen Eichkopplungen bereits bekannte Tatsache konnte durch die Betrachtung von Suszeptibilitäten und Binder-Kumulanten des Higgskondensates

bestätigt werden. Eine Analyse der entsprechenden Histogramme ermöglichte zudem die Bestimmung der Oberflächenspannung und der latenten Wärme. Für kleine κ befindet sich das System in der symmetrischen Phase, welche durch einen Erwartungswert des Higgskondensates $\rho^2 \approx 1$ gekennzeichnet ist. Für eine starke Wechselwirkung zwischen Materiefeld und Eichfeld (große κ) geht das System in die Higgsphase über ($\rho^2 \gg 1$). Die in Anhang A gegebenen Abbildungen sind konsistent mit der allgemeinen Überzeugung, dass der Übergang zwischen symmetrischer Phase und Higgsphase mit einem *confined-deconfined* Übergang der topologischen Defekte einhergeht. Während die confined-Phase ein dichtes Plasma aus Monopolen aufweist, sind in der deconfined-Phase die Dichten topologischer Defekte sehr klein. Außerdem bilden Monopole und Antimonopole neutrale Dipolpaare.

- Sofern in der fundamentalen Darstellung genügend große Selbstkopplungen betrachtet werden ($\lambda > \lambda^{\mathrm{EP}}$), verschwindet der Phasenübergang erster Ordnung. In diesem Gebiet konnte für hinreichend große Volumina keine Volumenabhängigkeit der Suszeptibilität beobachtet werden. Demnach liegt möglicherweise kein Phasenübergang vor. Alternativ könnte dieses Verhalten auf einen Phasenübergang zweiter Ordnung mit $\alpha \approx 0$ oder einen Kosterlitz-Thouless-artigen Übergang hindeuten. In der Darstellung $Q = 2$ lässt das Skalierungsverhalten der Suszeptibilität des Higgskondensates einen Phasenübergang zweiter Art vermuten.

  Erst kürzlich wurde in [12] die Verwendung dritter Momente der Wirkung zur Bestimmung kritischer Exponenten vorgestellt. Mithilfe dieser Methoden wurden in dieser Arbeit die Exponenten ν und α für eine ausgewählte Selbstkopplung bestimmt. Dies erlaubte einen expliziten Test der Hyperskalenrelation. Sie ist im Rahmen der Fehler erfüllt. In beiden Darstellungen stehen die gefundenen Ergebnisse für große Selbstkopplungen nicht mit den bekannten Resultaten aus dem London-Limes im Widerspruch. Dies deutet darauf hin, dass in diesem Gebiet tatsächlich die Phase des Higgsfeldes, nicht jedoch der Betrag, die entscheidende Rolle bei der Festlegung der Phasenstruktur spielt.

- Für die fundamentale Darstellung konnte der Übergangspunkt λ^{EP} auf $0.0065 < \lambda^{\mathrm{EP}} < 0.008$ eingegrenzt werden. Im Vergleich zu einer kürzlich erfolgten Studie bei einer kleineren Eichkopplung ($\beta = 1.1$ [49]) erwies sich die genaue Bestimmung des Übergangspunktes hier als wesentlich aufwändiger und schwieriger. Zudem ist die erreichte Eingrenzung trotz des Einsatzes hoher Ressourcen nicht gänzlich befriedigend.

- Für viele Selbstkopplungen λ wurden die kritischen Kopplungen $\kappa_c(\lambda)$ durch Extrapolation pseudokritischer Kopplungen in den thermodynamischen Limes berechnet. Das resultierende Phasendiagramm für die fundamentale Darstellung ist in Abbildung 3.6 gezeigt.

- In der Darstellung $Q = 2$ konnten theoretisch vorhergesagte Cluster von ANO-Strings und Monopolen, z.B. in Kettenform, nachgewiesen werden. Eine weiterführende Analyse ist bereits veröffentlicht [55].

- Der Photonpropagator wurde in den Gebieten erster und nicht-erster Ordnung in beiden Darstellungen gemessen. Eine Bestimmung der Masse und der anomalen Dimension des Propagators erfolgte durch einen Fitansatz. Dabei zeigte sich, dass die Fitparameter des Propagators dem Verhalten

thermodynamischer Observablen in Bezug auf die Art des Phasenüberganges folgen. Insbesondere wiesen sie nicht-stetiges Verhalten sowie eine Hysterese im Gebiet des Phasenüberganges erster Ordnung auf.

- Weit außerhalb der kritischen Region ist das Verhalten der Fitparameter des Propagators nahezu unabhängig von der betrachteten Darstellung. Nahe der kritische Kopplung gilt dies jedoch nicht mehr. In der fundamentalen Darstellung entwickelt die Propagatormasse dort ein Minimum, bleibt aber endlich. Der beobachtbare Abfall ist in der Darstellung $Q = 2$ wesentlich stärker ausgeprägt und es ist nicht ganz auszuschließen, dass die Masse im thermodynamischen Limes verschwindet. Allerdings ist diese Frage bei der gegebenen Genauigkeit noch nicht eindeutig zu beantworten. Während die anomale Dimension für $Q = 1$ in der symmetrischen Phase deutlich positive Werte annimmt und beim Übergang in die Higgsphase verschwindet, wird sie für $Q = 2$ in der kritischen Region negativ. Dieser Fund lässt sich möglicherweise mit der geringen Masse des Propagators und dem Einfluss des dynamischen Higgsfeldes erklären, siehe [10]. Ein solides Verständnis steht allerdings noch aus.

