

BERGISCHE UNIVERSITÄT  
WUPPERTAL



*Fachbereich 8*  
NATURWISSENSCHAFTEN

# Der Phasenübergang in der U(1)-Gittereichtheorie

Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
des Fachbereichs Physik  
der Bergischen Universität Wuppertal

vorgelegt von

Guido Arnold  
aus Wuppertal

WUB-DIS 2003-1

Januar 2003

# Abstract

In this work the phase transition of 4d compact pure U(1) gauge theory with Wilson action is investigated. By means of a highly efficient parallel implementation of the multicanonical Hybrid Monte Carlo algorithm we simulate systems of lattice sizes up to  $18^4$  with  $\mathcal{O}(10^6 - 10^7)$  configurations respectively. The goal of the project is to produce unambiguous results as to the order of the U(1) phase transition.

In a heuristic extension of the first order finite size scaling (FSS) theory of Borgs-Kotecky to U(1) gauge theory we investigate several cumulants of the plaquette energy. We find scaling to be consistent with a series expansion in terms of the reciprocal volume of the System  $1/V$ . In particular the pseudocritical couplings  $\beta(V)$  can be described by this ansatz with high precision and stability. We extract the infinite volume transition coupling,  $\beta_T = 1.0111331(21)$ , and determine the asymmetry,  $\log(X) = 3.21(10)$  where  $X$  denotes the relative weight of the coulomb phase over the confined phase in the infinite volume limit.

Since we cannot definitely discard the possibility of an asymptotic second order scaling that might show up on large lattice sizes, we investigate the latent heat by additional simulations of both metastable branches on lattice sizes up to  $32^4$  at the very transition coupling,  $\beta_T$ . The occurrence of a nonvanishing energy gap indicates a discontinuous phase transition. Furthermore its value is consistent with the gap obtained from FSS of the specific heat within the Borgs-Kotecky scheme.

An independent leading order perturbative lattice calculation confirms a first order scaling of the pseudocritical coupling as defined by the equilibrium of the free energies in both phases. The leading correction reveals an asymmetry of  $\log(X) = 3.15(8)$  in striking agreement with the FSS result. Yet we are faced with deviations from the Borgs-Kotecky scheme in higher order corrections to asymptotic scaling and conclude that either the Borgs-Kotecky first order theory or lattice perturbation theory might exhibit only asymptotic convergence. This does however not affect the clear evidence of a discontinuous phase transition determined by the non vanishing infinite volume gap.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1	Eichtheorie der QED . . . . .	7
2.2	$U(1)$ -Gittereichtheorie . . . . .	9
2.2.1	Diskretisierung . . . . .	10
2.2.2	Die Wilson-Wirkung . . . . .	11
2.2.3	Magnetische Monopole . . . . .	14
2.3	Phasenübergänge . . . . .	15
2.3.1	Die Ordnung eines Phasenübergangs . . . . .	15
	Phasenkoexistenz . . . . .	16
	Oberflächenspannung . . . . .	16
2.3.2	Der Phasenübergang der $U(1)$ -Gittereichtheorie . . . . .	17
2.3.3	Bisherige Untersuchungen des $U(1)$ -Phasenübergangs . . . . .	18
2.3.4	Existenz des Kontinuumslikes . . . . .	21
<b>3</b>	<b>Simulation</b>	<b>23</b>
3.1	Verteilungen . . . . .	23
3.1.1	Importance sampling . . . . .	23
3.1.2	Umbrella sampling . . . . .	25
3.1.3	Kanonische Verteilung . . . . .	26
3.1.4	Multikanonische Verteilung . . . . .	27
3.2	Algorithmen . . . . .	30
3.2.1	Markov Prozess . . . . .	30
3.2.2	Autokorrelation . . . . .	31
	Integrierte Autokorrelationszeit . . . . .	31
	Exponentielle Autokorrelationszeit . . . . .	33
	Flip-Autokorrelationszeit . . . . .	33
3.2.3	Slowing down . . . . .	34
3.2.4	Metropolis Algorithmus . . . . .	35
	Einstellung der Parameter . . . . .	37
	Konvergenz des Single-Site Metropolis . . . . .	37
3.2.5	Hybrid Monte Carlo (HMC) . . . . .	38
	Konvergenz des HMC . . . . .	40
3.2.6	Multikanonischer Hybrid Monte Carlo (MHMC) . . . . .	42

	Konvergenz des MHMC . . . . .	43
	Bestimmung des multikanonischen Potentials . . . . .	43
	Multihistogramm . . . . .	47
3.2.7	Relaxation . . . . .	47
3.3	Simulationsparameter . . . . .	49
3.4	Performanz . . . . .	52
	Parallelisierbarkeit des MHMC . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Finite Size Scaling</b>	<b>57</b>
4.1	Borgs-Kotecky Ansatz . . . . .	57
4.2	Messung der Kumulanten . . . . .	58
4.2.1	Genauigkeit . . . . .	63
4.3	Kritische Kopplung . . . . .	64
4.3.1	Observablen mit exponentiellen Korrekturen . . . . .	66
4.3.2	Fitansatz 2. Ordnung . . . . .	68
4.4	Latente Wärme . . . . .	68
4.4.1	Direkte Messung der latenten Wärme . . . . .	70
<b>5</b>	<b>Störungstheoretische Betrachtungen</b>	<b>77</b>
5.1	Notation . . . . .	77
5.2	Coulomb Phase . . . . .	78
5.3	Confinement Phase . . . . .	81
5.4	Phasengleichgewicht . . . . .	82
5.5	Vergleich mit der Simulation . . . . .	83
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>85</b>
<b>A</b>	<b>Datenanalyse</b>	<b>87</b>
A.1	Integrierte Autokorrelation . . . . .	87
A.2	Jackknife Fehleranalyse . . . . .	88
<b>B</b>	<b>Modensummen</b>	<b>90</b>
B.1	$\zeta$ -Funktion Regularisierung . . . . .	90
B.1.1	Definitionen . . . . .	90
B.1.2	Integraldarstellung . . . . .	91
B.1.3	$d = 1$ . . . . .	93
B.2	Gitter-Regularisierung . . . . .	93
B.2.1	Definitionen . . . . .	93
B.2.2	Integraldarstellung . . . . .	94
B.2.3	Kontinuumsimes und Korrekturen . . . . .	97
B.2.4	$d = 1$ . . . . .	97
B.2.5	$d = 2$ . . . . .	99
B.3	$\zeta$ -Funktion Regularisierung im massiven Fall . . . . .	99
B.3.1	Definitionen . . . . .	99
B.3.2	Integraldarstellungen . . . . .	99
B.3.3	$d = 1$ . . . . .	101

B.4	Gitter Regularisierung im massiven Fall . . . . .	101
B.4.1	Definitionen . . . . .	101
B.4.2	Integraldarstellung . . . . .	101
B.4.3	Kontinuumsimes . . . . .	102
B.4.4	$d = 1$ . . . . .	102
B.5	Riemannsches $\zeta$ -Funktion . . . . .	103
B.6	Kontinuumssummen . . . . .	104
B.7	Gitter Summen . . . . .	104
B.8	Gitter-Integrale . . . . .	107
B.9	Massiver Gitter-Propagator . . . . .	108
B.9.1	$0 < d < 2$ . . . . .	108
B.9.2	$d = 2$ . . . . .	108
B.9.3	$2 < d < 4$ . . . . .	109
B.9.4	$d = 4$ . . . . .	109
B.9.5	Zusammenfassung . . . . .	110

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Beschreibung elektromagnetischer Prozesse im Rahmen der relativistischen Quantenelektrodynamik (QED) ist über eine Störungsentwicklung in der elektromagnetischen Kopplung  $\alpha_e = e^2/(4\pi) \approx 1/137$  möglich. Die in dieser perturbativen Prozedur auftauchenden divergenten Integrale können regularisiert werden. Die Renormierbarkeit der QED (sowie jeder anderen Eichtheorie) garantiert die Unabhängigkeit der renormierten (physikalischen) Observablen von der Wahl der Regularisierungsparameter. Aufgrund des kleinen Wertes der Kopplung genügt bereits die Berücksichtigung von Beiträgen in niedriger Ordnung von  $\alpha_e$ , um äußerst präzise Resultate in fantastischer Übereinstimmung mit experimentellen Daten zu erhalten. So ist das anomale magnetische Moment des Elektrons in 13-stelliger Genauigkeit bekannt.

Dennoch muss die störungstheoretische Formulierung der QED wegen ihrer Beschränkung auf Energien unterhalb des Landau-Poles als *effektive Theorie* angesehen werden. Obwohl dieser ultraviolette *cut-off*  $\Lambda_L$  im Falle der QED jenseits der Planck-Skala liegt, stellt der Landau Pol kein rein akademisches Problem dar. Er taucht in jeder Quantenfeldtheorie auf, welche (anders als die QCD) nicht asymptotisch frei ist und ist somit von fundamentalem Interesse. Für das Minimal Supersymmetrische Standardmodell ergibt sich ein  $\Lambda_L \approx 10^{20}$  GeV, welches bei Berücksichtigung von vier Higgs-Teilchen auf  $\approx 10^{17}$  GeV absinkt [1]. Bei dieser Art von Beschränkung handelt es sich also keineswegs um exotische Energieskalen.

In der asymptotisch freien Quantenchromodynamik (QCD) bricht die Störungstheorie aufgrund der anwachsenden Kopplung der starken Wechselwirkung  $\alpha_s$  bei der Beschreibung niederenergetischer Phänomene zusammen. Daher kann z.B. eine zentrale Eigenschaft der QCD, das Confinement der Quarks, nur nicht-perturbativ untersucht werden. Die Gültigkeit der Gittereichtheorie über den gesamten Kopplungsbereich hinweg macht den Erfolg dieses alternativen Ansatzes aus. Anders als in der Gitterformulierung der QCD mit der ihr zugrundeliegenden SU(3) Eichsymmetrie, weist die Fundamentaldarstellung der reinen U(1)-Gittereichtheorie, als Modell der QED ohne dynamische Fermionen, einen Phasenübergang bei endlicher Kopplung  $\beta_T = 1/e^2 \approx 1.011$  auf. Dieser trennt die Coulomb Phase bei schwacher Kopplung von einer Confined Phase. Während die masselose Coulomb Phase die statischen

Eigenschaften der QED reproduziert, sorgen kondensierende magnetische Monopole in der Confined Phase für den Einschluss elektrischer Ladungen ähnlich dem Quarkeinschluss in der QCD. Es stellt sich daher die Frage, ob die Eigenschaften der Confined Phase ein reiner Gitterartefakt sind, oder ob es eine Möglichkeit gibt, über das Auffinden eines kritischen Punktes, eine Kontinuumstheorie aus der  $U(1)$  zu konstruieren, welche Eigenschaften des Confinement beibehält <sup>1</sup>.

Die Untersuchung des Phasenübergangs bei  $\beta_T$  ist wegen der Kopplungsstärke der Ordnung  $\mathcal{O}(1)$  nicht perturbativ möglich, sondern Gittersimulationen vorbehalten. Dabei ist die Phasenstruktur nicht universell, sondern hängt von der gewählten Wirkung ab. Eine systematische Suche nach einer Gitterformulierung mit einem kontinuierlichen Phasenübergang durch Addition zusätzlicher Terme zur Wilsonwirkung, wie z.B. der adjungierten Wirkung, erfordert die Klärung der Frage nach der Ordnung des Phasenübergangs in der Wilsonformulierung selbst. Dies ist das Ziel dieser Arbeit.

Nach der Erläuterung einiger theoretischer Grundlagen (Kapitel 2) wird zu diesem Zwecke ein Algorithmus bereitgestellt (Kapitel 3.2.6), welcher in der Lage ist, die kompakte vierdimensionale  $U(1)$  Eichtheorie effizient zu simulieren. Mit Hilfe des multikanonischen Hybrid Monte Carlo Algorithmus erzeugen wir eine ausreichend große Anzahl an Konfigurationen bei unterschiedlich großen Systemvolumina  $V = L^4$ , mit  $L = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18$ . Die Größe der Statistik bemisst sich dabei an der relativen statistischen Genauigkeit, mit der wir verschiedene Observablen auf den so erzeugten Konfigurationen "messen". Eine numerische Analyse des Skalierens dieser Observablen sowie der über deren Charakteristika definierten pseudokritischen Kopplung mit der Systemausdehnung  $L$  erlaubt eine selbstkonsistente Beschreibung konform mit einem Phasenübergang schwach 1. Ordnung (Kapitel 4). Im Rahmen dieser Analyse bestimmen wir einen präzisen Wert für die kritische Kopplung des unendlich ausgedehnten Systems  $\beta_T$ . Wegen der Beschränktheit der von uns untersuchten Systemvolumina können wir ein asymptotisches Skalieren 2. Ordnung, welches erst bei größeren Gittern sichtbar sein könnte, zunächst nicht ausschließen. Eine zusätzliche metastabile Simulation größerer Systeme bis  $L = 32$  ermöglicht die Bestimmung der latenten Wärme im Kontinuum. Da diese (in Übereinstimmung mit dem Ergebnis der Skalenanalyse) von Null verschieden ist, können wir unsere Arbeitshypothese eines diskontinuierlichen Übergangs numerisch bestätigen. Eine vollkommen unabhängige, halbanalytische Approximation der freien Energie über einen perturbativen Ansatz auf dem Gitter (Kapitel 5) liefert ebenfalls ein asymptotisches Skalenverhalten erster Ordnung.

Wir erhalten ein konsistentes Ergebnis zweier unabhängiger Ansätze und schließen daraus, dass der Phasenübergang der vierdimensionalen reinen  $U(1)$  Eichtheorie in der Wilsonformulierung schwach erster Ordnung ist.

---

<sup>1</sup>Letztlich ist natürlich das Phasendiagramm der kompakten Gitter-QED inklusive dynamischer Fermionen von Interesse [2].

# Kapitel 2

## Grundlagen

Das Standardmodell der Elementarteilchenphysik, als Zusammenfassung der Theorien der fundamentalen Wechselwirkungen, beschreibt drei der vier grundlegenden Kräfte der Natur<sup>1</sup>.

- starke Wechselwirkung
- elektromagnetische Wechselwirkung
- schwache Wechselwirkung

Als grundlegenden Bausteine der Materie sind sechs Quarks ( $u, d, s, c, b, t$ ) bekannt, welche jeweils drei verschiedene Farbladungen tragen können, sowie sechs Leptonen ( $e, \nu_e, \mu, \nu_\mu, \tau, \nu_\tau$ ). Diese Teilchen wechselwirken über den Austausch von Vektorbosonen. Die Gluonen stellen die Austauscheteilchen der starken Wechselwirkung dar,  $W^\pm$  und  $Z$  das Analogon für die schwache Wechselwirkung. Das Austauschboson der elektromagnetischen Wechselwirkung ist das Photon.

Die mathematische Beschreibung der Wechselwirkung zwischen den Konstituenten im Rahmen einer Feldtheorie basiert auf dem Prinzip der *lokalen Eichinvarianz*. Die Eichgruppe des Standardmodells ist die  $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ . Während die QCD als Theorie der starken Wechselwirkung invariant unter Transformationen der Gruppe  $SU(3)$  ist, besitzt die elektroschwache Theorie<sup>2</sup> die  $SU(2) \times U(1)$  als Eichgruppe. Hierin beschreibt die abelsche Lie-Gruppe  $U(1)$  im wesentlichen den elektromagnetischen Anteil der Wechselwirkung.

### 2.1 Eichtheorie der QED

Eine Eichtheorie ist durch die Angabe ihres Wirkungsfunktional  $S$  vollständig definiert. Die Konstruktion einer Eichtheorie baut auf der Feldtheorie freier Teilchen auf. Das Wirkungsfunktional für ein freies Fermion der Masse  $M$  ist gegeben durch:

---

<sup>1</sup>Die vierte und schwächste basale Wechselwirkung, die Gravitation, ist bislang nicht durch eine vollständige Quantentheorie beschrieben.

<sup>2</sup>Glashow, Salam und Weinberg gelang es, den Elektromagnetismus mit der schwachen Wechselwirkung zu vereinen.



$$S_f = \int d^4x \bar{\psi}(x) (i\gamma^\mu \partial_\mu - M) \psi(x). \quad (2.1)$$

Diese fermionische Wirkung ist invariant unter einer *lokalen* Eichtransformation

$$G(x) = e^{i\Lambda(x)}, \quad (2.2)$$

sofern wir die Ableitung durch ihre kovariante Formulierung ersetzen:

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu + i\partial_\mu \Lambda(x). \quad (2.3)$$

Das Transformationsverhalten von Wellenfunktion und Vierervektor ist dann wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightarrow G(x)\psi(x) \\ D_\mu &\rightarrow G(x)D_\mu G^\dagger(x). \end{aligned} \quad (2.4)$$

$G$  ist Element einer Lie-Gruppe und  $\Lambda$  ist ein Element der zugehörigen Lie-Algebra. Durch das Hinzufügen weiterer Wirkungsterme zur freien fermionischen Wirkung in Gl. (2.1), die ebenfalls lokal invariant sind unter der gewählten Eichtransformation  $G(x)$ , lassen sich verschiedene Eichtheorien definieren.

Die Konstruktion der QED als Eichtheorie lässt sich mit dem Aharonov-Bohm Effekt motivieren: Bewegt sich ein Fermion im elektromagnetischen (Eich-)Feld  $A_\mu(x)$  entlang eines Pfades  $\mathcal{P}$  vom Raumzeitpunkt  $x$  zu einem Punkt  $y$ , so erfährt dessen Wellenfunktion eine Phasenverschiebung

$$\psi(y) = \mathcal{P}[e^{ie \int_x^y dx'^\mu A_\mu(x')}] \psi(x) \quad (2.5)$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ e^{ie \int_{x_{N-1}}^y dx'^\mu A_\mu(x')} \dots e^{ie \int_x^{x_1} dx'^\mu A_\mu(x')} \right] \psi(x). \quad (2.6)$$

Hierbei steht  $\mathcal{P}[\cdot]$  für das pfadgeordnete Produkt. Die Betrachtung eines infinitesimalen Propagierens in Gl. (2.5) erlaubt die Zuordnung  $eA_\mu(x) = \partial_\mu \Lambda(x)$ . Die zugehörige Lie-Gruppe ist die abelsche  $U(1)$ , deren Elemente sich schreiben lassen als

$$U(x, x + \Delta x) = e^{ie \int_x^{x+\Delta x} dx'^\mu A_\mu(x')}. \quad (2.7)$$

Wir fügen zur Wirkung der Fermionen  $S_f$  den folgenden kinetischen Eichterm hinzu, der das Propagieren der Eichfelder ermöglicht

$$S_g = \frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}. \quad (2.8)$$

Dieser führt per Variation  $\delta S_g = 0$  in der klassischen Elektrodynamik auf die Maxwellgleichungen. Der Feldstärketensor ist dabei wie folgt mit den Eichfeldern verknüpft:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu. \quad (2.9)$$

Die volle QED ist über  $S = S_f + S_g$  definiert. Wir werden uns in der weiteren Betrachtung auf die reine Eichtheorie beschränken ( $S = S_g$ ), was bedeutet, dass wir Effekte dynamischer Fermionen unberücksichtigt lassen. Um aus der Eichtheorie Erwartungswerte von Operatoren berechnen zu können, verwenden wir den auf Feldtheorien verallgemeinerten Pfadintegralformalismus von Feynman [3], in dem auf natürliche Weise eine Diskretisierung der Zeit nahegelegt wird. Der Vakuumerwartungswert eines Operators  $\mathcal{O}$  ist gegeben durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int [DU] \mathcal{O}(U) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(U)\right), \quad (2.10)$$

mit der Normierung durch die Zustandssumme

$$Z = \int [DU] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(U)\right). \quad (2.11)$$

Die Integration erfolgt über alle möglichen Eichfeldkonfigurationen. Damit stellt Gl. (2.10) ein (überabzählbar) unendlich-dimensionales Integral dar. Mit Hilfe einer Renormierungsvorschrift lässt sich dieser Ausdruck allerdings in eine mathematisch wohldefinierte Berechnungsvorschrift überführen.

## 2.2 $U(1)$ -Gittereichtheorie

Die Diskretisierung der Raumzeit durch ein Gitter stellt eine solche Regularisierung dar. Durch die Formulierung der Theorie auf einem Gitter von Raumzeitpunkten wird die Integration in Gl. (2.10) auf ein hochdimensionales gewöhnliches Integral zurückgeführt. Dieses gilt es durch Anbindung an die statistische Mechanik über numerische Methoden zu lösen. Dazu ist es notwendig, die komplexwertige Exponentialfunktion in Gl. (2.10) auf eine reelle Darstellung zu transformieren.

Eine analytische Fortsetzung der Zeit über eine Wick-Rotation der Zeitachse

$$x_0 \rightarrow -ix_4, \quad (2.12)$$

bewirkt einen Übergang von der Minkowskischen zur euklidischen Metrik. Dies führt auf einen zusätzlichen Faktor  $i$  in der Minkowskischen Wirkung. Im Einheitensystem  $\hbar = 1$  ergibt sich damit für die Zustandssumme der euklidischen Feldtheorie

$$Z = \int [DU] \exp(-S_E(U)). \quad (2.13)$$

Damit erhalten wir für den Operatorerwartungswert aus Gl. (2.10) ein Integral der Operatoreinzelwerte, die mit dem bekannten Boltzmannfaktor  $\exp(-S_E)$  gewichtet sind

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int [DU] O(U) \exp(-S_E(U)) . \quad (2.14)$$

Durch diesen Übergang von der Minkowskischen zur euklidischen Feldtheorie sind nun die Methoden der statistischen Mechanik anwendbar geworden. Der Boltzmannfaktor legt es nahe, in einer numerischen Integration mittels Monte Carlo Methoden, Feldkonfigurationen als Stützstellen der Integration gemäß der kanonischen Boltzmannverteilung zu generieren. In Kapitel 3.1 wird die Methode des *Importance Sampling* diskutiert, während Kapitel 3.2.1 auf die Prozedur der Erzeugung der Feldkonfigurationen eingeht. Die Rücktransformation der erhaltenen Resultate auf reelle Zeiten entfällt in der Regel, da die interessierenden Größen keine explizite Zeitabhängigkeit besitzen. Wir werden daher im folgenden die euklidische Wirkung nur noch mit  $S$  bezeichnen.

### 2.2.1 Diskretisierung

Wir beschreiben im folgenden die Umformulierung der Kontinuums-Eichtheorie auf ein isotropes, vierdimensionales Raumzeit-Gitter des Gitterabstands  $a$  und der Ausdehnung  $(aL)^4$ . Die Wahl zyklischer Randbedingungen, welche auf die Topologie eines vierdimensionalen Torus führt, macht eine gesonderte Behandlung der Gitterränder überflüssig.

Bei der Konstruktion einer Gitterversion einer solchen Eichtheorie ergibt sich eine gewisse Freiheit in der Wahl der diskretisierten Operatoren und Felder. Eine Begrenzung dieser Freiheit besteht in der Forderung, dass die Gittergrößen im thermodynamischen Limes in die ursprünglichen Kontinuumsgrößen der Eichtheorie übergehen und in diesem Grenzwert die Symmetrien der Kontinuumstheorie besitzen. Man wählt daher mit Vorteil solche Größen, welche die Eichsymmetrie direkt erfüllen, also selbst Elemente der Eichgruppe sind.

Die einfachste Diskretisierung eines beliebigen Feldes  $\phi(x)$  besteht darin, das Kontinuumsfeld am Gitterpunkt  $x_i$  auszuwerten und diesen Wert dem diskretisierten Feld zuzuweisen:

$$\phi_i = \phi(x_i). \quad (2.15)$$

Diese Diskretisierung resultiert in einem *cutoff* der diskreten Impulse der Form  $\theta(|p| < \pi/a)$ . Das Gitter fungiert somit als nicht-perturbatives Regularisierungsschema. Der endliche Gitterabstand  $a$  sorgt für einen Ultraviolett-Cutoff in den Impulsen und vermeidet die in der Kontinuumstheorie auftretenden Divergenzen.

Lepage bezeichnet in Ref. [4] diese Diskretisierung als „*perfektes Feld*“ und hebt sie von der Möglichkeit der „*perfekten Wirkung*“ ab, in der das diskretisierte Feld als räumlicher Mittelwert des Kontinuumsfeldes geschrieben wird:

$$\phi_i = \frac{1}{a^4} \int_V d^4x \phi(x). \quad (2.16)$$

Das Integrationsvolumen erstreckt sich in jeder Dimension der Raumzeit über das Intervall  $x_{i,\mu} - a/2 \leq x_\mu \leq x_{i,\mu} + a/2$ . Diese Form der Felddefinition bewirkt einen weichen UV-Cutoff der Impulse. Differentiationsoperatoren werden dadurch wesentlich lokaler. Allerdings ist die Konstruktion diskretisierter Operatoren aufwendiger.

Wir begnügen uns mit einer  $O(1/a)$  Genauigkeit der Ableitungsoperatoren, die damit hinreichend lokal sind, und diskretisieren in der Form des perfekten Feldes:

$$\begin{aligned} x_\mu &\rightarrow n_\mu a \\ \phi(x) &\rightarrow \phi_n = \phi(na) \\ \partial_\mu \phi(x) &\rightarrow \frac{1}{a} (\phi_{n+\hat{\mu}} - \phi_n) \\ \int d^4x \dots &\rightarrow a^4 \sum_n \dots \end{aligned} \quad (2.17)$$

## 2.2.2 Die Wilson-Wirkung

Die  $U(1)$ -Gittereichtheorie besitzt als Eichgruppe die kompakte, abelsche Lie-Gruppe  $U(1)$ , deren Elemente  $U_\mu(n)$  die komplexen Zahlen mit Absolutbetrag 1 sind. Wir wählen eine kompakte Darstellung der Gruppe, indem wir die *Links* über *Linkwinkel*  $\phi_\mu(n)$  aus einem abgeschlossenen Intervall parametrisieren

$$U_\mu(n) = e^{i\phi_\mu(n)} \quad \text{mit} \quad \phi_\mu(n) \in [-\pi, \pi]. \quad (2.18)$$

Im thermodynamischen Limes können die Linkwinkel  $\phi_\mu(n)$  über Gl. (2.7) mit den Eichfeldern verknüpft  $A_\mu(x)$  werden

$$U_\mu(n) = U(n, n + \hat{\mu}) = e^{ie \int_{x_n}^{x_{n+\hat{\mu}}} dx^\nu A_\nu(x)} \simeq e^{ie a A_\mu(n)}. \quad (2.19)$$

Daher erwarten wir im naiven Kontinuums-limes die Entsprechung

$$\phi_\mu(n) \rightarrow ea A_\mu(x). \quad (2.20)$$

Damit liegt auch folgende anschauliche Interpretation der Links auf dem Gitter nahe:  $U_\mu(n)$  repräsentiert den Phasenfaktor, mit dem ein Materiefeld multipliziert werden muss, wenn es vom Gitterpunkt  $n$  zum Nachbarpunkt  $n + \hat{\mu}$  transportiert wird. Man nennt die Links daher auch Paralleltransporter. Der entsprechende Phasenfaktor für den Transport in Gegenrichtung lautet:

$$U_{-\mu}(n + \hat{\mu}) = U_\mu^\dagger(n). \quad (2.21)$$

Wir wollen nun eine mögliche Diskretisierung der Kontinuums-wirkung der QED auf dem Gitter konstruieren. Dabei soll die Eichsymmetrie respektiert werden. Ein

Produkt von Links entlang einer rechteckigen Kontur auf dem Gitter, *Wilson loop* genannt, ist unter Ausschluss von Fermionfeldern das einzige eichinvariante Konstrukt aus den Gruppenelementen  $U_\mu(n)$ . Der kleinste Wilson loop ist die in Fig. 2.1 dargestellte Plaquette

$$\begin{aligned}
U_{\mu\nu}(n) &= U_\mu(n)U_\nu(n + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(n + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(n) \\
&= \exp i(\phi_\mu(n) + \phi_\nu(n + \hat{\mu}) - \phi_\mu(n + \hat{\nu}) - \phi_\nu(n)) \\
&\equiv \exp i(\theta_{\mu\nu}(n)) .
\end{aligned} \tag{2.22}$$

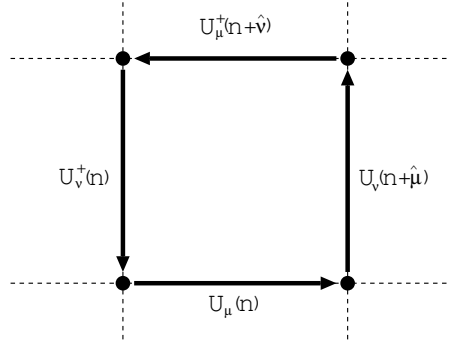


Abbildung 2.1: Die Plaquette

Für den in der letzten Gleichung definierten *Plaquettewinkel* ergibt sich  $\theta_{\mu\nu}(n) \in [-4\pi, 4\pi]$ . Über den Realteil der Plaquetten formulieren wir die *Wilsonwirkung*

$$\begin{aligned}
S(U) &= \beta \sum_p \Re[1 - U_p] \\
&= \beta \sum_{n,\mu,\nu>\mu} \Re[1 - U_{\mu\nu}(n)] \\
&= \beta \sum_{n,\mu,\nu>\mu} [1 - \cos(\theta_{\mu\nu}(n))]
\end{aligned} \tag{2.23}$$

$$= \frac{\beta}{2} \sum_{n,\mu,\nu} [1 - \cos(\theta_{\mu\nu}(n))] . \tag{2.24}$$

Wir definieren eine inverse Kopplung  $\beta$  durch die Beziehung mit der nackten Kopplung der QED

$$\beta = 1/e^2 . \tag{2.25}$$

Die Identität von Gl. (2.23) und Gl. (2.24) beruht darauf, dass der antisymmetrische Plaquettewinkel,  $\theta_{\mu\nu} = -\theta_{\nu\mu}$ , Argument einer geraden Funktion ist. Diese Symmetrie werden wir für die Konstruktion eines effizienten Algorithmus zur Erzeugung

von Eichfeldkonfigurationen verwenden.

Unter Berücksichtigung von Gl. (2.20) schreiben wir die Elemente der durch die Wirkung (Gl. (2.24)) definierten kompakten Gittereichtheorie in physikalischen Einheiten

$$U_\mu(n) = \exp[ieaA_\mu(n)], \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}(n) &= \exp[iea(A_\mu(n) + A_\nu(n + \hat{\mu}) - A_\mu(n + \hat{\nu}) - A_\nu(n))] \\ &= \exp[iea^2 F_{\mu\nu}(n)], \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$F_{\mu\nu}(n) = \partial_\mu A_\nu(n) - \partial_\nu A_\mu(n), \quad (2.28)$$

$$S = \frac{1}{2e^2} \sum_{n,\mu,\nu} [1 - \cos(ea^2 F_{\mu\nu}(n))], \quad (2.29)$$

$$\int DU = \prod_{n,\mu} \int dU_\mu(n) = \prod_{n,\mu} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d(aA_\mu)(n)}{2\pi}. \quad (2.30)$$

In einer Taylor-Entwicklung von Gl. (2.29) kann gezeigt werden, dass die Wilsonwirkung bis auf Korrekturen der Ordnung  $O(a^4)$  eine mögliche Diskretisierung der reinen Eichwirkung im Kontinuum,  $S_g$ , aus Gl. (2.8) darstellt:

$$S = a^4 \sum_{n,\mu,\nu} \left( \frac{1}{4} [F_{\mu\nu}]^2 - \frac{1}{48} e^2 a^4 [F_{\mu\nu}]^4 + \dots \right) \quad (2.31)$$

$$\xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}. \quad (2.32)$$

Daher spricht man davon, dass die QED den **naiven** Kontinuumsimes der  $U(1)$ -Gittereichtheorie darstellt. Die tatsächliche Existenz eines solchen Grenzwertes ist damit jedoch nicht nachgewiesen. In Kapitel 2.3.4 wird auf weitere Bedingungen zur Bildung des Kontinuumsimes eingegangen. Es sei nochmals darauf hingewiesen, daß die Wilson-Wirkung keinesfalls eindeutig aus der Wahl der Diskretisierung (perfektes Feld) folgt. Sie stellt jedoch gewissermaßen eine kanonische Wahl dar. Die Konstruktion über größere Wilsonloops ist ebenfalls möglich, führt jedoch auf einen größeren Diskretisierungsfehler und stellt überdies einen höheren Berechnungsaufwand dar.

Die zunächst formale Integraldarstellung der Zustandssumme aus Gl. (2.13) ist in der Gitterformulierung regularisiert.

$$Z = \int [DU] \exp(-S(U)), \quad DU = \prod_{n,\mu} dU_\mu(n). \quad (2.33)$$

Die Zustandssumme beschreibt das durch die  $U(1)$ -Gittereichtheorie mit Wilsonwirkung definierte statistische System vollständig. Für ein endliches Gitter ( $n =$

$1, \dots, L^4$ ) ist das Produkt aller Volumenelemente  $dU_\mu(n)$  im Gruppenraum endlich, sofern die Gruppe der zugehörigen Eichfelder  $U_\mu(n)$  *kompakt* ist. Daher ist die Zustandssumme Gl. (2.33), auch ohne die Eichung zu fixieren und damit Freiheitsgrade zu reduzieren, wohldefiniert. Eine feste Wahl der Eichung in der kompakten Wirkung wird erst notwendig, wenn wir Störungstheorie auf dem Gitter betreiben (siehe Kapitel 5).

In einer *nicht kompakten* Formulierung hingegen ist das Volumen der Eichgruppe und damit auch die Zustandssumme Gl. (2.33) divergent. Dennoch lassen sich auch in diesem Fall Erwartungswerte eichinvarianter Operatoren über Monte Carlo Simulationen, basierend auf dem Quotienten Gl. (2.14), sinnvoll berechnen, da sich die Divergenz formal herauskürzt. Die Zustandssumme selbst erhält jedoch erst über Eichfixierung eine mathematisch wohldefinierte Bedeutung. Dazu wird, wie aus der Kontinuums-QED bekannt, ein explizit nicht eichinvarianter Term zur ursprünglichen Wirkung addiert. Wir betrachten in dieser Arbeit ausschließlich die über Gl. (2.18) definierte kompakte Formulierung und sehen daher von weiteren Ausführungen ab.

### 2.2.3 Magnetische Monopole

Die Plaquetwinkel  $\theta_{\mu\nu}$  aus Gl. (2.22) können Werte zwischen  $-4\pi$  und  $4\pi$  annehmen. Aufgrund der Periodizität der  $\cos$ -Funktion sind in der Plaquette jedoch nur Werte zwischen  $-\pi$  und  $\pi$  physikalisch relevant. Gemäß Polyakov [5] kann der Plaquetwinkel daher in einen physikalischen Anteil und einen Restanteil zerlegt werden:

$$\begin{aligned} \theta_{\mu\nu}(n) &= \bar{\theta}_{\mu\nu}(n) - 2\pi m_{\mu\nu}(n) \\ \bar{\theta}_{\mu\nu} &\in [-\pi, \pi] \quad m_{\mu\nu}(n) \in \{-2, -1, 0, 1, 2\} . \end{aligned} \quad (2.34)$$

Die Größe  $m_{\mu\nu}$  wird analog zu einem Dirac-String in drei Dimensionen als Dirac-Sheet bezeichnet. Die (diskretisierte) vierdimensionale Rotation der Dirac-Sheets definiert einen topologischen Strom  $M_\mu$ , der Monopolstrom genannt wird:

$$M_\mu(n) = \frac{1}{2} \sum_{\nu\rho\sigma} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} (m_{\rho\sigma}(n + \nu) - m_{\rho\sigma}(n)) . \quad (2.35)$$

Per Konstruktion ist klar, dass die Divergenz des Monopolstroms lokal verschwindet

$$\partial_\mu M^\mu(n) = \frac{1}{2} \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \partial_\mu \partial_\nu m_{\rho\sigma}(n) = 0 . \quad (2.36)$$

Mit der vierdimensionalen Stromerhaltung folgt, dass die Monopolströme geschlossene Schleifen auf dem vierdimensionalen Gitter bilden müssen, sogenannte Monopolloops. Die Monopolloops sind eichinvariante Größen.

Die Bezeichnung der Konstruktion in Gl. (2.35) als „Monopolstrom“ kann mit Hilfe der klassischen Elektrodynamik motiviert werden. Eine Ladungsdichte für magnetische Monopole (eine solche ist in der Elektrodynamik nie beobachtet worden) würde

beschrieben durch

$$\vec{\nabla} \vec{B} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \partial_a \epsilon_{abc} \frac{1}{2} \{\partial_b A_c - \partial_c A_b\}. \quad (2.37)$$

Durch die Ersetzung der Ableitungen durch diskrete Vorwärtsableitungen und der Eichfelder  $A_\mu$  durch Link-Winkel erhält man für die Monopole innerhalb eines Volumens  $V$

$$M(n) = \epsilon_{abc} \frac{1}{2} [m_{bc}(n + \hat{a}) - m_{bc}(n)]. \quad (2.38)$$

Die natürliche Verallgemeinerung auf vier euklidische Dimensionen liefert den Monopolstrom in Gl. (2.35). Da in der Natur keine magnetischen Monopole beobachtbar sind, müssen die Monopolströme im thermodynamischen Limes verschwinden. Innerhalb einer Simulation treten diese infolge von Feldfluktuationen auf.

Die so definierten Monopolströme sind vor allem deshalb von Interesse, da ihre Dynamik eine entscheidende Rolle für die Beschreibung des Phasenübergangs in der vierdimensionalen  $U(1)$ -Gittereichtheorie spielt (siehe Kapitel 2.3.2 und 2.3.3). Das Studium der Monopole scheint jedoch ebenfalls für die nichtabelsche Eichgruppe  $SU(3)$  der QCD von Bedeutung zu sein. Polyakov [5] untersuchte den Zusammenhang zwischen Monopolen und dem Quark-Confinement. Interessanterweise ist der Effekt des Einschlusses auch in Eichungen zu beobachten, in denen der nichtabelsche Charakter der Eichgruppe fast völlig in den Hintergrund tritt (maximal abelschen Eichung). Somit mag das Verständnis der Dynamik der Monopolströme in der QED auch von Relevanz für den Quarkeinschluss der QCD sein.

## 2.3 Phasenübergänge

Von den Anfängen numerischer Untersuchungen des  $U(1)$ -Phasenübergangs bis heute wird die entscheidende Frage nach der Ordnung dieses Phasenübergangs kontrovers diskutiert. Keine der bisher gemachten Untersuchungen konnte die Situation eindeutig klären. In diesem Abschnitt wird die Existenz eines Phasenübergangs in der über die Wilsonwirkung definierten  $U(1)$  aufgezeigt. Wir werden einige der bisher durchgeführten Untersuchungen resümieren. Zunächst geben wir eine Klassifizierung von Phasenübergängen wieder und diskutieren Bedingungen für die Existenz eines Kontinuumslimes.

### 2.3.1 Die Ordnung eines Phasenübergangs

In einem thermodynamischen System, welches einen Phasenübergang aufweist, ist die Ordnung des Übergangs durch diejenige Ordnung der Ableitung des Gibbspotentials  $G$  nach der Temperatur  $T$  oder nach dem Druck  $p$  gegeben, in der endliche Unstetigkeiten bei der Übergangstemperatur auftauchen. Ein Phasenübergang 1. Ordnung weist demnach zum Beispiel einen Sprung in der Entropie  $S = -(\frac{\partial G}{\partial T})_p$  auf, während an einem Übergang 2. Ordnung erst in der spezifischen Wärme  $C_p =$



$-T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_p$  eine Diskontinuität beobachtbar ist. Denkbare Übergänge höherer Ordnung sind experimentell bislang nicht beobachtet worden und sollen im weiteren nicht betrachtet werden.