- Die Messung des Propagators erforderte die vorherige Durchführung einer Eichfixierung. Eine genaue Analyse des gebräuchlichen Verfahrens wies die Möglichkeit eines effektiven Einsatzes der Überrelaxation auf. Eine Beschreibung des so verbesserten Eichfixierungsalgorithmus zusammen mit einer kurzen Phasenstrukturanalyse und den Ergebnissen für den Propagator in der fundamentalen Darstellung ist auch in [68] zu finden.

Diese Arbeit beabsichtigt keineswegs eine erschöpfende Behandlung des 3D-abelschen Higgsmodells. Stattdessen bleiben viele Fragen, die mögliche Schwerpunkte einer aufbauenden und weiterführenden Arbeit sein könnten, offen, so z.B.:

- Eine genauere Bestimmung des Übergangspunktes λ^{EP}, bzw. Ermittlung von $\lambda^{EP}(\beta)$.

- Der Einsatz dritter Momente zur Bestimmung kritischer Exponenten (für $Q = 2$) über einen größeren Selbstkopplungsbereich und Vergleich mit den Ergebnissen im London-Limes. Hierzu wäre die Entwicklung neuartiger Algorithmen wünschenswert, um die hohe Autokorrelation bei moderaten Gittergrößen ($L > 30$) senken zu können. Mögliche Kandidaten scheinen Wurmalgorithmen [69] zu sein.

- Eine eingehendere Studie der topologischen Defekte und ihrer Auswirkungen auf den Photonpropagator.

- Die Messung des Propagators bei Anwesenheit von Materiefeldern mit höheren Ladungen. Der Fall $Q = 3$ scheint besonders interessant, da hier im London-Limes für gewisse Eichkopplungen ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt [38].

Anhang A

Tabellen und Bilder

A.1 Verhalten ausgewählter Observablen – $Q = 1$

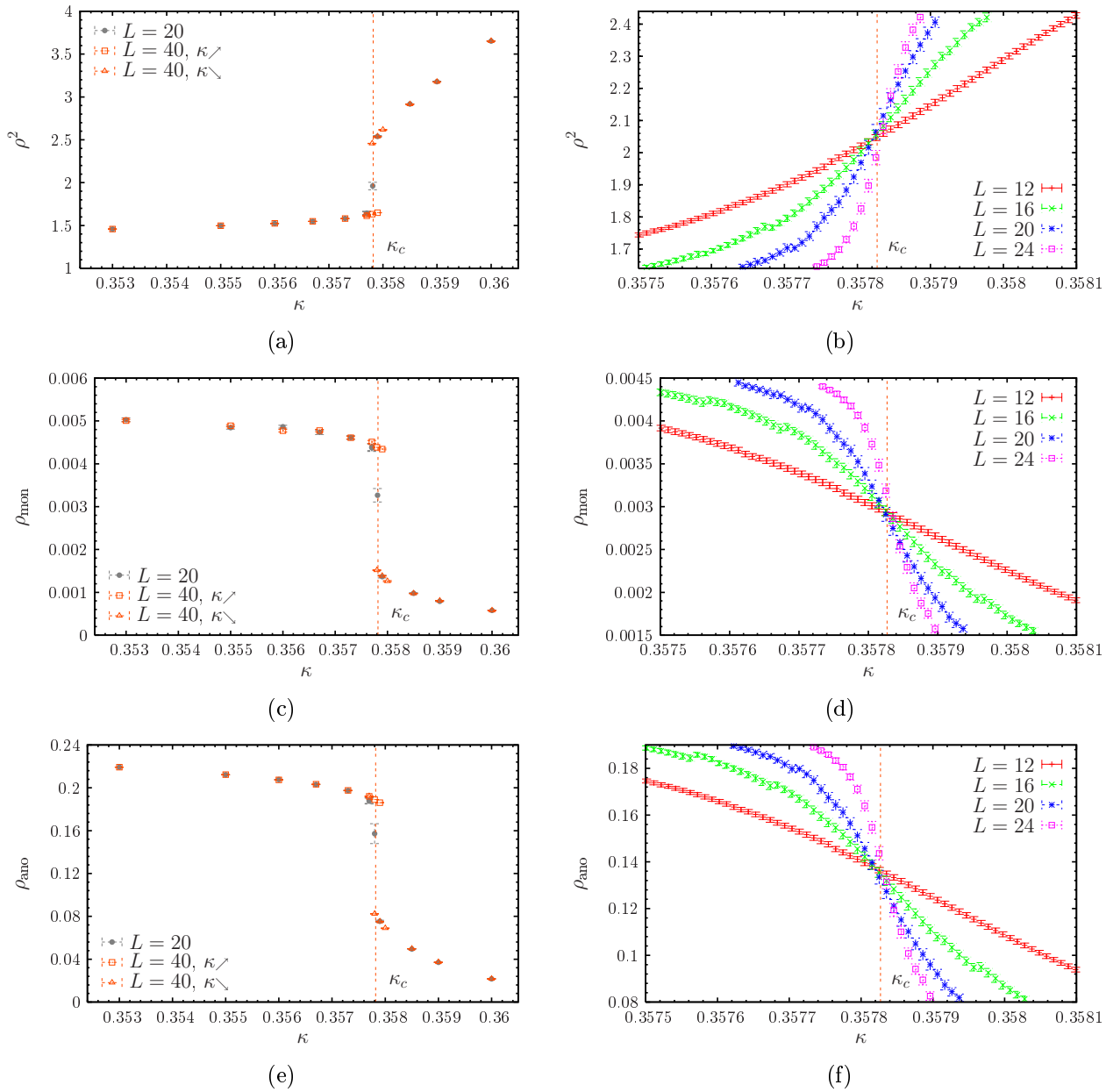


Abbildung A.1: Das Verhalten von ρ^2 (oben), ρ_{mon} (mitte) und ρ_{ano} (unten) über einen größeren Kopplungsbereich (links) bzw. nahe der kritischen Kopplung $\kappa_c = 0.35782(1)$ (rechts) für verschiedene Gittergrößen im Gebiet erster Ordnung: $Q = 1$, $\beta = 2.0$, $\lambda = 0.005$. Ein Sprung in den Observablen an κ_c wird erst sichtbar, wenn die typische Dauer für einen Phasenwechsel die Messdauer übersteigt. Dies trifft auf $L = 40$ zu. Der Einsatz von Reweighting nach der Kombinationsmethode (rechts) erlaubt eine optimale Fehlerbestimmung der einzelnen Messgrößen.

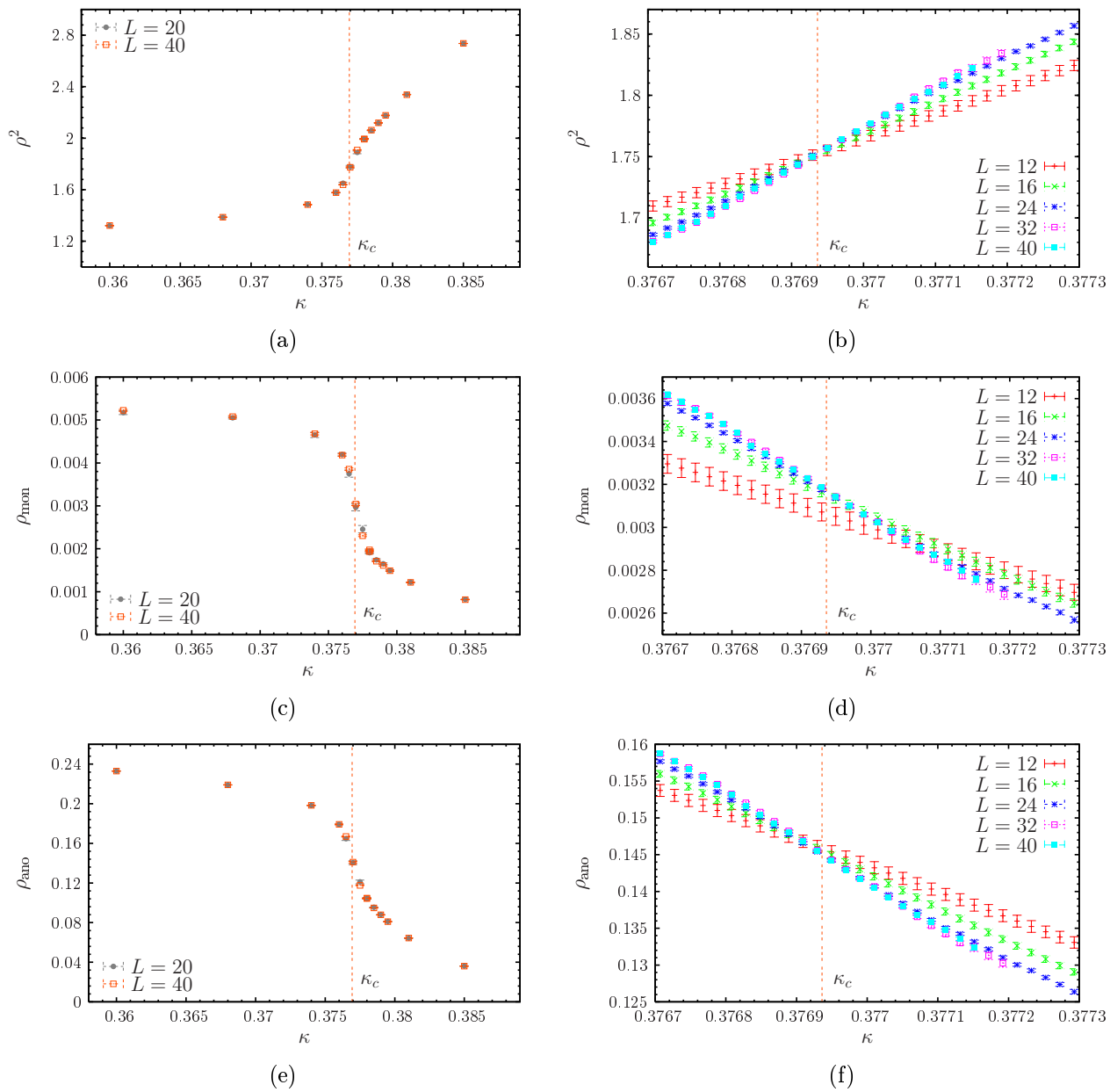


Abbildung A.2: Das Verhalten von ρ^2 (oben), ρ_{mon} (mitte) und ρ_{ano} (unten) über einen größeren Kopplungsbereich (links) bzw. nahe der kritischen Kopplung $\kappa_c = 0.376936(15)$ (rechts) für verschiedene Gittergrößen im kontinuierlichen Übergangsgebiet: $Q = 1$, $\beta = 2.0$, $\lambda = 0.02$. Der Einsatz von Reweighting nach der Kombinationsmethode (rechts) erlaubt eine optimale Fehlerbestimmung der einzelnen Messgrößen.