## Phasenkoexistenz

Das zentrale Unterscheidungsmerkmal zwischen Übergängen erster und zweiter Ordnung ist die *Phasenkoexistenz* beim Übergang 1. Ordnung, welche die ebenfalls für diesen Übergang charakteristische Existenz einer latenten Wärme<sup>3</sup> am Übergangspunkt impliziert:

Führt man einem System, das sich bei kleiner Temperatur zunächst vollständig in einer Phase befindet, Energie zu, so erhöht sich seine Temperatur bis zur Übergangstemperatur, ohne dass Bereiche der zweiten Phase auftreten. Erst an der Übergangstemperatur können sich spontan Domänen bilden, in denen sich das System in der anderen Phase befindet. Wird die Energie des Systems nun weiter vergrößert, so weiten sich die Bereiche der zweiten Phase immer weiter aus, bis sie das System vollständig ausfüllen. Währenddessen ändert sich die Temperatur des Systems nicht. In statistischen Systemen wird die Energie, die das System ohne Temperaturänderungen aufnimmt, als latente Wärme bezeichnet. Die bei der spontanen Ausbildung von Domänen anderer Phase möglichen Verzögerungen werden als Hysteresiseffekte bezeichnet. Erst wenn das System vollständig in die andere Phase überführt wurde, kann die Temperatur durch weiteres Zuführen von Energie wieder gesteigert werden.

## Oberflächenspannung

Die Energieaufnahme des Systems ohne Temperaturänderung beruht auf der Existenz von Grenzflächen zwischen den koexistierenden Domänen verschiedener Phase. Die zum Aufbau dieser Domänengrenzen notwendige Energie ist proportional zur Fläche der Grenzschicht. Den Proportionalitätsfaktor bezeichnet man als Oberflächenspannung  $\sigma$ . Die Größe der Oberflächenspannung bestimmt die „Stärke“ des Übergangs 1. Ordnung. Ein Übergang von **stark 1. Ordnung** zeichnet sich durch eine große Oberflächenspannung aus. Diese führt dazu, dass die Grenzfläche zwischen zwei Bereichen unterschiedlicher Phase eine minimale Größe annimmt<sup>4</sup>. In einem Übergang **schwach 1. Ordnung** kann die Grenzfläche bei geringer Oberflächenspannung stark fluktuieren und dabei sehr unterschiedliche Größen annehmen. Ein solcher Phasenübergang ist dann oft nur schwer von einem Phasenübergang 2. Ordnung zu unterscheiden.

---

<sup>3</sup>Damit bezeichnet man die Wärme, welche das System während des Übergangs aufnimmt oder abgibt.

<sup>4</sup>Vergleiche dazu Gasblasen in einer siedenden Flüssigkeit.

### 2.3.2 Der Phasenübergang der $U(1)$ -Gittereichtheorie

Die  $U(1)$ -Gittereichtheorie besitzt die diskreten Untergruppen  $Z(N)$  bestehend aus  $N$  komplexen Zahlen mit Absolutbetrag 1:

$$Z_N = \{e^{2\pi i n/N} | n = 0, 1, \dots, N - 1\}. \quad (2.39)$$

Die Gruppe  $U(1)$  kann als Grenzwert  $N \rightarrow \infty$  der  $Z(N)$  angesehen werden [6]. Bei der Untersuchung dieser  $Z(N)$ -Gittereichtheorien haben Creutz, Jacobs und Rebbi gezeigt, daß bei Variation des inversen Kopplungsparameters  $\beta$  für  $N > 4$  zwei Phasenübergänge existieren:

- $\beta_1 \simeq 1.0$  und Zwischenphase
- $\beta_2 = \frac{0.78}{1 - \cos(\frac{2\pi}{N})} \sim N^2$

Der Phasenübergang zur Tieftemperaturphase bei  $\beta_2$  wird beim Übergang zur kontinuierlichen Gruppe  $U(1)$  immer weiter in Richtung  $\beta \rightarrow \infty$  verschoben. Der erstgenannte Phasenübergang bei  $\beta_T \simeq 1.0$  „überlebt“ hingegen die Grenzwertbildung und stellt damit den im weiteren genauer zu betrachtenden Phasenübergang der  $U(1)$ -Gittereichtheorie dar.

Der Phasenübergang trennt eine **Coulomb-Phase** ( $\beta > \beta_T$ ), in der statische äußere Testladungen<sup>5</sup> im gegenseitigen Abstand  $r$  einem Coulombpotential

$$V(r) = \frac{\alpha}{r} + V_0, \quad (2.40)$$

unterworfen sind, von einer **Confinement-Phase** ( $\beta < \beta_T$ ), die Testladungen mit einem bei großem Abstand linear anwachsenden Potential

$$V(r) = \frac{\alpha}{r} + V_0 + \sigma_s \cdot r, \quad (2.41)$$

bindet [7]. Die Größe  $\sigma_s$  wird in Analogie zu effektiven Theorien des Quarkeinschlusses als *string tension* bezeichnet. Da geladene Fermionen in dieser Phase nicht frei auftreten können, wird die zugehörige Phase als „confined“ Phase bezeichnet.

Die Dynamik dieses Phasenübergangs wird mit den in Kapitel 2.2.3 eingeführten Monopolen in Verbindung gebracht. DeGrand und Toussaint [8] stellten fest, dass magnetische Monopole in der confined Phase in einer wesentlich höheren Dichte vorkommen, als in der Coulomb Phase. In der Coulomb Phase sorgen Feldanregungen für eine *Renormierung* der nackten Kopplung  $e$ . Das Coulombpotential hängt von der renormierten Ladung  $e_R$  ab

$$V_{Coul}(r) = -\frac{e_R^2}{4\pi} \frac{1}{r}. \quad (2.42)$$

---

<sup>5</sup>Es sei darauf hingewiesen, daß in der Beschränkung auf den Eichterm ausschließlich *dynamische* Fermionen aus der Eichtheorie entfernt wurden. Daher ist die Untersuchung des Potentials statischer Ladungen in der reinen Eichtheorie sehrwohl möglich.

Für kleine nackte Kopplungen  $e$  stimmt die renormierte mit der nackten Kopplung überein. Mit steigendem  $e$  wächst  $e_R$  bis zur kritischen Kopplung am Phasenübergang  $\beta_T = 1/e$ . Dort nimmt  $e_R$  einen endlichen, maximalen Wert an [10, 11]. Führt man die nackte Kopplung  $e$  über diesen Phasenübergang hinaus, kondensieren die Monopole und führen zum Confinement, welches mit Hilfe des dualen Meissner-Effekts erklärt werden kann [12]: Im Coulomb-Bereich gibt es nur einzeln lokalisierte Monopole endlicher Masse. Die elektrischen Feldlinien zwischen zwei äußeren Ladungen können sich wie in der klassischen Elektrodynamik im Raum ausbreiten. In der confined Phase bildet sich ein Monopol-Kondensat, innerhalb dessen das elektrische Feld zu Flussröhren zusammengedrückt wird (ähnlich dem Magnetfeld in einem Supraleiter)<sup>6</sup>.

### 2.3.3 Bisherige Untersuchungen des $U(1)$ -Phasenübergangs

Nach der Einführung der Gittereichtheorien durch Wilson [13] im Jahre 1974 hatte die Arbeit von Guth [14] die Existenz eines Phasenübergangs in der kompakten, reinen  $U(1)$ -Gittereichtheorie in der Nähe von  $\beta = 1$  nachgewiesen. Tatsächlich konnte gezeigt werden [15], dass abelsche Eichtheorien generell (unter der Annahme sehr allgemeiner Voraussetzungen) einen Phasenübergang bei endlicher Kopplung aufweisen.

Die von 1980 bis heute durchgeführten Untersuchungen waren nicht in der Lage, die Frage nach der Ordnung dieses Phasenübergangs eindeutig zu klären. Die ersten numerischen Simulationen [16, 17, 18, 19] wiesen auf einen Phasenübergang zweiter Ordnung hin. Die Gittergröße war zu dieser Zeit mit  $L = 5$  jedoch sehr klein, so dass der Einfluss von *finite size* Effekten<sup>7</sup> als beträchtlich anzunehmen ist. Die Untersuchung größerer Systeme wies eine Doppelpeakstruktur in der Energiedichte und lange Metastabilitäten<sup>8</sup> auf, was auf einen Übergang 1. Ordnung hindeutete [7, 20, 21]. Diese Hinweise stimmten mit Resultaten verschiedener Renormierungsgruppen-Studien [22, 23] überein.

Dennoch ist festzustellen, dass die latente Wärme mit zunehmender Gitterausdehnung (bis hin zur damals maximalen linearen Ausdehnung  $L = 12$ ) abnimmt. Der das Skalenverhalten höherer Momente der Plaquetteenergie beschreibende kritische Exponent  $\nu$  ergab sich weder als  $1/d = 0.25$ , was einen Übergang 1. Ordnung charakterisiert, noch als 0.5, was einem System „trivial“ 2. Ordnung entsprechen würde [24]. Diese Situation lässt zwei mögliche Interpretationen zu:

1. Die deutlich zu erkennende Doppelpeakstruktur ist ein Finite-size Effekt und

---

<sup>6</sup>Die Namensgebung *dualer* Meissner-Effekt basiert auf diesem Rollentausch von magnetischem und elektrischem Feld im Vergleich zum Meissner-Effekt der Supraleitung.

<sup>7</sup>Finite-size Effekte sind Auswirkungen der gewählten Randbedingungen auf das System. Deren Einfluss verschwindet im Limes  $V \rightarrow \infty$ .

<sup>8</sup>Metastabilitäten bezeichnen Simulationssequenzen, innerhalb derer ein Algorithmus zur sukzessiven Generierung von Systemfigurationen nur Konfigurationen aus einer der beiden Phasen erzeugt. Die Entstehung solcher Metastabilitäten ist in Kapitel 3.2.3 erläutert.

verschwindet im thermodynamischen Limes. Es verbleibt die Signatur eines Übergangs zweiter Ordnung.

2. Der Phasenübergang ist schwach 1. Ordnung, was bedeutet, dass die Korrelationslänge  $\xi$  der zugrunde liegenden Feldtheorie endlich, aber groß gegenüber der Gitterausdehnung  $L$  bislang simulierter Systeme ist. Somit wäre die Konvergenz gegen einen von Null verschiedenen Wert der latenten Wärme erst für  $L > \xi$  im thermodynamischen Limes als eindeutiges Zeichen eines 1. Ordnung-Phasenübergangs feststellbar.

In der Absicht, eine Gitterformulierung der QED mit einem Phasenübergangspunkt zweiter Ordnung zu finden, schlug Bhanot [25] vor, die Wilson-Wirkung um einen Term der adjungierten Darstellung zu erweitern:

$$S = \beta \sum_{n,\mu,\nu>\mu} [1 - \cos(\theta_{\mu\nu}(n))] + \gamma \sum_{n,\mu,\nu>\mu} [1 - \cos(2\theta_{\mu\nu}(n))] \quad (2.43)$$

Seine Erwartung war, dass sich bei dieser Wirkung für kleine negative Werte von  $\gamma$  ein klarer Übergang 2. Ordnung ergeben würde. Dennoch fand man in Simulationen bei  $\gamma = -0.4$  eine bei größeren Gittern wieder auftretende Doppelpeakstruktur [26, 27]. Damit bestehen Zweifel an der in Ref. [28, 11, 29] aufgestellten Hypothese eines Übergangs zweiter Ordnung bei endlichem, negativen  $\gamma$ . Zusätzlich weist eine Renormierungsgruppenuntersuchung [23] auf die Existenz eines Phasenübergangs zweiter Ordnung erst für  $\gamma \rightarrow -\infty$  hin.

Untersuchungen der Eichballmassen in der Confined Phase [11] unter Verwendungen der erweiterten Wirkung Gl. (2.43) bei negativen Werten von  $\gamma$  lassen aufgrund eines kritischen Exponenten von  $\nu = 0.35(3)$  ein Skalenverhalten zweiter Ordnung vermuten. Das Resultat ergibt sich in Übereinstimmung mit gleichen Untersuchungen auf der später noch diskutierten Topologie der 4d Kugel [30]. Problematisch erscheint jedoch, dass ausgerechnet der  $0^{++}$  Eichball, als dominantester Beitrag zum Finite-size Effekt in der Confined Phase, ein mit  $\nu = 0.49(7)$  signifikant abweichendes Skalenverhalten aufweist. Dies kann als Inkonsistenz gewertet werden oder aber auch als ein Hinweis auf die (exotische) Existenz eines weiteren thermodynamischen Limes am gleichen Übergangspunkt.

Grösch et al. untersuchten 1985 [9] den Einfluss von Monopolen auf die Metastabilitäten in der Simulation. Dabei zeigte sich, dass sich die Phasen nicht nur in der akkumulierten Gesamtlänge aller Monopoloops unterscheiden, sondern dass in der Confined Phase neben den kurzen Monopoloops, die ebenso in der Coulomb Phase zu beobachten sind, auch außergewöhnlich große Loops vorhanden sind, die das Gitter fast vollständig ausfüllen. Diese sehr großen Loops sind hingegen in der Coulomb Phase gar nicht zu beobachten. Wensley zeigte später in Potentialrechnungen [31], dass nur diese sehr großen Monopoloops einen Beitrag zum linear ansteigenden Term des Potentials in der confined Phase liefern. Eine weitere Beobachtung

Gröschs et al. war, dass die großen Loops unter Kühlung<sup>9</sup> des Systems oft stabile, nichttriviale Monopolkonfigurationen annehmen, die nur aufgrund der periodischen Randbedingungen geschlossene Loops bilden, sich also um den Torus herumwinden. Dies führte zu Spekulationen über den Einfluss der Topologie sowohl auf die Dynamik des Systems als auch auf die Ordnung des Phasenübergangs. Grösch et al. führten die beobachteten Metastabilitäten des Systems auf die periodisch geschlossenen Schleifen zurück. Insbesondere wäre es möglich, dass der beobachtete Phasenübergang erster Ordnung allein ein Artefakt der periodischen Randbedingungen ist.

Baig und Fort untersuchten ein System mit festen Randbedingungen [32, 33]. Dazu wurden auf dem gesamten Rand des Gitters die Eichfelder konstant gleich 1 gesetzt, was die Topologie des Systems an die des Kontinuums anpasst und dabei ein Ausbilden periodisch geschlossener Monopoloops unmöglich macht. Der dabei eingeführte Rand hat jedoch Auswirkungen auf das System, die nur schwer abzuschätzen sind. Um diese Auswirkungen klein zu halten, muss daher der Anteil des Randes am Gesamtsystem möglichst klein gehalten werden, was nur durch die Untersuchung großer Systeme möglich ist. Auf den betrachteten Gittergrößen bis maximal  $L = 16$  glaubten die Autoren dabei einen Phasenübergang schwach 1. Ordnung ausschließen zu können.

Unter Einführung eines Terms proportional zur Monopoldichte  $\lambda \sum_{\rho,x} |M_{\rho,x}|$  zusätzlich zur Wilsonwirkung haben Kerler et al. [34, 35, 36, 37] Hinweise auf einen nichttrivialen kritischen Punkt 2. Ordnung  $(\beta, \lambda)$  bei Monopolunterdrückung gefunden.

Ein weiterer Ansatz wurde von Bode et al. vorgeschlagen [38, 39, 40]. Hier wurden die periodischen Randbedingungen und damit die Topologie des Torus zwar beibehalten, gleichzeitig wurde jedoch die Bildung von solchen Monopoloops, die über einen auf dem Torus definierten Rand gehen, durch die Wahl eines speziellen Update-Algorithmus unterdrückt. Damit wird zwar de facto wieder ein Rand in die Theorie eingeführt, gleichzeitig ist jedoch zu erwarten, dass der Einfluss dieses Randes, der ja nur auf die Monopole wirkt, wesentlich geringer ist, als der von Baig und Fort benutzte. Eine genauere Untersuchung des Einflusses des Randes erfolgte durch die Betrachtung verschiedener innerer Schalen des Gitters. Die hier gemachten Beobachtungen (bei einer maximalen Gittergröße von  $L = 24$ ) deuteten wiederum auf einen Phasenübergang erster Ordnung hin.

Eine weitere Idee bestand darin, die Theorie auf einem Gitter mit der Topologie der vierdimensionalen Sphäre zu untersuchen [41, 42, 43]. Die triviale Homotopiegruppe verhindert die zuvor erwähnten unphysikalischen Monopoloops, die auf dem Torus (Homotopiegruppe  $\mathbb{Z}^4$ ) möglich sind. Allerdings ist der Einfluss der in einer

---

<sup>9</sup>Unter Kühlung des Systems versteht man hier das Anwenden von Monte-Carlo Schritten unter ständigem Vergrößern der inversen Kopplung  $\beta$ , bis sich das System schließlich nicht mehr verändert (also „eingefroren“ ist). Üblicherweise sind in einem solchen gekühlten System keine Monopolanregungen mehr zu beobachten.

Simulation auf der Sphäre notwendig einzuführenden Metrik auf das System schwer abzuschätzen. Die Resultate wiesen auf einen Übergang 2. Ordnung hin. Jedoch wurde in Simulationen auf der Sphäre äquivalent der hyperkubischen Gittergröße  $L = 26$  bei  $\gamma = -0.2$  ebenfalls ein Doppelpesignal gemessen [26, 27].

Viele der zuvor erwähnten Untersuchungen basieren auf einer geringen Statistik der Größenordnung  $\mathcal{O}(10^5)$  und weniger. Wir merken an, dass unserer Erfahrung nach, die Untersuchung der kompakten  $U(1)$  bei Phasenkoexistenz, abhängig vom verwendeten Algorithmus, eines deutlich höheren Aufwandes für Systeme mit  $L \geq 10$  bedarf. Dieser ist notwendig, um das relative Phasengewicht korrekt zu simulieren und damit die statistischen Fehler von Observablen unter Kontrolle zu bringen, die auf diesen Konfigurationen „gemessen“ werden. Wir werden dies in den Kapiteln 3.2.2 und 3.3 genauer quantifizieren. In diesem Sinne sind einige der zitierten Resultate auf die Stabilität gegenüber Vergrößerung der Statistik zu hinterfragen. Diesbezüglich herausragend ist die Untersuchung [24], welche auf Gittern der Größen  $L = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12$  mit min.  $\mathcal{O}(10^6)$  Konfigurationen das Skalieren von Observablen analysiert. Analog ist Ref. [44] die erste Arbeit, die eine fast ähnlich hohe Statistik auf Gittergrößen bis  $L = 16$  ausweitet. Diese neuerlich gemachten Untersuchungen größerer Systeme erhärten die Vermutung, dass der Phasenübergang der  $U(1)$ -Gittertheorie 1. Ordnung ist. Dennoch steht ein eindeutiger numerischer Beweis aus.

Für systematische Untersuchungen anderer, zu konstruierender  $U(1)$  Gittertheorien erscheint die eindeutige Klärung der Frage nach der Ordnung des Übergangs auf der Wilsonlinie ( $\gamma = 0$ ) unerlässlich.

### 2.3.4 Existenz des Kontinuumslimes

Mit der in Kapitel 2.2.2 konstruierten Wilsonwirkung ist zu erwarten, dass sich der vermutete Kontinuumslimit der  $U(1)$ -Gittertheorie als die QED ohne freie Fermionen erweist. An die tatsächliche Existenz eines Kontinuumslimes ist jedoch die Bedingung der „Kritikalität“ des Systems geknüpft. Ein System an einem Phasenübergang zweiter oder höherer Ordnung ist kritisch. Die Bedingung der Kritikalität der Gittertheorie lässt sich über die Notwendigkeit divergierender Gitterobservablen im Kontinuumslimit erklären: Gitterrechnungen führt man im allgemeinen mit dimensionslosen Größen auf einem Gitter mit Gitterkonstante 1 durch. Um anschließend zur im Kontinuum definierten Quantenfeldtheorie zurückzugelangen, extrapoliert man zunächst zu unendlichem Gittervolumen. Dies entspricht dem bereits verwendeten Begriff des thermodynamischen Limes in der statistischen Mechanik. Auf diesem unendlichen Gitter führt man eine Gitterkonstante  $a$  mit der Dimension einer Länge ein, wodurch die Parameter sowie die Felder und Observablen der Theorie dimensionsbehaftet werden. Am thermodynamischen Limes ( $a \rightarrow 0$ ) bleibt die dimensionsbehaftete Korrelationslänge  $a\xi$  endlich. Daher muss die dimensionslose

Korrelationslänge divergieren<sup>10</sup>.

Die QED ist anders als die QCD mit der assoziierten  $SU(3)$ -Gittereichtheorie *keine* asymptotisch freie Theorie. In der QED wächst die Kopplung mit steigendem Impuls an und divergiert schließlich sogar bei endlichen Impulsen<sup>11</sup>. Damit ist klar, dass die QED nicht für alle Impulse gelten kann. Es ist jedoch unklar, wie eine allgemeingültige Theorie der elektromagnetischen Wechselwirkung aussehen könnte. Im Falle der  $U(1)$ -Gittereichtheorie muss demnach ein Phasenübergang 2. Ordnung bei endlicher inverser Kopplung existieren, an dem der Kontinuumsimes vollzogen werden kann. Dies begründet die zentrale Frage nach der Ordnung des Phasenübergangs bei  $\beta \approx 1$ .

Ist dieser Übergang von mindestens 2. Ordnung, so kann die Kritikalität des Systems sichergestellt werden, die Durchführung des Kontinuumsimes wäre im Prinzip möglich. Ist der Übergang jedoch nur 1. Ordnung, so wäre die Bildung des Kontinuumsimes in der einfachen  $U(1)$ -Gittereichtheorie, wie sie zu Beginn dieses Kapitels eingeführt wurde, nicht möglich. Damit würde sich die Aufgabe stellen, andere Gitterversionen der reinen Kontinuumswechselwirkung zu konstruieren, welche ihrerseits einen Übergang zweiter Ordnung aufweisen könnten. Im Sinne einer systematischen Suche ist in jedem Falle ein Verständnis der Dynamik des Phasenübergangs der Wilson-Wirkung unerlässlich.

---

<sup>10</sup>Dies gilt damit für alle auf dem Gitter gemessenen Größen der Dimension „Länge“: Um an endliche physikalische Ergebnisse im Kontinuum zu gelangen, müssen diese Größen im selben Maße divergieren, wie der Gitterabstand gegen 0 geführt wird.

<sup>11</sup>Dies geschieht bei Energien, die bislang experimentell nicht zugänglich sind.

# Kapitel 3

## Simulation

### 3.1 Verteilungen

Wir suchen eine Vorschrift zur numerischen Berechnung hochdimensionaler Integrale in der euklidischen Formulierung der Quantenfeldtheorie. Das mit Hilfe des größten, von uns untersuchten Gitters diskretisierte Funktionalintegral vom Typ Gl. (2.14) hat immerhin  $4 \times 18^4 = 419904$  Integrationsvariablen. Der zentrale Grenzwertsatz erlaubt es, über das *Importance sampling* solche Integrale stochastisch auf adäquaten Ensembles von Zufallszahlen zu berechnen. Ziel der Suche nach geeigneten Ensembles ist, die Ungenauigkeit unserer numerischen Approximation zu minimieren. Dabei stoßen wir auf eine alte Methode namens *Umbrella sampling*, welches durch Neugewichtung die Verteilung der zu erzeugenden Zufallszahlen künstlich „verbreitert“. Eine spezielle Variante dieser Methode stellt die Wahl der *multikanonischen Verteilung* dar. Unser Ziel ist, mit der algorithmischen Umsetzung dieser Methode große Systeme der U(1) Gittereichtheorie effizient zu simulieren.

#### 3.1.1 Importance sampling

Der Erwartungswert einer Funktion  $h$  der Zufallsvariablen  $x$  aus einem  $D$ -dimensionalen Volumen  $\Omega$ , die gemäß einer positiv definiten und über  $\Omega$  normierten Wahrscheinlichkeitsdichte  $f(x)$  verteilt ist, berechnet sich zu:

$$\langle h \rangle_f \equiv \int_{\Omega} h(x) f(x) dx. \quad (3.1)$$

Wir können diesen Erwartungswert numerisch näherungsweise berechnen, wenn wir  $N$  Zufallszahlen  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  aus  $\Omega$  mit der Wahrscheinlichkeitsdichte  $f$  würfeln und deren Funktionswerte  $h(x_i)$  berechnen:

$$\widehat{\langle h \rangle}_f = \frac{1}{N} \sum_i h(x_i). \quad (3.2)$$

Der zentrale Grenzwertsatz besagt, dass im Limes  $N \rightarrow \infty$  die Schätzwerte  $\widehat{\langle h \rangle}_f$  Gaußverteilt um den tatsächlichen Mittelwert  $\langle h \rangle_f$  mit einer Varianz  $\sigma^2$  streuen, wobei



$$\sigma_{h,f}^2 = \frac{1}{N} (\langle h^2 \rangle_f - \langle h \rangle_f^2). \quad (3.3)$$

Wenn wir das Ensemble  $x_i$ ,  $i = 1, \dots, N$  gemäß einer anderen normierten Verteilungsfunktion  $g(x)$  generieren, berechnet sich der Erwartungswert der Funktion  $H(x) = h(x) \frac{f(x)}{g(x)}$  zu

$$\begin{aligned} \langle h \frac{f}{g} \rangle_g &= \int_{\Omega} h(x) \frac{f(x)}{g(x)} g(x) dx \\ &= \int_{\Omega} h(x) f(x) dx \\ &= \langle h \rangle_f. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Die numerische Approximation

$$\widehat{\langle h \frac{f}{g} \rangle}_g = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(x_i) \frac{f(x_i)}{g(x_i)}, \quad (3.5)$$

streut per Konstruktion um den gleichen Mittelwert  $\langle h \frac{f}{g} \rangle_g = \langle h \rangle_f$ , jedoch mit einer von  $\sigma_{h,f}^2$  verschiedenen Varianz

$$\sigma_{h \frac{f}{g}, g}^2 = \frac{1}{N} (\langle (h \frac{f}{g})^2 \rangle_g - \langle h \frac{f}{g} \rangle_g^2), \quad (3.6)$$

wobei

$$\begin{aligned} \langle (h \frac{f}{g})^2 \rangle_g &= \int_{\Omega} H^2(x) g(x) dx \\ &= \int_{\Omega} \frac{h(x) f(x)}{g(x)} \frac{h(x) f(x)}{g(x)} g(x) dx \\ &= \int_{\Omega} \left[ \frac{f(x)}{g(x)} \right] h^2(x) f(x) dx, \end{aligned} \quad (3.7)$$

zum Vergleich: (3.8)

$$\langle h^2 \rangle_f = \int_{\Omega} h^2(x) f(x) dx. \quad (3.9)$$

Wenn wir eine Verteilungsfunktion  $g$  finden, derart dass  $f(x)/g(x) < 1$  im Mittel aller  $x \in \Omega$ , können wir die Varianz reduzieren und mit Gl. (3.5) eine genauere numerische Berechnungsvorschrift für den Erwartungswert Gl. (3.1) angeben:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(x_i) \frac{f(x_i)}{g(x_i)} = \langle h \frac{f}{g} \rangle_g \pm \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\langle (h \frac{f}{g})^2 \rangle_g - \langle h \frac{f}{g} \rangle_g^2} \quad (3.10)$$

Die optimale Wahl eines Ensembles zur stochastischen Berechnung des Integrals  $I = \langle h f \rangle_1 = \langle h \rangle_f = \langle h \frac{f}{g} \rangle_g$  wäre natürlich die numerische Realisierung von  $\langle \frac{h f}{h f} \rangle_{h f}$ .

Formal ermöglicht das Gewicht  $g = \frac{1}{I}hf$  die Berechnung  $\frac{1}{N} \sum_i \frac{hf}{g}(x_i) = I$  mit statistischem Fehler Null. Die notwendige Normierung von  $g$  erfordert allerdings bereits die Kenntnis des Integralwertes  $I$  selbst, wodurch sich die Lösung des Problems erübrigen würde.

### 3.1.2 Umbrella sampling

Torrie und Valleau [45, 46, 47, 48] führten die Methode des *Umbrella samplings* ein, um in einem breiten Gebiet des makroskopischen Zustandsraums zu simulieren. Stellen wir uns vor, wir wollen die Erwartungswerte *mehrerer* Operatoren  $h_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, M$  über einer Verteilung  $f$  bestimmen:

$$\langle h_k f \rangle = \langle h_k \rangle_f . \quad (3.11)$$

Während sich ein Sampling gemäß der Verteilung  $f$  in dem in Fig. 3.1 skizzierten Fall für die numerische Approximation von  $\langle h_1 f \rangle$  durchaus eignet, ist die Approximation von  $\langle h_2 f \rangle$  sehr ineffizient, da der Überlapp von  $h_2 f$  mit  $f$  sehr klein ist. Die Methode des zuvor dargestellten Importance sampling legt nun die Berechnung der  $M$  Erwartungswerte über  $M$  angepasste Samplings  $g_k$  nahe:  $\langle h_k f \rangle = \langle h_k \frac{f}{g_k} \rangle_{g_k}$ . Wie wir in Kapitel 3.2 sehen werden, ist dies in der Regel zu „teuer“. Sinnvoller ist es, ein Sample gemäß einer einzigen hinreichend breiten Verteilung  $g$  zu erzeugen:

$$\langle h_k f \rangle = \langle h_k \frac{f}{g} \rangle_g , \quad (3.12)$$

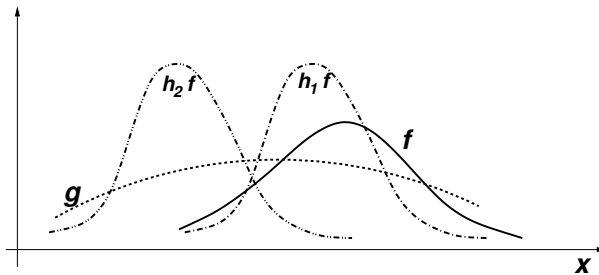


Abbildung 3.1: Illustration des Umbrella sampling mit Hilfe der Verteilung  $g$

Je breiter die *Umbrella*-Verteilung  $g$  ist, desto größer sind die Fluktuationen in  $x$ . Damit wächst die Varianz der Einzelberechnung für ein spezifisches  $k$ . Den Grenzfall dieser Verbreiterung stellt die Gleichverteilung  $g = const.$  dar. Ein sinnvoller Kompromiss zwischen hinreichend großem Überlapp und minimaler Varianz ist daher eine Verteilung  $g$ , deren Träger die statistisch relevanten Regionen der Verteilungen  $h_k f$  umfasst.

Wir werden in Kapitel 3.1.4 eine spezielle Variante dieses Umbrella samplings vorstellen, welche Feldkonfigurationen gemäß einer *multikanonischen Verteilung*  $g$  erzeugt. Zunächst soll jedoch die kanonische Verteilung eingeführt werden.

### 3.1.3 Kanonische Verteilung

Die Bestimmung des Erwartungswertes einer Observablen  $\mathcal{O} = \mathcal{O}(\phi)$  in der euklidischen Quantenfeldtheorie erfordert die Auswertung eines Integrals über alle möglichen Feldkonfigurationen  $\{\phi\}$  gewichtet mit dem Boltzmannfaktor  $w_B = e^{-S(\phi)}$ .

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\langle \mathcal{O} w_B \rangle}{\langle w_B \rangle} = \frac{\int [d\phi] \mathcal{O}(\phi) e^{-S(\phi)}}{\int [d\phi] e^{-S(\phi)}} . \quad (3.13)$$

Häufig hängen die interessierenden Observablen nicht unmittelbar von der *mikroskopischen* Feldkonfiguration, sondern von einem Satz *makroskopischer* Parameter eines niedriger dimensionalen Zustandsraumes ab. Wir wollen im Folgenden annehmen, dieser Satz genüge zur Spezifikation aller thermodynamischen Eigenschaften des Systems. In der Quantenfeldtheorie stellt das Wirkungsfunktional  $S$  selbst einen solchen „Satz“ dar, da es das physikalische System vollständig beschreibt. Statt der originären Wilson-Wirkung Gl. (2.23) betrachten wir im folgenden die bis auf eine additive Konstante  $6V$  äquivalente Wirkung

$$S = -\beta \sum_{n,\mu,\nu>\mu} \cos \theta_{\mu\nu} \quad (3.14)$$

$$= -\beta E . \quad (3.15)$$

Um im folgenden die Abhängigkeit der Wirkung von der Kopplung  $\beta$  explizit zu machen, haben wir die innere Energie  $E$  des Systems eingeführt.

Mit Hilfe der *spektralen Dichte*

$$\rho(E) = \int [d\phi] \delta(E - E(\phi)) , \quad (3.16)$$

lässt sich der Erwartungswert auch über makroskopische Größen ausdrücken:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int dE \rho(E) \mathcal{O}(E) e^{\beta E}}{\int dE \rho(E) e^{\beta E}} . \quad (3.17)$$

Es liegt nahe, die Stützstellen  $\phi_i$  der numerischen Integration gemäß der *kanonischen Verteilung*

$$P_{can}(\phi) = \frac{1}{Z_{can}} e^{\beta E(\phi)} \quad \text{mit} \quad Z_{can} = \int [d\phi] e^{\beta E(\phi)} , \quad (3.18)$$

zu generieren, um über die Gewichtung der Feldkonfigurationen gemäß  $w_B$  den makroskopischen Zustandsraum auf den „relevanten“ Teilbereich zu beschränken.

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{P_{can}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(\phi_i) . \quad (3.19)$$

Wir definieren über die spektrale Dichte aus Gl. (3.16) die *kanonische Energiedichte*

$$N_{can}(E, \beta) = \rho(E) e^{\beta E} . \quad (3.20)$$

Eine Stichprobenbildung mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung gemäß  $P_{can}$  stellt nur dann ein gutes Importance sampling dar, wenn die damit verbundene Energiedichte im interessierenden Energieintervall hinreichend groß ist. Fig. 3.2 soll grob qualitativ illustrieren, dass dies für ein System der Größe  $L = 18$  in der Nähe des Phasenübergangs nicht gegeben ist: In einem Energieintervall in der Umgebung von  $E_{min}$  ist die Statistik um fast 2 Größenordnungen kleiner als in einem gleichgroßen Intervall in der Nähe der Phasenpeaks. Dies bedeutet, dass in einem „kleinschrittigen“ Monte Carlo Prozess zur Erzeugung der Konfigurationen praktisch kein Tunneln von der linken in die rechte Phase erfolgt. Die Bestimmung des relativen Phasengewichts wird dadurch unmöglich. Wir diskutieren im Folgenden eine Sampling Methode, die das Problem stark unterdrückter Konfigurationen innerhalb des makroskopischen Zustandsraumes überwindet.

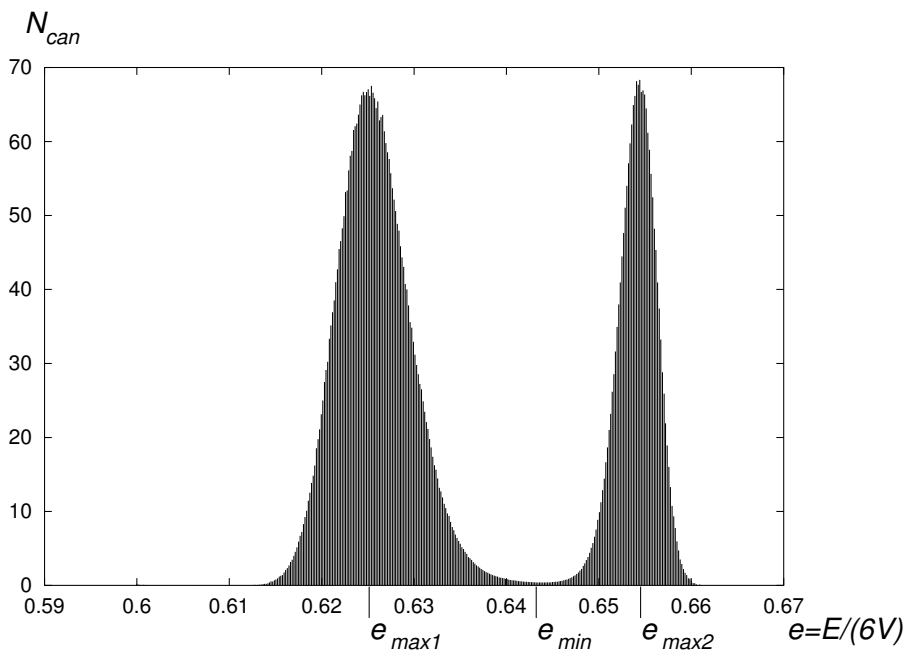


Abbildung 3.2: Energiedichte  $N_{can}(E, \beta)$  des  $18^4$ -Systems bei  $\beta_{eh} = 1.0109138$  in Abhängigkeit der Energie  $e = E/(6V)$ .

### 3.1.4 Multikanonische Verteilung

Berg und Neuhaus griffen 1991 die Idee des Umbrella samplings auf und entwickelten unter dem Namen der multikanonischen Simulation eine Methode, welche die Effizienz von Monte Carlo Algorithmen in Systemen steigert, bei denen dynamisch nahezu unverbundene Bereiche des makroskopischen Zustandsraumes vorliegen. Die Praktikabilität dieser Methode konnte an einer Vielzahl von Systemen gezeigt werden [49, 50, 51, 52, 53].

Das Sampling gemäß einer multikanonischen Verteilung dient der Simulation von Systemen, welche starke Metastabilitäten aufweisen. Die Energiedichte eines solchen

Systems ist durch stochastisch stark unterdrückte Bereiche gekennzeichnet, deren statistische Gewichte durch eine geschickt gewählte Sampling Verteilung künstlich angehoben werden können.

Für eine multikanonische Simulation des Systems in der Nähe des Phasenübergangs bei  $\beta \approx \beta_{eh}$  fordern wir eine möglichst konstante Häufigkeitsverteilung zwischen den beiden Phasenpeaks (siehe Fig. 3.2)<sup>1</sup>. Wir suchen somit nach einer Verteilung  $P_{muca}(\phi)$  derart, dass für die zugehörige *multikanonische Energiedichte* gilt:

$$N_{muca}(E, \beta_{eh}) = \rho(E) P_{muca} = \text{const.} , \quad \text{für } E_{\max 1} \leq E \leq E_{\max 2} . \quad (3.21)$$

Anstatt kanonisch mit  $P_{can}(E, \beta_{eh}) \sim e^{\beta_{eh} E}$  zu simulieren, führt folgende Wahl von  $P_{muca}(E)$  innerhalb des relevanten Bereichs  $E_{\max 1} \leq E \leq E_{\max 2}$

$$P_{muca}(E) \sim \frac{1}{\rho(E)} , \quad (3.22)$$

zu der gewünschten Konstanz der multikanonischen Energiedichte. Unter Verwendung von Gl. (3.20) und der Einführung eines *multikanonischen Potentials*  $V_{\text{MUCA}}(E)$  schreiben wir für die multikanonische Verteilung

$$P_{muca}(E) \sim e^{\beta_{eh} E - V_{\text{MUCA}}(E)} , \quad (3.23)$$

$$V_{\text{MUCA}}(E) = \begin{cases} \log N_{can}(E_{\max 1}, \beta_{eh}) & : E < E_{\max 1} \\ \log N_{can}(E, \beta_{eh}) & : E_{\max 1} \leq E \leq E_{\max 2} \\ \log N_{can}(E_{\max 2}, \beta_{eh}) & : E > E_{\max 2} . \end{cases} \quad (3.24)$$

Das multikanonische Potential hebt das statistische Gewicht der Mischkonfigurationen zwischen den Peaks der beiden reinen Phasen auf ein konstantes Niveau an. Allerdings ist die kanonische Energiedichte und damit auch  $V_{\text{MUCA}}(E)$  apriori unbekannt und kann nur sukzessive bestimmt werden. Aufbauend auf einer Schätzung der kanonischen Energiedichte  $\hat{N}_{can}(E, \hat{\beta}_{eh})$ , generieren wir Feldkonfigurationen gemäß der multikanonischen Verteilung

$$\hat{P}_{muca}(E) \sim e^{\hat{\beta}_{eh} E - \hat{V}_{\text{MUCA}}(E)} . \quad (3.25)$$

Die Rückgewichtung der so erhaltenen multikanonischen Verteilung liefert die *exakte* kanonische Verteilung

$$P_{can}(E) \sim \hat{P}_{muca}(E) e^{\hat{V}_{\text{MUCA}}(E)} . \quad (3.26)$$

Die Exaktheit der rückgewichteten Verteilung ist durch die Identität der Träger von simulierter und rückgewichteter Verteilung sichergestellt, denn per Konstruktion von

---

<sup>1</sup>Es ist anzunehmen, dass unabhängig vom verwendeten Algorithmus eine innerhalb des interessierenden Energieintervalls *konstante* Energiedichte das Rauschen der statistischen Prozedur minimiert [siehe Kapitel 3.2.3].