A.2 Verhalten ausgewählter Observablen – Q=2

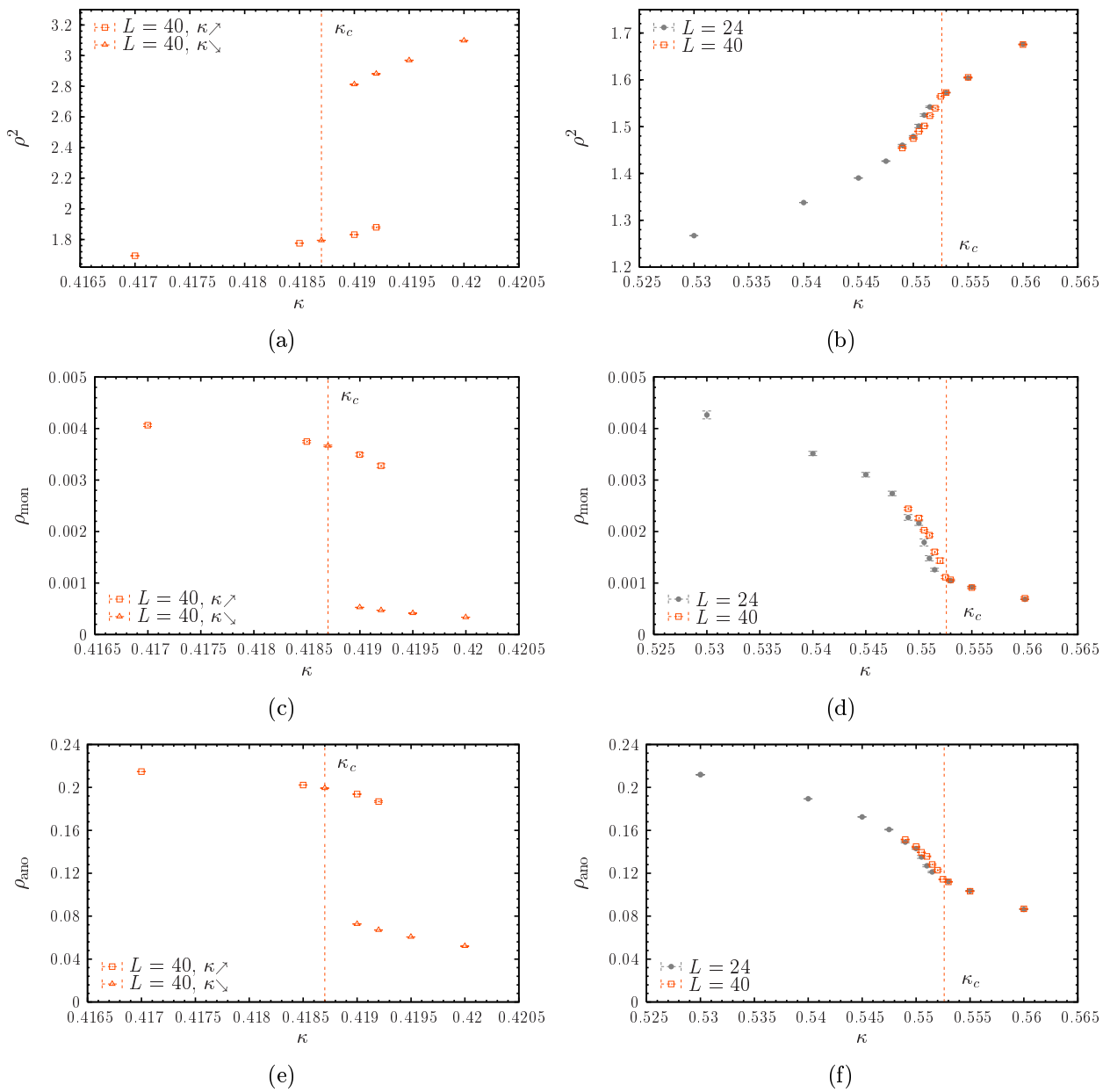


Abbildung A.3: Das Verhalten von ρ^2 (oben), ρ_{mon} (mitte) und ρ_{ano} (unten) bei $Q = 2$ und $\beta = 2.0$. Links: $\lambda = 0.02$, Übergangsgebiet erster Ordnung. Eine Hysterese ist deutlich erkennbar. Rechts: $\lambda = 0.2$, Übergangsgebiet zweiter Ordnung. Die kritischen Kopplungen (ohne Fehler), die von den pseudokritischen Kopplungen bei endlichen Gittergrößen stark abweichen können, sind jeweils eingezeichnet.