Gl. (3.24) ist  $V_{\text{MUCA}}(E)$  endlich für alle  $E$ .<sup>2</sup> Der kanonische Erwartungswert eines Operators  $\mathcal{O}$  berechnet sich damit approximativ zu

$$\langle \hat{\mathcal{O}}_{\hat{\beta}_{eh}} \rangle_{can} = \frac{\sum_i \mathcal{O}_{\hat{\beta}_{eh}}^i \exp(\hat{V}_{\text{MUCA}}(E_i))}{\sum_i \exp(\hat{V}_{\text{MUCA}}(E_i))}. \quad (3.27)$$

Dabei stellt  $\mathcal{O}_{\hat{\beta}_{eh}}^i$ ,  $i = 1, \dots, N$  den auf der Konfiguration  $\phi_i$  des multikanonischen Ensembles gemessenen Einzelwert des Operators dar. In den Kapiteln 3.2.2 und 4.2 gehen wir auf die Berechnung des statistischen Fehlers von Operatorerwartungswerten ein.

Wir weisen an dieser Stelle auf die Möglichkeit hin, ebenfalls auf einen anderen, benachbarten Kopplungsparameter  $\beta$  rückzugewichten. Basierend auf der Standardtechnik des „Reweightings“ [54] lässt sich die kanonische Verteilung bei dieser Kopplung folgendermaßen durch die bei  $\hat{\beta}_{eh}$  simulierte ausdrücken:

$$P_{can}(E, \beta) \sim P_{can}(E, \hat{\beta}_{eh}) e^{(\beta - \hat{\beta}_{eh})E}. \quad (3.28)$$

Der zugehörige Operatorerwartungswert lässt sich direkt aus der multikanonischen Simulation berechnen:

$$\langle \hat{\mathcal{O}}_{\beta} \rangle_{can} = \frac{\sum_i \mathcal{O}_{\beta}^i \exp(\hat{V}_{\text{MUCA}}(E_i) + (\beta - \hat{\beta}_{eh})E_i)}{\sum_i \exp(\hat{V}_{\text{MUCA}}(E_i) + (\beta - \hat{\beta}_{eh})E_i)}. \quad (3.29)$$

Bei dieser Art der Neugewichtung hin zu anderen Kopplungen ist darauf zu achten, dass der Träger der multikanonischen Energiedichte den *tatsächlichen* Träger der kanonisch rückgewichteten Dichte umfaßt:

$$T[N_{can}(E, \beta)] \subset T[\hat{N}_{muca}(E, \hat{\beta}_{eh})]. \quad (3.30)$$

Ohne ein künstliches Vergrößern von  $T[\hat{N}_{muca}(E, \hat{\beta}_{eh})]$  ist die Berechnung der Erwartungswerte von Operatoren auf einen kleinen Kopplungsbereich  $\beta \in [\hat{\beta}_{eh} - \epsilon_1, \hat{\beta}_{eh} + \epsilon_2]$  beschränkt.  $\epsilon_{1,2}$  nehmen mit wachsendem Systemvolumen ab.

Es sei darauf hingewiesen, dass es grundsätzlich keine Beschränkung in der Wahl des multikanonischen Potentials gibt. Allein aus technischen Gründen, die aus der Dynamik des verwendeten Algorithmus resultieren, fordern wir von  $V_{\text{MUCA}}(E)$  Stetigkeit. Wir können eine analytische Funktion ansetzen oder aber auch eine Polygon-Approximation<sup>3</sup>, wie z.B.  $\hat{V}_{muca}(E) = \hat{\beta}(E) E + \hat{\alpha}(E)$ , wählen. Basierend auf einer Unterteilung des Trägers der Energiedichte in Intervalle, wählt man  $\hat{\beta}(E)$  und  $\hat{\alpha}(E)$  innerhalb eines solchen Intervalls konstant. Letztere Darstellung liefert

$$\hat{P}_{muca}(E) = e^{(\hat{\beta}_{eh} - \hat{\beta}(E))E - \hat{\alpha}(E)}, \quad (3.31)$$

<sup>2</sup>Der Überlapp der Träger ist *die* kritische Größe bei der Rückgewichtung auf einen anderen Kopplungsbereich. Damit ist die Berechnung von thermodynamischen Größen des Systems zu unterschiedlichen Temperaturen auf der Basis von Umgewichtung i.a. beschränkt.

<sup>3</sup>Wir betonen, dass diese stückweise lineare *Approximation* des Potentials beim anschließenden *Rewighting* im Sinne von Gl. (3.26) zu der korrekten kanonischen Verteilung führt.

$$\beta_{\text{eff}}(E) = \hat{\beta}_{eh} - \hat{\beta}(E), \quad (3.32)$$

und kann als Simulation bei variierender Kopplung  $\beta_{\text{eff}}(E)$  (inverser Temperatur) interpretiert werden [45]. Diese Tatsache ist der Hintergrund der Namensgebung „*multikanonisch*“.

Es ist unmittelbar plausibel, dass die Güte im Tuning der multikanonischen Simulation, welche wir über die tatsächlich erreichte Konstanz von Gl. (3.21) messen, sensibel davon abhängt, wie gut die verwendete Modellierung die Energiedichte [Gl. (3.20)] approximiert. In Kapitel 3.2.6 wird darauf eingegangen, wie sich dieser technische Aspekt der multikanonischen Prozedur in der Praxis darstellt.

## 3.2 Algorithmen

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie Feldkonfigurationen gemäß einer gewünschten Verteilung erzeugt werden können. Die Grundlage aller hier vorgestellten Algorithmen ist die Realisierung eines Markovprozesses, der die Konvergenz gegen eine eindeutige Fixpunktverteilung sicherstellt. Entscheidend für die Effizienz eines solchen Algorithmus ist sowohl das Konvergenzverhalten, welches sich über die *exponentielle Autokorrelation* quantifizieren läßt, als auch die möglichst kleine Varianz der interessierenden Observablen, welche eng verknüpft ist mit der *integrierten Autokorrelation*. In diesem Zusammenhang beschreiben wir eine Methode zur verbesserten Dekorrellierung aufeinanderfolgender Konfigurationen im Markov Prozess. Diese Methode der Relaxation nutzt eine Symmetrie der zugrunde liegenden Eichwirkung aus. Wir können sie daher mit allen hier vorgestellten Algorithmen kombinieren. Abschließend vergleichen wir die Effizienz der verwendeten Algorithmen und untersuchen deren Performanz bei Variation der zur Berechnung eingesetzten Anzahl von Prozessoren in unserer Parallelrechnerimplementierung.

### 3.2.1 Markov Prozess

Um ein repräsentatives Ensemble von Feldkonfigurationen gemäß einer gewünschten Verteilung  $P_E(\phi)$  zu erzeugen, bietet sich ein Markovprozess an. Dieser ist definiert über die Wahrscheinlichkeit  $P_{\text{trans}}(\phi \rightarrow \phi')$  mit der eine (beliebige) neue Konfiguration  $\phi'$  aus der alten erzeugt wird. Die Verteilung der so generierten Markovkette  $\{\phi_i\}$ ,  $i = 1, \dots, N$  konvergiert für eine beliebige Startkonfiguration gegen den *eindeutigen* Fixpunkt  $P_E(\phi)$ , sofern folgende hinreichende Bedingungen erfüllt sind:

$$P_{\text{trans}}(\phi \rightarrow \phi') > 0 \quad (\text{Ergodizität}) \quad (3.33)$$

$$P_E(\phi)P_{\text{trans}}(\phi \rightarrow \phi') = P_E(\phi')P_{\text{trans}}(\phi' \rightarrow \phi) \quad (\text{Detailliertes Gleichgewicht}).(3.34)$$

Die Ergodizität stellt über die nicht verschwindende Übergangswahrscheinlichkeit von einer beliebigen Konfiguration  $\phi$  zu jeder möglichen Konfiguration  $\phi'$  sicher, dass die erzeugte Verteilung unabhängig von der Startkonfiguration ist. Hierbei ist

anzumerken, dass der über den Einzelschritt  $\phi(x) \rightarrow \phi'(x)$  definierte Prozess lokaler Monte Carlo Algorithmen in der Regel nicht ergodisch ist, sondern nur der Bedingung  $P_{trans}(\phi \rightarrow \phi') \geq 0$  genügt. Die Ergodizität läßt sich jedoch wiederherstellen, indem man mehrere solcher Mikroschritte zu einem Makroschritt zusammenfasst. Desweiteren setzt ein Markovprozess voraus, dass alle Konfigurationen der Kette erlaubte Zustände des zu simulierenden Systems sind und die Übergangswahrscheinlichkeit entlang der Kette erhalten bleibt:

$$\int d\phi' P_{trans}(\phi \rightarrow \phi') = 1. \quad (3.35)$$

Die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts garantiert in leicht nachvollziehbarer Weise die gewünschte Fixpunkteigenschaft des Prozesses: Integration von Gl. (3.34) über  $\phi$  liefert

$$\int d\phi P_E(\phi) P_{trans}(\phi \rightarrow \phi') = P_E(\phi'). \quad (3.36)$$

Die im folgenden untersuchten Algorithmen realisieren einen Markovschritt, indem sie, ausgehend von der Konfiguration  $\phi$ , eine neue Konfiguration  $\phi'$  mit der Wahrscheinlichkeit  $P_{prop}(\phi \rightarrow \phi')$  *vorschlagen* und diese anschließend mit der Wahrscheinlichkeit  $P_{acc}(\phi \rightarrow \phi')$  *akzeptieren*.

Wie in Ref. [55] gezeigt, genügt folgende Wahl von  $P_{acc}$  bei beliebigem  $P_{prop}$  der Bedingung des detaillierten Gleichgewichts in Gl. (3.34):

$$P_{acc} = \min \left( 1, \frac{P_E(\phi') P_{prop}(\phi' \rightarrow \phi)}{P_E(\phi) P_{prop}(\phi \rightarrow \phi')} \right). \quad (3.37)$$

Wir werden in Kapitel 3.2.4 sehen, dass die Effizienz eines Algorithmus zur Generierung einer Markovkette entscheidend von der Vorschlagsprozedur und der damit definierten Vorschlagswahrscheinlichkeit  $P_{prop}$  abhängt.

## 3.2.2 Autokorrelation

### Integrierte Autokorrelationszeit

Die Schwierigkeit bei der Erzeugung von Feldkonfigurationen mittels des im letzten Kapitel beschriebenen Markovprozesses besteht darin, dass aufeinanderfolgende Konfigurationen korreliert sind. Diese statistische Abhängigkeit muss bei der Berechnung von Observablen und deren Fehler berücksichtigt werden.

Sei  $\mathcal{O} = \mathcal{O}(\phi)$  ein Operator und  $\mathcal{O}_i = \mathcal{O}(\phi_i)$  dessen Wert auf den gemäß  $P_E(\phi)$  verteilten Konfigurationen der Markovkette  $\{\phi_i\}$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Wir erhalten somit eine Sequenz von Operatorwerten,  $\{\mathcal{O}_i\}$ , und für den Erwartungswert dieses Ensembles

$$\mu_{\mathcal{O}} = \langle \mathcal{O}_i \rangle = \int d\phi P_E(\phi) \mathcal{O}_i(\phi). \quad (3.38)$$



Um die statistische Abhängigkeit des Ensembles zu quantifizieren, führen wir die *Autokorrelationsfunktion*

$$\begin{aligned} C_{\mathcal{O}}(t) &= \langle \mathcal{O}_i - \mu_{\mathcal{O}} \rangle \langle \mathcal{O}_{i+t} - \mu_{\mathcal{O}} \rangle \\ &= \langle \mathcal{O}_i \mathcal{O}_{i+t} \rangle - \mu_{\mathcal{O}}^2, \end{aligned} \quad (3.39)$$

bzw die über die Varianz  $\sigma_{\mathcal{O}}^2 = C_{\mathcal{O}}(0)$  *normierte Autokorrelationsfunktion* ein

$$\rho_{\mathcal{O}}(t) = \frac{C_{\mathcal{O}}(t)}{C_{\mathcal{O}}(0)}. \quad (3.40)$$

Dies erlaubt die Definition der *integrierten Autokorrelationszeit*

$$\tau_{\text{int}}(\mathcal{O}) = \frac{1}{2} \sum_{t=-\infty}^{\infty} \rho_{\mathcal{O}}(t) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \rho_{\mathcal{O}}(t). \quad (3.41)$$

Approximieren wir nun den Operatorerwartungswert aus Gl. (3.38) durch den Schätzwert

$$\hat{\mu}_{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}_i, \quad (3.42)$$

so läßt sich nach kurzer Rechnung, die wir in Anhang A.1 durchführen, dessen Varianz abschätzen durch:

$$\hat{\sigma}_{\hat{\mu}_{\mathcal{O}}}^2 = \frac{2\tau_{\text{int}}(\mathcal{O})}{N} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}_i^2 - \hat{\mu}_{\mathcal{O}}^2 \right). \quad (3.43)$$

Wie aus Gl. (3.43) ersichtlich, ist der statistische Fehler  $\hat{\sigma}_{\hat{\mu}_{\mathcal{O}}}^2$  gegenüber dessen Wert ohne Berücksichtigung der Korrelation um den Faktor  $2\tau_{\text{int}}(\mathcal{O})$  größer. Die Markovkette der Länge  $N$  enthält somit (bezüglich der Schätzung des Erwartungswertes) nur  $N/2\tau_{\text{int}}(\mathcal{O})$  statistisch unabhängige Konfigurationen. Daher ist die integrierte Autokorrelationszeit eine für die Effizienz des Simulations-Algorithmus' entscheidende Größe. Es sei daran erinnert, dass diese Größe explizit vom Operator  $\mathcal{O}$  abhängt. Ein Algorithmus kann sehr wohl effizient im Sinne der Berechnung von lokalen Operatoren sein, hingegen Observablen größerer Ausdehnung auf dem Gitter schlechter dekorrelieren. Die hier vorgestellte Untersuchung beschränkt sich auf den Plaquette-Operator. Daher wird im folgenden die Operatorabhängigkeit weggelassen.

Um die Effizienz verschiedener Algorithmen vergleichen zu können, berechnen wir die integrierte Autokorrelationszeit  $\tau_{\text{int}}$  gemäß Anhang A.1 approximativ zu

$$\hat{\tau}_{\text{int}} = \hat{\tau}_{\text{int},M} = \frac{1}{2} \sum_{t=-M}^M \hat{\rho}_{\mathcal{O}}(t) \quad \text{mit} \quad M \in [4\hat{\tau}_{\text{int},M}, 8\hat{\tau}_{\text{int},M}]. \quad (3.44)$$

Für den statistischen Fehler dieses Schätzwertes erhält man (siehe Anhang A.1)

$$\sigma(\hat{\tau}_{\text{int},M}) \approx \sqrt{\frac{2(2M+1)}{N}} \hat{\tau}_{\text{int},M}. \quad (3.45)$$

Die Unabhängigkeit von  $\hat{\tau}_{\text{int}}$  gegenüber Vergrößerung von  $M$  (ganzzahlig) innerhalb des angegebenen Bereichs ergibt sich erst bei hinreichend langer Markovkette ( $N \approx 1000\hat{\tau}_{\text{int}}$ ).

## Exponentielle Autokorrelationszeit

Die charakteristische Zeitskala des (im allgemeinen exponentiellen) Abfalls der normierten Autokorrelationsfunktion,

$$\rho_{\mathcal{O}}(t) = \frac{C_{\mathcal{O}}(t)}{C_{\mathcal{O}}(0)} \sim e^{-|t|/\tau} \quad , \quad t \text{ groß} \quad (3.46)$$

läßt sich über die *exponentielle Autokorrelationszeit*  $\tau_{\text{exp},\mathcal{O}}$  quantifizieren:

$$\tau_{\text{exp},\mathcal{O}} = \limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{t}{-\log |\rho_{\mathcal{O}}(t)|}. \quad (3.47)$$

Beschreibt man den generierenden Markov Prozess als kontrahierende Abbildung  $Q$  mit Eigenwerten  $|\lambda| \leq 1$  und mit Fixpunktverteilung  $P_E$  als Eigenzustand des größten Eigenwertes  $\lambda = 1$ , dann stellt  $\tau_{\text{exp},\mathcal{O}}$  die Abklingzeit der langsamsten Mode des Systems (mit dem zweitgrößten Eigenwert von  $Q$ ) dar, die an den Operator  $\mathcal{O}$  koppelt.

Die numerische Bestimmung von Erwartungswerten auf einem so generierten Ensemble,  $\{\phi_i : i = 1, \dots, N\}$ , muss daher auf  $\{\phi_i : i > \tau_{\text{exp}}\}$  beschränkt werden.

## Flip-Autokorrelationszeit

Die direkte Betrachtung der Zeitreihe des Systems in der Nähe des Phasenübergangs (siehe Fig. 3.3) gibt qualitativ Aufschluss über die Häufigkeit der Phasenwechsel innerhalb einer Simulation mit kanonischer Verteilung der Feldkonfigurationen. Die Abbildung zeigt die auf eine Plaquette normierte Energie  $e = E/6V$  des  $16^4$  Systems bei  $\beta = 1.010800$  in der „zeitlichen“ Entwicklung über 3 Mio Konfigurationen hinweg.

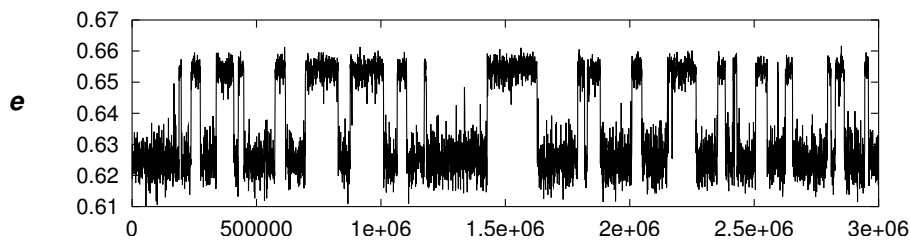


Abbildung 3.3: Die Zeitserie eines kanonischen Metropolis Algorithmus für das  $16^4$  Systems bei  $\beta = 1.010800$ .

Wir definieren die *Flipzeit*, die bei der Untersuchung von Systemen mit ausgeprägten Metastabilitäten ein qualitatives Maß für die statistische Abhängigkeit des Ensembles darstellt. Sie beschreibt die Verweildauer des Algorithmus innerhalb einer der beiden Phasen. Um ein eindeutiges und von der Einzelsimulation unabhängiges Kriterium der Phasenzugehörigkeit zu formulieren, gehen wir wie folgt vor; wir kombinieren alle Simulationsläufe gleicher Systemgröße  $L$  zu einem Multihistogramm

$N_{can}$  (siehe Kapitel 3.2.6). Wir bestimmen die Kopplung  $\beta_{eh}$  so, dass gleich hohe Phasenpeaks auftreten

$$N_{can}(E_1, \beta_{eh}) = N_{can}(E_2, \beta_{eh}) , \quad (3.48)$$

und messen deren Lokalisierung  $E_i$  (siehe Fig. 3.2). Mit einer Unterteilung der Energiedichte in drei Intervalle

$$\begin{aligned} I_1 &= \{E : E < E_1\} \\ I_2 &= \{E : E_1 \leq E \leq E_2\} \\ I_3 &= \{E : E > E_2\} , \end{aligned}$$

definieren wir  $\tau_{\text{flip}}$  als die mittlere Anzahl der *Sweeps*, die erforderlich ist, um von einer Konfiguration aus  $I_1$  nach  $I_3$  bzw. umgekehrt zu gelangen:

$$\tau_{\text{flip}} = \langle \#\text{Sweeps}(I_1 \leftrightarrow I_3) \rangle . \quad (3.49)$$

Ein Sweep beinhaltet jeweils ein update *aller* Freiheitsgrade.  $\tau_{\text{flip}}$  ist die entscheidende Bewertungsgröße für die Zuverlässigkeit der Bestimmung des relativen Phasengewichts einer Simulation in der Nähe eines Phasenübergangs 1. Ordnung. Die dieser Arbeit zugrunde liegenden Untersuchungen haben ergeben, dass ein erzeugtes Ensemble von Konfigurationen wenigstens  $O(100)$  flips zwischen den beiden Phasen aufweisen muss, damit die statistischen Fehler der aus der Energiedichte abzuleitenden thermodynamischen Größen hinreichend kontrolliert werden können (siehe Kapitel 4).

### 3.2.3 Slowing down

Um aus Gittersimulationen Resultate der Kontinuumsphysik extrahieren zu können, ist das Studium von verschiedenen Gittervolumina  $V = L^d$  notwendig. Aus dem Skalenverhalten der betrachteten thermodynamischen Größen läßt sich dann eine Aussage über deren Erwartungswerte im Limes  $L \rightarrow \infty$  machen (siehe Kapitel 2.3.4).

Die Untersuchung von Systemen an Phasenübergängen wird dadurch erschwert, dass das Phänomen des *Critical slowing downs* (CSD) den Rechenaufwand von Monte Carlo Methoden bei zunehmender Systemgröße enorm anwachsen läßt. An Phasenübergängen **zweiter Ordnung** divergiert die Autokorrelationszeit  $\tau$  gemäß

$$\tau \sim \min(L, \xi)^z . \quad (3.50)$$

Hier ist  $\xi$  die (statische) *Korrelationslänge* im unendlich ausgedehnten System, welche charakteristisch für die zugrunde liegende Feldtheorie ist. Gl. (3.50) beschreibt das potenzartige Anwachsen der Autokorrelationszeit mit der Gittergröße durch den *dynamischen kritischen Exponenten*  $z$ , der spezifisch für den gewählten Simulationsalgorithmus ist. Für einen lokalen Metropolis-Algorithmus in einer freien Theorie

ergibt sich  $z = 2$ , was mit dem *Random-walk*-artigen Durchschreiten des Zustandsraumes zusammenhängt. Globale Algorithmen wie der Hybrid Monte Carlo können den dynamischen kritischen Exponenten (je nach gewähltem Integrationschema) auf  $z \approx 1$  reduzieren.

Die Situation am Phasenübergang **erster Ordnung** ist eine grundlegend andere [56]. Trotz endlicher Korrelationslänge wird die Bestimmung thermodynamischer Eigenschaften des Systems durch das *supercritical slowing down* (SCSD) erschwert: die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von Konfigurationen, bei denen sich das System in einem Mischzustand zweier koexistierender Phasen befindet, ist durch die Existenz von Phasengrenzen mit nichtverschwindender Oberflächenspannung  $\sigma$  exponentiell unterdrückt. Daher ergibt sich in der Nähe des Phasenübergangs<sup>4</sup>  $\beta = \beta_{eh}$  im Histogramm der Energiedichte zwei ausgeprägte Doppelpeaks mit sehr stark unterdrückter Aufenthaltswahrscheinlichkeit im Tal dazwischen. Wie in Ref. [57] beschrieben, lässt sich folgender Zusammenhang zwischen Energiedichte und Oberflächenspannung finden (siehe Fig. 3.2):

$$\frac{N_{min}(S, \beta_c)}{N_{max1,2}(S, \beta_c)} \sim \exp(-2\sigma L^{d-1}) . \quad (3.51)$$

Da ein lokaler kanonischer Simulationsalgorithmus durch das Minimum der Energiedichte zwischen den Phasen nur in kleinen Schritten „tunneln“ kann, nimmt die Autokorrelationszeit analog zu Gl. (3.51) exponentiell mit der Ausdehnung der  $(d-1)$ -dimensionalen Phasengrenzflächen des Systems zu.

$$\tau \sim \exp(2\sigma L^{d-1}) . \quad (3.52)$$

Das Phänomen des SCSD führt in der Simulation zu sogenannten *Metastabilitäten*. Dies sind mitunter extrem große Teilensembles, innerhalb derer der Simulationsalgorithmus trotz Phasenkoexistenz am Phasenübergang in einer der beiden Phasen „verharrt“. Diese Metastabilitäten erschweren die Bestimmung des korrekten relativen Gewichts der beiden Phasen und der daraus abgeleiteten thermodynamischen Größen des Systems.

Es ist daher unser Ziel, einen Algorithmus zu entwickeln, welcher das Problem des exponentiellen slowing downs überwindet. Dazu wählen wir in dieser Arbeit die Methode der multikanonischen Simulation.

### 3.2.4 Metropolis Algorithmus

Der kanonische Single-site Metropolis Algorithmus [58] generiert eine Markovkette von Feldkonfigurationen gemäß der kanonischen Verteilung  $P_{can}(\phi) \sim e^{\beta E(\phi)}$ . Dazu starten wir mit einer beliebigen Startkonfiguration  $\{\phi\}$ , deren einzelne Freiheitsgrade  $\phi_\mu(n)$ , mit  $n = 1, \dots, V$  und  $\mu = 1, 2, 3, 4$  in der Vorschlagsprozedur

---

<sup>4</sup>Wie wir später in Kapitel 4 sehen werden ist die kritische Kopplung des Phasenübergangs  $\beta_T \neq \beta_{eh}$

eines updates *sequentiell* neu gewählt werden. Der Vorschlag eines Linkwinkels erfolgt durch Addition einer Zufallszahl

$$\phi_\mu(n) \rightarrow \phi'_\mu(n) = \phi_\mu(n) + \eta_\mu(n) . \quad (3.53)$$

Die für jeden einzelnen Linkwinkel neu zu würfelnde Zufallszahl  $\eta_\mu(n)$  wählen wir gleichverteilt aus dem Intervall

$$\eta_\mu(n) \in \delta[-\pi, \pi]. \quad (3.54)$$

Der Parameter  $\delta$  ist einstellbar. Die aus der Periodizität der Wirkung  $S(\phi)$  resultierende Eigenschaft von  $\phi_\mu(n)$  legt eine Wahl  $\delta \in [0, 1]$  nahe.

Schließlich akzeptieren wir diese vorgeschlagene Linkänderung mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_{acc} = \min(1, e^{-\Delta S}), \quad \text{mit } \Delta S = S(\phi') - S(\phi). \quad (3.55)$$

Die Updatereihenfolge der Einzellinks stellt einen weiteren einstellbaren Parameter des Algorithmus dar. Die Wirkung der  $U(1)$ -Gittereichtheorie

$$S(\phi) = -\beta E(\phi) = -\beta \sum_{n,\nu>\mu} \cos(\theta_{\mu\nu}(n)), \quad (3.56)$$

ist lokal definiert. Da sich die Änderung des Links  $\phi_\mu(n)$  nur auf die 6 Plaquetten

$$\theta_{\mu\nu}(n) = \phi_\mu(n) + \phi_\nu(n + \hat{\mu}) - \phi_\mu(n + \hat{\nu}) - \phi_\nu(n), \quad (3.57)$$

auswirkt (siehe Fig. 3.4), welche den betrachteten Linkwinkel beinhalten, reduziert sich die globale Wirkungsdifferenz in der accept/reject Entscheidung auf die Änderung der Summe dieser 6 Plaquetten.

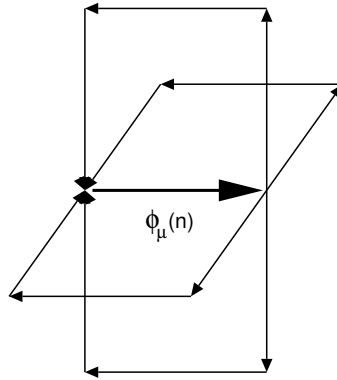


Abbildung 3.4: In einer dreidimensionalen Projektion sind 4 der insgesamt 6 zu  $\phi_\mu(n)$  gehörigen Plaquetten darstellbar.

Diese Lokalität eröffnet die Möglichkeit, den Update auf zwei separaten Untergittern jeweils *parallel* und unabhängig voneinander durchzuführen. Wie in Fig. 3.5 als zweidimensionale Projektion dargestellt, ergibt sich die Struktur eines vierdimensionalen Schachbretts. Es sei darauf hingewiesen, dass trotz des parallelen Updates

die accept/reject Entscheidung aus Gl. (3.55) lokal für jeden Einzellink getroffen wird. Damit sind  $4V$  solcher Entscheidungen je Sweep (= Update *aller* Freiheitsgrade) zu treffen, was die Bezeichnung „lokal“ auch in einer parallelen Implementation rechtfertigt.

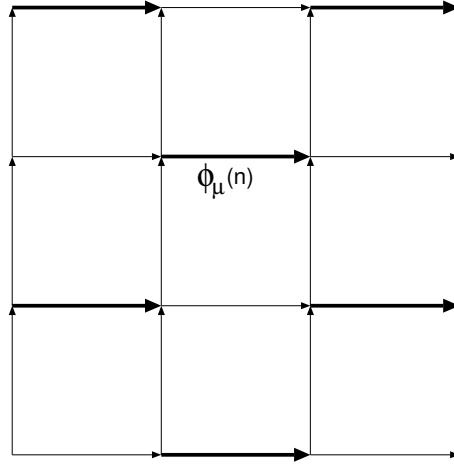


Abbildung 3.5: Projektion des vierdimensionalen Gitters. Die fett markierten Links können unabhängig, d.h. parallel, zu  $\phi_\mu(n)$  upgedatet werden.

### Einstellung der Parameter

Für den oben beschriebenen parallelen Update reduziert sich die Wahl der Reihenfolge der Einzelupdates auf die vier Raumrichtungen der Links innerhalb eines der beiden Schachbrett-Untergitter. Wir durchlaufen diese periodisch. Der die Effizienz des Algorithmus' maßgeblich bestimmende Parameter ist die Breite der Gleichverteilung  $\delta$ , (Gl. (3.54)):

- zu großes  $\delta$  führt zu einer zu geringen Akzeptanzwahrscheinlichkeit.
- zu kleines  $\delta$  dekorreliert aufeinanderfolgende Konfigurationen der Markovkette unzureichend, da sie im Zustandsraum zu dicht beieinander liegen. Wir können dies makroskopisch über die Differenz  $E' - E$  quantifizieren.

Beides führt zu einer gegenüber optimaler Parameterwahl erhöhten Autokorrelation und senkt damit die Effizienz des Algorithmus'. Die für die Optimierung des Algorithmus' bezüglich der Messung des Plaquetteoperators und daraus abgeleiteter Operatoren zu minimierende Größe ist die integrierte Autokorrelationszeit  $\tau_{\text{int}}$ . Wir sehen von einer detaillierten Analyse ab und erreichen über  $\delta = 0.5$  eine optimale Akzeptanzrate von  $\approx 50\%$  [59].

### Konvergenz des Single-Site Metropolis

Nur für die Wahl von  $\delta = 1$  ist die **Ergodizität** [Gl. (3.33)] für einen einzelnen Sweep sichergestellt<sup>5</sup>. Fassen wir jedoch, wie in Kapitel 3.2.1 vorgeschlagen, formal

<sup>5</sup>Es sei daran erinnert, dass  $\phi_\mu(x) \in [-\pi, \pi]$  und die lokale Wirkung in  $\phi_\mu(x)$   $2\pi$  periodisch ist.

$k$  Sweeps zu einem einzigen zusammen, dann ist der so definierte *Multi-sweep* für  $\delta \geq \frac{1}{k}$  ergodisch.

Wir weisen nun das **detaillierte Gleichgewicht** Gl. (3.34) für den Single-site Metropolis Update nach. Die Verallgemeinerung von Gl. (3.55) auf beliebige Distributionen  $P_E(\phi)$  lautet:

$$P_{trans}(\phi \rightarrow \phi') = P_{acc} = \begin{cases} 1 & : P_E(\phi) < P_E(\phi') \\ P_E(\phi')/P_E(\phi) & : P_E(\phi) \geq P_E(\phi') \end{cases} \quad (3.58)$$

Wegen der Gleichverteilung von  $\eta_\mu(x)$  stellt die Akzeptanzwahrscheinlichkeit gleichzeitig die komplette Übergangswahrscheinlichkeit  $P_{trans}(\phi \rightarrow \phi') = P_{acc}$  dar. In dieser Fallunterscheidung ist die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts trivial nachzuweisen.

Wir haben damit gezeigt, dass der durch den Single-site-Metropolis Algorithmus definierte Markovprozess die eindeutige Fixpunktverteilung  $P_E(\phi)$  besitzt (siehe Kapitel 3.2.1). Eine entsprechende Fixpunkteigenschaft lässt sich analog für eine beliebige andere Distribution, insbesondere für eine multikanonische Verteilung nachweisen. Eine multikanonische Simulation mit dem *lokalen* Single-site-Metropolis Algorithmus erfordert jedoch eine sequentielle Implementation. Denn wegen der Abhängigkeit des multikanonischen Potentials (Gl. (3.24)) von der *globalen* Energie  $E$  kann die accept/reject Entscheidung nur noch dann lokal getroffen werden, wenn wir sequentiell (einen Link nach dem anderen) „updaten“.

Die Nicht-Parallelisierbarkeit lokaler Algorithmen (wie des Single-site-Metropolis) innerhalb einer multikanonischen Simulation erfordert die Verwendung globaler Update Schemata, wie des Hybrid Monte Carlo Algorithmus.

### 3.2.5 Hybrid Monte Carlo (HMC)

Im Hybrid Monte Carlo Algorithmus modifiziert man das lokale Vorschlagsverfahren aus Gl. (3.53) zu einem Vorschlag mit *globalen* Veränderungen, die man aus einer Integration eines Systems von Hamiltonschen Bewegungsgleichungen gewinnt. Der Hybrid Monte Carlo [60, 61, 62] besteht aus zwei Teilen: Die Hybrid-Dynamik [63] entwickelt die Freiheitsgrade entlang einer künstlich eingeführten Zeit mittels einer (mikrokanonischen) Molekulardynamik (MD). Anschließend sorgt eine globale Metropolis-Entscheidung für die Exaktheit des Algorithmus.

Zusätzlich zu den Eichfeldern  $\{\phi_\mu(n)\}$  führen wir einen weiteren Satz unabhängiger Zufallsvariablen, die kanonischen Impulse  $\{\pi_\mu(n)\}$  ein und erweitern die Wirkung  $S = -\beta E$  zu einem Hamiltonian:

$$\mathcal{H}(\phi, \pi) = \frac{1}{2} \sum_{\mu, n} \pi_\mu^2(n) - \beta E(\phi). \quad (3.59)$$

Zu Beginn einer jeden Trajektorie der Molekulardynamik werden die kanonischen Impulse gemäß einer Gauß-Verteilung

$$P_G(\pi) \sim \exp\left(-\frac{\pi^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{mit } \sigma^2 = 1 \quad (3.60)$$

zufällig gewählt. Von einer so erhaltenen Startkonfiguration  $(\phi, \pi)$  zu fiktiver Molekulardynamikzeit  $t = 0$  ausgehend, integrieren wir das System vollständig deterministisch mit Hilfe der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{\phi}_\mu &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_\mu} = \pi_\mu, \\ \dot{\pi}_\mu &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi_\mu} = \frac{\partial}{\partial \phi_\mu}[\beta E]. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Dies führt uns zu einer Konfiguration  $(\phi', \pi')$  zur Zeit  $t = \tau$ . Schließlich akzeptieren wir diese vorgeschlagene Konfiguration via *globaler* Metropolis-Entscheidung mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_{acc} = \min(1, e^{-\Delta \mathcal{H}}), \quad \text{mit } \Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(\phi', \pi') - \mathcal{H}(\phi, \pi). \quad (3.62)$$

In dieser kontinuierlichen Formulierung ist der Hamiltonian eine Erhaltungsgröße, womit der globale Metropolis-Schritt in Gl. (3.62) überflüssig wäre. In einer realen Simulation hingegen führen wir die Integration der Bewegungsgleichungen Gl. (3.61) in diskreten Zeitschritten  $\Delta t$  aus. Wir unterteilen das Zeitintervall  $0 \leq t \leq \tau$  in  $N_{md}$  Stützstellen und definieren darüber eine Trajektorie in der Molekulardynamikzeit  $t = k \cdot \Delta t$  mit  $k = 0, 1, \dots, N_{md}$ <sup>6</sup>. Jeder diskrete Integrationsschritt führt zu Abweichungen von der Hyperfläche konstanter Energie und erfordert damit Gl. (3.62), um einen *exakten* Algorithmus zu konstruieren.

Wir wählen das einfachste symplektische Integrationsschema, den *Leapfrog* Algorithmus, dessen Implementation aus  $N_{md}$  Sequenzen der folgenden Art besteht:

$$\pi(t + \Delta t/2) = \pi(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial \phi}[\beta E(\phi(t))], \quad (3.63)$$

$$\phi(t + \Delta t) = \phi(t) + \Delta t \cdot \pi(t + \Delta t/2), \quad (3.64)$$

$$\pi(t + \Delta t) = \pi(t + \Delta t/2) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial \phi}[\beta E(\phi(t + \Delta t))]. \quad (3.65)$$

Es sei angemerkt, dass in den Sequenzen  $2, \dots, N_{md} - 1$  die Halbschritte Gl. (3.63) und Gl. (3.65) zu einem Einzelschritt kombiniert werden können. Jede dieser Triaden des Leapfrog-Schemas approximiert den korrekten Hamiltonian  $\mathcal{H}$  bis auf einen Fehler  $O(\Delta t^3)$ . Der Vorzug dieses Algorithmus besteht in der vollständigen *Parallelisierbarkeit* der Molekulardynamik: alle Freiheitsgrade können parallel integriert

---

<sup>6</sup>Die Parameter  $\Delta t$  und  $N_{md}$  sind im Rahmen der Stabilität des Integrationsschemas frei wählbar. Der Langevin Algorithmus [64] stellt mit  $N_{md} = 1$  einen (weniger effizienten) Spezialfall dar.



werden.

Für die Kraft  $\dot{\pi}$  berechnen wir die Ableitung der Energie nach einem Eichfreiheitsgrad

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial \phi_\alpha(n)} &= \sum_{m,\nu>\mu} \frac{\partial}{\partial \phi_\alpha(n)} \cos[\phi_\mu(m) + \phi_\nu(m + \hat{\mu}) - \phi_\mu(m + \hat{\nu}) - \phi_\nu(m)] \\
&= \sum_{m,\nu>\mu} \sin(\theta_{\mu\nu}(m)) [-\delta_{m,n} \delta_{\alpha,\mu} + \delta_{m,n} \delta_{\alpha,\nu} - \delta_{m+\hat{\mu},n} \delta_{\alpha,\nu} + \delta_{m+\hat{\nu},n} \delta_{\alpha,\mu}] \\
&= - \sum_{n,\nu>\alpha} \sin(\theta_{\alpha,\nu}(n)) + \sum_{n,\nu<\alpha} \sin(\theta_{\mu,\alpha}(n)) \\
&\quad - \sum_{n,\mu<\alpha} \sin(\theta_{\mu,\alpha}(n - \hat{\mu})) + \sum_{n,\nu>\alpha} \sin(\theta_{\alpha,\nu}(n - \hat{\nu})) \\
&= - \sum_{n,\nu>\alpha} \sin(\theta_{\alpha,\nu}(n)) - \sum_{n,\nu<\alpha} \sin(\theta_{\alpha,\mu}(n)) \\
&\quad + \sum_{n,\mu<\alpha} \sin(\theta_{\alpha,\mu}(n - \hat{\mu})) + \sum_{n,\nu>\alpha} \sin(\theta_{\alpha,\nu}(n - \hat{\nu})) \\
&= \sum_{n,\nu \neq \alpha} [\sin(\theta_{\alpha,\nu}(n - \hat{\nu})) - \sin(\theta_{\alpha,\nu}(n))] . \tag{3.66}
\end{aligned}$$

Damit ist die Molekulardynamik des HMC in der  $U(1)$  beschrieben durch<sup>7</sup>:

$$\begin{aligned}
\dot{\phi}_\mu &= \pi_\mu, \\
\dot{\pi}_\mu &= \beta \sum_{n,\nu \neq \alpha} [\sin(\theta_{\alpha,\nu}(n - \hat{\nu})) - \sin(\theta_{\alpha,\nu}(n))] . \tag{3.67}
\end{aligned}$$

### Konvergenz des HMC

Wir wollen nun zeigen, dass der HMC die für die Existenz einer eindeutigen Fixpunktverteilung  $P_S(\phi)$  hinreichenden Bedingungen der *Ergodizität* Gl. (3.33) und des *detaillierten Gleichgewichts* Gl. (3.34) erfüllt. Während die Entwicklung des Systems durch den Phasenraum entlang einer Trajektorie vollkommen deterministisch ist, garantiert das Würfeln der Impulse als *stochastische Kraft* zu Beginn einer jeden Trajektorie die Ergodizität.

Für den Nachweis der Gültigkeit der Bedingung des detaillierten Gleichgewichts schreiben wir die Sequenz Gl. (3.63)-Gl. (3.64) eines einzelnen Mikroschrittes<sup>8</sup> innerhalb einer Trajektorie mathematisch äquivalent zu einer Abbildung um:

$$f_{MD} : (\phi^n, \pi^n) \rightarrow (\phi^{n+1}, \pi^{n+1}) \tag{3.68}$$

<sup>7</sup>Wir verifizieren unser Resultat, in dem wir Energierhaltung entlang der Trajektorie in kontinuierlicher Zeit fordern.

<sup>8</sup>Unter einem Mikroschritt verstehen wir einen Integrationsschritt in *allen* Freiheitsgraden. Damit besteht eine Trajektorie aus  $N_{md}$  Mikroschritten.

$$\begin{aligned}
\phi^{n+1} &= \phi^n + \Delta t \cdot \pi^n + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial}{\partial \phi} [\beta E(\phi^n)] \\
\pi^{n+1} &= \pi^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial \phi} [\beta E(\phi^n)] + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial}{\partial \phi} [\beta E(\phi^{n+1})]. \quad (3.69)
\end{aligned}$$

$f$  stellt die Bewegungsgleichungen auf *ganze* Zeitschritte in  $\phi$  und  $\pi$  transformiert dar. Wir weisen auf zwei Eigenschaften der iterativen Abbildung  $f_{MD}$  hin:

- Reversibilität:  $f_{MD}(\phi^{n+1}, -\pi^{n+1}) = (\phi^n, -\pi^n)$
- Erhaltung des Phasenraumvolumens:  $[d\phi^{n+1}][d\pi^{n+1}] = [d\phi^n][d\pi^n]$

Die Zeitumkehrbarkeit ist leicht nachzurechnen. Der entscheidende Punkt hierbei ist die Linearität von  $f_{MD}$  in  $\pi$ . Für die Erhaltung des Phasenraumvolumens bestätigt eine simple Rechnung

$$\det \left( \frac{\partial(\phi^{n+1}, \pi^{n+1})}{\partial(\phi^n, \pi^n)} \right) = 1. \quad (3.70)$$

Die Wahrscheinlichkeit, eine Konfiguration  $(\phi', \pi')$  vorzuschlagen, wenn sich das System in der Eichfeldkonfiguration  $\phi$  befindet, berechnet sich zu

$$P_{prop}(\phi, \pi \rightarrow \phi', \pi') = P_G(\pi) \cdot \int [d\phi'] [d\pi'] \delta((\phi', \pi') - (\phi, \pi)) = e^{-\frac{1}{2}\pi^2}. \quad (3.71)$$

Analog ergibt sich für die Umkehrung

$$P_{prop}(\phi', -\pi' \rightarrow \phi, -\pi) = e^{-\frac{1}{2}\pi'^2}. \quad (3.72)$$

Wir haben hier die Erhaltung des Phasenraumvolumens sowie die Reversibilität verwandt. Es sei darauf hingewiesen, dass Gl. (3.71) und Gl. (3.72) für einen beliebigen Hamiltonian der Molekulardynamik  $\mathcal{H}_{MD}$  gelten. Relevant ist einzig die Tatsache, dass es sich um eine deterministische Evolution im Phasenraum handelt.

Wir bestätigen damit folgendermaßen die Gültigkeit des detaillierten Gleichgewichts:

$$\begin{aligned}
P_E(\phi) P_{trans}(\phi \rightarrow \phi') &= \int [d\pi] [d\pi'] P_E(\phi) P_{prop}(\phi, \pi \rightarrow \phi', \pi') P_{acc}(\phi, \pi \rightarrow \phi', \pi') \\
&= \int [d\pi] [d\pi'] e^{-\mathcal{H}(\phi, \pi)} \cdot \min \left( 1, e^{-(\mathcal{H}(\phi', \pi') - \mathcal{H}(\phi, \pi))} \right) \\
&= \int [d\pi] [d\pi'] e^{-\mathcal{H}(\phi', \pi')} \cdot \min \left( e^{-(\mathcal{H}(\phi, \pi) - \mathcal{H}(\phi', \pi'))}, 1 \right) \\
&= \int [-d\pi] [-d\pi'] e^{-\mathcal{H}(\phi', -\pi')} \\
&\quad \cdot \min \left( e^{-(\mathcal{H}(\phi, -\pi) - \mathcal{H}(\phi', -\pi'))}, 1 \right) \quad (3.73)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int [-d\pi] [-d\pi'] P_E(\phi') P_{prop}(\phi', -\pi' \rightarrow \phi, -\pi) \\
&\quad \cdot P_{acc}(\phi', -\pi' \rightarrow \phi, -\pi) \\
&= P_E(\phi') P_{trans}(\phi' \rightarrow \phi). \quad (3.74)
\end{aligned}$$

Gl. (3.73) beruht auf der Invarianz des Maßes und des Hamiltonians gegenüber  $\pi \rightarrow -\pi$  bzw.  $\pi' \rightarrow -\pi'$ .

Wir erhalten das Resultat, dass der HMC die eindeutige Fixpunktverteilung  $P_E(\phi) = \exp(\beta E(\phi))$  besitzt. Der HMC generiert diese Verteilung exakt, da er die mit einem beliebigen Molekulardynamik-Hamiltonian  $\mathcal{H}_{MD}$  vorgeschlagenen Konfigurationen mit der Wahrscheinlichkeit  $\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum \pi^2 - \beta E$  akzeptiert.

### 3.2.6 Multikanonischer Hybrid Monte Carlo (MHMC)

Multikanonische Algorithmen sind in der Lage, das SCSD und die daraus resultierenden langen Metastabilitäten zu überwinden. Wir wollen nun ausgehend vom HMC einen parallelisierbaren multikanonischen Hybrid Monte Carlo (MHMC) diskutieren.

Dazu erzeugen wir Feldkonfigurationen gemäß

$$\hat{P}_{\text{MUCA}}(E) \sim e^{\hat{\beta}_{eh}E - \hat{V}_{\text{MUCA}}(E)}, \quad (3.75)$$

$$\hat{V}_{\text{MUCA}}(E) = \begin{cases} \log \hat{N}_{can}(E_{\max 1}, \hat{\beta}_{eh}) & : E < E_{\max 1} \\ \log \hat{N}_{can}(E, \hat{\beta}_{eh}) & : E_{\max 1} \leq E \leq E_{\max 2} \\ \log \hat{N}_{can}(E_{\max 2}, \hat{\beta}_{eh}) & : E > E_{\max 2} \end{cases} \quad (3.76)$$

Das multikanonische Potential basiert auf einer Schätzung der kanonischen Energiedichte  $\hat{N}_{can}(E, \hat{\beta}_{eh})$  zur vermuteten Kopplung  $\hat{\beta}_{eh}$ . Ein Vergleich mit der kanonischen Verteilung  $\sim e^{-S}$  legt die Definition einer *effektiven Wirkung* nahe.

$$\hat{S}_{\text{eff}} = -\hat{\beta}_{eh}E + \hat{V}_{\text{MUCA}}(E), \quad (3.77)$$

Wir wählen für die Molekulardynamik

$$\mathcal{H}_{MD} = \mathcal{H}_{\text{acc}} = \frac{1}{2} \sum \pi^2 + \hat{S}_{\text{eff}}. \quad (3.78)$$

Die aus den Bewegungsgleichungen resultierende Kraft ist durch die Ableitung nach den Eichfreiheitsgraden gegeben (vergleiche Gl. (3.67)):

$$\dot{\pi}_\mu(n) = [\hat{\beta}_{eh} - \partial_E V(E)] \partial_\phi E \quad (3.79)$$

$$= [\hat{\beta}_{eh} - \hat{\beta}(E)] \sum_{\nu \neq \mu} \left[ \sin \theta_{\mu\nu}(n - \hat{\nu}) - \sin \theta_{\mu\nu}(n) \right] \quad (3.80)$$

für  $V_{\text{MUCA}}(E) = \hat{\beta}(E) \cdot E + \hat{\alpha}(E)$   
abschnittsweise linear.

Im Falle der stückweise linearen Polygondarstellung des multikanonischen Potentials ist die Kraft proportional zur effektiven Kopplung  $\beta_{\text{eff}}$  aus Gl. (3.32).

Die Doppelpeakstruktur in der Energiedichte des betrachteten Systems begünstigt den Phasenwechsel des MHMC. Durch das attraktive Potential  $\hat{V}_{\text{MUCA}}(E)$ , dessen Minimum  $E_{\text{min}}$  bei den exponentiell unterdrückten Mischkonfigurationen zu finden ist, wandert das System verstärkt von der Confinement hin zur Coulomb Phase und vice versa: Der zusätzliche Kraftterm in Gl. (3.80) sorgt dafür, dass

$$\beta_{\text{eff}} > \hat{\beta}_{eh} : E_{\text{max1}} < E < E_{\text{min}} \quad (3.81)$$

$$\beta_{\text{eff}} < \hat{\beta}_{eh} : E_{\text{min}} < E < E_{\text{max2}} . \quad (3.82)$$

## Konvergenz des MHMC

Für den MHMC gelten uneingeschränkt die in 3.2.5 detailliert ausgeführten, für beliebige Wirkung  $S$  zutreffenden Betrachtungen zur Konvergenz des HMC. Ein wesentlicher Unterschied in der Implementation des MHMC gegenüber der des HMC ist durch die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts aus Gl. (3.34) gegeben. Die Reversibilität der Molekulardynamik ist notwendig, um dieser Bedingung zu genügen. Genaue Inspektion der mathematisch äquivalent umgeformten Update-Sequenz des Leapfrogschemas in Gl. (3.69) zeigt, dass das multikanonische Gewicht zu jedem Mikroschritt der Molekulardynamik dynamisch neu bestimmt werden muss.

Eine statische Simulation mit einem zu Anfang einer Trajektorie *fixierten* Wert des multikanonischen Potentials würde explizit die geforderte Zeitumkehrbarkeit verletzen. Dies gilt ebenfalls bei der Verwendung der Polygonapproximation. Für diese gilt innerhalb eines Energieintervalls  $E_k$ , dass  $\hat{\beta} = \beta_k$  konstant ist. Verlässt die Molekulardynamik beim Übergang von einem Mikroschritt  $n \rightarrow n+1$  dieses Energieintervall ( $E_k \rightarrow E_{k+1}$ ), so ist die Reversibilität nur dann gewährleistet, wenn die diskretisierten Bewegungsgleichungen Gl. (3.69) für diesen Mikroschritt des MHMC folgendermaßen aussehen:

$$\begin{aligned} \phi^{n+1} &= \phi^n + \Delta t \cdot \pi^n + \frac{\Delta t^2}{2} [\hat{\beta}_{eh} - \hat{\beta}^n] \frac{\partial}{\partial \phi} E(\phi^n) \\ \pi^{n+1} &= \pi^n + \frac{\Delta t}{2} [\hat{\beta}_{eh} - \hat{\beta}^n] \frac{\partial}{\partial \phi} E(\phi^n) + \frac{\Delta t}{2} [\hat{\beta}_{eh} - \hat{\beta}^{n+1}] \frac{\partial}{\partial \phi} E(\phi^{n+1}). \end{aligned} \quad (3.83)$$

Es ist instruktiv, die Reversibilität der so definierten Molekulardynamik in dieser Darstellung der Bewegungsgleichungen nachzuvollziehen<sup>9</sup>.

## Bestimmung des multikanonischen Potentials

Die kanonischen Energiedichten der Systeme  $L \leq 10$  lassen sich innerhalb des Energieintervalls zwischen den Phasenpeaks hinreichend genau durch eine Gaußfunktion approximieren. Es ist möglich, für  $E_{\text{max1}} \leq E \leq E_{\text{max2}}$  einen  $\chi^2$ -Fit an  $\hat{N}_{\text{can}}(E, \hat{\beta}_{eh})$

---

<sup>9</sup>Die direkte Vergleichbarkeit begründet die für konstante Kopplung  $\beta$  ungewöhnlich erscheinende Formulierung der Gl. (3.69).

mit folgendem Ansatz zu wählen:

$$\hat{N}_{\text{can}}(E, \hat{\beta}_{eh}) = a e^{-c(E-b)^2} + d, \quad (3.84)$$

wobei wir zunächst nur  $a, b, c$  als freie Fitparameter wählen und in einem zweiten Fitversuch mit diesen so ermittelten Parameterwerten auch  $d$  variieren.

Auf den größeren Gittern erweist sich die Beschreibung der kanonischen Energiedichte innerhalb des interessierenden Intervalls  $E_{\text{max1}} \leq E \leq E_{\text{max2}}$  per Gaußfunktion als unzulänglich. Dies ist durch die mit wachsender Systemgröße zunehmende Asymmetrie der Energiedichte zu begründen. Man betrachte dazu Fig. 3.10, in der deutlich zu erkennen ist, dass das Minimum der Energiedichte  $E_{\text{min}}$  bei den größeren betrachteten Systemen nicht mittig zwischen den Phasenpeaks liegt. Eine Messung (Tab. 3.3) bestätigt, dass  $E_{\text{min}} > \frac{1}{2}(E_{\text{max2}} + E_{\text{max1}})$ .

Wir wählen daher die in Kapitel 3.1.4 eingeführte Polygonapproximation

$$\hat{V}_{\text{MUCA}}(e) = \hat{\beta}_k(e) e + \hat{\alpha}_k(e) \quad \text{mit } e = E/6V, \quad (3.85)$$

welche bei beliebiger Form des „Tals“ eine ausreichend genaue Parametrisierung des multikanonischen Potentials erlaubt. Dazu unterteilen wir die aus einer kanonischen Simulation gewonnene Energiedichte in  $N = 500$  Bins  $E_k = \{e | e_k \leq e < e_{k+1}\}$ ,  $k = 1, \dots, N$ . Die Kurven werden geglättet, indem die ursprünglichen Histogrammeinträge  $N_k = \hat{N}_{\text{can}}(E_k, \hat{\beta}_{eh})$  durch den gewichteten Mittelwert dieses Eintrags und der 10 benachbarten Bins ersetzt werden.

$$N_k = \sum_i w_{k+i} N_{k+i}, \quad |i| \leq 5 \quad (3.86)$$

$$w_k = 1/(\Delta N_k)^2 \quad (3.87)$$

$$w_{k+i} = 1/[|i|(\Delta N_{k+i})^2], \quad i \neq 0, \quad (3.88)$$

wobei wir unter  $\Delta N_k$  den Fehler des bins  $k$  in einer *Jackknife* Fehleranalyse bei Unterteilung in 10 Blöcke verstehen (Kapitel A.2). Man könnte einwenden, dass eine Glättung überflüssig sei, wenn man die Anzahl der bins hinreichend *klein* wählt (so klein, dass statistische Fluktuationen unterdrückt werden). Dem ist zum einen entgegenzuhalten, dass in der multikanonischen Simulation das Gewicht eines *großen* Energie-Intervalls linear approximiert würde. Förderung der Mobilität des MHMC bedeutet jedoch, die Energiedichte möglichst genau zu nähern und damit Anfangs und Endpunkt der vorgeschlagenen Trajektorie eines MHMC-Schrittes möglichst häufig in unterschiedlichen Energie-Bins vorzufinden. Zum anderen erfordert eine möglichst präzise Bestimmung der Verteilungscharakteristika eine hinreichend hohe Auflösung<sup>10</sup>. In einer Untersuchung verschiedener Markovketten der Länge  $O(10^6)$  des  $16^4$  Systems testen wir die Genauigkeit der Bestimmung von  $\beta_{eh}, E_{\text{max1}}$ ,

---

<sup>10</sup>Dies bezieht sich nicht auf die Observablen unserer Finite-size-scaling Analyse aus Kapitel 4. Deren Berechnung belassen wir explizit unabhängig von jeglichem Binning.

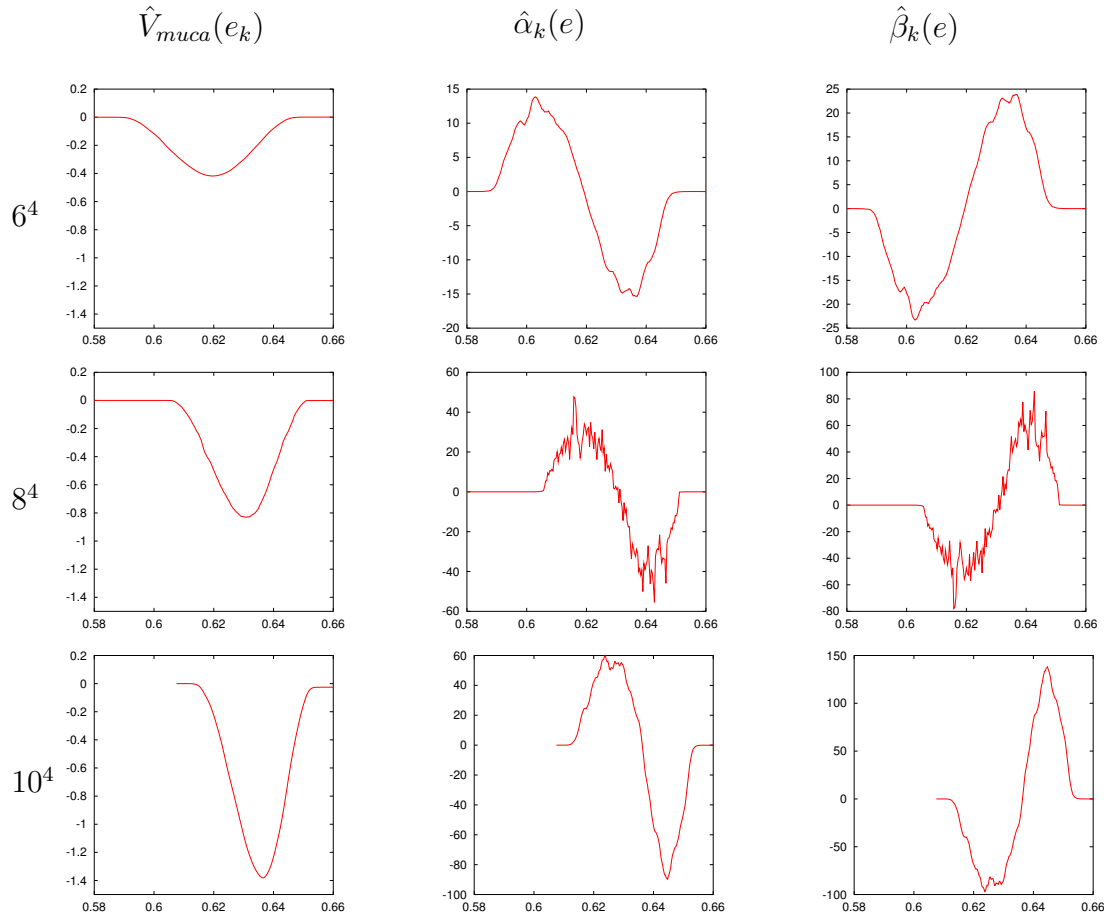


Abbildung 3.6: Wahl von  $\hat{V}_{\text{MUCA}}(e)$  und die daraus resultierenden Parameter der Polygonapproximation  $\hat{\alpha}_k(e)$ ,  $\hat{\beta}_k(e)$  für die Systeme  $6^4$ ,  $8^4$ ,  $10^4$ .

$E_{\min}$ ,  $E_{\max 2}$  in Abhängigkeit der Histogrammauflösung,  $N_{\text{bin}} = 250, 500, 1000$  für  $0.60 < e < 0.67$ . Wir erhalten Stabilität der oben genannten Charakteristika im Rahmen der Jackknife Genauigkeit, wobei im Fall  $N_{\text{bin}} = 250$  die Fehler nahe der Auflösungsungenauigkeit sind. Wir wählen im folgenden  $N_{\text{bin}} = 500$ , da die Energiedichte dann deutlich glatter ist als im Falle der höchsten untersuchten Auflösung.

Über den Logarithmus der so geglätteten Energiedichte  $N_k(e)$  definieren wir die Parameter der Polygonapproximation folgendermaßen:

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_k(e) &= (\hat{V}_{\text{MUCA}}(e_{k+1}) - \hat{V}_{\text{MUCA}}(e_k)) / (e_{k+1} - e_k) \\ \hat{\alpha}_k(e) &= \hat{V}_{\text{MUCA}}(e_k) .\end{aligned}\tag{3.89}$$

Man beachte, dass die über  $e = E/6V$  definierten Kopplungen  $\hat{\beta}_k$  zu einer effektiven Kopplung  $\beta_{\text{eff}}(e) = \hat{\beta}_{eh} - \hat{\beta}_k(e)/6V$  führen (vergleiche dazu Gl. (3.32)). Wir stellen das multikanonische Potential  $\hat{V}_{\text{MUCA}}(e)$  und die daraus resultierenden Parameter  $\hat{\alpha}_k(e)$ ,  $\hat{\beta}_k(e)$  für die Systeme  $6^4, 8^4, 10^4$  in Fig. 3.6 und  $12^4, 14^4, 16^4, 18^4$  in Fig. 3.7

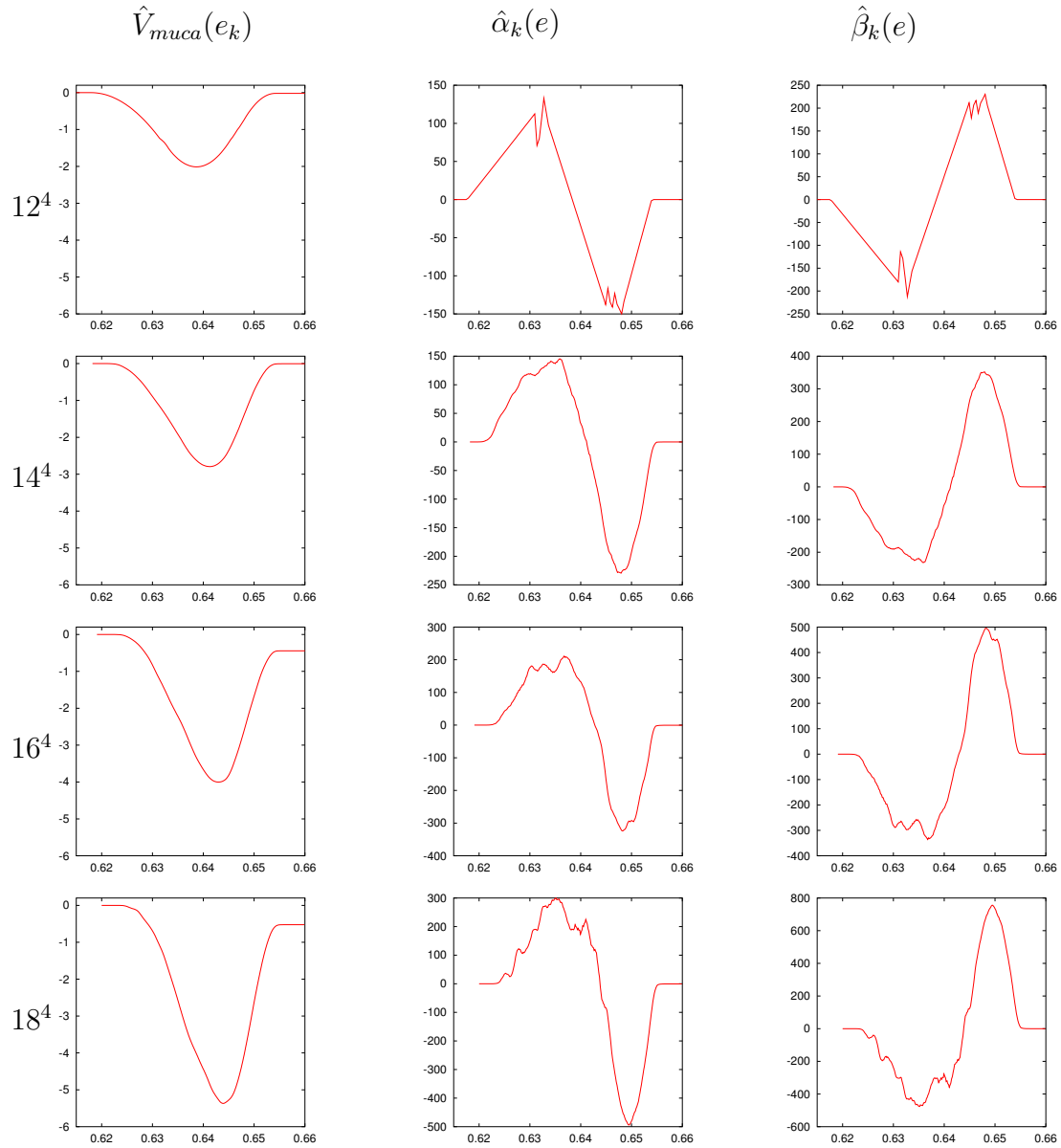


Abbildung 3.7: Wahl von  $\hat{V}_{\text{MUCA}}(e)$ ,  $\hat{\alpha}_k(e)$ ,  $\hat{\beta}_k(e)$  für die Systeme  $12^4, 14^4, 16^4, 18^4$ .

dar. Während es für Gitter der Größe  $L < 16$  ausreichend war, das multikanonische Potential auf der Basis einer kanonischen Simulation zu bestimmen, wird diese Methode unzulänglich für Systeme mit linearer Ausdehnung  $L \geq 16$ : Wegen der exponentiell ansteigenden Flipzeit  $\tau_{\text{flip}}$  einer kanonischen Simulation bedürfte es eines unangemessen großen Ensembles, um eine zuverlässige Schätzung der Energiedichte zu erhalten. Wir verfahren stattdessen wie folgt in einer rekursiven Prozedur.

- **1. Initialisierung:** Wir ermitteln eine erste Schätzung der Energiedichte  $\hat{N}_{\text{can}}^0(E, \hat{\beta}_{eh}^0)$  durch eine kanonische Kurzsimulation. Für größere Systeme bietet sich eine Initialisierung durch eine Extrapolation der kanonischen Energiedichte kleinerer Systeme an[52]. Dazu ist es sinnvoll, sowohl die Kopplung  $\beta_{eh}(L)$

(definiert über gleiche Phasenpeakhöhe), als auch die Charakteristika der Kurve der kanonischen Energiedichte zu extrapolieren. Dazu zählen insbesondere die folgenden 5 Größen  $E_{\max 1}$ ,  $E_{\min}$ ,  $E_{\max 2}$ , sowie deren normierte Histogrammeinträge  $\hat{N}_{\text{can}}(E_{\max 1}) \approx \hat{N}_{\text{can}}(E_{\max 2})$ ,  $\hat{N}_{\text{can}}(E_{\min})$ .

- **2. Iteration:** Auf der Basis einer vorhergehenden Schätzung der Energiedichte  $\hat{N}_{\text{can}}^i(E, \hat{\beta}_{eh}^i)$  ermitteln wir das multikanonische Potential  $V_{\text{MUCA}}^i(e)$ . Eine mit diesem Potential durchgeführte multikanonische Simulation ergibt nach kanonischer Rückgewichtung die Energiedichte  $\hat{N}_{\text{can}}^{i+1}(E, \hat{\beta}_{eh}^{i+1})$ .

## Multihistogramm

Die Einstellung adäquater multikanonischer Gewichte stellt eine „manuelle“ Prozedur dar. Die Konvergenz dieser rekursiven Bestimmung des multikanonischen Potentials ist nur dann zu erwarten, wenn die Histogramme aller zuvor durchgeführten, suboptimalen Simulationen  $i = 0, \dots, k-1$  mittels Multihistogramm Technik in die Schätzung von  $V_{\text{MUCA}}^k(e)$  miteingehen. Dabei muß die relative Genauigkeit der verschiedenen Histogramme berücksichtigt werden. Wir kombinieren daher alle zuvor durchgeführten Simulationen durch Gewichtung auf eine gemeinsame Kopplung  $\beta_c$ . Jedes einzelne Markovkettenelement der Simulation  $i$  trage mit dem Gewicht  $w_i = w[\hat{N}_{\text{can}}^i(E, \beta_c)] \sim 1/\tau_{\text{int}}^{(i)}$  bei. Das Multihistogramm ergibt sich somit über die Summation aller normierten Histogramme  $i$  zu

$$\hat{N}_{\text{can}}^k(E_j, \beta_c) = \frac{\sum_{i=0}^{k-1} w^i \hat{N}_{\text{can}}^i(E_j, \beta_c)}{\sum_{i=0}^{k-1} w^i}. \quad (3.90)$$

Den Fehler eines einzelnen bins  $j$  des Multihistogramms ermitteln wir, indem wir obige Mittelung für jeden Block einzeln vornehmen und dann eine jackknife Fehleranalyse durchführen.

Es gibt keinerlei theoretische Vorhersage zu der etwaigen Existenz eines optimalen Verhältnisses der Anzahl von Rekursionsschritten zur Länge der gesamten Simulation des MHMC. Eine zu kurze Simulation innerhalb eines Rekursionszyklus liefert sicherlich eine zu hohe Unsicherheit bezüglich des relativen Phasengewichts. Ein zu häufiges Korrigieren der Kopplung  $\hat{\beta}_{eh}^i$  hingegen erfordert viele Thermalisierungsschritte, die nicht zur Gesamtstatistik beitragen. Zu seltene Korrektur der multikanonischen Gewichte verschwendet durch die suboptimale Einstellung Rechenleistung.

### 3.2.7 Relaxation

Um die Autokorrelation der erzeugten Konfigurationen und damit den statistischen Fehler der auf ihnen gemessenen Observablen zu verringern, ist es möglich,  $N_{\text{sweep}}$  Sweeps durchzuführen, bevor die Messung des Plaquetteoperators vorgenommen wird. Ein tatsächlich unkorreliertes Ensemble erhält man für  $N_{\text{sweep}} > 2\tau_{\text{int}}$ . Wegen



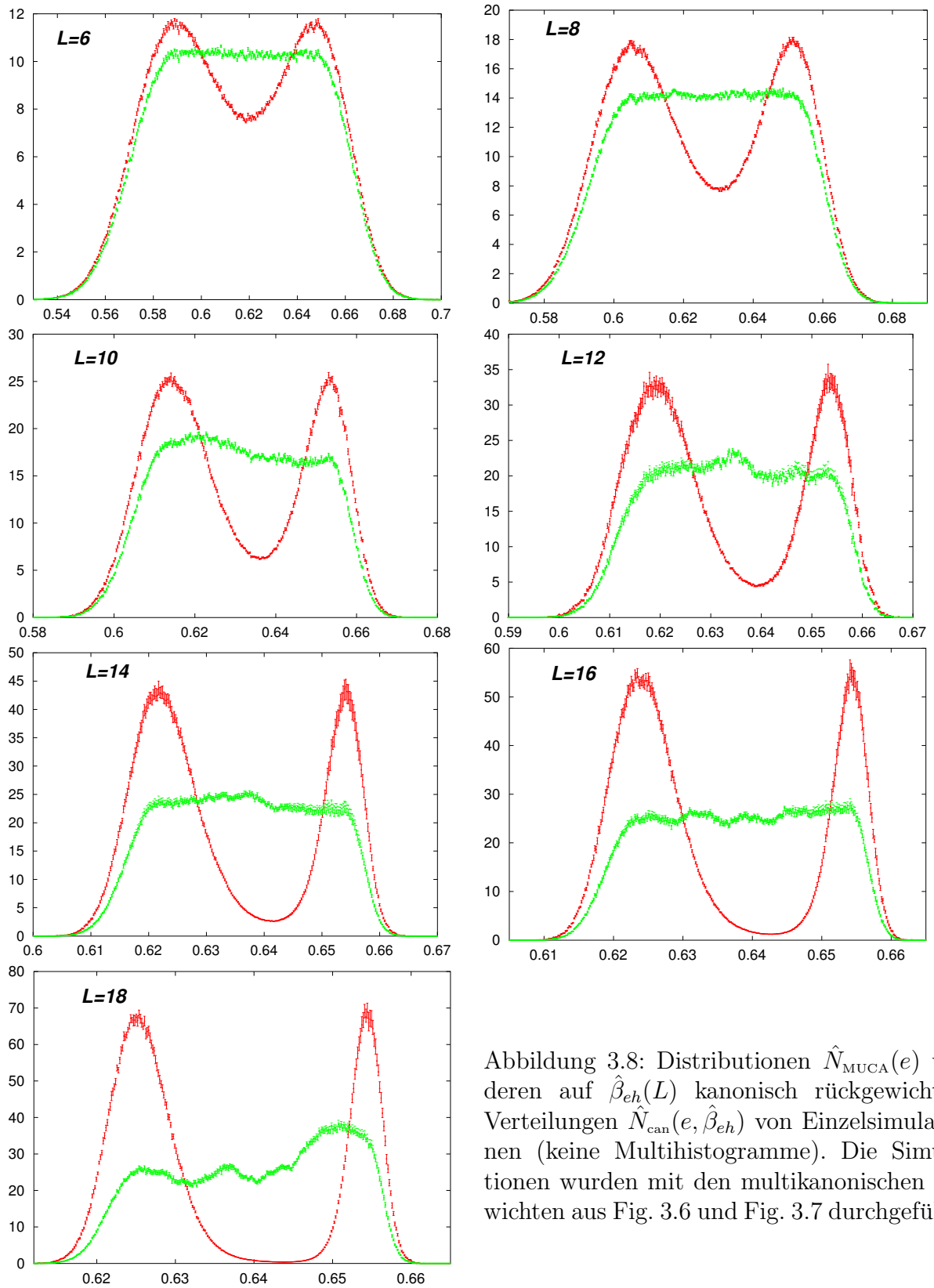


Abbildung 3.8: Distributionen  $\hat{N}_{\text{MUCA}}(e)$  und deren auf  $\hat{\beta}_{eh}(L)$  kanonisch rückgewichtete Verteilungen  $\hat{N}_{\text{can}}(e, \hat{\beta}_{eh})$  von Einzelsimulationen (keine Multihistogramme). Die Simulationen wurden mit den multikanonischen Gewichten aus Fig. 3.6 und Fig. 3.7 durchgeführt.

der großen Autokorrelationszeiten des betrachteten Systems am Phasenübergang erscheint dies unpraktikabel. Sinnvoller erscheint es, die Mobilität des Markov Prozesses zu steigern, in dem man Symmetrioperationen im Phasenraum einsetzt, unter denen die Wirkung invariant ist. In unserem Fall bietet sich eine Reflexion nach jedem kompletten Sweep an [65]. Dazu kann die Wirkung Gl. (3.15) als Realteil der Projektion von links  $U_\mu = e^{i\phi_\mu}$  auf die Summe von *Staples*<sup>11</sup>  $V_\mu$  geschrieben werden.

$$\begin{aligned} S(\phi) &= -\frac{\beta}{2} \sum_{n,\mu,\nu \neq \mu} \Re[U_\mu(n)U_\nu(n + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(n + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(n)] \\ &= -\frac{\beta}{4} \sum_{n,\mu} \Re[U_\mu(n) \cdot V_\mu(n)] \end{aligned} \quad (3.91)$$

$$\text{mit } V_\mu(n) = \sum_{\nu \neq \mu} \left\{ \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \uparrow \quad \uparrow \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \oplus \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \uparrow \quad \uparrow \\ \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \right\}. \quad (3.92)$$

In dieser Darstellung ist es offensichtlich, dass die Wirkung unter einer lokalen Reflexion von  $U_\mu(n)$  an  $V_\mu(n)$  invariant ist:

$$R : U_\mu(n) \rightarrow -U_\mu(n) + 2V_\mu(n). \quad (3.93)$$

Diese Reflexionstransformation  $R$  kann sinnvoll mehrfach angewendet werden ( $RR \neq 1$ ). Die algorithmische Umsetzung von  $R$  ist überdies simpel zu parallelisieren. Alle „gleichfarbigen“ Links, des in Fig. 3.5 angedeuteten vierdimensionalen Schachbretts können gleichzeitig upgedated werden.

In [66] wurde über einen Vergleich von  $\tau_{\text{int}} \cdot t_{\text{cpu}}$  eines  $8^4$  Systems in der Nähe des Phasenübergangs gezeigt, dass die Reflexionstransformation im Vergleich zum Mehrfachupdate eines Single-site Metropolis Algorithmus erheblich effizienter de-korreliert. Wir wählen für alle Simulationen einen dreifachen Reflexionsschritt  $R^3$  nach jedem Sweep.

### 3.3 Simulationsparameter

Mithilfe des lokalen Metropolis Algorithmus (Metro), des globalen Hybrid Monte Carlo (HMC) und dessen multikanonischer Variante (MHMC) haben wir die in Tab. 3.5 aufgelisteten Simulationen der Systeme  $V = L^4$  mit  $L = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18$  durchgeführt. Die Gesamtzahl der je Gittergröße erzeugten Konfigurationen ( $\#meas. \cdot 10^6$ ) ist größer als  $5 \cdot 10^6$ . Wir geben die Anzahl der Phasenflips ( $\#flips$ ) als Kontrollparameter für die Mobilität des Algorithmus sowie die integrierte Autokorrelation  $\tau_{\text{int}}$  für die statistische Qualität der Markovkette an. Für das größte System erhalten wir kumulativ fast 400 Phasenflips und erwarten daher eine ausreichende Genauigkeit in der Bestimmung des relativen Phasengewichts. Für HMC- und

<sup>11</sup>Unter den zum Link  $U_\mu$  gehörigen Staples verstehen wir die unvollständigen Linkprodukte (Gl. (3.92)) der 6 Plaquetten aus Fig. 3.4.

MHMC-Simulationen ist die jeweilige Trajektorienlänge  $N_{md}$  als Index angegeben.

Wie wir in [66] nach Untersuchung kleinerer Systeme ausführlich diskutiert haben, läßt sich die mittlere Akzeptanzrate des HMC sehr gut durch

$$\langle P_{acc} \rangle = \operatorname{erfc}(c(\beta)V^{\frac{1}{2}}\Delta t^2) . \quad (3.94)$$

beschreiben.  $c(\beta)$  variiert nur schwach linear mit der Kopplung  $\beta$  und kann für die Untersuchungen in der Nähe des Phasenübergangs ( $\beta \approx 1.01$ ) in guter Näherung als konstant angenommen werden. Aus der gewünschten Konstanz der optimalen mittleren Akzeptanzrate  $\langle P_{acc} \rangle^{\text{opt}} = \text{const.} \approx 65\%$  ergibt sich das Skalenverhalten

$$\Delta t \sim V^{-1/4} . \quad (3.95)$$

Ein aufwendiges Tuning der HMC-Parameter für das  $8^4$  System unter Berücksichtigung der Oszillation der Energie  $\Delta\mathcal{H}(t)$  entlang einer Trajektorie [66] legt die Simulation bei konstanter Trajektorienlänge

$$\tau = N_{md,\text{opt}}\Delta t = 1.21(5) . \quad (3.96)$$

mit  $\Delta t = 0.093$  nahe. Es empfiehlt sich daher die in Tab. 3.1 angegebenen Werte für die Schrittweite der Molekulardynamikzeit einzustellen.