A.3 Monopolketten

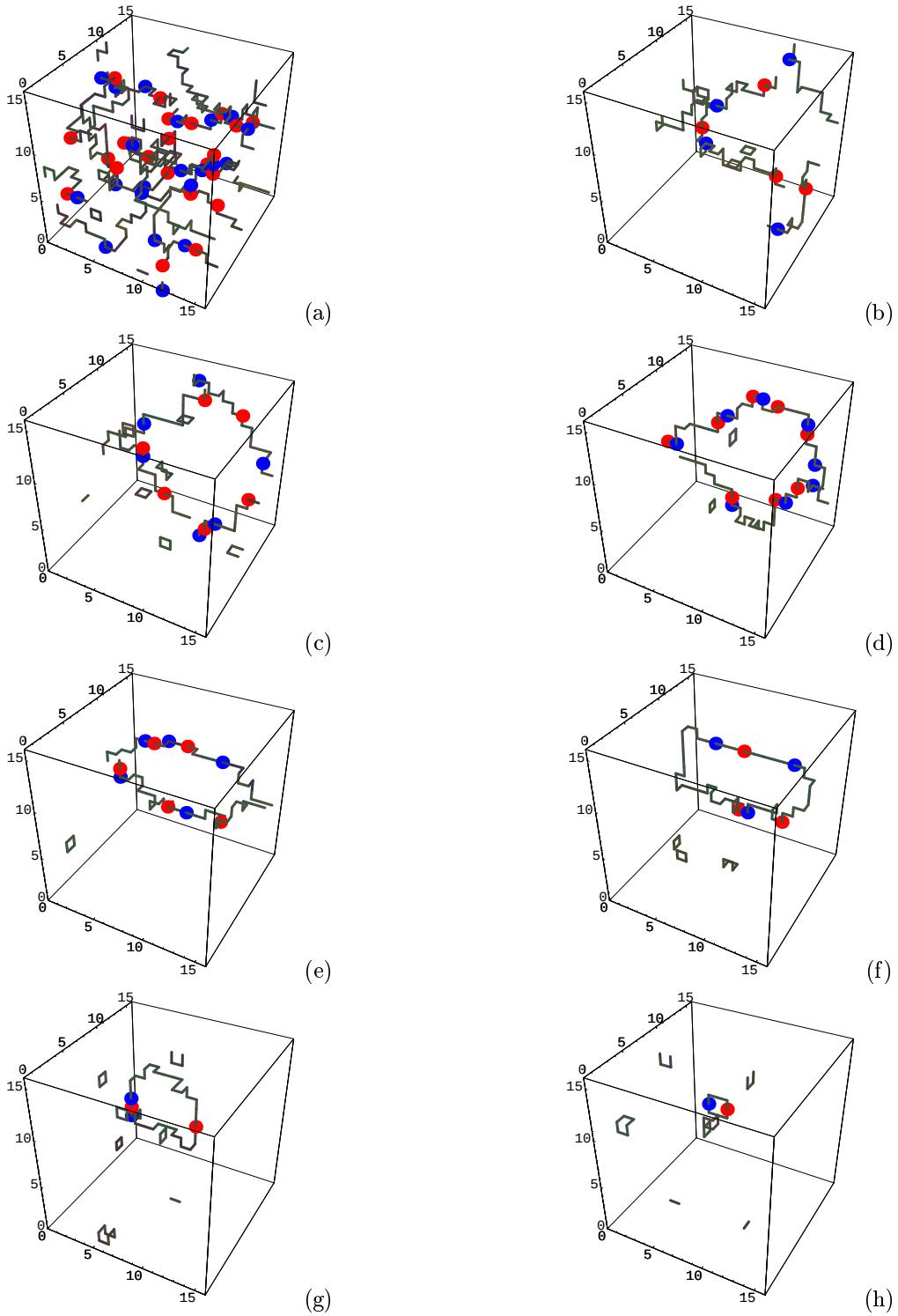


Abbildung A.4: Monopol- und ANO-Stringpositionen nach (a) 300 (b) 3000 (c) 4700 (d) 5100 (e) 6100 (f) 6200 (g) 7000 (h) 7400 Monte Carlo Sweeps. Die Messung fand auf einem 16^3 Gitter bei $Q = 2$, $\beta = 2.0$, $\kappa = 0.56$, $\lambda = 0.08$ statt. Für weitere Erklärungen siehe Text.

A.4 Autokorrelationzeiten und Parameter der Propagatormessungen

Die folgenden Tabellen beziehen sich auf den Fall $Q = 2$ (Abschnitt 4.4.1). Die entsprechenden Angaben für die fundamentale Darstellung $Q = 1$ finden sich in Abschnitt 4.3.2.

L	κ	$\tau_{\mathrm{int},\rho^2}$	$\tau_{\mathrm{int},\rho_{\mathrm{mon}}}$	Messintervall	Messungen	η_P	$\xi_P \times 3 \times L^3$
24	0.45	5.2	270	5000	100	1.997	0.1
	0.478	27.4	267	5000	200		
	0.479	61.3	480	5000	200		
	0.480	106	498	10000	100		
	0.481	313	631	10000	100		
	0.482	11991	6129	10000	100		
	0.4825	18750	11108	20000	150		
	0.483	7253	4910	10000	200		
	0.4835	1518	500	10000	100		
	0.484	88.2	53.3	10000	100		
	0.487	30.8	19.6	5000	100		
40	0.45	5.4	282	1000	108	1.997	1.0
	0.478	32.7	404	1000	100		
	0.480	115	792	3000	126		
	0.481	370	675	5000	105		
	0.482	1555	1107	>5000	135		
	0.4824	4063	2991	10000	60		
	0.4826	8095	4811	10000	60		
	0.483	9829	7575	>10000	140		
	0.4835	261	153	10000	72		
	0.484	77	47	5000	126		
	0.487	29.1	16.6	1000	100		

Tabelle A.1: Autokorrelationszeiten der Observablen ρ^2 und ρ_{mon} im Übergangsgebiet ($\lambda = 0.08$). Die angegebenen Größen werden im Text erläutert.

L	κ	$\tau_{\mathrm{int},\rho^2}$	$\tau_{\mathrm{int},\rho_{\mathrm{mon}}}$	Messintervall	Messungen	η_P	$\xi_P \times 3 \times L^3$	metast. Phase
40	0.417	22.3	477	10000	50	1.997	1.0	symm.
	0.4185	82.4	373	>10000	50			
	0.419	480	745	>10000	70			
	0.4192	1355	1520	>10000	50			
	0.419	145	43	10000	80	1.988	1.0	Higgs
	0.4192	106	26.6	10000	80			
	0.4195	90.5	25.2	10000	80			
	0.42	58.7	16.3	10000	80			
	0.43	17.4	14.9	10000	80			

Tabelle A.2: Autokorrelationszeiten der Observablen ρ^2 und ρ_{mon} im Gebiet erster Ordnung $\lambda = 0.02$. Die angegebenen Größen werden im Text erläutert.