L	$\Delta t$
6	0.12
8	0.093
10	0.071
12	0.060
14	0.050
16	0.045
18	0.042

Tabelle 3.1: Wahl der Simulationsparameter  $\Delta t$  für den (M)HMC Algorithmus

Der Fehler der Flipzeit  $\tau_{flip}$  ist über die Standardabweichung der mittleren Phasenwechselfdauer gegeben. Die integrierte Autokorrelationszeit ermitteln wir gemäß Gl. (3.44). Dabei konstatieren wir die Übereinstimmung der Werte  $\hat{\tau}_{\text{int},M}$  für  $M = k \cdot \hat{\tau}_{\text{int},M}$  mit  $k = 4, 6, 8$  innerhalb der Fehler (Gl. (3.45)) für alle Einzelsimulationen. Zur Illustration stellt Fig. 3.9 beispielhaft den Verlauf der Kurven  $\hat{\tau}_{\text{int},M}(t)$  für die Simulationen 46, 47 aus Tab. 3.5 dar. Die Summationsobergrenzen  $M(k)$  sind durch den Schnittpunkt von  $\hat{\tau}_{\text{int},M}(t)$  mit den Geraden  $t/k$  markiert. In Tab. 3.5 sind Werte und Fehler für  $\tau_{\text{int}}$  mit  $k = 6$  angegeben.

Die einzelnen Simulationsläufe gleicher Systemgröße  $L$  unterscheiden sich in der verwendeten Kopplung  $\beta$ , dem Typ des Algorithmus, dem verwendeten Zufallszahlengenerator, den HMC Parametern  $\Delta t$ ,  $N_{md}$  oder dem über  $\hat{\alpha}_k(e)$ ,  $\hat{\beta}_k(e)$  definierten

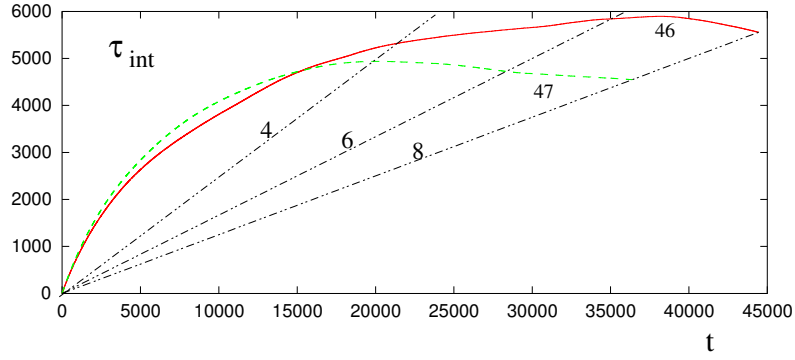


Abbildung 3.9: Die integrierte Autokorrelation  $\hat{\tau}_{\text{int},M}(t)$  der  $18^4$ -Simulationen 46, 47 aus Tab. 3.5 und die Geraden  $t/k$  für  $k = 4, 6, 8$ .

sim.	k	4	6	8
47	M	19776	28381	36437
	$\hat{\tau}_{\text{int},M}$	4944(719)	4730(825)	4555 (900)
46	M	21276	35100	44504
	$\hat{\tau}_{\text{int},M}$	5319(1567)	5850(2214)	5563(2371)

Tabelle 3.2: Selbstkonsistente Bestimmung von  $\hat{\tau}_{\text{int},M}$  in Abhängigkeit der Summationsobergrenze  $M(k)$ .

multikanonischen Potential. Die Einzelsimulationen können daher als statistisch unabhängig angesehen werden.

$L$	$\hat{\beta}_{eh}$	$e_{\text{max}1}$	$e_{\text{max}2}$	$e_{\text{min}}$	$\hat{N}_{\text{can}}(e_{\text{min}})$
6	1.00177(2)	0.58948(45)	0.64744(46)	0.62008(47)	0.6559(12)
8	1.00736(2)	0.60508(72)	0.65140(59)	0.63076(49)	0.4368(53)
10	1.00932(1)	0.61340(31)	0.65320(40)	0.63620(47)	0.2580(22)
12	1.010164(8)	0.61880(26)	0.65390(17)	0.63950(17)	0.1350(25)
14	1.010576(7)	0.62170(22)	0.65418(22)	0.64172(41)	0.0583(13)
16	1.010789(5)	0.62394(36)	0.65432(20)	0.64284(22)	0.0228(6)
18	1.010916(6)	0.62480(34)	0.65444(23)	0.64400(11)	0.0062(3)

Tabelle 3.3: Charakteristika der Multihistogramme bei gleicher Höhe der Phasenpeaks  $\hat{N}_{\text{can}}(E_{\text{max}1}, \hat{\beta}_{eh}) = \hat{N}_{\text{can}}(E_{\text{max}2}, \hat{\beta}_{eh}) = 1$ .

Zur möglichst genauen Bestimmung der Charakteristika der Energiedichte ist es sinnvoll, die Simulationen gleicher Systemgröße zu einem Multihistogramm zusammenzufassen. Fig. 3.10 zeigt die auf das jeweilige  $\hat{\beta}_{eh}(L)$  rückgewichteten kanonischen Energiedichten im Vergleich. Der Übersichtlichkeit halber wurde auf die Darstellung der Fehlerbalken eines jeden Bins verzichtet.

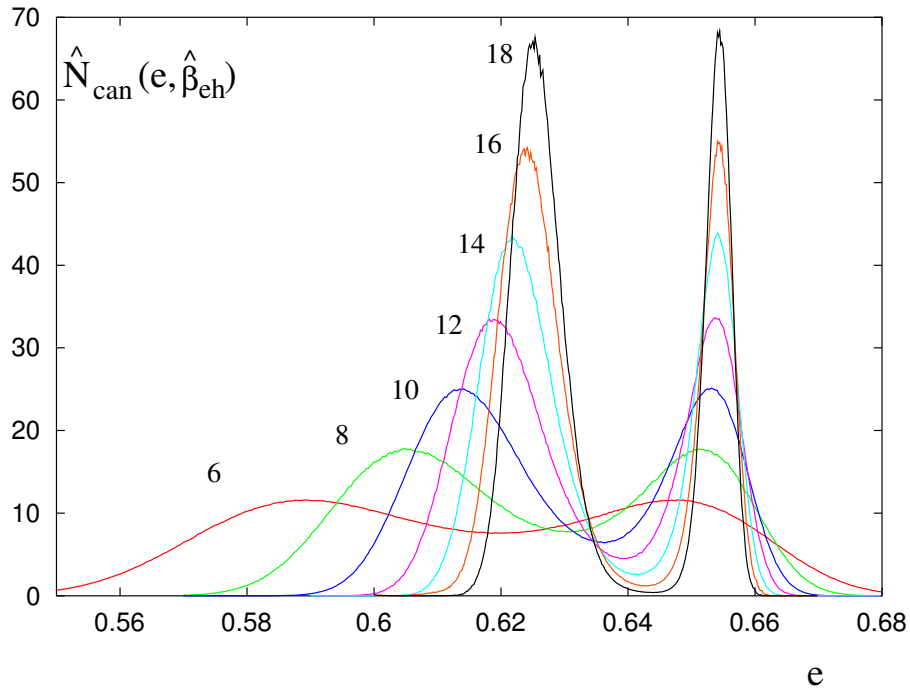


Abbildung 3.10: Multihistogramme bei  $\hat{\beta}_{eh}(L)$  wie in Tab. 3.3 gegeben.

### 3.4 Performanz

Die in Tab. 3.5 aufgelisteten Flip- und Autokorrelationszeiten spiegeln die Überlegenheit des MHMC gegenüber der kanonischen Simulation (Metro und HMC) wieder. Am Beispiel des  $16^4$  Systems als größtem System, für welches wir sowohl kanonische als auch multikanonische Simulationen durchgeführt haben, illustriert der Vergleich der Zeitserie die unterschiedliche Mobilität von Metro und MHMC (Fig. 3.11).

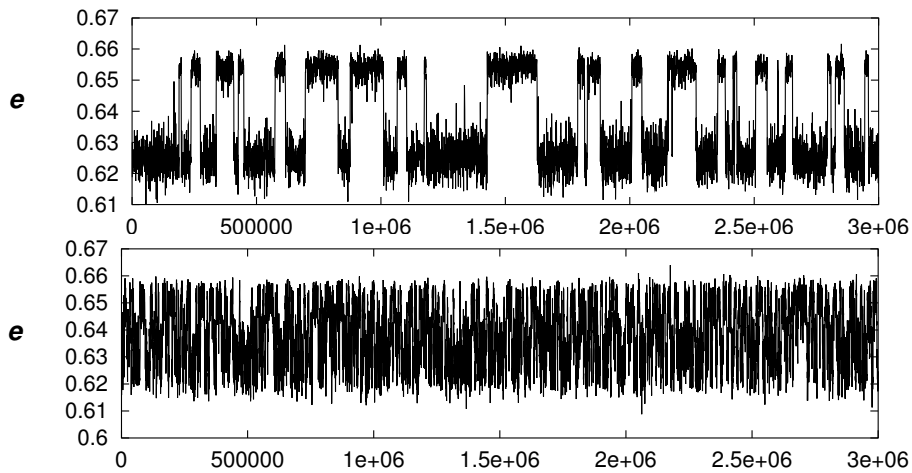


Abbildung 3.11: Die Zeitserie des  $16^4$  Systems bei  $\beta = 1.010800$  für den kanonischen Metropolis Algorithmus Metro (oben) und den MHMC (unten).

Während der in Kapitel 3.2.4 vorgestellte Metropolis Algorithmus die Komplexität

$$t_{\text{Metro}} \sim V , \quad (3.97)$$

besitzt, erfordert die aus Gl. (3.95) und Gl. (3.96) resultierende Anpassung der Trajektorienlänge für den HMC einen um  $V^{1/4}$  erhöhten Berechnungsaufwand für einen globalen Sweep. Ein zusätzlicher Mehraufwand für den MHMC entsteht durch die nach jedem Mikroschritt der Molekulardynamik notwendige Energiesumme. Dies sind  $N_{md}$  anstatt 2 globale Summationen und damit ebenfalls von der Komplexität  $V^{5/4}$ . Damit skaliert der Rechenaufwand des MHMC sowie der des HMC (mit unterschiedlichen Faktoren) gemäß

$$t_{(\text{M})\text{HMC}} \sim V^{5/4} . \quad (3.98)$$

Die in [66] für  $L = 6, 8, 10, 12, 14, 16$  je Sweep gemessenen Rechenzeiten bestätigen den somit zu erwartenden linearen Verlauf  $t_{\text{MHMC}}/t_{\text{Metro}} \sim L = V^{1/4}$ . Unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Komplexität beider Algorithmen soll nun die Effizienz hinsichtlich der Erzeugung statistisch unabhängiger Konfigurationen untersucht werden. Die dazu benötigte Rechenzeit beträgt  $2\tau_{int} \cdot t$ .

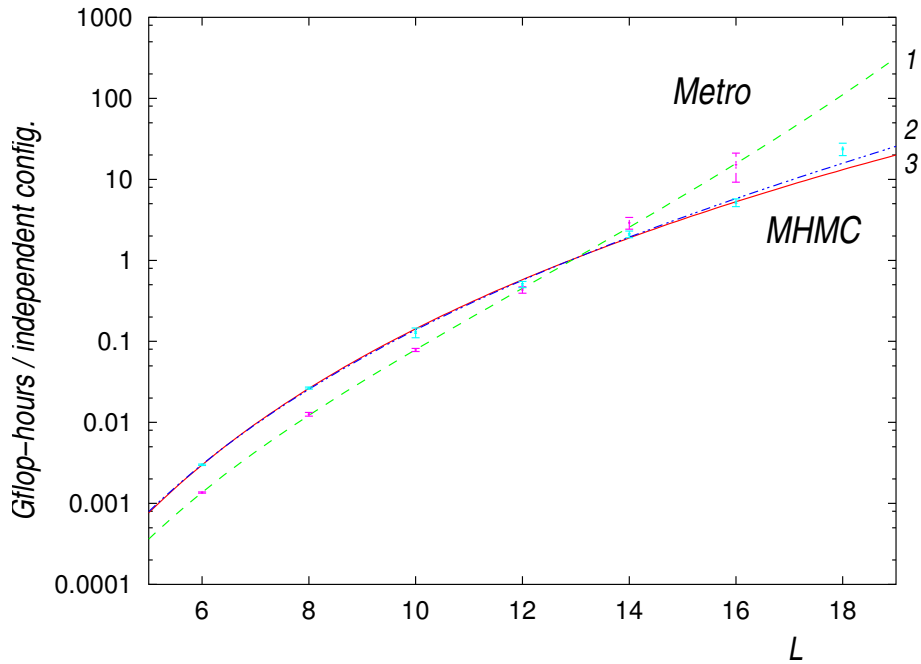


Abbildung 3.12: Berechnungsaufwand in Gflop-Stunden je statistisch unabhängiger Konfiguration für den Metro- und den MHMC-Algorithmus.

In Fig. 3.12 ist zu erkennen, dass für Systeme  $L > 12$  der MHMC effizienter ist als der Metropolis Algorithmus. Die Kurve 1 entspricht dem Resultat eines exponentiellen Fits an die integrierte Autokorrelationszeit des Metro Algorithmus  $\tau_{int}^{\text{Metro}} = a L^b e^{2cL^3}$ . Die beiden anderen Kurven stellen Fits an  $\tau_{int}^{\text{MHMC}}$  dar. Kurve 2 läßt ebenfalls ein exponentielles Anwachsen zu  $\tau_{int}^{\text{MHMC}} = \tilde{a} L^{\tilde{b}} e^{2\tilde{c}L^3}$ , während Kurve

3 das Fitresultat an ein Monom  $\tau_{int}^{\text{MHMC}} = p L^q$  darstellt. Die Nähe der Fitfunktionen 2 und 3 sowie der gegenüber  $c = 0.000328(32)$  um einen Faktor 10 kleinere Wert  $\tilde{c} = 0.00003(3)$  zeigen, dass ein eventuell noch verbleibendes exponentielles Anwachsen der integrierten Autokorrelation des MHMC stark unterdrückt ist. Unter Auslassung der suboptimalen<sup>12</sup>  $18^4$ -Simulation (siehe Fig. 3.8) sind die beiden Kurven im Rahmen der Fehler deckungsgleich. Wir können daher für den MHMC eine qualitative Unterdrückung des exponentiellen SCSD feststellen.

## Parallelisierbarkeit des MHMC

Wir wollen abschließend das Skalieren der parallelen Implementation des MHMC auf zwei uns zur Verfügung stehenden Parallelrechnern untersuchen. Tab. 3.4 stellt einige wesentliche Spezifika der beiden Alpha-Prozessor Rechner Cray T3E-1200 in Jülich und des Wuppertaler Clusterrechners ALiCE zusammen. In beiden Fällen wurde das Programm in Fortran 90 und MPI, dem Standard *message passing interface* geschrieben. Alle Berechnungen sind in 64 Bit Genauigkeit durchgeführt.

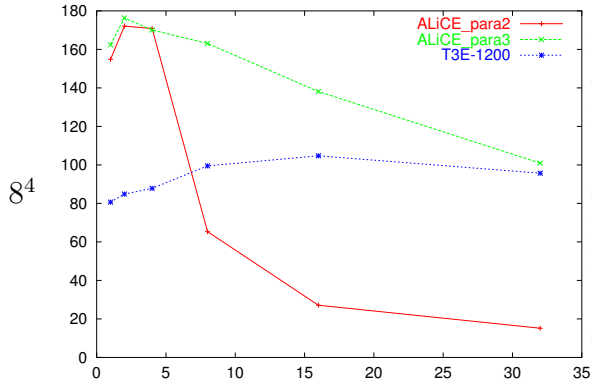
	T3E-1200	ALiCE
Prozessor	21164 600MHz	21264 616Mhz
peak performance	1200 MFLOPS	1232 MFLOPS
cache L1	8 kB	64 kB
cache L2	96 kB + streams	2 MB
Speicher	512 MB	256 MB
MPI-Latenz	14 $\mu$ s	27 $\mu$ s / < 20 $\mu$ s
max. Netzdurchsatz	2· 500 MB/s	2· 160 MB/s
Betriebssystem	UNICOS/mk	Linux
Fortran Compiler	CF90	fort

Tabelle 3.4: Maschinenspezifische Daten: Cray T3E and ALiCE

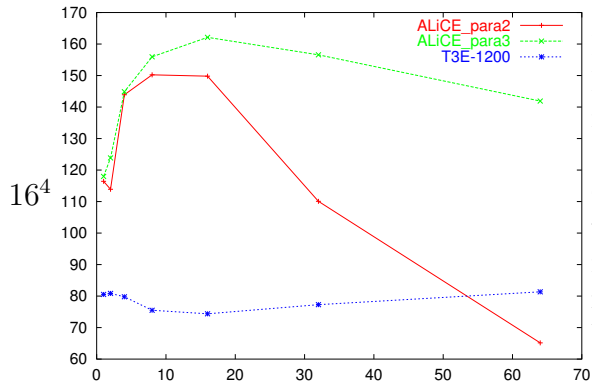
Die Parallelisierung des Algorithmus' durch Unterteilen des vierdimensionalen Raumzeitgitters  $V = L_x \cdot L_y \cdot L_z \cdot L_t$  in  $p = p_x \cdot p_y \cdot p_z$  lokale Subvolumina der Größe  $V_{\text{lokal}} = L_x/p_x \cdot L_y/p_y \cdot L_z/p_z \cdot L_t$  weist zwei unterschiedliche Skalen auf. Während die Berechnungszeit eines lokalen Updates vom Volumen  $V_{\text{lokal}}$  abhängt, nimmt die Zeit für Interprozessorkommunikation proportional zum Rand des lokalen Volumens  $\partial V_{\text{lokal}}$  zu. Die in Tab. 3.13 dargestellten Performanzmessungen zeigen deutlich, dass der Clustercomputer ALiCE mit Myricom Netzwerk unter Verwendung der Kommunikationssoftware Parastation 3 für unsere Zwecke geeigneter ist. Entscheidend für die Skalierbarkeit unseres Problems ist die Größe des Cache-Speichers sowie die zur Initialisierung eines jeden Kommunikationsprozesses notwendige Latenzzeit. Während die hohe Latenz von Parastation 2 (27 $\mu$ s) die Effizienz mit steigender Prozessorzahl  $p$  deutlich absinken lässt, ist dieser Effekt unter Parastation 3 mit einer Latenz von <20 $\mu$ s in Fig. 3.13 erkennbar abgeschwächt. Bei einer sinnvollen

<sup>12</sup>Die Simulation 47 aus Tab. 3.5 ist insofern nicht optimal, als dass das Verhältnis  $N_{\text{max}}/N_{\text{min}}$  der multikanonischen Energiedichte für  $e_{\text{max},1} < e < e_{\text{max},2}$  mit  $\approx 1.7$  vergleichsweise groß ist.

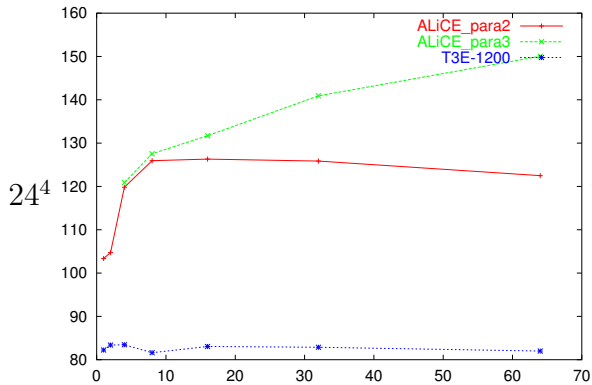
Wahl von  $p$  erreichen wir gegenüber der T3E eine um einen Faktor 1.7 bis 2 höhere Performanz. Auf beiden Rechnern erhalten wir gute Skalierbarkeit, welche es uns ermöglicht, die aufwendigen, in Tab. 3.5 dokumentierten Simulationen durch Verwendung von  $8 \leq p \leq 64$  Prozessoren in vertretbarem Zeitrahmen durchzuführen.



Der Level 2 *cache* der T3E mit 96 kB erlaubt einen schnellen Zugriff auf die Impulse und lokalen Eichfelder der Molekulardynamik erst ab  $p \geq 16$ . Auf ALiCE passt das lokale Gitter schon bei einer Verteilung auf zwei Prozessoren in den 2 MB großen cache. Auf beiden Maschinen läßt der höhere Kommunikationsaufwand die Effizienz mit steigender Prozessorenzahl  $p$  sinken.



Das Konkurrieren von begrenztem cache und Kommunikationsaufwand spiegelt sich in einem lokalen Maximum der Effizienz von ALiCE bei  $p = 16$  wieder. Für die T3E ist ein solcher cache-Effekt erst für  $p > 256$  zu erwarten. Der Geschwindigkeitsvorteil von ALiCE nimmt mit steigendem  $p$  wegen des langsameren Interprozessornetzwerks ab, liegt jedoch bei  $p = 64$  immer noch bei  $\approx 1.7$ .



Die optimale Anzahl von Prozessoren steigt mit dem Volumen. Auf ALiCE ist es sinnvoll 64 Prozessoren zu verwenden. Die Effizienz der T3E verbleibt nahezu konstant.

Abbildung 3.13: Performanz des MHMC je Prozessor in Mflop/s in Abhängigkeit der verwendeten Anzahl an Prozessoren  $p$ .



L		$\beta$	algorithm	#meas.	#flips	$\tau_{flip}$	$\tau_{int}$
6	1	1.001700	Metro	11.20	37971	295(2)	104(2)
	2	1.001500	Metro	9.80	32579	300(2)	104(2)
	3	1.001600	HMC <sub>10</sub>	2.48	6575	376(4)	130(5)
	4	1.001772	MHMC <sub>10</sub>	4.90	14918	328(2)	102(2)
8	5	1.007370	Metro	2.79	3471	800(10)	304(16)
	6	1.007370	HMC <sub>2</sub>	1.25	420	2950(130)	1256(196)
	7	1.007370	HMC <sub>4</sub>	1.25	808	1530(50)	649(73)
	8	1.007370	HMC <sub>6</sub>	1.25	1018	1220(40)	450(42)
	9	1.007370	HMC <sub>8</sub>	1.25	1205	1070(30)	390(33)
	10	1.007370	HMC <sub>9</sub>	1.25	1273	970(20)	339(27)
	11	1.007370	HMC <sub>10</sub>	1.25	1301	950(20)	328(26)
	12	1.007370	HMC <sub>11</sub>	1.25	1263	980(30)	345(28)
	13	1.007370	HMC <sub>12</sub>	1.25	1249	990(30)	363(30)
	14	1.007370	HMC <sub>13</sub>	1.25	1308	950(20)	355(29)
	15	1.007370	HMC <sub>14</sub>	1.25	1231	1000(30)	382(33)
	16	1.007370	HMC <sub>16</sub>	1.25	1244	1000(30)	399(35)
	17	1.007370	HMC <sub>13</sub>	1.44	1494	960(20)	379(30)
	18	1.007337	MHMC <sub>13</sub>	6.36	8310	764(7)	240(7)
10	19	1.009300	Metro	4.37	2094	2080(50)	784(52)
	20	1.009400	Metro	7.44	3714	2000(30)	775(35)
	21	1.009300	HMC <sub>9</sub>	1.00	358	2760(140)	948(144)
	22	1.009300	HMC <sub>11</sub>	1.00	382	2590(120)	897(132)
	23	1.009300	HMC <sub>15</sub>	1.00	420	2360(120)	1060(170)
	24	1.009300	HMC <sub>17</sub>	1.00	418	2370(110)	831(118)
	25	1.009300	HMC <sub>19</sub>	1.00	398	2490(120)	894(132)
	26	1.009300	MHMC <sub>17</sub>	2.61	1790	1450(30)	412(56)
12	27	1.010143	Metro	3.62	621	5810(240)	2406(304)
	28	1.010143	Metro	5.88	994	5900(180)	2058(189)
	39	1.010143	Metro	1.75	345	5040(300)	2576(486)
	30	1.010143	Metro	1.87	334	5550(310)	2098(345)
	31	1.010143	MHMC <sub>20</sub>	1.30	515	2510(100)	734(86)
	32	1.010143	MHMC <sub>18</sub>	2.18	868	2500(80)	689(60)
14	33	1.010598	Metro	3.90	225	17200(1100)	5980(1150)
	34	1.010600	Metro	6.52	407	16000(840)	7480(1240)
	35	1.010568	HMC <sub>24</sub>	0.57	26	17000(3800)	12500(9000)
	36	1.010568	MHMC <sub>24</sub>	0.83	192	4240(260)	1070(190)
	37	1.010568	MHMC <sub>24</sub>	3.80	885	4280(140)	1380(130)
16	38	1.010753	Metro	5.42	75	70600(9700)	22900(9000)
	39	1.010800	Metro	5.55	97	57000(5800)	25400(6800)
	40	1.010753	MHMC <sub>26</sub>	0.60	66	8220(860)	1980(560)
	41	1.010753	MHMC <sub>26</sub>	0.63	81	7010(770)	1850(500)
	42	1.010753	MHMC <sub>20</sub>	1.63	204	7640(410)	1770(290)
	43	1.010753	MHMC <sub>20</sub>	3.39	452	7390(300)	1800(200)
18	44	1.010900	MHMC <sub>28</sub>	0.38	13	22300(7300)	9900(7900)
	45	1.010900	MHMC <sub>28</sub>	0.63	20	26200(5600)	10000(6800)
	46	1.010900	MHMC <sub>28</sub>	0.98	60	15500(2600)	5900(2200)
	47	1.010900	MHMC <sub>28</sub>	3.79	300	12400(600)	4730(830)

Tabelle 3.5: Parameter sowie  $\tau_{flip}$  und  $\tau_{int}$  aller Simulationen.

# Kapitel 4

## Finite Size Scaling

Ein grundlegendes Problem bezüglich der Untersuchung der Ordnung eines Phasenübergangs ergibt sich dadurch, dass Singularitäten in numerischen Simulationen nicht darstellbar sind. Ein Phasenübergang erster Ordnung ist durch eine Singularität in der ersten Ableitung der freien Energie des idealisierten unendlich ausgedehnten Systems charakterisiert. Wegen der grundsätzlichen Endlichkeit der Ressource Computerzeit können wir nur endlich viele Freiheitsgrade auf endlich großen Gittern numerisch behandeln, so dass Diskontinuitäten glatt und Divergenzen zu endlichen Extrema werden. Signaturen eines Phasenübergangs schwach erster Ordnung erscheinen selbst auf großen Gittern ununterscheidbar von einem Übergang zweiter Ordnung. Eine quantitative Untersuchung des Skalenverhaltens charakteristischer Observablen versucht hier Abhilfe zu schaffen und ist Gegenstand dieses Kapitels.

Wir stellen in diesem Kapitel die Ergebnisse unserer *Finite-size-scaling* (FSS) Analyse vor, deren grundlegender Ansatz zunächst nur heuristisch motiviert ist. Selbstkonsistenz der in diesem Rahmen gewonnenen Resultate und deren Übereinstimmung mit störungstheoretischen Berechnungen in Kapitel 5 jenseits des Ansatzes von Borgs-Kotecky werden unsere Arbeitshypothese eines Phasenübergangs erster Ordnung bestätigen.

### 4.1 Borgs-Kotecky Ansatz

Borgs und Kotecky haben in ihren Arbeiten [67, 68, 69] für einige Spinmodelle mit einem Phasenübergang stark erster Ordnung nachgewiesen, dass deren Zustandssumme bei endlichem Volumen und periodischen Randbedingungen unter Vernachlässigung von exponentiellen Grenzflächenkorrekturen als Summe von  $Q$  Zustandfunktionen

$$Z(\beta, L) \approx \sum_{q=1}^Q \exp(F_q) \quad (4.1)$$

geschrieben werden kann. Dabei ist  $Q$  die Anzahl der koexistierenden Phasen. Eine heuristische Ausweitung des Borgs-Kotecky (BK) Ansatzes auf Phasenübergänge

schwach erster Ordnung ist in [70] für den Fall des 3dim 3-Zustände-Potts Modells gezeigt. Motiviert durch dieses Beispiel einer breiteren Anwendbarkeit der BK Theorie setzen wir hier für die U(1) Gittereichtheorie an:

$$Z(\beta, L) = e^{F(\beta, L)} \quad (4.2)$$

$$= [e^{Vf_1(\beta, L) + \log(X)} + e^{Vf_2(\beta, L)}] [1 + \mathcal{O}(e^{-L/L_0})] . \quad (4.3)$$

Die Funktionen  $f_1(\beta, L)$  und  $f_2(\beta, L)$  stehen für die „metastabilen“ freien Energiedichten der Coulomb- bzw der Confined Phase. Das relative Phasengewicht der Energieverteilung im thermodynamischen Limes ist durch den Asymmetrieparameter  $X$  beschrieben.  $L_0 < \infty$  beschreibt die Längenskala der exponentiellen Abweichung von der exakten Zustandssumme.

## 4.2 Messung der Kumulanten

Für eine quantitative Finite-size-scaling Analyse eignet sich die Energiedichteverteilung Gl. (3.20) oder äquivalent dazu die das System vollständig beschreibende Zustandssumme weniger. Wir betrachten vielmehr abgeleitete Observablen der Zustandssumme

$$Z(\beta, L) = \int \rho(e, L) e^{\beta \tilde{V} e} de = e^{\tilde{V} F(\beta, L)} , \quad (4.4)$$

in Abhängigkeit der Plaquette Energie  $e = E/\tilde{V}$ , mit  $\tilde{V} = 6L^4$ .

Basierend auf den statistischen Momenten der Plaquette Energie

$$\langle e^n \rangle = \frac{(-1)^{n+1}}{\tilde{V}^n} \frac{1}{Z} \frac{\partial^n Z}{\partial \beta^n} \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial \langle e^n \rangle}{\partial \beta} = \tilde{V} (\langle e \rangle \langle e^n \rangle - \langle e^{n+1} \rangle) , \quad (4.6)$$

untersuchen wir die spezifische Wärme und die beiden Binder Kumulanten

$$\frac{1}{\beta^2} C_v(\beta, L) = -\frac{\partial^2}{\partial \beta^2} F(\beta, L) = \tilde{V} (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2) \quad (4.7)$$

$$U_2(\beta, L) = 1 - \frac{\langle e^2 \rangle}{\langle e \rangle^2} \quad (4.8)$$

$$U_4(\beta, L) = \frac{1}{3} \left( 1 - \frac{\langle e^4 \rangle}{\langle e^2 \rangle^2} \right) , \quad (4.9)$$

sowie deren Ableitungen

$$\frac{\partial C_v}{\partial \beta} = \tilde{V} \left[ 2\beta (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2) - \beta^2 \tilde{V} (\langle e^3 \rangle - 3 \langle e^2 \rangle \langle e \rangle + 2 \langle e \rangle^3) \right] \quad (4.10)$$

$$\frac{\partial U_2}{\partial \beta} = \frac{\tilde{V}}{\langle e \rangle^3} \left( \langle e^3 \rangle \langle e \rangle + \langle e^2 \rangle \langle e \rangle^2 - 2 \langle e^2 \rangle^2 \right) \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial U_4}{\partial \beta} = \frac{\tilde{V}}{3 \langle e^2 \rangle^3} \left( \langle e^5 \rangle \langle e^2 \rangle + \langle e^4 \rangle \langle e^2 \rangle \langle e \rangle - 2 \langle e^4 \rangle \langle e^3 \rangle \right) . \quad (4.12)$$

Zusätzlich zu diesen Standard Kumulanten betrachten wir auch höhere Ableitungen der Dichte der freien Energie  $f(\beta, L)$

$$(-1)^{n+1} \kappa_n(\beta, L) = \frac{\partial^n f(\beta, L)}{\partial \beta^n} . \quad (4.13)$$

Während die ersten drei Ableitungen mit den Zentralmomenten  $\mu_n = \tilde{V}^{n-1} \langle (e - \langle e \rangle)^n \rangle$  übereinstimmen, ergeben sich für  $\kappa_n$ ,  $n > 3$  nicht lineare Kombinationen. Infolge statistischen Rauschens, welches mit der Ordnung der involvierten Momente zunimmt, beziehen wir die Ableitungen nur bis einschließlich  $\kappa_6$  in unsere Analyse ein. Zusätzlich zur spezifischen Wärme, den beiden Binder Kumulanten und deren Ableitungen untersuchen wir daher

$$\kappa_3 = \mu_3 \quad (4.14)$$

$$\kappa_4 = \mu_4 - 3\tilde{V}\mu_2^2 \quad (4.15)$$

$$\kappa_5 = \mu_5 - 10\tilde{V}\mu_2\mu_3 \quad (4.16)$$

$$\kappa_6 = \mu_6 - 15\tilde{V}\mu_2\mu_4 - 10\tilde{V}\mu_3^2 + 30\tilde{V}^2\mu_2^3 . \quad (4.17)$$

Diese insgesamt 10 Observablen sind bezüglich der Plaquette Energie  $e$  algebraisch unabhängig<sup>1</sup>. In einer Scaling-Analyse untersuchen wir diese Kumulanten durch Umgewichtung als Funktion der Kopplung  $\beta$  und betrachten das Skalieren von Charakteristika  $(\beta_\kappa, \kappa)$  für verschiedene Systemgrößen  $L = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18$ .

Grundsätzlich lässt sich über die Wahl eines beliebigen charakteristischen Punktes der Kurven  $\kappa(\beta)$  eine pseudokritische Kopplung  $\beta_T = \beta_\kappa(\infty)$  definieren, derart dass

$$\beta_\kappa(L) = \beta_T + g_\kappa(L), \quad \text{mit } \lim_{L \rightarrow \infty} g_\kappa(L) = 0 \quad (4.18)$$

Lokale Extrema  $(\bar{\beta}_\kappa, \bar{\kappa})$  mit  $\partial_\beta \kappa(\beta)|_{\beta=\bar{\beta}} = 0$  sind mögliche charakteristische Punkte. Je näher  $\bar{\beta}_\kappa(L)$  bei  $\beta_T$  für ein betrachtetes  $L$  liegt, desto besseres Konvergenzverhalten erwarten wir für die Korrektur  $g_\kappa$ . Stehen mehrere lokale Extremstellen  $\bar{\beta}_{ext,r}$  zur Auswahl, wählen wir aus diesem Grund  $\max\{\bar{\beta}_{ext,r}\}$ <sup>2</sup>.

Wegen der statistischen Unabhängigkeit kombinieren wir die Einzelsimulationen gleicher Systemgröße (Tab. 3.5) nicht zu einem Multihistogramm, sondern verfahren zur Bestimmung des Extremums der Kumulante  $\kappa$  für die jeweilige Gittergröße  $L$  in zwei Schritten. Zuerst bestimmen wir  $(\bar{\beta}^{(i)}, \bar{\kappa}^{(i)})$  für jeden Simulationslauf getrennt. Den Fehler  $\Delta\bar{\kappa}^{(i)}$  bzw.  $\Delta\bar{\beta}^{(i)}$  ermitteln wir mit Hilfe einer Jackknife-Analyse bei Unterteilung in 10 Blöcke. Das gemittelte Extremum  $(\bar{\beta}, \bar{\kappa})$  aller Simulationen bei gleichem  $L$  und dessen Fehler erhalten wir per  $\chi^2$ -Fit der  $(\bar{\beta}^{(i)}, \bar{\kappa}^{(i)})$  an eine Konstante. Dies

<sup>1</sup> $\kappa_2 = \mu_2 = C_v/\beta^2$  bringt aus diesem Grund keine neue Erkenntnis.  $\kappa_1 = \langle e \rangle$  werden wir in Form einer neuen Observable in Kapitel 4.3.1 gesondert studieren.

<sup>2</sup>Inspektion der Extrema zeigt, dass bei endlichem  $L$  gilt:  $g_\kappa(L) < 0$  für alle betrachteten Kumulanten.

entspricht einer Gewichtung der Einzelsimulationen mit  $w_i = 1/(\Delta\bar{\kappa}^{(i)})^2$  beziehungsweise  $w_i = 1/(\Delta\bar{\beta}^{(i)})^2$ .

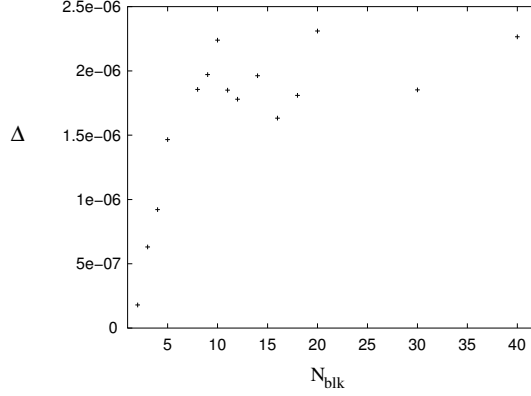


Abbildung 4.1: Jackknife Fehler der Simulation 39 aus Tab. 3.5 in Abhängigkeit der Blockanzahl  $N_{blk}$ .

Wir untersuchen zunächst am Beispiel der Simulation 39 aus Tab. 3.5 das Verhalten des Fehlers in Abhängigkeit von der Anzahl der Blöcke  $N_{blk}$  und damit auch von der Samplelänge  $N - N/N_{blk}$ . In der Suche nach dem lokalen Extremum wählen wir die Schrittweite in  $\beta$  mit  $1 \cdot 10^{-7}$  um mindestens eine Größenordnung kleiner, als das Plateau des Jackknife-Fehlers für den „genauesten“ Operator. Wir erkennen am Beispiel des Maximums der spezifischen Wärme von Gl. (4.7) in Fig. 4.1 den Anstieg des Jackknife-Fehlers bis zu einem Plateau mit stärkeren Schwankungen ab  $N_{blk} \approx 9$ . Dementsprechend wählen wir für alle späteren Analysen  $N_{blk} = 10$ .

Im Folgenden zeigen wir exemplarisch alle gemessenen Kumulanten  $\kappa(\beta)$  der Simulation 47 aus Tab. 3.5 in einem für die Extrema relevanten Kopplungsbereich. Dabei ist der Übersichtlichkeit halber nur der Jackknife-Fehlerbalken jedes zwanzigsten Datenpunktes eingezeichnet. Die tatsächlich verwendete Genauigkeit beträgt  $\Delta\beta = 3 \cdot 10^{-7}$ . Das am weitesten rechts liegende Extremum der in Fig. 4.2 und Fig. 4.3 dargestellten Kumulanten  $\kappa(\beta)$  wird zur Berechnung herangezogen.

Ziehen wir die anderen Simulationen bei  $L = 18$  (siehe Tab. 3.5) ebenfalls hinzu, so erhalten wir exemplarisch für die spezifische Wärme die in Fig. 4.4 dargestellten Extrema  $(\bar{\beta}^{(i)}(C_v/\beta^2), \tilde{V}^{-1} \cdot \overline{C_v/\beta^{2(i)}})$  für  $i = 1, 2, 3, 4$  entsprechend den Simulationen 44,46,47,45. Das per  $\chi^2$ -Fit erhaltene Mittel ist als 5. Datenpunkt dargestellt. Analog verfahren wir mit den anderen Kumulanten und Gittergrößen.

Wir konstatieren paarweise Übereinstimmung (im Rahmen der Einzelfehler) der Kopplungen  $\bar{\beta}^{(i)}(\kappa)$  und Kumulanten  $\bar{\kappa}^{(i)}$  für die jeweiligen Gittergrößen und tabellieren die Mittelwerte in den Tabellen 4.6, 4.7, 4.8 und 4.9. Diese Übereinstimmung gilt ohne erkennbare systematische Effekte unabhängig vom verwendeten Algorithmus.