L	κ	$\tau_{\mathrm{int},\rho^2}$	$\tau_{\mathrm{int},\rho_{\mathrm{mon}}}$	Messintervall	Messungen	η_P	$\xi_P \times 3 \times L^3$
24	0.54	11.6	155	1000	80	1.997	0.1
	0.545	38.2	413	5000	60		
	0.5475	108	549	5000	60		
	0.549	1606	1710	10000	60		
	0.550	2351	2206	10000	70		
	0.5505	7763	5826	10000	70		
	0.5510	3971	3193	10000	70		
	0.5515	800	540	10000	70		
	0.553	64.4	58.1	5000	60		
	0.555	44.7	53.1	5000	60		
	0.56	18.8	18.8	2000	80		
	0.57	12.9	11.7	1000	90		
40	0.549	498	685	2000	60	1.997	1.0
	0.55	2213	2435	10000	60		
	0.5505	1626	1250	10000	50		
	0.551	1908	1476	10000	42		
	0.553	51.6	46.2	2000	45		
	0.56	17.7	15.8	2000	45		

Tabelle A.3: Autokorrelationszeiten der Observablen ρ^2 und ρ_{mon} im Gebiet zweiter Ordnung $\lambda = 0.2$. Die angegebenen Größen werden im Text erläutert.

Literaturverzeichnis

[1] Creutz, M.: *Quarks, Gluons and Lattices.* Cambridge University Press, 1983. – ISBN 0521244056

[2] Creutz, Michael ; Jacobs, Laurence ; Rebbi, Claudio: Monte Carlo computations in lattice gauge theories. In: *Phys. Rept.* **95** (1983), S. 201

[3] Nakano, T. et a.: Evidence for a Narrow S=+1 Baryon Resonance in Photoproduction from the Neutron. In: *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003), S. 012002

[4] Kleinert, H.: *Gauge fields in condensed matter.* Singapore [u.a.] : World Scientific, 1989. – ISBN ISBN 9971–50–210–0

[5] de Gennes, P.G.: In: *Solid State Commun.* **10** (1972), S. 753

[6] Fujita, Yukari ; Matsui, Tetsuo: Quantum gauged neural network: U(1) gauge theory. (2002). cond-mat/0207023

[7] Polyakov, Alexander M.: Quark confinement and topology of gauge groups. In: *Nucl. Phys.* **B 120** (1977), S. 429–458

[8] Chernodub, M. N. ; Ilgenfritz, Ernst-Michael ; Schiller, A.: String breaking and monopoles: A case study in the 3D Abelian Higgs model. In: *Phys. Lett.* **B 547** (2002), S. 269–277. hep-lat/0207020

[9] Fradkin, Eduardo H. ; Shenker, Stephen H.: Phase diagrams of lattice gauge theories with Higgs fields. In: *Phys. Rev.* **D 19** (1979), S. 3682

[10] Kleinert, Hagen ; Nogueira, Flavio S. ; Sudbø, Asle: Deconfinement transition in three-dimensional compact U(1) gauge theories coupled to matter fields. In: *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002), S. 232001. hep-th/0201168

[11] Kajantie, K. ; Karjalainen, M. ; Laine, M. ; Peisa, J.: Three-dimensional U(1) gauge + Higgs theory as an effective theory for finite temperature phase transitions. In: *Nucl. Phys.* **B 520** (1998), S. 345–381. hep-lat/9711048

[12] sudbø, A. ; Smorgrav, E. ; Smiseth, J. ; Nogueira, F. S. ; Hove, J.: Criticality in the (2+1)-dimensional compact Higgs model and fractionalized insulators. In: *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002), S. 226403. cond-mat/0207501

[13] Dirac, P.A.M.: *The Principles of Quantum Mechanics.* 2003. – 4. Auflage

[14] Feynman, R.P. ; Hibbs, A.R. *Quantum Mechanics and Path Integrals.* 1965

[15] Itzykson, C. ; Zuber, J.-B.: *Quantum Field Theorie.* McGraw-Hill, 1980

[16] Bjorken, J.D. ; Drell, S.D.: *Relativistische Quantenfeldtheorie.* McGraw-Hill, 1965. – ISBN 3–411–00101–1

[17] Le Bellac, M.: *Quantum and Statistical Field Theory.* Oxford : Clarendon Press, 1991. – ISBN 0–19–853929–0

[18] Salmhofer, M.: *Renormalization, An Introduction.* Springer-Verlag, 1999. – ISBN 3–540–64666–3

[19] Wick, G.C.: Properties of Bethe-Salpeter Wave Functions. In: *Phys. Rev.* **96** (1954), S. 1124

[20] Osterwalder, K. ; Schrader, R.: Axioms for Euclidian Green's functions. In: *Comm. Math. Phys* **31** (1973), S. 83

[21] Osterwalder, K. ; Schrader, R.: Axioms for Euclidian Green's functions 2. In: *Comm. Math. Phys* **42** (1975), S. 281

[22] Ryder, L.H.: *Quantum Field Theory.* Cambridge University Press, 1985. – ISBN 0–521–33859–5