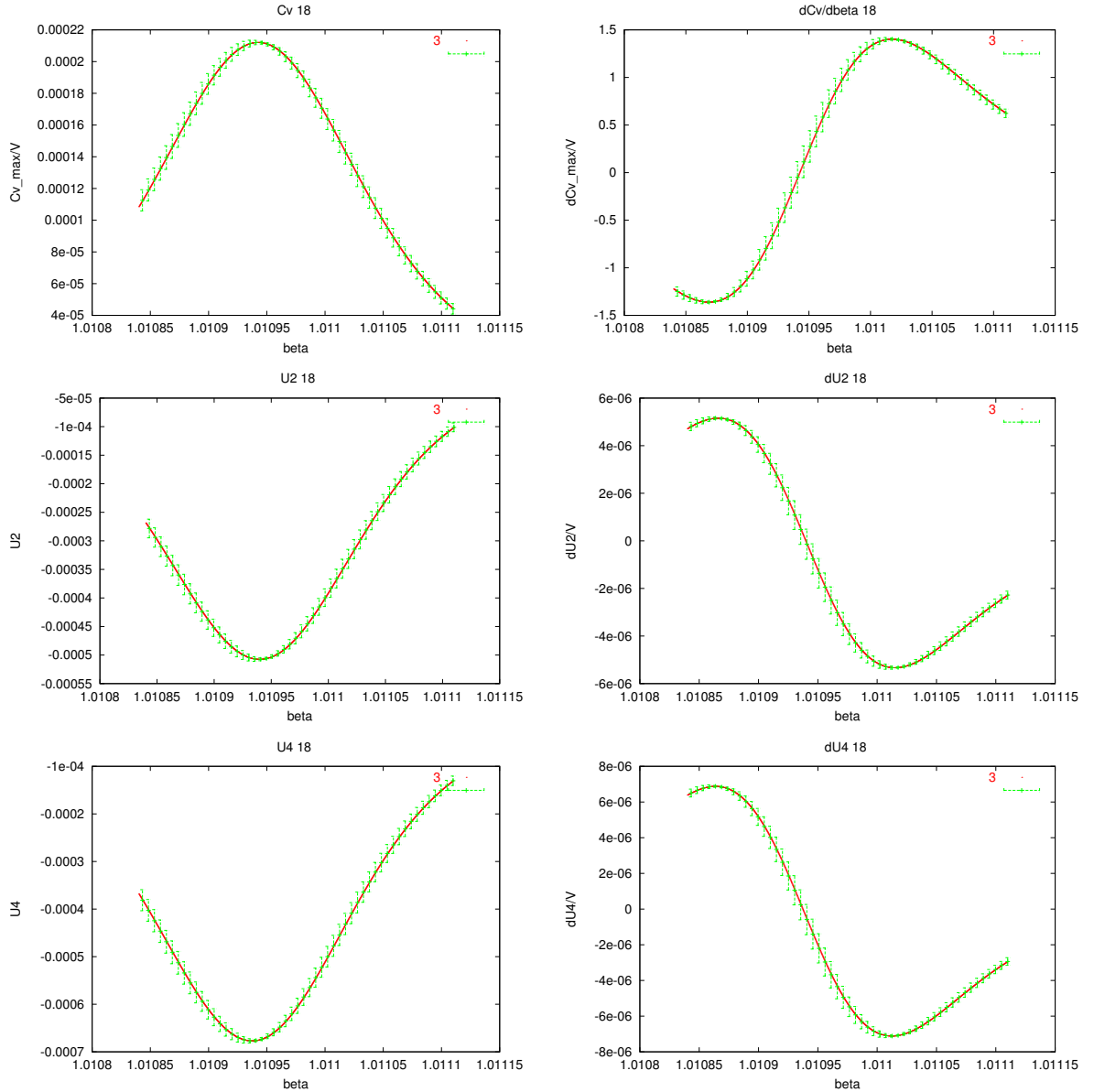


Abbildung 4.2: Werte der Kumulanten  $C_v$ ,  $U_2$ , und  $U_4$  (links), sowie deren Ableitungen  $\partial_\beta C_v$ ,  $\partial_\beta U_2$  und  $\partial_\beta U_4$  umgewichtet auf 1000 verschiedene Werte der Kopplung im Intervall  $1.010803 < \beta < 1.01112$ .

mus zur Erzeugung der Konfigurationen Metro, HMC bzw MHMC. Die Kopplungen der Tabellen 4.6 und 4.7 stimmen vollständig mit den Messungen bei  $L = 6, 8, 10, 12$  von [24]<sup>3</sup> überein. Wir erhalten ebenso perfekte Übereinstimmung mit nichtpublizierten Messungen von  $\bar{\beta}^{(i)}(C_v/\beta^2)$  auf Gittern der Größe  $L = 6, 8, 10, 12, 14, 16$  [44]. Bei den Kumulanten selbst ist die paarweise Übereinstimmung im Rahmen der Fehler mit den Fremdmessungen nur teilweise gegeben. Insbesondere zur Messung bei

<sup>3</sup>In der zitierten Publikation wurden sämtliche Kumulanten für die Systemgrößen  $L = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12$  untersucht.

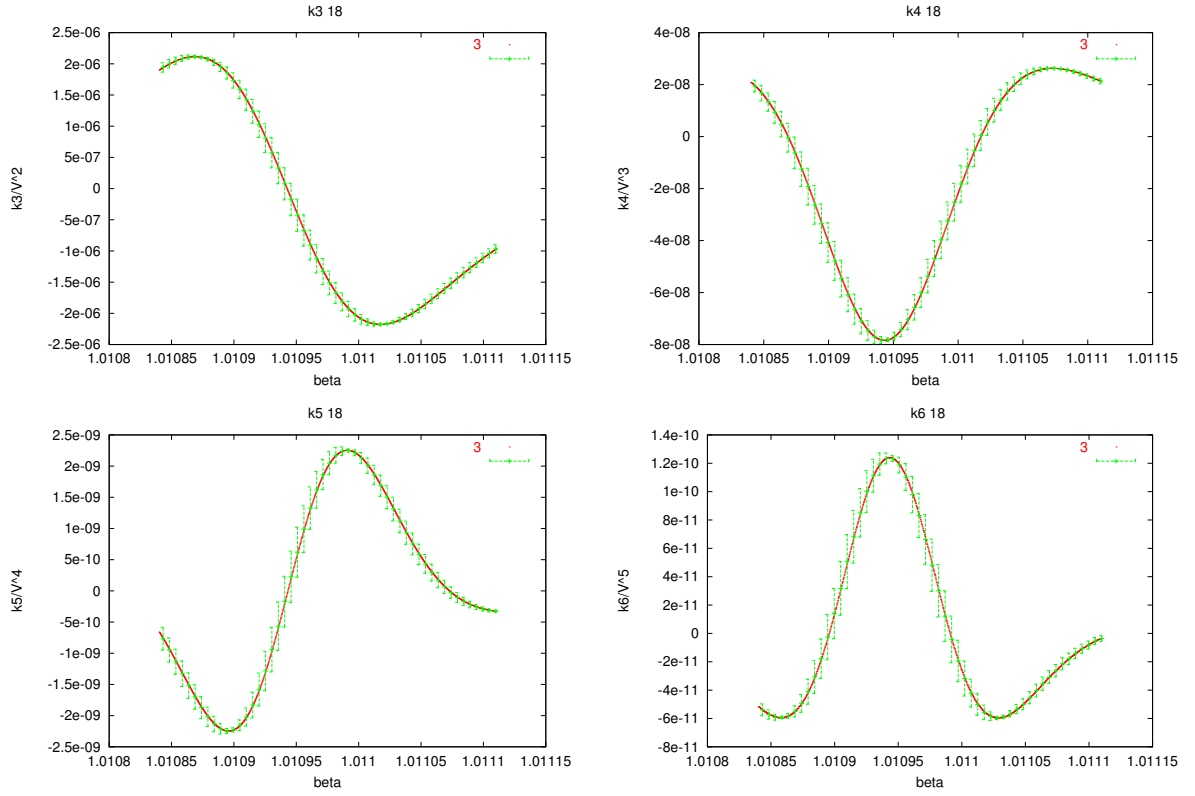


Abbildung 4.3: Werte der Kumulanten  $\kappa_3, \kappa_4, \kappa_5$  und  $\kappa_6$ , über dem Intervall  $1.01083 < \beta < 1.01112$ .

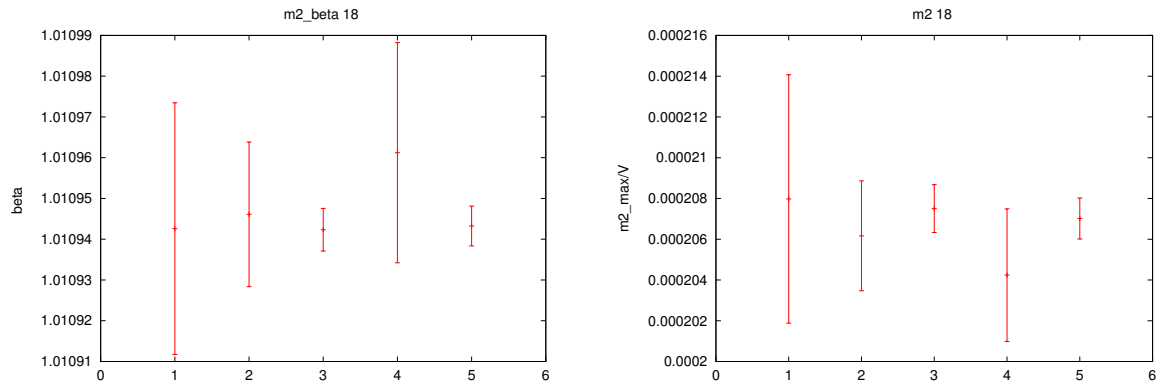


Abbildung 4.4: Kopplungen  $\bar{\beta}^{(i)}(C_v/\beta^2)$  und Kumulanten  $\tilde{V}^{-1} \cdot \overline{C_v/\beta^2}^{(i)}$  der Simulationen 44,46,47,45 sowie deren Mittelwert (5. Datenpunkt).

$L = 12$  aus [24] gibt es Inkompatibilitäten. Ebenso stellen wir leichte Abweichungen in  $\bar{C}_v$ ,  $\bar{U}_2$  und  $\bar{U}_4$  für das kleinste Gitter  $L = 6$  fest <sup>4</sup>.

<sup>4</sup>Ohne Kenntnis der Simulationsdetails der betreffenden Fremdmessungen können wir dazu keine weiteren Angaben machen. Eine typische Fehlerquelle hoch präziser Feldtheorie-Messungen liegt in der Erzeugung der in unserem Fall benötigten, extrem langen Pseudozufallszahlenketten der Länge  $\mathcal{O}(10^{12})$ . In [44] ist eine signifikante Abhängigkeit der Messungen vom verwendeten Zu-

### 4.2.1 Genauigkeit

Inspektion von Tab. 4.6 zeigt, dass die relative Genauigkeit der pseudokritischen Kopplung mit der Systemgröße zunimmt. Dies ist interessant, da die kumulative Anzahl der erzeugten unabhängigen Konfigurationen  $N_{indep} = \sum_L N/(2\tau_{int})$  gleicher Gittergröße mit  $L$  abnimmt.

$L$	6	8	10	12	14	16	18
$N_{indep}$	269039	72872	26944	10868	5099	3903	1069

Wir erwarten für den relativen Fehler einer Kumulanten

$$\frac{\Delta\kappa}{\kappa} \sim C(V) \frac{1}{\sqrt{N_{indep}}}, \quad (4.19)$$

und untersuchen das Skalieren von  $C$ , als relativem Fehler in Einheiten von  $\sqrt{N_{indep}}$  mit dem Systemvolumen  $V = L^4$  sowohl für die Kopplung  $\bar{\beta}(C_v/\beta^2)$  als auch für den Wert der Kumulanten  $\tilde{V}^{-1} \cdot \overline{C_v/\beta^2}$ .

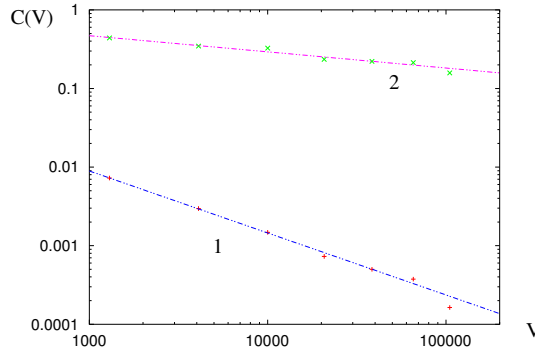


Abbildung 4.5: Skalenverhalten des relativen Fehlers  $C$  für die Kopplung  $\bar{\beta}(C_v/\beta^2)$  (1) und die Kumulante  $\tilde{V}^{-1} \cdot \overline{C_v/\beta^2}$  (2) als Funktion des Systemvolumens  $V$  in doppelt logarithmischer Darstellung.

Ein  $\chi^2$ -Fit an die Funktion  $C(V) = b V^a$  liefert uns die Volumenabhängigkeit  $a_\beta = -0.79(1)$ , bzw.  $a_{C_v} = -0.21(2)$ . Den Werten der negativen Steigungen der

---

fallszahlengenerator dokumentiert. Abweichungen traten bei der Verwendung eines *Shift-register* Zufallszahlengenerators [71] auf. Allgemein können, auch ohne die Periode des verwendeten Zufallszahlengenerators auszuschöpfen, schwerwiegende Probleme durch Korrelationen auftreten, insbesondere beim Aufteilen einer Sequenz von Zufallszahlen in Mehrprozessorenrechnungen. Wir verwenden einen skalierbaren Pseudozufallszahlengenerator *cmrg* der SPRNG Bibliothek [72]. Dieser auf einer Sequenzlänge von  $10^{13}$  Zufallszahlen *getestete* Generator stellt eine Kombination eines linear kongruenten 64 Bit Generators mit einem rekursiven Primzahlengenerator dar. Wir verwenden diesen Generator sowohl auf der T3E als auch auf ALiCE.



beiden Fitfunktionen entnehmen wir, dass die Zahl der unabhängigen Konfigurationen  $N_{indep} = \left(\frac{C(V)}{\Delta\kappa/\kappa}\right)^2$ , die notwendig ist, um eine relative Genauigkeit  $\Delta\kappa/\kappa$  zu erreichen, mit dem Volumen abnimmt und jeweils mit  $V^{-2a}$  skaliert.

Die relativen Fehler der Kopplungen liegen im Bereich  $(5 - 20) \cdot 10^{-6}$  und variieren kaum mit der Kumulante, über deren Extremum sie jeweils definiert sind. Lediglich der relative Fehler von  $\bar{\beta}(\kappa_6)$  liegt etwas höher. Die relativen Fehler der Kumulanten selbst sind  $< 2 \cdot 10^{-3}$ .

### 4.3 Kritische Kopplung

Für einen Phasenübergang erster Ordnung legt die Borgs-Kotecky Darstellung der Zustandssumme Gl. (4.3) nahe, dass sowohl  $\bar{\beta}_\kappa$  als auch  $\bar{\kappa}$  als Reihenentwicklung in  $1/V$  darstellbar sind. Die Gültigkeit dieser Reihenentwicklungen konnte im Fall von  $q$ -Zustände-Pottsmodellen mit großem  $q$  gezeigt werden [73, 74]. Wesentliche Bedingung für die massiven Spinmodelle ist dabei, dass die Gitterausdehnung  $L$  größer als die Korrelationslänge des *Gaps* ist. Es ist somit keinesfalls klar, ob eine derartige Reihenentwicklung für die U(1) mit ihrer masselosen Coulombphase existiert. In der Hypothese der Gültigkeit dieser Reihendarstellung machen wir für die Kopplung der spezifischen Wärme den folgenden Extrapolationsansatz:

$$\bar{\beta}_{C_v/\beta^2}(L) = \beta_{C_v/\beta^2}(\infty) + \sum_{k=1}^{k_{max}} B_k V^{-k} , \quad (4.20)$$

und erhalten in Abhängigkeit vom Fit-Intervall  $L_{min} \leq L \leq 18$  und der maximalen Ordnung der berücksichtigten Korrekturterme  $k_{max}$  die in Tab. 4.1 aufgelisteten Werte der kritischen Kopplung  $\beta_{C_v/\beta^2}(\infty)$ . Desweiteren geben wir dort den Koeffizienten des ersten Korrekturterms  $B_1$  an. Fitresultate mit  $\chi_{d.o.f.}^2 < 1$  sind fettgedruckt hervorgehoben.

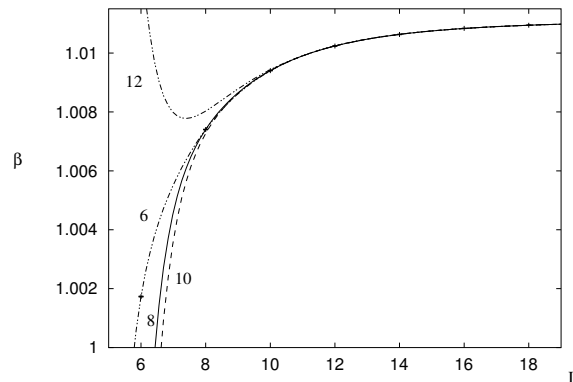


Abbildung 4.6: Beste Fitresultate aus Tab. 4.1 mit  $k_{max} = 6, 8, 10, 12$ .

Die Übereinstimmung der fettgedruckten Resultate dokumentiert die Stabilität der Fits und lässt nachfolgend beschriebene Interpretation der Resultate zu. Unter Hin-

$L_{min}$	$k_{max}$	$\chi^2_{d.o.f.}$	$\beta_{C_v/\beta^2}(\infty)$	$B_1$
14	1	1.03	1.0111241(13)	-18.95(14)
12	1	1.09	1.0111144(55)	-18.24(21)
	2	<b>0.19</b>	<b>1.0111315(57)</b>	<b>-19.96(53)</b>
10	1	12.7	1.0110945(147)	-17.18(37)
	2	<b>0.13</b>	<b>1.0111283(25)</b>	<b>-19.63(15)</b>
	3	<b>0.21</b>	<b>1.0111319(62)</b>	<b>-20.06(65)</b>
8	1	108	1.0110474(349)	-15.33(50)
	2	2.14	1.0111159(69)	-18.70(25)
	3	<b>0.11</b>	<b>1.0111309(25)</b>	<b>-19.94(17)</b>
	4	<b>0.21</b>	<b>1.0111309(22)</b>	<b>-19.94(10)</b>
6	1	970	1.0109389(913)	-12.38(56)
	2	37.1	1.0110792(218)	-16.84(41)
	3	1.25	1.0111199(55)	-19.02(22)
	4	<b>0.10</b>	<b>1.0111316(11)</b>	<b>-20.02(6)</b>

Tabelle 4.1: Kritische Kopplung  $\beta_{C_v/\beta^2}(\infty)$  und erster Korrekturkoeffizient  $B_1$  aus  $\chi^2$ -Fit an Gl. (4.20).

zunahme höherer Korrekturterme können auch die kleineren Gitter konsistent in die Reihendarstellung miteinbezogen werden (siehe auch Fig. 4.6). Die Konsistenz der auf diese Weise ermittelten kritischen Kopplungen ist als Hinweis auf die Anwendbarkeit des Borgs-Kotecky Ansatzes auf die  $U(1)$  Gittereichtheorie zu werten. Wir mitteln die fettgedruckten Resultate und erhalten

$$\beta_{C_v/\beta^2}(\infty) = 1.0111310(62) . \quad (4.21)$$

Dabei geben wir die Unsicherheit mit dem größten Fehler der an der Mittelung beteiligten Einzelfits an, da die Fitresultate keinesfalls als unabhängig angesehen werden können. Wir verfahren analog mit den Kopplungen der verbleibenden Kumulanten:

$$\begin{aligned}
\beta_{\partial_\beta(C_v/\beta^2)}(\infty) &= 1.0111332(73) \\
\beta_{U_2}(\infty) &= 1.0111319(70) \\
\beta_{\partial_\beta U_2}(\infty) &= 1.0111345(67) \\
\beta_{U_4}(\infty) &= 1.0111313(75) \\
\beta_{\partial_\beta U_4}(\infty) &= 1.0111334(73) \\
\beta_{\kappa_3}(\infty) &= 1.0111332(73) \\
\beta_{\kappa_4}(\infty) &= 1.0111385(75) \\
\beta_{\kappa_5}(\infty) &= 1.0111339(70) \\
\beta_{\kappa_6}(\infty) &= 1.0111342(75) , \quad (4.22)
\end{aligned}$$

und konstatieren sehr gute Übereinstimmung dieser extrapolierten Werte für die Übergangskopplungen des unendlich großen Systems. Die algebraische Unabhängigkeit der Kumulanten ermöglicht, aus diesen zehn Resultaten per Mittelung einen Schätzwert für die kritische Kopplung des Phasenübergangs zu extrahieren

$$\beta_{\mathbf{T}} = \mathbf{1.0111331(21)} . \quad (4.23)$$

Dies ist die bislang präziseste Bestimmung der kritischen Kopplung der U(1) Gittereichtheorie und ist zu vergleichen mit dem Literaturwert  $\beta_T = 1.01114(4)$  [44] sowie unserem eigenen Zwischenresultat von  $\beta_T = 1.011128(11)$  [75].

### 4.3.1 Observablen mit exponentiellen Korrekturen

Der Borgs-Kotecky Ansatz ermöglicht die Definition von Observablen, deren pseudokritische Kopplungen bei endlichem Volumen lediglich exponentielle Korrekturen gegenüber  $\beta_T$  aufweisen. Wir versprechen uns vom Studium dieser Größen einen alternativen Zugang zur genauen Bestimmung von  $\beta_T$ .

Die Observable  $N(V, V', \beta)$  [67, 68, 69]

$$N(V, V', \beta) \equiv \left( \frac{Z(V, \beta)^\alpha}{Z(V', \beta)} \right)^{1/(\alpha-1)} \quad \text{mit} \quad \alpha = V/V' , \quad (4.24)$$

gibt die Anzahl der stabilen Phasen eines Modells in Abhängigkeit von  $\beta$  an und definiert über ihr Maximum eine pseudokritische Kopplung  $\beta_{V/V'}$ . Die Ableitung bezüglich  $\beta$  zeigt, dass das Maximum von  $N(V, V', \beta)$  gegeben ist durch die Schnittpunkte der Plaquette-Energien der Systeme  $V$  und  $V'$

$$\langle e(L, \beta) \rangle = \langle e(L', \beta) \rangle . \quad (4.25)$$

Eine Umgewichtung der Plaquette-Energien aller 47 Simulationen aus Tab. 3.5 auf 2000 verschiedene Kopplungen  $1.011 < \beta < 1.013$  ermöglicht die paarweise Bestimmung der Schnittpunkte aller Einzelsimulationen gemäß Gl. (4.25). Den Fehler  $\Delta\beta^{(i,j)}$  des Schnittpunktes der Simulation  $(i, L)$  mit der Simulation  $(j, L')$  ermitteln wir durch Kombination der 10 Jackknife-Subsamples von  $(i, L)$  mit denen von  $(j, L')$ . Wir mitteln daher zur Abschätzung von  $\Delta\beta_{L/L'}^{(i,j)}$  über 100 Schnittpunkte je Paar  $(i, j)$  mit  $i \neq j$  und  $L \neq L'$ . Anschließend fitten wir alle  $\beta_{L/L'}^{(i,j)}$  an eine Konstante  $\beta_{L/L'}$ .

Wir stellen fest, dass die Kurven  $e(6, \beta)$  und  $e(8, \beta)$  keine Schnitte mit irgendeinem der verbleibenden  $e(L', \beta)$  aufweisen. Dies gilt auch für erreichbare  $\beta$  außerhalb des oben angegeben Intervalls. Inspektion von Fig. 4.7 zeigt, dass der Schnittwinkel und damit die Genauigkeit mit zunehmendem  $L, L'$  wächst (vergleiche auch [70]). Wir fixieren  $L' = 18$  und ermitteln folgende pseudokritische Kopplungen  $\beta_{L/L'}$  bei  $L = 10, 12, 14, 16$  :

L	$\beta_{L/L'}$
10	1.011232(32)
12	1.011167(20)
14	1.011146(29)
16	1.011133(45)

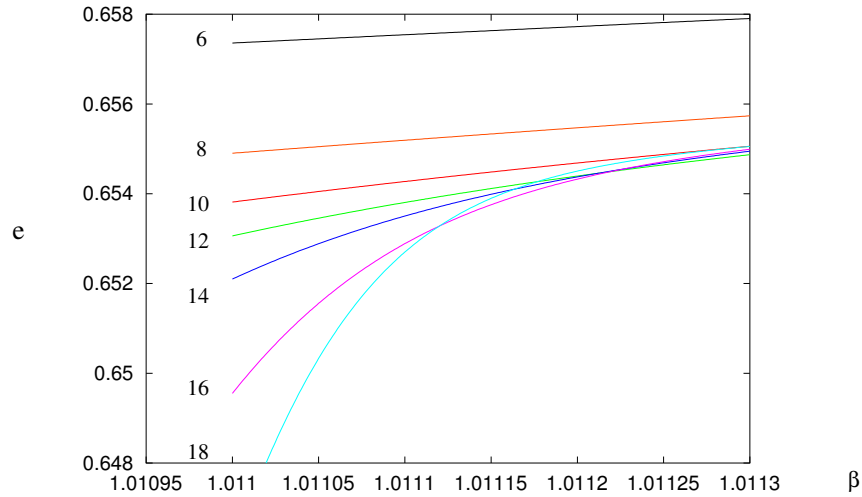


Abbildung 4.7: Exemplarische Schnitte der Plaquette Energien verschiedener Simulationen mit  $L, L' = 10, 12, 14, 16, 18$ .

Zur Bestimmung der kritischen Kopplung fitten wir die so gewonnenen Daten mit dem Ansatz

$$\beta_{L/L'} = \beta_{L/L'}(\infty) + ae^{-L/\tilde{L}_0} , \quad (4.26)$$

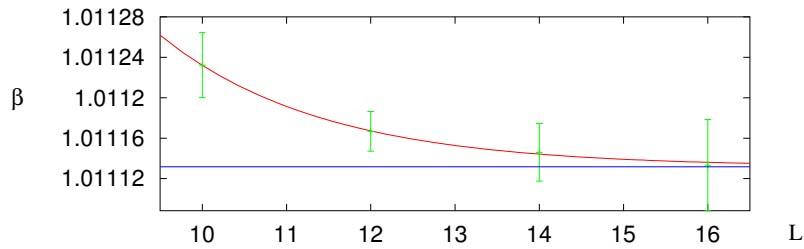


Abbildung 4.8: Fit der Kopplungen  $\beta_{L/18}$  bei  $L = 10, 12, 14, 16$  an Gl. (4.26).

und erhalten neben  $\tilde{L}_0 = 1.9(2)$  in sehr guter Übereinstimmung mit dem Wert von  $\beta_T$  aus Gl. (4.23)

$$\beta_{L/L'}(\infty) = 1.0111317(45) \quad \chi_{\text{d.o.f.}}^2 = 0.01 . \quad (4.27)$$

Wir konstatieren, dass der Fehler von  $\beta_{L/L'}(\infty)$  von gleicher Größenordnung ist wie der in Gl. (4.23). Dem Vorteil der lediglich exponentiellen Korrekturen (gegenüber den polynomialen der  $1/V$ -Entwicklung in Gl. (4.20)) steht die Ungenauigkeit in der Schnittpunktbestimmung bei sehr kleinen Schnittwinkeln gegenüber. Je stärker der Phasenübergang ist, desto größer sind die Schnittwinkel bei gleicher Wahl von  $V$  und  $V'$ .

### 4.3.2 Fitansatz 2. Ordnung

Wir testen im Folgenden, ob unsere Daten für die Kopplungen die  $\bar{\beta}_\kappa$  aus den Tabellen 4.7 und 4.6 auch mit einem 3 Parameter-Fitansatz

$$\beta_c(L) = \beta_c(\infty) + aL^{-\frac{1}{\nu}} , \quad (4.28)$$

verträglich sind, was für  $\nu^{-1} \neq 4$  ein Hinweis auf asymptotisches Skalieren zweiter Ordnung wäre. Die Fitresultate für die Kumulanten  $\kappa$  in Abhängigkeit des Fitintervalls  $L_{min} \leq L \leq 18$  sind in Tab. 4.2 zusammengestellt. Da der Fitansatz verglichen mit Gl. (4.20) sehr flexibel ist, erhalten wir erwartungsgemäß kleine  $\chi_{d.o.f.}^2$ . Wir beobachten jedoch, dass die Fits aller Kumulanten instabil bezüglich Variation des Fitintervalls sind:

- Die kritische Kopplung  $\beta_c(\infty)$  fällt mit steigendem  $L_{min}$  ab, ohne eindeutige Konvergenz.
- Der kritische Exponent  $\nu^{-1}$  nimmt mit steigendem  $L_{min}$  zu.

Betrachten wir ausschließlich die (instabilen) Fitresultate bei  $L_{min} = 12$ , so ist erkennbar, dass die „kritischen“ Kopplungen im Rahmen der Fehler mit  $\beta_T$  verträglich sind, die „kritischen“ Exponenten  $\nu^{-1}$  aber nur teilweise mit dem Wert 4 kompatibel sind. Da beide Fitparameter keine Konvergenz bezüglich Variation von  $L_{min}$  aufzeigen, können wir keine Aussage über die Verträglichkeit mit einem Skalenverhalten erster oder zweiter Ordnung machen. Die beobachtete Instabilität des Fitansatzes bei  $L_{max} = 18$  kann daher das Szenario eines Phasenübergangs 2.Ordnung nicht ausschließen.

## 4.4 Latente Wärme

Wir untersuchen in diesem Abschnitt das Skalenverhalten der spezifische Wärme sowie der anderen Kumulanten und extrahieren im Rahmen der angenommenen Gültigkeit des Borgs-Kotecky Ansatzes einen Schätzwert für die latente Wärme  $G$ , als Gap der inneren Energie  $e = E/V$  im thermodynamischen Limes.

Die Finite-size-scaling Theorie à la Borgs-Kotecky sagt für die spezifische Wärme folgendes Skalenverhalten voraus

$$\frac{C_v/\beta^2}{6V} = \frac{1}{4}G^2 + \sum_{k=1}^{\infty} A_k V^{-k} . \quad (4.29)$$

Wir setzen die gleiche Fitstrategie wie zur Ermittlung der kritischen Kopplung in Tab. 4.1 an und versuchen über ein schrittweises Erhöhen der Ordnung der Korrekturterme  $k_{max}$  das Fitintervall  $L_{min} \leq L \leq 18$  zu kleineren  $L_{min}$  hin auszuweiten. Wir erhalten die in Tab. 4.3 aufgelisteten Fitresultate.

Wir stellen eine langsamere Konvergenz als beim Fit der Kopplungen fest und erhalten nur drei akzeptable Fits mit  $\chi_{d.o.f.}^2 < 1$ . Der Datenpunkt bei  $L = 6$  kann in die

Fits mit  $k_{max} \leq 4$  noch nicht miteingebunden werden. Die fettgedruckten (brauchbaren) Fitresultate für das Gap  $G$  weisen keinen systematischen Drift bezüglich  $k_{max}$  auf und sind im Rahmen der (sehr kleinen) Fehler annähernd kompatibel. Ein (per Fit an eine Konstante) gemittelt Resultat dieser drei Datenpunkte ist daher sinnvoll. Wegen der statistischen Abhängigkeit der den Fits unterschiedlicher Ordnung zugrunde liegenden Daten geben wir den Fehler mit dem maximalen Einzelfehler an. Damit erhalten wir als Endresultat folgenden Schätzwert für das Gap der inneren Energie des unendlich großen Systems

$$\mathbf{G} = \mathbf{0.026721(59)} . \quad (4.30)$$

Die Qualität der Fitresultate für die anderen Kumulanten  $\kappa$

$$\kappa \tilde{V}^{-m} = \kappa(\infty) + \sum_{j=1}^{j_{max}} D_j(\kappa) V^{-j} \quad (4.31)$$

$$m = 0 \quad \text{für } \kappa = U_2, U_4 \quad \text{nach (4.8, 4.9)} \quad (4.32)$$

$$m = 1 \quad \text{für } \kappa = \partial_\beta U_2, \partial_\beta U_4 \quad \text{nach (4.11, 4.12)} \quad (4.33)$$

$$m = 2 \quad \text{für } \kappa = \partial_\beta (C_v/\beta^2) \quad \text{nach (4.10)} \quad (4.34)$$

$$m = l - 1 \quad \text{für } \kappa_l \quad \text{nach (4.14, ff)} . \quad (4.35)$$

fällt unterschiedlich aus. Während  $U_2$  und  $U_4$  ebenfalls nur 3 gute Fits aufweisen, ergeben die Ableitungen der freien Energie  $\kappa_l$  ein besseres Skalenverhalten. Wir zeigen in Tab. 4.4 exemplarisch die Resultate für  $\kappa_5$  und ermitteln daraus  $\kappa_5(\infty) = 0.1710(26)10^{-8}$ .

Die stärkere Konvergenz der  $\kappa_l$  ermöglicht eine gute Beschreibung mit Fits niedriger Ordnung bereits innerhalb  $L_{min} \leq L \leq 18$ . Wir bestätigen das bessere Skalenverhalten testweise über einen flexiblen Fitansatz

$$\kappa_{5,max} V^{-4} = \kappa + CL^{-\omega} , \quad (4.36)$$

welcher mit  $L_{min} = 12$  das Resultat der Borgs-Kotecky Reihenentwicklung dadurch bestätigt, dass sowohl  $\kappa = 0.1688(34)10^{-8}$  mit  $\kappa_5(\infty)$  übereinstimmt, als auch der Exponent  $\omega = 3.925(99)$  bei einer Fitqualität von  $\chi_{d.o.f.}^2 = 0.09$  mit dem Wert 4 verträglich ist. Ein analoger Ansatz für die schlechter skalierende spezifische Wärme dokumentiert bei ähnlich guter Fitqualität ( $\chi_{d.o.f.}^2 = 0.05$ ) mit  $\omega = 2.828(49)$  und einem abweichenden  $G = 0.02584(11)$  die Notwendigkeit von Korrekturtermen höherer Ordnung. Wir möchten betonen, dass dieser testweise eingeführte Fitansatz für alle Kumulanten instabil gegenüber Variation von  $L_{min}$  ist.

Die Untersuchungen des Skalenverhaltens der Kumulanten lassen folgende Interpretation zu. Für die Kumulanten  $C_v/\beta^2$ ,  $U_2$  und  $U_4$  mit schwächerem Konvergenzverhalten liegt unser minimaler Fitbereich  $12 \leq L \leq 18$  unterhalb des Bereiches asymptotischen Skalierens erster Ordnung. Dennoch erhalten wir unter Einbeziehen höherer Korrekturen stabile Fitresultate hinunter bis  $L_{min} = 8$ . Für die weiteren

Untersuchungen halten wir noch das Ergebnis des Fits für die Binder Kumulante  $U_4$  fest

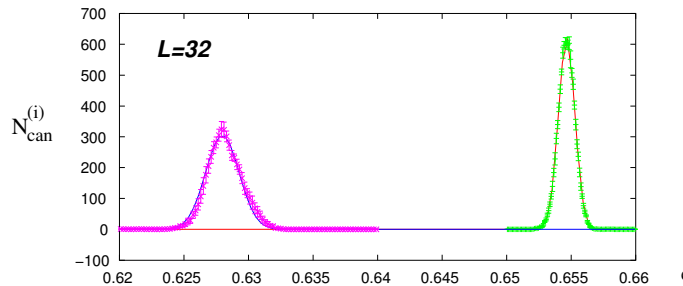
$$U_{4,min}(V) = U + \sum_{k=1}^{k_{max}} H_k V^{-k} \quad (4.37)$$

$$\Rightarrow \mathbf{U} = -5.816(27) \mathbf{10}^{-4} . \quad (4.38)$$

Unsere Daten der Kumulanten geben keinerlei Hinweis auf ein asymptotisches Skalieren 2. Ordnung: keiner der untersuchten Kumulanten *skaliert* wie  $\kappa = pL^\tau$ . Der im Falle eines Skalierens 2. Ordnung zu erwartende Exponent  $\tau$  dieses Fitansatzes hängt vom Grad der Ableitung der Kumulanten nach  $\beta$  ab. So gilt  $\tau = 2\nu^{-1} - 4$  für  $C_v/\beta^2$ , bzw  $\tau = 3\nu^{-1} - 4$  für  $\partial_\beta(C_v/\beta^2)$ . Wir beobachten weder Stabilität in  $\nu^{-1}$  bei Variation des Fitbereichs, noch erhalten wir einen Einzelfit hinreichender Qualität ( $\min(\chi_{d.o.f.}^2) > 5$ ). Die nicht vorhandene Kompatibilität unseres Datensatzes mit einem Fitansatz zweiter Ordnung kann die Möglichkeit eines kontinuierlichen Phasenübergangs wegen des beschränkten Fitbereichs jedoch noch nicht mit vollständiger Sicherheit ausschließen. Daher wollen wir die latente Wärme auch auf größeren Gittern untersuchen.

#### 4.4.1 Direkte Messung der latenten Wärme

Wir diskutieren in diesem Abschnitt eine „direkte“ Messung der latenten Wärme  $\tilde{G}$  für größere Systeme, um die Diskontinuität des Phasenübergangs numerisch nachzuweisen. Diese Untersuchung basiert nur auf der Kenntnis eines präzisen Wertes für die kritische Kopplung  $\beta_T$  (Gl. (4.23)). Zu diesem Zwecke ergänzen wir unsere Simulationen der Systeme  $L = 6, 4, 8, 10, 12, 14, 16, 18$  um metastabile Simulationen der Systeme  $L = 20, 22, 24, 28, 32$ . Über Startkonfigurationen in der Coulomb- (1) bzw. Confined Phase (2) erzeugen wir mit Hilfe des Metropolis Algorithmus am Phasenübergangspunkt, also bei  $\beta_T$  aus Gl. (4.23), metastabile Samples der beiden Phasen von etwa 50000 Konfigurationen. Erwartungsgemäß registrieren wir in diesen kanonischen Simulationen keine Phasenflips. Die zwei unabhängigen Einzelsimulationen je Systemgröße lassen also keine Aussage über das relative Phasengewicht zu.



Wir ermitteln über einen Gaußfit an die jeweilige Energiedichteverteilung  $N_{can}^{(i)}(e, \beta_T)$ ,  $i = 1, 2$  die Positionen der Phasenpeaks  $e_1(L)$  und  $e_2(L)$ , definiert über  $\partial_e \log(N_{can}^{(i)}) = 0$ . Der Fitbereich ist dabei nicht symmetrisch um die vermeintliche Peakposition

$e_i(L)$  gewählt, sondern mit  $[e_1 - \frac{1}{3}\sigma; e_1 + \frac{2}{3}\sigma]$  bzw.  $[e_2 - \frac{2}{3}\sigma; e_2 + \frac{1}{3}\sigma]$  an der jeweils äußeren (dem Gap abgewandten) Flanke orientiert.  $\sigma$  stellt die approximative Halbwertsbreite dar. Dies ist insbesondere für die kleineren Systeme von Bedeutung, da der Überlapp beider Phasen die inneren Flanken der beiden Phasenpeaks beeinträchtigt. In einer manuell rekursiven Prozedur ermitteln wir die Fehler der Peakpositionen  $\Delta e_i(L)$  als systematische Fehler. Wir erhalten die in Tab. 4.5 angegebenen Werte.

Die Genauigkeit wächst fast ausnahmslos mit der Systemgröße, was auf die mit steigendem  $L$  schmaler werdenden Peaks zurückzuführen ist. Die Genauigkeit der Peakposition in der Coulombphase ist überdies höher als die der Confined Phase. Dies ist in der Asymmetrie und der dadurch breiteren Verteilung der Confined Phase begründet (siehe exemplarisch Fig. 4.4.1). Für  $L = 6, 8, 10$  ist aus der auf  $\beta_T$  umgewichteten Verteilung keine Ausprägung in der Confined Phase auszumachen. Somit können wir kein Maximum bestimmen. Für  $L = 20, 28$  haben wir keine Konfigurationen der Confined Phase erzeugt. Inspektion der Daten in Fig. 4.9 legt einen exponentiellen Fit nahe

$$e_i(L) = e_i(\infty) + a_i e^{-b_i L} . \quad (4.39)$$

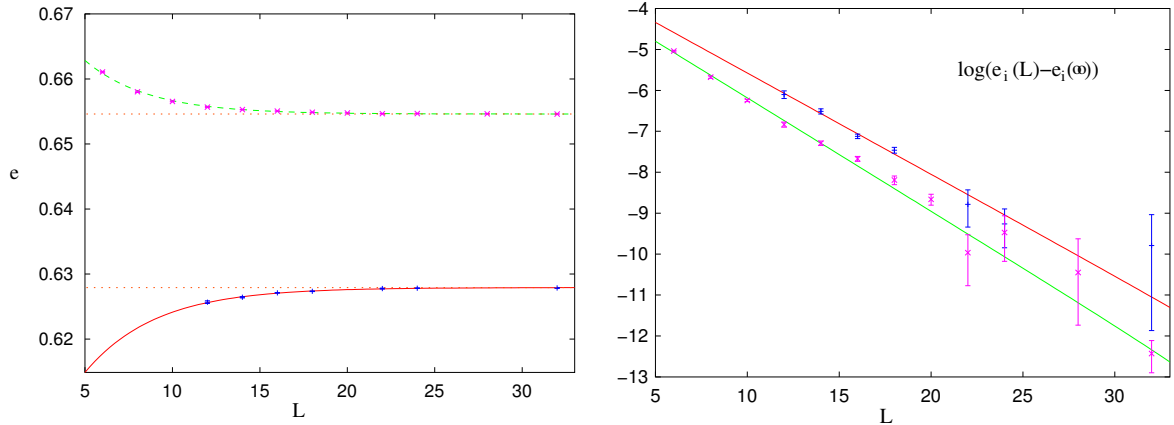


Abbildung 4.9: Exponentielle Fits der Peakpositionen  $e_i(L)$  aus (Tab. 4.5) an Gl. (4.39). Darstellung links in linearer Energiskala, rechts logarithmisch.