[23] Rothe, Heinz J.: *Lattice gauge theories : an introduction.* Singapore[u.a.] : World Scientific, 1997. – 2. Auflage. – ISBN 981–02–3032–0

[24] Montvay, I. ; Münster, G.: *Quantum Fields on a Lattice.* Cambridge University Press, 1994. – ISBN 0–521–40432–0

[25] Janke, W.: Pseudo Random Numbers: Generation and Quality Checks. In: *Quantum Simulation of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, NIC Series* Bd. 10, John von Neumann Institute for Computing, 2002

[26] Metropolis, N. ; Rosenbluth, A. W. ; Rosenbluth, M. N. ; Teller, A. H. ; Teller, E.: Equation of state calculations by fast computing machines. In: *J. Chem. Phys.* **21** (1953), S. 1087–1092

[27] Grimmett, G. ; Stirzaker, D.R.: *Probability and random processes.* Oxford : Clarendon Press, 1997. – 2. Auflage. – ISBN 0–19–853665–8

[28] Binney, J.J.: *The theory of critical phenomena : an introduction to the renormalization group.* Oxford : Clarendon Press, 1992. – ISBN 0–19–851393–3

[29] Bunk, B.: Monte Carlo methods and results for the electro-weak phase transition. In: *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* **42** (1995), S. 566–568

[30] Janke, W.: *Computer Simulation I.* 2001. – Vorlesungsskriptum

[31] Janke, W.: Statistical Analysis of Simulations: Data Correlations and Error Estimation. In: *Quantum Simulation of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms, NIC Series* Bd. 10, John von Neumann Institute for Computing, 2002

[32] Ferrenberg, A. M. ; Swendsen, R. H.: New Monte Carlo technique for studying phase transitions. In: *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988), S. 2635–2638

[33] Ferrenberg, A. M. ; Swendsen, R. H.: New Monte Carlo technique for studying phase transitions, Erratum. In: *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989), S. 1658

[34] Newman, M.E.J. ; Palmer, R.G.: Error estimation in the histogram Monte Carlo method. (1998). cond-mat/9804306

[35] Newman, M.E.J. ; Barkema, G.T.: *Monte Carlo methods in statistical physics*. Oxford : Clarendon Press, 1999. – ISBN 0–19–851797–1

[36] Janke, W.: Histograms and all that. In: *Computer Simulations of Surfaces and Interfaces, NATO Science Series, II. Mathematics, Physics and Chemistry* Bd. 114, 2002, S. 137–157

[37] Ferrenberg, Alan M. ; Swendsen, Robert H.: Optimized Monte Carlo analysis. In: *Phys. Rev. Lett.* **63** (1989), S. 1195–1198

[38] Smiseth, J. ; Smorgrav, E. ; Nogueira, F. S. ; Hove, J. ; Sudbø, A.: Phase structure of d=2+1 compact lattice gauge theories and the transition from Mott insulator to fractionalized insulator. In: *Phys. Rev.* **B 67** (2003), S. 205104. cond-mat/0301297

[39] Binder, K. ; Heermann, D.W.: *Monte Carlo simulation in statistical physics*. Springer, 1997. – 3. Auflage. – ISBN 3–540–63265–4

[40] Kleinert, Hagen ; Nogueira, Flavio S. ; Sudbø, Asle: Kosterlitz-Thouless-like deconfinement mechanism in the 2+1 dimensional Abelian Higgs model. In: *Nucl. Phys.* **B 666** (2003), S. 361–395. hep-th/0209132

[41] Herbut, Igor F. ; Tesanovic, Zlatko: Critical fluctuations in superconductors and the magnetic field penetration depth. In: *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996), S. 4588. cond-mat/9605185

[42] Hove, J. ; Sudbø, A.: Anomalous Scaling Dimensions and Stable Charged Fixed Point of Type-II Superconductors. In: *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000), S. 3426

[43] Hasenbusch, M. ; Torok, T.: High precision Monte Carlo study of the 3D XY-universality class. (1999). cond-mat/9904408

[44] Becher, P. ; Joos, H.: The Dirac-Kahler equation and fermions on the lattice. In: *Zeit. Phys.* **C 15** (1982), S. 343

[45] Chernodub, M. N. ; Polikarpov, M. I. ; Zubkov, M. A.: Various Abelian projections of SU(2) lattice gluodynamics and Aharonov-Bohm effect in the field theory. In: *Nucl. Phys. Proc. Suppl.* **34** (1994), S. 256–260. hep-lat/9401027

[46] Abrikosov, A.A.: In: *Sov. Phys. JETP* **32** (1957), S. 1442

[47] Nielsen, Holger B. ; Olesen, P.: Vortex-line models for dual strings. In: *Nucl. Phys.* **B 61** (1973), S. 45–61

[48] Alves, Nelson A. ; Berg, Bernd A. ; Sanielevici, Sergiu: Binder energy cumulant for SU(3) lattice gauge theory. In: *Phys. Lett.* **B 241** (1990), S. 557

[49] Wenzel, S.: *Monte Carlo simulations of the 3D Ginzburg-Landau model with compact U(1) gauge field*, Universität Leipzig, Master thesis, 2004

[50] Chernodub, M. N. ; Ilgenfritz, Ernst-Michael ; Schiller, A.: More on string breaking in the 3D Abelian Higgs model: The photon propagator. In: *Phys. Lett.* **B 555** (2003), S. 206–214. hep-lat/0212005