Wir erhalten bei vernünftiger Fitqualität

$$e_1 = e_1(\infty) = 0.654603(3) \quad \chi_{\text{d.o.f.}}^2 = 0.84 \quad (4.40)$$

$$e_2 = e_2(\infty) = 0.627918(54) \quad \chi_{\text{d.o.f.}}^2 = 0.30 , \quad (4.41)$$

und bestimmen darüber die latente Wärme

$$\tilde{\mathbf{G}} = \lim_{V \rightarrow \infty} \langle e \rangle_{\text{coul}} - \langle e \rangle_{\text{conf}} \quad (4.42)$$

$$= e_1 - e_2 \quad (4.43)$$

$$= \mathbf{0.026685(54)} . \quad (4.44)$$



Desweiteren erhalten wir für den Wert der Binder Kumulanten im thermodynamischen Limes in Übereinstimmung mit Gl. (4.38)

$$\tilde{U} = -\frac{(e_1^2 - e_2^2)^2}{12e_1^2e_2^2} \quad (4.45)$$

$$= -5.777(16) \cdot 10^{-4} . \quad (4.46)$$

Es ist anzumerken, dass wegen der Asymmetrie und des Überlapps der Verteilungen die Identifikation  $e_i = \langle e \rangle_i$  für endliches Volumen nicht zulässig ist. Erst im thermodynamischen Limes ist die Peakposition ein sinnvoller Schätzwert für die innere Energie der jeweiligen Phase.

Die sehr gute Übereinstimmung der Werte von  $\tilde{G}$  (Gl. (4.44)) mit  $G$  (Gl. (4.30)) sowie von  $\tilde{U}$  (Gl. (4.46)) mit  $U$  (Gl. (4.38)) liefert einen weiteren Hinweis für die Gültigkeit des FSS 1.Ordnung im Rahmen der Genauigkeit unserer Messungen. Entscheidend für die Bestimmung der Ordnung des Phasenübergangs ist die Beantwortung der Frage, ob der Wert des Gaps im Grenzwert unendlich großer Systeme von Null verschieden ist. Das nicht verschwindende Gap  $\tilde{G}$ , welches bereits auf den von uns zusätzlich untersuchten Systemgrößen  $18 < L \leq 32$  überzeugend kleine Volumeneffekte aufweist (siehe linke Fig. 4.5), kann definitiv als numerischer Beleg der Diskontinuität gewertet werden. Wir erinnern daran, dass die Grundlage dieser „direkten“ Messung des Gaps alleinig die verlässliche Kenntnis eines präzisen Schätzwertes für die kritische Kopplung ist. Letztere sehen wir mit der hohen Genauigkeit und Stabilität der Bestimmung von  $\beta_T$  in Kapitel 4.3 als gegeben an.

$\kappa$	$L_{min}$	$\chi^2_{d.o.f.}$	$\beta_c(\infty)$	$\nu^{-1}$
$C_v/\beta^2$	6	15.1	1.011240(24)	3.213(40)
	8	1.67	1.011189(11)	3.402(36)
	10	0.46	1.011166(09)	3.540(49)
	12	0.34	1.011147(14)	3.70(12)
$\partial_\beta(C_v/\beta^2)$	6	8.52	1.011207(18)	3.252(47)
	8	1.11	1.011169(09)	3.476(46)
	10	0.27	1.011150(07)	3.662(61)
	12	0.33	1.011139(14)	3.82(19)
$U_2$	6	13.2	1.011233(22)	3.258(36)
	8	1.39	1.011187(10)	3.431(32)
	10	0.50	1.011166(09)	3.549(50)
	12	0.31	1.011146(13)	3.72(11)
$\partial_\beta U_2$	6	7.59	1.011203(17)	3.303(43)
	8	0.98	1.011168(08)	3.508(42)
	10	0.28	1.011151(07)	3.674(59)
	12	0.28	1.011138(12)	3.85(17)
$U_4$	6	12.7	1.011232(21)	3.271(35)
	8	1.60	1.011187(11)	3.437(33)
	10	0.49	1.011165(09)	3.566(49)
	12	0.33	1.011145(14)	3.73(11)
$\partial_\beta U_4$	6	7.42	1.011201(16)	3.324(42)
	8	0.92	1.011167(08)	3.523(40)
	10	0.28	1.011150(07)	3.680(59)
	12	0.33	1.011139(14)	3.83(18)
$\kappa_3$	6	8.52	1.011207(18)	3.252(47)
	8	1.11	1.011169(09)	3.476(46)
	10	0.27	1.011150(07)	3.662(61)
	12	0.33	1.011139(14)	3.82(19)
$\kappa_4$	6	5.35	1.011184(14)	3.319(63)
	8	0.70	1.011155(07)	3.627(64)
	10	0.20	1.011142(06)	3.884(92)
	12	0.26	1.011133(10)	4.13(28)
$\kappa_5$	6	9.69	1.011220(20)	3.232(42)
	8	1.04	1.011177(09)	3.438(38)
	10	0.44	1.011159(09)	3.579(66)
	12	0.32	1.011140(13)	3.80(15)
$\kappa_6$	6	4.10	1.011198(14)	3.292(43)
	8	1.63	1.011172(13)	3.453(67)
	10	0.15	1.011146(06)	3.733(54)
	12	0.23	1.011138(13)	3.85(19)

Tabelle 4.2: Fitresultate der Kopplungen  $\bar{\beta}_\kappa$  an den Fitansatz 2. Ordnung Gl. (4.28).

$L_{min}$	$k_{max}$	$\chi_{d.o.f.}^2$	$G$	$A_1$
14	1	1.33	0.02714(11)	2.48(8)
12	1	11.6	0.02753(20)	2.16(9)
	2	<b>0.14</b>	<b>0.02684(6)</b>	<b>2.97(12)</b>
10	1	75.0	0.02811(36)	1.83(9)
	2	3.15	0.02718(14)	2.56(9)
	3	<b>0.03</b>	<b>0.02675(4)</b>	<b>3.15(5)</b>
8	1	532	0.02928(68)	1.40(8)
	2	22.9	0.02764(23)	2.19(9)
	3	2.04	0.02709(12)	2.69(9)
	4	<b>0.02</b>	<b>0.02672(2)</b>	<b>3.22(4)</b>
6	1	3372	0.03127(13)	0.98(7)
	2	292	0.02879(55)	1.63(9)
	3	15.8	0.02753(20)	2.29(8)
	4	1.80	0.02706(4)	2.72(7)

Tabelle 4.3: Fit der Maxima von  $C_v/\beta^2$  aus Tab. 4.8 an Gl. (4.29).

$L_{min}$	$k_{max}$	$\chi_{d.o.f.}^2$	$\kappa_5 V^{-4}/10^{-8}$	$D_1$
14	1	<b>0.05</b>	<b>0.1703(10)</b>	<b>.5565(56)</b>
12	1	<b>0.07</b>	<b>0.1713(7)</b>	<b>.5501(26)</b>
	2	<b>0.08</b>	<b>0.1698(19)</b>	<b>.5639(160)</b>
10	1	1.09	0.1682(22)	.5645(54)
	2	<b>0.21</b>	<b>0.1731(16)</b>	<b>.5327(89)</b>
	3	<b>0.11</b>	<b>0.1690(26)</b>	<b>.5765(263)</b>
8	1	6.82	0.1624(44)	.5858(75)
	2	<b>0.29</b>	<b>0.1713(13)</b>	<b>.5446(46)</b>
	3	<b>0.24</b>	<b>0.1733(19)</b>	<b>.5298(122)</b>
	4	<b>0.12</b>	<b>0.1687(18)</b>	<b>.5828(43)</b>
6	1	217	0.1375(221)	.6580(272)
	2	<b>0.30</b>	<b>0.1722(10)</b>	<b>.5403(22)</b>
	3	<b>0.31</b>	<b>0.1713(14)</b>	<b>.5451(54)</b>
	4	<b>0.25</b>	<b>0.1734(20)</b>	<b>.5288(134)</b>

Tabelle 4.4: Resultate der Fits für die Maxima von  $\kappa_5$  an den Ansatz Gl. (4.31).

$L$	$e_1$	$e_2$
6	0.66107(22)	
8	0.65803(20)	
10	0.65654(11)	
12	0.65568(13)	0.62568(42)
14	0.65529(07)	0.62643(19)
16	0.65507(06)	0.62711(09)
18	0.65488(06)	0.62734(08)
20	0.65478(05)	
22	0.65465(05)	0.62777(13)
24	0.65468(08)	0.62782(09)
28	0.65463(07)	
32	0.654607(3)	0.62786(13)

Tabelle 4.5: Peakpositionen  $e_1$  und  $e_2$  der Coulomb-, bzw Confined Phase der Verteilungen  $N_{can}^{(i)}(e, \beta_T)$ .

L	$\beta(C_v/\beta^2)$	$\beta(\partial_\beta C_v)$	$\beta(U_2)$	$\beta(\partial_\beta U_2)$	$\beta(U_4)$	$\beta(\partial_\beta U_4)$
6	1.001730(14)	1.005011(14)	1.001347(14)	1.004683(14)	1.001138(14)	1.004479(15)
8	1.007403(11)	1.008728(11)	1.007301(11)	1.008636(12)	1.007237(11)	1.008572(12)
10	1.0094029(91)	1.0100330(93)	1.0093677(89)	1.0099995(93)	1.0093394(90)	1.0099741(93)
12	1.0102381(67)	1.0105754(67)	1.0102211(67)	1.0105594(67)	1.0102087(67)	1.0105472(68)
14	1.0106304(72)	1.0108233(76)	1.0106222(72)	1.0108158(75)	1.0106155(73)	1.0108086(75)
16	1.0108357(56)	1.0109534(57)	1.0108311(57)	1.0109490(58)	1.0108272(57)	1.0109450(57)
18	1.0109432(49)	1.0110182(52)	1.0109405(49)	1.0110157(51)	1.0109379(49)	1.0110131(52)

Tabelle 4.6: Positionen der Extrema  $\bar{\beta}_{max}(C_v/\beta^2)$ ,  $\bar{\beta}_{max}(\partial_\beta C_v/\beta^2)$ ,  $\bar{\beta}_{min}(U_2)$ ,  $\bar{\beta}_{min}(\partial_\beta U_2)$ ,  $\bar{\beta}_{min}(U_4)$ ,  $\bar{\beta}_{min}(\partial_\beta U_4)$  in Abhängigkeit von der Gittergröße  $L$ .

L	$\beta(\kappa_3)$	$\beta(\kappa_4)$	$\beta(\kappa_5)$	$\beta(\kappa_6)$
6	1.005011(14)	1.007396(14)	1.003844(13)	1.005477(23)
8	1.008728(11)	1.009688(12)	1.008259(11)	1.008946(13)
10	1.0100330(93)	1.0104929(95)	1.0098118(93)	1.0101246(99)
12	1.0105754(67)	1.0108206(70)	1.0104541(71)	1.0106277(66)
14	1.0108233(76)	1.0109653(77)	1.0107551(77)	1.0108536(80)
16	1.0109534(57)	1.0110399(58)	1.0109121(57)	1.0109713(60)
18	1.0110182(52)	1.0110736(53)	1.0109918(53)	1.0110295(68)

Tabelle 4.7: Positionen der Extrema  $\bar{\beta}_{min}(\kappa_3)$ ,  $\bar{\beta}_{max}(\kappa_4)$ ,  $\bar{\beta}_{max}(\kappa_5)$ ,  $\bar{\beta}_{min}(\kappa_6)$  in Abhängigkeit von der Gittergröße  $L$ .

L	$\tilde{V}^{-1} \cdot \overline{C_v/\beta^2}$	$\tilde{V}^{-1} \cdot \overline{\partial_\beta C_v}$	$\overline{U_2}$	$\tilde{V}^{-1} \cdot \overline{\partial_\beta U_2}$	$\overline{U_4}$	$\tilde{V}^{-1} \cdot \overline{\partial_\beta U_4}$
6	0.96807(82)E-03	0.12478(22)	-.25676(23)E-02	-.42809(74)E-04	-.34302(31)E-02	-.57177(99)E-04
8	0.54564(70)E-03	0.18516(47)	-.13937(18)E-02	-.19093(48)E-04	-.18604(24)E-02	-.25484(65)E-04
10	0.37702(75)E-03	0.27980(97)	-.9450(20)E-03	-.11523(41)E-04	-.12610(26)E-02	-.15377(54)E-04
12	0.29274(66)E-03	0.4200(16)	-.7258(17)E-03	-.8225(32)E-05	-.9683(23)E-03	-.10974(43)E-04
14	0.24838(77)E-03	0.6357(33)	-.6117(19)E-03	-.6662(35)E-05	-.8161(26)E-03	-.8887(46)E-05
16	0.22258(76)E-03	0.9487(53)	-.5459(19)E-03	-.5798(33)E-05	-.7283(25)E-03	-.7735(44)E-05
18	0.2070(10)E-03	1.397(11)	-.5063(25)E-03	-.5312(41)E-05	-.6754(33)E-03	-.7085(55)E-05

Tabelle 4.8: Extrema  $\max(C_v/\beta^2)$ ,  $\max(\partial_\beta(C_v/\beta^2))$ ,  $\min(U_2)$ ,  $\min(\partial_\beta U_2)$ ,  $\min(U_4)$ ,  $\min(\partial_\beta U_4)$  in Abhängigkeit von der Gittergröße  $L$ .

L	$\tilde{V}^{-2} \cdot \bar{\kappa}_3$	$\tilde{V}^{-3} \cdot \bar{\kappa}_4$	$\tilde{V}^{-4} \cdot \bar{\kappa}_5$	$\tilde{V}^{-5} \cdot \bar{\kappa}_6$
6	-1.5707(28)E-05	3.3703(84)E-07	5.579(18)E-08	-27.73(10)E-10
8	-.7373(19)E-05	1.2602(47)E-07	1.6119(73)E-08	-6.259(36)E-10
10	-.4563(16)E-05	0.6772(33)E-07	0.7368(45)E-08	-2.460(18)E-10
12	-.3303(13)E-05	0.4460(24)E-07	0.4363(29)E-08	-1.315(10)E-10
14	-.2698(14)E-05	0.3444(25)E-07	0.3153(28)E-08	-.8925(98)E-10
16	-.2360(13)E-05	0.2901(23)E-07	0.2548(25)E-08	-.6924(76)E-10
18	-.2169(17)E-05	0.2612(27)E-07	0.2237(29)E-08	-.5928(91)E-10

Tabelle 4.9: Extrema  $\min(\kappa_3)$ ,  $\max(\kappa_4)$ ,  $\max(\kappa_5)$ ,  $\min(\kappa_6)$ .

# Kapitel 5

## Störungstheoretische Betrachtungen

In diesem Kapitel wollen wir die soweit gewonnenen Resultate mit Aussagen der Störungstheorie im Bereich schwacher Kopplung ( $\beta = 1/e^2$  groß) konfrontieren. Eine perturbative Entwicklung der Zustandssumme, welche explizit die periodischen Randbedingungen des Gitters berücksichtigt, erlaubt eine halbanalytische Bestimmung der freien Energie in der Coulomb Phase  $F_I(\beta, L)$ . Eine zusätzliche Abschätzung der deutlich kleineren freien Energie der Confinement Phase  $F_{II}(\beta, L)$  ermöglicht die Vorhersage verschiedener Größen am Punkt des Phasengleichgewichts,  $F_I(\beta_{eq}(L), L) = F_{II}(\beta_{eq}(L), L)$ . Wir werden hieraus eine Vorhersage für das Skalenverhalten der pseudokritischen Kopplung  $\beta_{eq}(L)$  sowie für die Asymmetrie  $\log(X)$  des relativen Phasengleichgewichts am Phasenübergang gewinnen. Die zum Teil sehr aufwändigen Rechnungen dieses Kapitels sind detailliert in Anhang B wiedergegeben. Sie gehen im Wesentlichen auf Burkhard Bunk zurück und bilden die Grundlage einer gemeinsamen Veröffentlichung [76].

### 5.1 Notation

Wir betrachten die kompakte  $U(1)$  Eichtheorie in Gittereinheiten  $a = 1$  auf einem  $d$ -Torus  $L_1 \times L_2 \times \dots \times L_d$

$$\begin{aligned} Z &= \int DU e^{-S(U)} \\ U_\mu(x) &= e^{iA_\mu(x)} \\ DU &= \prod_{x\mu} \frac{dA_\mu(x)}{2\pi} \\ S(U) &= \beta \sum_p \operatorname{Re}(1 - U_p) \\ &= \frac{\beta}{2} \sum_{x\mu\nu} (1 - \cos F_{\mu\nu}(x)) \end{aligned}$$

$$= \beta \sum_{x\mu\nu} \sin^2 \frac{F_{\mu\nu}(x)}{2}. \quad (5.1)$$

und definieren das Systemvolumen  $V$ , die freie Energie  $F$  und die innere Energie  $E$

$$\begin{aligned} V &= L^d \\ Z &= e^F \\ E &= \partial_\beta F. \end{aligned}$$

## 5.2 Coulomb Phase

Durch die Addition eines zusätzlichen, explizit nicht eichinvarianten Terms zur Wirkung Gl. (5.1) fixieren wir analog zur Eichtheorie im Kontinuum die Eichung für eine Störungsentwicklung in der schwachen Kopplung

$$\begin{aligned} S_{\text{gf}} &= \frac{1}{\xi} \sum_x \frac{\beta}{2} (\bar{\partial}_\mu \text{Im} U_\mu(x))^2, \\ \bar{\partial}_\mu f(x) &= f(x) - f(x + \mu), \quad \bar{\partial}_\mu = \partial_\mu^\dagger. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Über eine spezielle Eichtransformation

$$U_\mu(x) \rightarrow U_\mu^\Omega(x) = \Omega(x) U_\mu(x) \Omega^\dagger(x + \mu) \quad (5.3)$$

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu^\Omega(x) = A_\mu(x) - B_\mu - \partial_\mu \varphi(x) \quad (5.4)$$

$$\text{mit } B_\mu \in [0, 2\pi/L_\mu] \quad (5.5)$$

$$\varphi(x) \in [0, 2\pi], \quad (5.6)$$

führen wir kollektive Koordinaten  $B_\mu$  und  $\varphi(x)$  ein. Die Faddeev-Popov Determinante  $\Delta_{FP}(U)$  dieser Koordinatentransformation ergibt sich aus dem Wert der eichfixierenden Wirkung zu

$$\Delta(U)^{-1} = \int D\Omega \exp S_{\text{gf}}(U^\Omega), \quad (5.7)$$

wobei  $\int D\Omega$  die Integration über alle Eichtransformationen meint. Wir erhalten damit die Identität

$$1 = \Delta_{FP}(A) \int \prod_\mu dB_\mu \prod_\mu \delta \left( B_\mu - V^{-1} \sum_x A_\mu(x) \right) \quad (5.8)$$

$$\int D\varphi \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_x [\bar{\partial}_\mu \sin[A_\mu(x) - B_\mu - \partial_\mu \varphi(x)]]^2 \right\} \quad (5.9)$$

$$\text{mit } D\varphi = \prod_x \frac{d\varphi(x)}{2\pi}. \quad (5.10)$$

$\Delta_{FP}(A)$  ist invariant unter Eichtransformationen im allgemeinen und der Transformation  $A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + B'_\mu + \partial_\mu \varphi'(x)$  im speziellen.

Wir schreiben für die Zustandssumme

$$Z = \int \prod_\mu dB_\mu \int D\varphi \int DU \Delta_{FP}(A) \prod_\mu \delta \left( B_\mu - V^{-1} \sum_x A_\mu(x) \right) \quad (5.11)$$

$$e^{-S(U)} \exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_x [\bar{\partial}_\mu \sin[A_\mu(x) - B_\mu - \partial_\mu \varphi(x)]]^2 \right\}, \quad (5.12)$$

und entwickeln  $A_\mu(x)$  um eine Konfiguration minimaler Wirkung  $S(U)$

$$A_\mu(x) = B_\mu + \partial_\mu \varphi(x) + a_\mu(x). \quad (5.13)$$

Wegen der Invarianz von  $S(U)$  und  $\Delta_{FP}(A)$  hängen beide nur von den Fluktuationen  $a_\mu(x)$  ab

$$Z = \int \prod_\mu dB_\mu \int D\varphi \int Da \Delta_{FP}(a) \prod_\mu \delta \left( V^{-1} \sum_x a_\mu(x) \right) \quad (5.14)$$

$$\exp \left\{ -\frac{\beta}{2} \sum_{x,\mu,\nu} (1 - \cos f_{\mu\nu}(x)) - \frac{\beta}{2} \sum_x [\bar{\partial}_\mu \sin a_\mu(x)]^2 \right\} \quad (5.15)$$

$$\text{mit } Da = \prod_x \frac{da_\mu(x)}{2\pi}. \quad (5.16)$$

$f_{\mu\nu}(x)$  stellt den Feldstärketensor (Gl. (2.28)) bezüglich  $a_\mu(x)$  dar. Nach der Isolation der Nullmoden und Ausführung der Integration über  $B_\mu$  und  $\varphi$

$$\prod_\mu \delta \left( V^{-1} \sum_x a_\mu(x) \right) = V^{D/2} \prod_\mu \delta \left( V^{-1/2} \sum_x a_\mu(x) \right) \quad (5.17)$$

$$\int \prod_\mu dB_\mu = (2\pi)^D V^{-1} \quad (5.18)$$

$$\int D\varphi = 1, \quad (5.19)$$

kann die Zustandssumme in erster Ordnung Störungstheorie berechnet werden

$$Z \simeq (2\pi\beta)^{-(3/2)(V-1)} V^{1/2} \prod_p' \left[ \sum_\mu 2(1 - \cos p_\mu) \right]^{-1} \quad (5.20)$$

$$\beta \rightarrow 1/e_R^2.$$

Das gestrichene Produkt  $\prod_p'$  meint die Auslassung von  $p = 0$ . Da die Störungstheorie in lediglich erster Ordnung das Rennen der Kopplung nicht wiedergeben kann,



beschreiben wir die Zustandssumme über die renormierte Kopplung  $e_R$ . Der Wert dieser Kopplung in unmittelbarer Nähe des Phasenübergangs muss über eine Extrapolation nicht-störungstheoretischer Messungen in der Coulomb-Phase auf dem Gitter ermittelt werden.

Die in der Berechnung der freien Energie  $F = \log Z$  auftauchenden Modensummen sind im Anhang B detailliert behandelt. Wir zitieren hier nur das Resultat der Gitterregularisierung im isotropen Fall  $L_k = L$  aus Anhang B.2:

$$\begin{aligned} -\zeta'_d(0; L_1 \dots L_d) &= \sum'_p \log \sum_\mu 2(1 - \cos p_\mu) \\ &= b_d L^d + 2 \log L - f_d(L_1 \dots L_d) - f_d^{(1)}(L_1 \dots L_d) L^{-2} + \mathcal{O}(L^{-4}) \end{aligned}$$

$d$	$b_d$	$f_d$	$f_d^{(1)}$
1	0	0	0
2	1.166244	1.054688	0.501531
3	1.673389	1.453847	1.484069
4	<b>1.999708</b>	<b>1.701216</b>	<b>3.122151</b>

Tabelle 5.1:  $b_d$ ,  $f_d$  und  $f_d^{(1)}$  für ein hyperkubisches Gitter

Die freie Energie der Coulombphase für das 4d isotrope Gitter mit periodischen Randbedingungen berechnet sich zu

$$\begin{aligned} F_I = \log Z &= -\frac{3}{2}(V-1) \log\left(\frac{2\pi}{e_R^2}\right) + \log(V^{1/2}) - \sum'_p \log \sum_\mu 2(1 - \cos p_\mu) \\ &\equiv V f_I(\beta) + \Delta F_I(\beta, L) \end{aligned} \quad (5.21)$$

$$\text{mit } \Delta F_I(\beta, L) = \frac{3}{2} \log\left(\frac{2\pi}{e_R^2}\right) + f_4 + f_4^{(1)} L^{-2} + \mathcal{O}(L^{-4}) . \quad (5.22)$$

Dazu sind zwei wesentliche Anmerkungen zu machen:

- Der logarithmische Term der Modensumme  $2 \log(L)$  hebt sich nur in 4 Dimensionen gegen  $\log(V^{1/2})$  heraus. Damit haben wir bis einschliesslich  $\mathcal{O}(L^{-2})$  keine logarithmischen Beiträge zu den Korrekturen der freien Energie.
- Das Fehlen derartiger logarithmischer Korrekturterme ist ebenfalls spezifisch für das isotrope Gitter  $L_\mu = L$ . Die Geometrie  $V = L^3 \times T$ ,  $T \gg L$  beispielsweise führt auf folgende Modensumme:

$$\sum'_p \log \sum_\mu 2(1 - \cos p_\mu) = b_4 V + 2 \log T - g_3 \frac{T}{L} + \mathcal{O}(e^{-2\pi T/L}) . \quad (5.23)$$

Den Wert der Kopplung  $e_R$  entnehmen wir der Literatur. Mit dem in Ref. [11] zitierten endlichen Wert der renormierten Feinstrukturkonstante am Phasenübergang  $\alpha_T = e_R^2/4\pi = 0.19(1)$  (in Übereinstimmung mit [10]) sind wir in der Lage, die freie Energie der Coulombphase aus Gl. (5.22) numerisch zu bestimmen:

$$\Delta F_I(\beta_T, L = \infty) = 3.15 (8) . \quad (5.24)$$

Die Genauigkeit ist ausschließlich durch den Fehler der renormierten Kopplung gegeben. Die Konstanten  $f_d$  und  $f_d^{(1)}$  sind numerisch beliebig genau berechenbar.

### 5.3 Confinement Phase

In der Confinement Phase dominieren *Eichbälle* und *Stringzustände* das Finite Size Verhalten. In [77] wurde die Zustandssumme einer Grenzfläche mit periodischen Randbedingungen berechnet, deren  $d$ -dimensionelle Oberfläche  $L^d$  durch die Koordinaten  $0 \leq x_k \leq L_k$ ,  $k = 1, \dots, d$  parametrisiert sei. Die Fluktuationen dieser Grenzfläche gegen die Oberflächenspannung  $\sigma$  seien durch Auslenkungen  $z_\alpha(x)$ ,  $\alpha = 1, \dots, d_\perp$  im verbleibenden transversalen Raum  $T^{d_\perp}$  gegeben. Damit läßt sich die Zustandssumme

$$Z_{\text{interface}} = \int D[z] \exp(-\sigma \int dA) , \quad (5.25)$$

angeben, wobei  $dA$  ein Flächenelement der Phasengrenzfläche sei. Für  $\sigma L^d \gg 1$  betrachten wir in quadratischer Näherung der Wirkung

$$Z_{\text{interface}} \simeq \int D[z] \exp(-\sigma L^d - \frac{\sigma}{2} \int d^d x [\nabla z(x)]^2) . \quad (5.26)$$

Analog zur Coulombphase kann über eine Koordinatentransformation (hier eine globale Translation) die Nullmode des quadratischen Terms separiert werden. Es verbleibt die Summe über alle Impulse  $p_k = (2\pi n_k)/L_k \neq 0$

$$Z_{\text{interface}} \simeq T \left( \frac{\sigma L^d}{2\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \exp(-\sigma L^d - \frac{1}{2} \sum_p' \log p^2) . \quad (5.27)$$

Die Regularisierung der Summe  $\sum_p' \log p^2$  unter Verwendung der  $\zeta$ -Funktion ist im Anhang Anhang B beschrieben. Wir können das Ergebnis mit Hilfe der bereits bekannten Koeffizienten  $f_d$  aus Tab. 5.1 ausdrücken:

$$Z_{\text{interface}} \simeq \left( T c_d \sigma^{\frac{1}{2}} L^{\frac{d}{2}-1} \right)^{d_\perp} \exp(-\sigma L^d), \quad \text{für } \sigma L^d \rightarrow \infty, \quad (5.28)$$

$$\sigma_d = \sqrt{2} e^{\frac{1}{2}(f_d - \log 4\pi)} \quad (5.29)$$

$$\text{mit } c_1 = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \quad (5.30)$$

$$c_2 = 0.675978$$

$$c_3 = 0.825294$$

Man beachte, dass für das isotropische 4d-Gitter  $T = L$  und  $d_{\perp} = 4 - d$  gilt.

Ein **Eichball** als periodisch geschlossener Loop um ein 1d Objekt der Länge  $L$  liefert mit Masse  $\sigma = m_{gb}$  den dominanten Beitrag zum finite size Effekt:

$$Z_{gb} = \left( \frac{m_{gb}L}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-m_{gb}L} \quad (5.31)$$

Die leichtesten Eichbälle  $0^{++}$  der Masse  $m_{0^{++}} \approx 0.35$ <sup>1</sup> liefern den größten Beitrag. Eine Analyse von Gl. (5.31) zeigt, dass schwerere Eichbälle der Masse  $m = xm_{0^{++}}$ ,  $x \geq 1$  mit kleinerem  $Z$  beitragen sofern  $x - 3/(2m_{0^{++}}L) \log x > 1$ . Für den eigentlichen Gültigkeitsbereich von Gl. (5.31)  $mL \gg 1$  ist diese Bedingung trivial erfüllt.

Ein 2d **Stringzustand** der Größe  $L \times L$  trägt gemäß Gl. (5.31) mit

$$Z_{st} = c_2^2 (\sigma_{st}L^2) e^{-\sigma_{st}L^2} \quad (5.32)$$

bei. Mit der Stringtension  $\sigma_{st} \approx 0.06$  berechnen wir die Eichball- und Stringbeiträge approximativ für die von uns untersuchten Gitter:

$L$	$Z_{gb}$	$Z_{st}$
6	.023661	.113826
8	.018090	.037714
10	.012555	.006796
12	.008195	.000698
14	.005128	.000042
16	.003111	.000001
18	.001844	$3 \times 10^{-8}$

## 5.4 Phasengleichgewicht

Wir definieren die Kopplung des Phasengleichgewichts,  $\beta_{eq}(L)$ , durch die Forderung gleich großer freier Energien in den beiden koexistierenden Phasen:

$$F_I(\beta_{eq}(L), L) = F_{II}(\beta_{eq}(L), L) . \quad (5.33)$$

Im Kontinuumslimites  $L \rightarrow \infty$ , reduziert sich das Phasengleichgewicht auf die Gleichheit der *bulk*-Beiträge

$$f_I(\beta_{eq}(\infty)) = f_{II}(\beta_{eq}(\infty)) . \quad (5.34)$$

---

<sup>1</sup>Die approximative Bestimmung der Eichballmasse  $m_{0^{++}}$  und der Stringtension  $\sigma_{st}$  basiert auf Simulationen bei  $\beta = 1.010$  auf Gittern der Größe  $L = 12, 14, 16$  [78].

Der Finite Fize Effekt der Confined Phase ist aufgrund der Exponentialterme in Gl. (5.31) und (5.32) um mehrere Größenordnungen kleiner als der Beitrag  $\exp(\Delta F_I)$  der Coulomb Phase. Diese Aussage gilt nicht erst im Limes unendlich großer Volumina, sondern bereits im Regime der von uns betrachteten Gittergrößen. Wir nähern daher im folgenden den Finite Size Effekt des gesamten Systems durch den Beitrag der Coulomb Phase.

Eine Entwicklung von  $\beta_{eq}$  um den Kontinuumswert

$$\beta_{eq}(L) = \beta_{eq}(\infty) + \delta\beta , \quad (5.35)$$

ergibt für Gl. (5.33) unter Ausnutzung von Gl. (5.34)

$$E_I \delta\beta + \Delta F_I = E_{II} \delta\beta . \quad (5.36)$$

Die Energie  $E_i = \partial_\beta F_i$  steht für die innere Energie der jeweiligen Phase am Phasenübergang  $\beta_{eq}(\infty)$ . Mit dem Gap  $G = \frac{E_I - E_{II}}{6V}$ , der Diskontinuität in der Plaquette Energie, können wir Gl. (5.36) umschreiben

$$\delta\beta = -\frac{1}{6} \Delta F_I G^{-1} L^{-4} . \quad (5.37)$$

Damit erhalten wir die FSS Korrektur der Gleichgewichtskopplung:

$$\beta_{eq}(L) = \beta_{eq}(\infty) - c_4 L^{-4} - c_4^{(1)} L^{-6} + O(L^{-8}) \quad (5.38)$$

$$\text{mit } c_4 = \frac{1}{6} \left( f_4 + \frac{3}{2} \log\left(\frac{2\pi}{e_R^2}\right) \right) G^{-1}, \quad (5.39)$$

$$c_4^{(1)} = \frac{1}{6} f_4^{(1)} G^{-1} . \quad (5.40)$$

## 5.5 Vergleich mit der Simulation

Das Resultat Gl. (5.38) weist auf einen Phasenübergang erster Ordnung hin. Die Differenz der inneren Energien für das unendlich ausgedehnte System ist von Null verschieden Gl. (5.36). Wegen des verschwindenden Beitrags der Confined Phase  $\Delta F_{II}$  zur freien Energie für  $V \rightarrow \infty$  ist die Differenz der inneren Energien durch den endlichen Term in  $\Delta F_I$  (Gl. (5.22)) gegeben. Die führende Korrektur zur kritischen Kopplung ist daher  $\sim L^{-4}$ .

Da  $\Delta F_{II}$  im Kontinuumsmlimes verschwindet, ergibt  $\Delta F_I$  des unendlich großen Systems am Phasenübergang  $\beta_T$  (Gl. (5.24)) einen Schätzwert für die Asymmetrie des Systems.

$$\log(X) = \Delta F_I(\beta_T, L = \infty) = 3.15 (8) . \quad (5.41)$$

Inspektion von Gl. (5.38) und Gl. (4.20) zeigt, dass  $c_4$  dem Koeffizienten des ersten Borgs-Kotecky Korrekturterms  $B_1$  entspricht. In Übereinstimmung mit [73] leiten wir aus Gl. (5.39) ab

$$B_1 = -\frac{\log(X)}{6G} . \quad (5.42)$$

Eine Mittelung der fettgedruckten Resultate für  $B_1$  in Tab. 4.1 ergibt zusammen mit dem Wert des Gaps  $G$  aus Gl. (4.44)

$$\log(X) = 3.21 (10) , \quad (5.43)$$

als Schätzwert der Asymmetrie im Rahmen des Borgs-Kotecky FSS. Wir konstatieren volle Übereinstimmung mit  $\log(X) = 3.18(12)$  aus [44] und mit dem *unabhängigen* Resultat der Störungstheorie auf dem Gitter in Gl. (5.41).

Die halbanalytische Vorhersage der führenden Ordnung der Störungsentwicklung in der renormierten Kopplung stimmt überraschend gut mit dem Resultat der Finite-size-scaling Analyse überein. Das Auftreten eines Terms  $\sim L^{-6}$  in Gl. (5.38) beinhaltet allerdings eine Abweichung von der Borgs-Kotecky Vorhersage. Die Größe dieser Abweichungen kann jedoch ohne die Kenntnis der Terme höherer Ordnung in der Störungsentwicklung nicht genauer quantifiziert werden. Solche Abweichungen relativieren das heuristisch auf die  $U(1)$  Gittertheorie übertragene BK-Verfahren zu einem effektiven Verfahren. Abweichungen vom asymptotischen Skalenverhalten in Form höherer Korrekturterme bleiben phänomenologischer Natur, solange keine FSS-Theorie spezifisch für die jeweilige Gittertheorie hergeleitet werden kann.<sup>2</sup>

Entscheidend für die Ordnung des Phasenübergangs ist der asymptotische Term  $\sim L^{-4}$ , welcher durch die in diesem Kapitel berechneten Kopplungskorrekturen bestätigt wird. Damit stellt der nicht verschwindende  $L^{-6}$  Term unsere Schlussfolgerung eines endlichen Gaps und damit eines diskontinuierlichen Phasenübergangs keineswegs in Frage.

---

<sup>2</sup>Es ist in diesem Zusammenhang instruktiv, entsprechende Untersuchungen zum dreidimensionalen 3-Zustände Pottsmodell [70] zu machen, welches ebenfalls einen Phasenübergang schwach erster Ordnung aufweist. Die Autoren stellen auch dort Abweichungen zur  $1/V$  Entwicklung der Korrekturen fest.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, die Ordnung des Phasenübergangs in der über die Wilson-wirkung definierten reinen U(1)-Gittereichtheorie in vier Dimensionen zu ermitteln.

Dazu wurde eine parallele Implementation des multikanonischen Hybrid Monte Carlo Algorithmus (MHMC) entwickelt, welche in der Lage ist, auch Systeme größer  $12^4$  effektiv zu simulieren. Die durchgeführten Simulationen bis zur Größe  $18^4$  konnten zeigen, dass es mit Hilfe des MHMC möglich ist, das statistische Gewicht der in der Nähe des Phasenübergangs unterdrückten Konfigurationen zwischen Confined- und Coulombphase anzuheben und ein Sample mit hinreichend konstanter Energiedichte zu generieren. Die Messung der integrierten Autokorrelation zeigte die Überwindung des exponentiellen *Slowing down*. Eine Untersuchung der Performanz des MHMC auf zwei unterschiedlichen Rechner-Plattformen ergab, dass der parallele Algorithmus gut mit der Zahl der verwendeten Prozessoren skaliert. Wir konnten die Erzeugung der  $\mathcal{O}(10^6 - 10^7)$  Konfigurationen je Gittergröße mit Gewinn auf  $8 \leq p \leq 64$  Prozessoren verteilen.

Um die Arbeitshypothese eines Phasenübergangs schwach erster Ordnung von einem Übergang zweiter Ordnung abgrenzen zu können, untersuchten wir das Skalieren von zehn algebraisch unabhängigen Momenten der Plaquettenenergie auf den Volumina  $V = L^4$  mit  $L = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18$ . Im Rahmen des Borgs-Kotecky *Finite-size-scaling* (FSS) Szenarios, dessen Anwendung auf die U(1) Gittereichtheorie soweit nur heuristisch motiviert ist, konnten wir einen präzisen und stabilen Schätzwert für die kritische Kopplung  $\beta_T = 1.0111331(21)$  bestimmen. Die Genauigkeit des Resultats konnte mit einem relativen Fehler von  $2 \cdot 10^{-6}$  gegenüber der Literatur um 2 Größenordnungen verbessert werden. Die Stabilität der kritischen Kopplung (zum einen bezüglich der maximalen Ordnung der Korrekturterme des Fitansatzes als auch bezüglich der gewählten Observable) weist diese Messung als solide Grundlage für die Analyse des Phasenübergangs aus. Die Untersuchung der pseudokritischen Kopplung einer Observablen mit nur exponentiellen FSS-Korrekturen bestätigte den Wert der kritischen Kopplung mit vergleichbarer Genauigkeit und unabhängig vom obigen Fitansatz.