[51] Chernodub, M. N. ; Ilgenfritz, Ernst-Michael ; Schiller, A.: Confinement and the photon propagator in 3D compact QED: A lattice study in Landau gauge at zero and finite temperature. In: *Phys. Rev.* **D 67** (2003), S. 034502. hep-lat/0208013

[52] Chernodub, M. N. ; Suzuki, T.: String breaking and monopoles. (2002). hep-lat/0211026

[53] Kosterlitz, J. M. ; Thouless, D. J.: Ordering, metastability and phase transitions in two- dimensional systems. In: *J. Phys.* **C 6** (1973), S. 1181–1203

[54] Nogueira, F. S. ; Smiseth, J. ; Smorgrav, E. ; Sudbø, A.: Compact U(1) gauge theories in 2+1 dimensions and the physics of low dimensional insulating materials. (2003). hep-th/0310100

[55] Chernodub, M. N. ; Feldmann, R. ; Ilgenfritz, Ernst-Michael ; Schiller, A.: Monopole chains in a compact Abelian model with Q=2 Higgs field. (2004). hep-lat/0406015

[56] Mosel, U.: *Introduction to Path Integrals in Field Theory.* 2002. – http://theorie.physik.uni-giessen.de

[57] Nakamura, A. ; Plewnia, M.: Gauge fixing ambiguity and photon propagators in compact U(1) lattice gauge theory. In: *Phys. Lett.* **B 255** (1991), S. 274–278

[58] Polikarpov, M. I. ; Yee, Kenton K. ; Zubkov, M. A.: Compact QED in Landau gauge: A Lattice gauge fixing case study. In: *Phys. Rev.* **D 48** (1993), S. 3377–3382. hep-lat/9305019

[59] Bogolubsky, I. L. ; Mitrjushkin, V. K. ; Muller-Preussker, M. ; Peter, P.: Lorentz gauge and Gribov ambiguity in the compact lattice U(1) theory. In: *Phys. Lett.* **B 458** (1999), S. 102–108. hep-lat/9904001

[60] Marenzoni, P. ; Martinelli, G. ; Stella, N.: The Gluon propagator on a large volume, at beta=6.0. In: *Nucl. Phys.* **B 455** (1995), S. 339–356. hep-lat/9410011

[61] Leinweber, Derek B. ; Skullerud, Jon I. ; Williams, Anthony G. ; Parrinello, Claudio: Asymptotic scaling and infrared behavior of the gluon propagator. In: *Phys. Rev.* **D 60** (1999), S. 094507. hep-lat/9811027

[62] Ma, J. P.: A study of gluon propagator on coarse lattice. In: *Mod. Phys. Lett.* **A 15** (2000), S. 229–244. hep-lat/9903009

[63] Langfeld, K. ; Reinhardt, H. ; Gattnar, J.: Gluon propagators and quark confinement. In: *Nucl. Phys.* **B 621** (2002), S. 131–156. hep-ph/0107141

[64] Mandula, J. E. ; Ogilvie, M.: The gluon is massive: A lattice calculation of the gluon propagator in the Landau gauge. In: *Phys. Lett.* **B 185** (1987), S. 127–132

[65] Mandula, Jeffrey E. ; Ogilvie, Michael: Efficient gauge fixing via overrelaxation. In: *Phys. Lett.* **B 248** (1990), S. 156–158

[66] Chernodub, M. N. ; Ilgenfritz, Ernst-Michael ; Schiller, A.: The photon propagator in compact QED(2+1): The effect of wrapping Dirac strings. In: *Phys. Rev.* **D 69** (2004), S. 094502. hep-lat/0311033

[67] Nambu, Yoichiro: Strings, monopoles, and gauge fields. In: *Phys. Rev.* **D 10** (1974), S. 4262

[68] Chernodub, M. N. ; Feldmann, R. ; Ilgenfritz, Ernst-Michael ; Schiller, A.: Phase structure and gauge boson propagator in the radially active 3D compact Abelian Higgs model. (2004). hep-lat/0405005

[69] Prokov'ev, N. ; Svistunov, B.: Worm algorithms for classical statistical models. In: *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), S. 160601. cond-mat/0103146

Danksagung

Ich möchte mich zuerst bei meinem Betreuer Dr. Arwed Schiller sehr herzlich für die ausdauernde und stets hilfreiche Unterstützung während des vergangenen Jahres bedanken. Mein spezieller Dank gilt auch Dr. Michael Ilgenfritz und Dr. Maxim Chernodub für wertvollen Anregungen und die Aufwerfung/Beantwortung manch kniffliger Frage. Desweiteren gebührt mein Dank Dr. Adriaan Schakel für stetige Motivation während der Arbeit und der oft unsichtbaren Hilfe von Dr. Elmar Bitter und Andreas Nussbaumer in allen Computerfragen.

Ich danke auch sehr Nadine Große, Alex Hertsch, Christoph Husemann, Konstantin Ulrich und Sandro Wenzel, für viele interessante Diskussionen und Anregungen gerade auch aus verschiedenen Blickrichtungen.

Mein herzlicher Dank gilt auch der Abteilung Computerorientierte Quantenfeldtheorie, insbesondere Professor Janke für die Organisation der Gruppenseminare.

Ich bedanke mich bei der Studienstiftung des deutschen Volkes für finanzielle Unterstützung.

Erklärung nach §20(5) der Prüfungsordnung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Ort, Datum, Unterschrift

Einverständniserklärung

Hiermit erkläre ich mich einverstanden, dass diese Arbeit – sofern eine positive Begutachtung vorliegt – in die Bibliothek der Fakultät für Physik und Geowissenschaften aufgenommen wird.

Ort, Datum, Unterschrift