Der Borgs-Kotecky Zugang für die Kumulantenextrema lieferte akzeptable Genauigkeit und Stabilität sowohl für die spezifische Wärme als auch für die beiden Binder Kumulanten. Die höheren Ableitungen der freien Energie  $\kappa_{4,5,6}$  zeigten ein durch schnellere Konvergenz verbessertes Skalenverhalten. Von besonderer Bedeutung für die Bestimmung der Ordnung des Phasenübergangs ist der aus dem FSS resultierende Wert der latenten Wärme im Kontinuumslimites  $G = 0.026721(59)$  und der Wert des Minimums der Binder Kumulante  $U_4$  für das unendlich ausgedehnte System  $U = -5.816(27) 10^{-4}$ .

Weder die Kopplungen noch die Extrema der Kumulanten selbst ließen sich auf der Grundlage unserer Daten durch einen asymptotischen Fitansatz zweiter Ordnung hinreichend beschreiben. In keinem Fall konnte Stabilität der Kopplung des Kumulanten oder des kritischen Exponenten erlangt werden.

Die Hypothese eines diskontinuierlichen Phasenübergangs wurde über eine „direkte“ Messung des Energiegaps  $\tilde{G}$  des unendlich großen Systems weiter erhärtet. Dazu wurden unsere Simulationen der Systeme  $L \leq 18$  um metastabile Simulationen der Systeme  $L = 20, 22, 24, 28, 32$  exakt am Phasenübergang  $\beta_T$  ergänzt. Wir ermitteln die Positionen der Energiedichtepeaks  $e_i(L)$  in der Coulomb- und in der Confined Phase. Ein exponentieller Fit erlaubt die Bestimmung des Gaps  $\tilde{G} = e_1(\infty) - e_2(\infty)$ . Wir konstatieren für  $\tilde{G} = 0.026685(54)$  und für den Wert der Binder Kumulanten  $\tilde{U} = -5.777(16) 10^{-4}$  Übereinstimmung mit den jeweiligen Werten der Borgs-Kotecky FSS  $G$  und  $U$ . Entscheidend für die Beantwortung der Frage nach der Ordnung des Phasenübergangs ist die Bestätigung, dass der Wert des Gaps im Grenzwert unendlich großer Systeme von Null verschieden ist. Wir betonen, dass dieses Ergebnis auf der Annahme genauer Kenntnis von  $\beta_T$  beruht. Insofern können wir schließen, dass unsere Daten ein sehr konsistentes Bild eines Phasenübergangs erster Ordnung liefern.

Die von Burkhard Bunk durchgeführte Berechnung der freien Energien in Coulomb- und Confined Phase in erster Ordnung Störungstheorie auf dem Gitter erlaubt in Kombination mit einer Extrapolation der renormierten Kopplung die halbanalytische Berechnung eines Schätzwertes für die Asymmetrie  $\log(X) = 3.15(8)$ . Dieser Wert stimmt mit unserem numerischen Resultat des  $1/V$ -Korrekturterms der Kopplung von  $\log(X) = 3.21(10)$  hervorragend überein. Diese Form der Störungstheorie auf dem Gitter bestätigt überdies das asymptotische Skalieren der Kopplung erster Ordnung  $\sim L^{-4}$ .<sup>1</sup> Wir resümieren, dass die halbanalytische Störungstheorie auf dem Gitter mit dem Borgs-Kotecky FSS konsistente Resultate in führender Ordnung des Skalenverhaltens der kritischen Kopplung liefert.

Die im Kontinuumslimites von Null verschiedene latente Wärme  $\tilde{G}$  ist als numerischer Nachweis der Diskontinuität des Phasenübergangs in der fundamentalen Darstellung der 4d kompakten U(1) Gittereichtheorie zu werten.

---

<sup>1</sup>Bemerkenswert ist, dass dies nur in der vierdimensionalen U(1) gilt. In Dimensionen  $\neq 4$  tauchen führende Terme  $\sim \log(L)$  auf.

# Anhang A

## Datenanalyse

### A.1 Integrierte Autokorrelation

Um den statistischen Fehler des geschätzten Ensemblemittelwertes

$$\hat{\mu}_{\mathcal{O}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}_i, \quad (\text{A.1})$$

zu ermitteln, müssen wir der Korrelation des Samples  $\mathcal{O}_i = \mathcal{O}(\phi_i)$  der Markovkette  $\{\phi_i\}$ ,  $i = 1, \dots, N$  Rechnung tragen. Zunächst ein Hinweis zur Nomenklatur:  $\mu$ ,  $C(t)$  und  $\tau_{\text{int}}$  sind reelle Zahlwerte der tatsächlichen statistischen Größen, während es sich bei deren Approximation (Schätzwert) um Zufallsvariablen handelt. Diese Schätzwerte sind durch Hüte gekennzeichnet. Wir verstehen in Übereinstimmung mit Gl. (3.38) aus Kapitel 3.2.2 unter  $\langle \rangle$  den *tatsächlichen Erwartungswert* des jeweiligen Operators.

Die Varianz des geschätzten Ensemblemittelwertes berechnet sich zu

$$\begin{aligned} \sigma_{\hat{\mu}_{\mathcal{O}}}^2 &= \langle \hat{\mu}_{\mathcal{O}}^2 \rangle - \langle \hat{\mu}_{\mathcal{O}} \rangle^2 \quad \text{wobei} \quad \langle \hat{\mu}_{\mathcal{O}} \rangle = \mu_{\mathcal{O}} \\ &= \frac{1}{N^2} \langle \sum_{i,k=1}^N \mathcal{O}_i \mathcal{O}_k \rangle - \mu_{\mathcal{O}}^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,k=1}^N (\langle \mathcal{O}_i \mathcal{O}_k \rangle - \mu_{\mathcal{O}}^2) \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,k=1}^N C_{\mathcal{O}}(i-k) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{t=-(N-1)}^{N-1} \left(1 - \frac{|t|}{N}\right) C_{\mathcal{O}}(t) \\ &\approx \frac{1}{N} 2\tau_{\text{int}}(\mathcal{O}) C_{\mathcal{O}}(0) \quad \text{für } N \gg \tau. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$



Hierbei ist  $\tau$  die für den exponentiellen Abfall der normierten Autokorrelationsfunktion  $\rho_{\mathcal{O}}(t) \sim \exp(-|t|/\tau)$  charakteristische Zeit  $\tau_{\text{exp}}(\mathcal{O}) \approx \tau_{\text{int}}(\mathcal{O})$ .

Um das Resultat aus Gl. (A.2) für die Fehlerberechnung anwendbar zu machen, müssen wir sinnvolle Schätzwerte für die a priori unbekanntes Größen  $C_{\mathcal{O}}(t)$  und  $\tau_{\text{int}}(\mathcal{O})$  finden. Wir fordern für einen Schätzwert, dass dessen Varianz im Limes  $N \rightarrow \infty$  verschwindet. Der naheliegende Schätzwert der Autokorrelationsfunktion

$$\hat{C}_{\mathcal{O}}(t) = \frac{1}{N - |t|} \sum_{i=1}^{N-|t|} (\mathcal{O}_i - \hat{\mu}_{\mathcal{O}})(\mathcal{O}_{i+|t|} - \hat{\mu}_{\mathcal{O}}), \quad (\text{A.3})$$

erfüllt diese Forderung. Analog lässt sich auch die normierte Autokorrelationsfunktion  $\hat{\rho}_{\mathcal{O}}(t) = \hat{C}_{\mathcal{O}}(t)/\hat{C}_{\mathcal{O}}(0)$  abschätzen. Hingegen führt der naive Ansatz

$$\hat{\tau}_{\text{int,naiv}}(\mathcal{O}) = \frac{1}{2} \sum_{t=-(N-1)}^{N-1} \hat{\rho}_{\mathcal{O}}(t), \quad (\text{A.4})$$

zu einer nichtverschwindenden Varianz und stellt damit eine unbrauchbare Abschätzung dar [79]. Wählt man jedoch, wie in Ref. [80] vorgeschlagen, für den symmetrischen Summationsbereich einen *cutoff*  $M$ , der das Rauschen von  $\hat{\rho}_{\mathcal{O}}(t)$  bei grossem  $|t|$  unterdrückt, so kann  $\tau_{\text{int}}$  selbstkonsistent approximiert werden durch

$$\hat{\tau}_{\text{int,M}}(\mathcal{O}) = \frac{1}{2} \sum_{t=-M}^M \hat{\rho}_{\mathcal{O}}(t). \quad (\text{A.5})$$

Selbstkonsistent meint hier, dass das Ergebnis für hinreichend hohes  $N$  stabil gegenüber Variation von  $M$  in einem sinnvoll gewählten Bereich ist. Wir wählen ganzzahlige Werte aus dem Intervall

$$M \in [4\hat{\tau}_{\text{int,M}}, 8\hat{\tau}_{\text{int,M}}]. \quad (\text{A.6})$$

Die Varianz des so berechneten Schätzwertes  $\hat{\tau}_{\text{int,M}}$  kann approximiert werden durch [79]:

$$\sigma^2(\hat{\tau}_{\text{int,M}}) \approx \frac{2(2M+1)}{N} \hat{\tau}_{\text{int,M}}^2. \quad (\text{A.7})$$

Es sei angemerkt, dass die Wahl größerer Werte von  $M$  in der Bestrebung,  $\tau_{\text{int}}$  genauer bestimmen zu können, nur in Verbindung mit einer sehr viel längeren Markovkette sinnvoll ist ( $\hat{\tau}_{\text{int,M}} < M \ll N$ ).

## A.2 Jackknife Fehleranalyse

Die Analyse korrelierter Daten kann ohne die zumeist numerisch schwer zugängliche Auswertung der Kovarianzmatrix durch die Analyse von Teilensembles der Gesamtstatistik erfolgen.

Wir bilden aus einem bestehenden Sample  $S = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$  von  $N$  Konfigurationen  $N_{blk}$  Subsamples  $S_i$  durch Auslassung von Blöcken der Länge  $l = N/N_{blk}$

$$S_i = \{\phi_1, \dots, \phi_{l \cdot (i-1)}, \phi_{l \cdot (i+1)}, \dots, \phi_N\} . \quad (\text{A.8})$$

Die Messung einer Observablen  $\mathcal{O}$  auf dem Subsample  $i$  bezeichnen wir mit  $\mathcal{O}_i$ . Der Mittelwert des Gesamtsamples ergibt sich zu

$$\hat{\mu}_{\mathcal{O}} = \frac{1}{N_{blk}} \sum_{i=1}^{N_{blk}} \mathcal{O}_i . \quad (\text{A.9})$$

Dessen Fehler kann für hinreichend großes  $l$  durch

$$\Delta_l = \sqrt{\frac{N_{blk} - 1}{N_{blk}} \sum_{i=1}^{N_{blk}} (\mathcal{O}_i - \hat{\mu}_{\mathcal{O}})^2} , \quad (\text{A.10})$$

geschätzt werden. Der Fehler steigt in der Regel mit der Blocklänge  $l$  an. Erst ab einer Blocklänge  $l_{min}$  läuft der Fehler der geblockten Daten in ein Plateau.

# Anhang B

## Modensummen

### B.1 $\zeta$ -Funktion Regularisierung

#### B.1.1 Definitionen

Wir betrachten eine Box der Größe  $L_1 \times L_2 \times \dots \times L_d$  mit periodischen Randbedingungen in allen Richtungen  $\mu = 1, \dots, d$ . Das Volumen dieser Box definieren wir  $L$

$$L^d \equiv L_1 \cdots L_d. \quad (\text{B.1})$$

Die möglichen Impulse eines Systems dieser Geometrie sind abzählbar unendlich

$$p_k = \frac{2\pi n_k}{L_k}, \quad n_k \in \mathbb{Z}. \quad (\text{B.2})$$

Modensummen, wie

$$\sum'_p \log p^2, \quad (\text{B.3})$$

$$\sum'_p |p|, \quad (\text{B.4})$$

sind daher nur formale Ausdrücke, die *regularisiert* werden müssen.

Wir definieren die generalisierte  $\zeta$ -Funktion

$$\zeta_d(s; L_1 \dots L_d) \equiv \sum'_p (p^2)^{-s}, \quad (\text{B.5})$$

die für hinreichend großen  $\text{Re } s$  analytisch ist. Eine analytische Fortsetzung liefert die regularisierten Modensummen [81]

$$-\zeta'_d(0; L_1 \dots L_d) = \sum'_p \log p^2, \quad (\text{B.6})$$

$$\zeta_d(-1/2; L_1 \dots L_d) = \sum'_p |p|. \quad (\text{B.7})$$

## B.1.2 Integraldarstellung

Exponenziere  $(p^2)^{-s}$  und führe die Summation der Moden mit Hilfe von Gl. (B.72) und Gl. (B.88) aus:

$$\begin{aligned}
\zeta_d(s; L_1 \dots L_d) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \sum'_p \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-tp^2} \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \prod_k \Omega(4\pi t/L_k^2) - 1 \right] \\
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \left( \frac{L^2}{4\pi} \right)^s \int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - 1 \right]. \quad (\text{B.8})
\end{aligned}$$

Da  $\Omega(t) \simeq t^{-1/2}$  für  $t \rightarrow 0$  (Gl. (B.87)), ist die Integraldarstellung gültig im Bereich  $\text{Re } s > d/2$ . Addition/Subtraktion von Termen verbessert die Konvergenz des Integrals bei kleinem  $t$ :

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - 1 \right] \\
&= \int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - t^{-d/2} \theta(1-t) - \theta(t-1) \right] \\
&\quad + \int_0^1 dt [t^{s-1-d/2} - t^{s-1}] \\
\Rightarrow \zeta_d(s; L_1 \dots L_d) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \left( \frac{L^2}{4\pi} \right)^s \left\{ \frac{1}{s-d/2} - \frac{1}{s} \right. \\
&\quad \left. + \int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - t^{-d/2} \theta(1-t) - \theta(t-1) \right] \right\} \quad (\text{B.9})
\end{aligned}$$

Damit ist der Pol  $s = d/2$  isoliert und die analytische Fortsetzung nach  $s \approx 0$  offensichtlich:

$$\frac{1}{\Gamma(s)} = s + \mathcal{O}(s^2) \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{s\Gamma(s)} &= \frac{1}{\Gamma(1+s)} \\
&= 1 + C_E s + \mathcal{O}(s^2) \quad (\text{B.11})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow -\zeta'_d(0; L_1 \dots L_d) &= \frac{2}{d} + \log \frac{L^2}{4\pi} + C_E \\
&\quad - \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - t^{-d/2} \theta(1-t) - \theta(t-1) \right] \\
&= 2 \log L - f_d(L_1 \dots L_d) \quad (\text{B.12})
\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}
f_d(L_1 \dots L_d) &\equiv \log 4\pi - C_E - \frac{2}{d} \\
&\quad + \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - t^{-d/2} \theta(1-t) - \theta(t-1) \right] \quad (\text{B.13}) \\
&= \log 4\pi - C_E - \frac{2}{d} \\
&\quad + \int_0^1 \frac{dt}{t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - t^{-d/2} \right] \\
&\quad + \int_0^1 \frac{dt}{t} \left[ t^{d/2} \prod_k \Omega\left(\frac{L_k^2}{L^2} t\right) - 1 \right]
\end{aligned}$$

$C_E$  ist Eulers Konstante. Für die letzten Schritt wurde das Integrationsintervall bei  $t = 1$  aufgesplittet und vermittels  $t \rightarrow t^{-1}$  der Bereich  $[1, \infty)$  nach  $[0, 1]$  abgebildet. Benutze anschliessend Gl. (B.86). Das Resultat Gl. (B.12) bleibt unverändert, wenn höhere Terme der Entwicklungen Gl. (B.10) und (B.11) berücksichtigt werden, da diese für  $s = 0$  nicht beitragen.

$$\Gamma(-1/2) = -2\sqrt{\pi} \quad (\text{B.14})$$

$$\Rightarrow \zeta_d(-1/2; L_1 \dots L_d) = -L^{-1} g_d(L_1 \dots L_d) \quad (\text{B.15})$$

mit

$$\begin{aligned}
g_d(L_1 \dots L_d) &\equiv \frac{2d}{d+1} \\
&\quad + \int_0^\infty dt t^{-3/2} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - t^{-d/2} \theta(1-t) - \theta(t-1) \right] \\
&= \frac{2d}{d+1} \\
&\quad + \int_0^1 dt t^{-3/2} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - t^{-d/2} \right] \\
&\quad + \int_0^1 dt t^{-1/2} \left[ t^{d/2} \prod_k \Omega\left(\frac{L_k^2}{L^2} t\right) - 1 \right] \\
&= \int_0^\infty dt t^{-3/2} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2} t\right) - t^{-d/2} \right] \quad (\text{B.16})
\end{aligned}$$

Für eine hyperkubische Box  $L_k = L$  erhalten wir

$$f_d = \log 4\pi - C_E - \frac{2}{d} + \int_0^1 \frac{dt}{t} (1 + t^{d/2}) [\Omega(t)^d - t^{-d/2}] \quad (\text{B.17})$$

$$g_d = \frac{2d}{d+1} + \int_0^1 \frac{dt}{t} (t^{-1/2} + t^{(d+1)/2}) [\Omega(t)^d - t^{-d/2}] \quad (\text{B.18})$$

$d$	$f_d$	$g_d$
1	0	1.047198
2	1.054688	1.437746
3	1.453847	1.675074
4	1.701216	1.864154

Tabelle B.1:  $f_d$  und  $g_d$  für eine hyperkubische Box

### B.1.3 $d = 1$

Im eindimensionalen Fall bestätigen wir

$$\zeta_1(s; L) = 2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^{2s} \zeta_R(2s) \quad (\text{B.19})$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow -\zeta_1'(0; L) &= -4\zeta_R(0) \log \frac{L}{2\pi} - 4\zeta_R'(0) \\ &= 2 \log L \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

$$\Rightarrow f_1 = 0 \quad (\text{B.21})$$

$$\begin{aligned} \zeta_1(-1/2; L) &= \frac{4\pi}{L} \zeta_R(-1) \\ &= -\frac{\pi}{3L} \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

$$\Rightarrow g_1 = \pi/3. \quad (\text{B.23})$$

## B.2 Gitter-Regularisierung

### B.2.1 Definitionen

Wir definieren ein periodisches Gitter der Größe  $L_1 \times L_2 \times \dots \times L_d$  mit Gitterabstand  $a$ . Das Volumen definiert wie im Falle der Box im Kontinuum  $L$ :

$$L^d \equiv L_1 \cdots L_d \quad (\text{B.24})$$

Auf dem Gitter darstellbare Impulse:

$$p_k = \frac{2\pi n_k}{L_k}, \quad n_k = 0 \dots (L_k - 1) \quad (\text{B.25})$$

Die Modensummen

$$\sum_p' \log \sum_k 2(1 - \cos p_k), \quad (\text{B.26})$$

$$\sum_p' \epsilon(p), \quad (\text{B.27})$$

sind mit  $(L^d - 1)$  Termen **endlich**.  $\epsilon(p) \geq 0$  ist definiert über:

$$\sinh^2 \frac{\epsilon(p)}{2} \equiv \sum_k \sin^2 \frac{p_k}{2} \quad (\text{B.28})$$

$$\Rightarrow \sum_k 2(1 - \cos p_k) = 2 \cosh \epsilon(p) - 2 \quad (\text{B.29})$$

$$\Rightarrow \int \frac{dp_{d+1}}{2\pi} \log \sum_{k=1}^{d+1} 2(1 - \cos p_k) = \epsilon(p). \quad (\text{B.30})$$

Die letzte Zeile folgt aus Gl. (B.107).

Führe generalisierte  $\zeta$ -Funktionen ein:

$$\zeta_d(s; L_1 \dots L_d) \equiv \sum_p' \left( \sum_k 2(1 - \cos p_k) \right)^{-s} \quad (\text{B.31})$$

$$\Rightarrow -\zeta_d'(0; L_1 \dots L_d) = \sum_p' \log \sum_k 2(1 - \cos p_k) \quad (\text{B.32})$$

$$\xi_d(s; L_1 \dots L_d) \equiv \sum_{p_1 \dots p_d}' \int \frac{dp_{d+1}}{2\pi} \left( \sum_{k=1}^{d+1} 2(1 - \cos p_k) \right)^{-s} \quad (\text{B.33})$$

$$\Rightarrow -\xi_d'(0; L_1 \dots L_d) = \sum_p' \epsilon(p). \quad (\text{B.34})$$

## B.2.2 Integraldarstellung

Exponenziere  $[\sum_k 2(1 - \cos p_k)]^{-s}$  und führe die Summation der Moden mit Hilfe von Gl. (B.101) aus

$$\begin{aligned} \zeta_d(s; L_1 \dots L_d) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_p' \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-t \sum_k 2(1 - \cos p_k)} \\ &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \prod_k \Omega(4\pi t/L_k^2; L_k) - 1 \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

Das Integral ist für  $s \approx 0$  nicht ohne weiteres zu berechnen, da  $\Omega(0; L_k) = L_k$  at  $t = 0$ , see (B.96). Eine passende Subtraktion ist durch den  $\nu = 0$  Term der Summe (B.92) gegeben:

$$\Omega(4\pi t/L_k^2; L_k) = L_k \tilde{I}_0(2t) + \mathcal{O}(t^{L_k})$$

Darüber kann im Fall  $0 < s < d/2$  ein *bulk* Beitrag herausgezogen werden.

$$\zeta_{bulk}(s; L_1 \dots L_d) = L^d \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t)^d \quad (\text{B.36})$$

$$= L^d \frac{1}{\Gamma(s)} \left\{ \frac{1}{s} + \int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \tilde{I}_0(2t)^d - \theta(1-t) \right] \right\} \quad (\text{B.37})$$

$$\Rightarrow -\zeta'_{bulk}(0; L_1 \dots L_d) = b_d L^d$$

mit

$$\begin{aligned} b_d &= -C_E - \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[ \tilde{I}_0(2t)^d - \theta(1-t) \right] \\ &= -C_E - \int_0^1 \frac{dt}{t} \left[ \tilde{I}_0(2t)^d + \tilde{I}_0(2/t)^d - 1 \right] \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

$d$	$b_d$
1	0
2	1.166244
3	1.673389
4	1.999708

Tabelle B.2: Bulk Koeffizienten  $b_d$

Skaliere im subtrahierten Integral B.35 um  $(t \rightarrow L^2 t / (4\pi))$  und addiere/subtrahiere einen weiteren Term:

$$\begin{aligned} \zeta_d(s; L_1 \dots L_d) &= \zeta_{bulk}(s; L_1 \dots L_d) \\ &+ \frac{1}{\Gamma(s)} \left( \frac{L^2}{4\pi} \right)^s \int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \prod_k \Omega \left( \frac{L^2}{L_k^2} t; L_k \right) - L^d \tilde{I}_0(L^2 t / (2\pi))^d - 1 \right] \\ &= \zeta_{bulk}(s; L_1 \dots L_d) \\ &+ \frac{1}{\Gamma(s)} \left( \frac{L^2}{4\pi} \right)^s \int_0^\infty dt t^{s-1} \left[ \prod_k \Omega \left( \frac{L^2}{L_k^2} t; L_k \right) - L^d \tilde{I}_0(L^2 t / (2\pi))^d - \theta(t-1) \right] \\ &- \frac{1}{\Gamma(s)} \left( \frac{L^2}{4\pi} \right)^s \frac{1}{s} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow -\zeta'_d(0; L_1 \dots L_d) &= b_d L^d \\ &+ \log \frac{L^2}{4\pi} + C_E \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
& - \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[ \prod_k \Omega \left( \frac{L^2}{L_k^2} t; L_k \right) - L^d \tilde{I}_0(L^2 t / (2\pi))^d - \theta(t-1) \right] \\
& = b_d L^d + 2 \log L - f_d^{lat}(L_1 \dots L_d) \tag{B.39}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{mit } f_d^{lat}(L_1 \dots L_d) & = \log 4\pi - C_E \\
& + \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[ \prod_k \Omega \left( \frac{L^2}{L_k^2} t; L_k \right) - L^d \tilde{I}_0(L^2 t / (2\pi))^d - \theta(t-1) \right] \tag{B.40}
\end{aligned}$$

$\xi_d(s; L_1 \dots L_d)$  wird analog umgeschrieben:

$$\begin{aligned}
& \xi_d(s; L_1 \dots L_d) \\
& = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t) \left[ \prod_k \Omega(4\pi t / L_k^2; L_k) - 1 \right] \quad (\text{Re } s > 0) \\
& = L^d \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t)^{d+1} \quad (0 < \text{Re } s < (d+1)/2) \\
& - \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t) \quad (0 < \text{Re } s < 1/2) \\
& + \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t) \left[ \prod_k \Omega(4\pi t / L_k^2; L_k) - L^d \tilde{I}_0(2t)^d \right] \quad (\text{Re } s < 1/2) \\
& = L^d \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t)^{d+1} - \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t) \\
& + \frac{1}{\Gamma(s)} \left( \frac{L^2}{4\pi} \right)^s \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(L^2 t / (2\pi)) \left[ \prod_k \Omega \left( \frac{L^2}{L_k^2} t; L_k \right) - L^d \tilde{I}_0(L^2 t / (2\pi))^d \right]
\end{aligned}$$

Vergleich mit  $\zeta_{bulk}$  ergibt

$$\begin{aligned}
& - \frac{d}{ds} \left[ \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t)^{d+1} \right]_{s=0} = b_{d+1} \\
& - \frac{d}{ds} \left[ \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t) \right]_{s=0} = b_1 = 0.
\end{aligned}$$

$$\Rightarrow -\xi'_d(0; L_1 \dots L_d) = b_{d+1} L^d - L^{-1} g_d^{lat}(L_1 \dots L_d) \tag{B.41}$$

mit

$$g_d^{lat}(L_1 \dots L_d) = \int_0^\infty \frac{dt}{t} L \tilde{I}_0(L^2 t / (2\pi)) \left[ \prod_k \Omega \left( \frac{L^2}{L_k^2} t; L_k \right) - L^d \tilde{I}_0(L^2 t / (2\pi))^d \right] \tag{B.42}$$

### B.2.3 Kontinuumsliches und Korrekturen

Die folgende Diskussion basiert auf den asymptotischen Entwicklungen (B.95) und (B.98). Im Kontinuumsliches  $L_k \rightarrow \infty$ , bei festgehaltenem  $L_k/L$  konvergieren die Größen  $f_d^{lat}$  Gl. (B.40) und  $g_d^{lat}$  Gl. (B.42) gegen die  $\zeta$ -Funktionen Ergebnisse (B.13) and (B.16).

Beweis:

$$\begin{aligned}
\Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2}t; L_k\right) &\rightarrow \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2}t\right) \\
L\tilde{I}_0(L^2t/(2\pi)) &\rightarrow t^{-1/2} \\
\Rightarrow f_d^{lat}(L_1 \dots L_d) &\rightarrow \log 4\pi - C_E \\
&\quad + \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2}t\right) - t^{-d/2} - \theta(t-1) \right] \\
&= \log 4\pi - C_E - \frac{2}{d} \\
&\quad + \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2}t\right) - t^{-d/2}\theta(1-t) - \theta(t-1) \right] \\
g_d^{lat}(L_1 \dots L_d) &\rightarrow \int_0^\infty dt t^{-3/2} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2}t; L_k\right) - t^{-d/2} \right]
\end{aligned}$$

Bei endlichem Gitterabstand erhalten wir Korrekturen in Potenzen von  $a^2$ , also  $L^{-2}$ :

$$\Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2}t; L_k\right) = \Omega\left(\frac{L^2}{L_k^2}t\right) + \Omega^{(1)}\left(\frac{L^2}{L_k^2}t\right) L_k^{-2} + \mathcal{O}(L_k^{-4}) \quad (\text{B.43})$$

$$L\tilde{I}_0(L^2t/(2\pi)) = t^{-1/2} \left(1 + \frac{\pi}{4}t^{-1}L^{-2}\right) + \mathcal{O}(L^{-4}) \quad (\text{B.44})$$

$$\Rightarrow f_d^{lat}(L_1 \dots L_d) = f_d(L_1 \dots L_d) + f_d^{(1)}(L_1 \dots L_d) L^{-2} + \mathcal{O}(L^{-4}) \quad (\text{B.45})$$

$$g_d^{lat}(L_1 \dots L_d) = g_d(L_1 \dots L_d) + g_d^{(1)}(L_1 \dots L_d) L^{-2} + \mathcal{O}(L^{-4}) \quad (\text{B.46})$$

Für den uns interessierenden isotropischen Fall ( $L_k = L$ ) ergibt sich der jeweils erste Korrekturterm zu:

$$f_d^{(1)} = d \int_0^\infty \frac{dt}{t} \left[ \Omega(t)^{d-1} \Omega^{(1)}(t) - \frac{\pi}{4} t^{-d/2-1} \right] \quad (\text{B.47})$$

$$g_d^{(1)} = \int_0^\infty dt t^{-3/2} \left[ d \Omega(t)^{d-1} \Omega^{(1)}(t) + \frac{\pi}{4} t^{-1} \Omega(t)^d - \frac{\pi}{4} (d+1) t^{-d/2-1} \right] \quad (\text{B.48})$$

### B.2.4 $d = 1$

Unter Ausnutzung von Gl. (B.105) berechnen wir die exakte eindimensionale Modensumme zu

$$\sum_p' \log 2(1 - \cos p) = 2 \log L, \quad (\text{B.49})$$

$d$	$f_d^{(1)}$	$g_d^{(1)}$
1	0	0.344514
2	0.501531	1.118962
3	1.484069	2.473944
4	3.122151	4.733497

Tabelle B.3:  $f_d^{(1)}$  and  $g_d^{(1)}$  für die hyperkubische Box

und bestätigen

$$\begin{aligned} \Rightarrow b_1 &= 0, \\ f_1^{lat} &= 0. \end{aligned}$$

Die Euler–MacLaurin Formel (B.106) erlaubt eine asymptotische Entwicklung von  $g_1^{lat}(L)$  :

$$\begin{aligned} \sum_p \epsilon(p) &= L \int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \epsilon(p) \\ &\quad + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} (-)^k L^{1-2k} \zeta_R(2k) [\epsilon^{(2k-1)}(0) - \epsilon^{(2k-1)}(2\pi)] \\ \epsilon(p) &= 2 \operatorname{arsinh} \sin(p/2) \\ &= \epsilon(2\pi - p) \\ &= p - \frac{1}{12}p^3 + \frac{1}{96}p^5 + \dots \\ \Rightarrow g_1^{lat}(L) &= \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} (-)^{k+1} L^{2-2k} \zeta_R(2k) \epsilon^{(2k-1)}(0) \\ &= \frac{\pi}{3} + \frac{\pi^3}{90}L^{-2} + \frac{\pi^5}{378}L^{-4} + \mathcal{O}(L^{-6}) \end{aligned} \tag{B.50}$$

$$\Rightarrow g_1^{(1)} = \pi^3/90 \tag{B.51}$$

Eine alternativ Herleitung (basierend auf Gl. (B.107), Gl. (B.103), und Gl. (B.71)) bestätigt:

$$\begin{aligned} \sum_{p_1} \epsilon(p_1) &= \sum_{p_1} \int \frac{dp_2}{2\pi} \log(4 - 2 \cos p_1 - 2 \cos p_2) \\ &= \int \frac{dp_2}{2\pi} [\epsilon(p_2)L_1 + 2 \log(1 - e^{-\epsilon(p_2)L_1})] \\ \Rightarrow g_1^{lat}(L) &= -2L \int \frac{dp}{2\pi} \log(1 - e^{-\epsilon(p)L}) \\ &= -\frac{2}{\pi}L \int_0^\pi dp \log(1 - e^{-\epsilon(p)L}) \end{aligned} \tag{B.52}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{2}{\pi}L \int_0^{\epsilon(\pi)} d\epsilon \frac{dp}{d\epsilon} \log(1 - e^{-\epsilon L}) \\
&= -2L \log(1 - e^{-\epsilon(\pi)L}) \\
&\quad + \frac{2}{\pi}L^2 \int_0^{\epsilon(\pi)} d\epsilon \frac{p(\epsilon)}{e^{\epsilon L} - 1} \\
\epsilon(\pi) &= 2 \operatorname{arsinh} 1 \\
&= 2 \log(1 + \sqrt{2}) \\
p(\epsilon) &= 2 \arcsin \sinh(\epsilon/2) \\
&= \epsilon + \frac{1}{12}\epsilon^3 + \frac{1}{96}\epsilon^5 + \dots \\
\int_0^{\epsilon(\pi)} d\epsilon \frac{\epsilon^{2k-1}}{e^{\epsilon L} - 1} &= \int_0^\infty d\epsilon \frac{\epsilon^{2k-1}}{e^{\epsilon L} - 1} + \mathcal{O}(e^{-\epsilon(\pi)L}) \\
&= L^{-2k} \Gamma(2k) \zeta_R(2k) + \mathcal{O}(e^{-\epsilon(\pi)L}) \\
\Rightarrow & \quad (B.50)
\end{aligned}$$

## B.2.5 $d = 2$

$b_2$  ist proportional zur *Catalanschen Konstante*  $G$ :

$$\begin{aligned}
b_2 &= \int \frac{d^2 p}{(2\pi)^2} \log(4 - 2 \cos p_1 - 2 \cos p_2) \\
&= \int \frac{dp_1}{2\pi} \epsilon(p_1) \\
&= \frac{4}{\pi} G \tag{B.53}
\end{aligned}$$

unter Benutzung von Gl. (B.107) und (B.108).

## B.3 $\zeta$ -Funktion Regularisierung im massiven Fall

### B.3.1 Definitionen

$$\zeta_d(s; L_1 \dots L_d) \equiv \sum_p (m^2 + p^2)^{-s} \tag{B.54}$$

$p = 0$  ist in der Summe enthalten.

### B.3.2 Integraldarstellungen

$$\zeta_d(s; L_1 \dots L_d) = \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_p \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-t(m^2+p^2)}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-tm^2} \prod_k \Omega(4\pi t/L_k^2) \\
&= \frac{m^{-2s}}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-t} \prod_k \Omega\left(\frac{4\pi t}{m^2 L_k^2}\right) \\
&= (mL)^d (4\pi)^{-d/2} \frac{m^{-2s}}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1-d/2} e^{-t} \prod_k \Omega\left(\frac{m^2 L_k^2}{4\pi t}\right) \\
&= (mL)^d (4\pi)^{-d/2} m^{-2s} \frac{\Gamma(s-d/2)}{\Gamma(s)} \\
&+ (mL)^d (4\pi)^{-d/2} \frac{m^{-2s}}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1-d/2} e^{-t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{m^2 L_k^2}{4\pi t}\right) - 1 \right] \\
&= (mL)^d (4\pi)^{-d/2} m^{-2s} \frac{\Gamma(s-d/2)}{\Gamma(s)} \\
&+ (mL)^d (4\pi)^{-d/2} \frac{m^{-2s}}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1-d/2} e^{-t} \sum'_{\{\nu\}} \exp\left(-\frac{m^2}{4t} \sum_k \nu_k^2 L_k^2\right)
\end{aligned}$$

Abkürzung:

$$\begin{aligned}
X &\equiv (\nu_1 L_1, \dots, \nu_d L_d) & (B.55) \\
\Rightarrow X^2 &= \sum_k \nu_k^2 L_k^2
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty dt t^{s-1-d/2} e^{-t} \exp\left(-\frac{m^2 X^2}{4t}\right) \\
&= (m|X|/2)^{s-d/2} \int_0^\infty dt t^{s-1-d/2} \exp\left(-\frac{m|X|}{2}(t+t^{-1})\right) \\
&= (m|X|/2)^{s-d/2} 2 K_{d/2-s}(m|X|) \\
\Rightarrow \zeta_d(s; L_1 \dots L_d) &= (mL)^d (4\pi)^{-d/2} m^{-2s} \frac{\Gamma(s-d/2)}{\Gamma(s)} \\
&+ 2(mL)^d m^{-2s} \frac{(4\pi)^{-s}}{\Gamma(s)} \sum'_X (2\pi m|X|)^{s-d/2} K_{d/2-s}(m|X|)
\end{aligned} \tag{B.56}$$

$K_\nu(z)$  ist die modifizierte Bessel Funktion zweiten Typs [82].

$$\begin{aligned}
\Rightarrow -\zeta'_d(0; L_1 \dots L_d) &= (mL)^d (4\pi)^{-d/2} \gamma_d \\
&- (mL)^d (4\pi)^{-d/2} \int_0^\infty dt t^{-1-d/2} e^{-t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{m^2 L_k^2}{4\pi t}\right) - 1 \right] \\
&= (mL)^d (4\pi)^{-d/2} \gamma_d
\end{aligned} \tag{B.57}$$

$$- 2(mL)^d \sum'_X (2\pi m|X|)^{-d/2} K_{d/2}(m|X|) \quad (\text{B.58})$$

mit

$$\gamma_d \equiv -\frac{d}{ds} \left[ m^{-2s} \frac{\Gamma(s-d/2)}{\Gamma(s)} \right]_{s=0} \quad (\text{B.59})$$

$$= \begin{cases} 2\sqrt{\pi} & d=1 \\ -2\log m + 1 & d=2 \\ -\frac{4}{3}\sqrt{\pi} & d=3 \\ \log m - \frac{3}{4} & d=4 \end{cases} \quad (\text{B.60})$$

Entwickle den finite size Effekt in erster Ordnung:

$$\begin{aligned} -\zeta'_d(0; L_1 \dots L_d) &\simeq (mL)^d (4\pi)^{-d/2} \gamma_d \\ &- 2(mL)^d 2\pi \sum_k (2\pi m L_k)^{-(d+1)/2} e^{-mL_k} \end{aligned} \quad (\text{B.61})$$

### B.3.3 $d=1$

$$\begin{aligned} \zeta_1(s; L) &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(s-1/2)}{\Gamma(s)} m^{1-2s} L \\ &+ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\Gamma(s)} L \sum_{\nu=1}^{\infty} \left( \frac{L\nu}{2m} \right)^{s-1/2} K_{1/2-s}(mL\nu) \end{aligned} \quad (\text{B.62})$$

$$\Rightarrow -\zeta'_1(0; L) = mL + 2\log(1 - e^{-mL}) \quad (\text{B.63})$$

## B.4 Gitter Regularisierung im massiven Fall

### B.4.1 Definitionen

$$\zeta_d(s; L_1 \dots L_d) \equiv \sum_p \left[ m^2 + \sum_k 2(1 - \cos p_k) \right]^{-s} \quad (\text{B.64})$$

endliche Summe mit  $L^d$  Termen inklusive  $p=0$ .

### B.4.2 Integraldarstellung

$$\begin{aligned} \zeta_d(s; L_1 \dots L_d) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \sum_p \int_0^{\infty} dt t^{s-1} e^{-t[m^2 + \sum_k 2(1 - \cos p_k)]} \\ &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} dt t^{s-1} e^{-tm^2} \prod_k \Omega(4\pi t/L_k^2; L_k) \end{aligned} \quad (\text{B.65})$$

Bulk Beitrag:

$$\begin{aligned}
\zeta_{bulk}(s; L_1 \dots L_d) &= L^d \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-tm^2} \tilde{I}_0(2t)^d \\
&= L^d \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \tilde{I}_0(2t)^d \\
&\quad - L^d \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} (1 - e^{-tm^2}) \tilde{I}_0(2t)^d \quad (\text{B.66})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow -\zeta'_{bulk}(0; L_1 \dots L_d) &= b_d(m) L^d \\
\text{mit } b_d(m) &= b_d + \int_0^\infty \frac{dt}{t} (1 - e^{-tm^2}) \tilde{I}_0(2t)^d \quad (\text{B.67})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow -\zeta'_d(0; L_1 \dots L_d) &= b_d(m) L^d - \int_0^\infty \frac{dt}{t} e^{-tm^2} \left[ \prod_k \Omega(4\pi t/L_k^2; L_k) - L^d \tilde{I}_0(2t)^d \right] \\
&= b_d(m) L^d - \int_0^\infty \frac{dt}{t} e^{-t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{4\pi t}{m^2 L_k^2}; L_k\right) - L^d \tilde{I}_0(2t/m^2)^d \right] \quad (\text{B.68})
\end{aligned}$$

### B.4.3 Kontinuumsliches

$L_k \rightarrow \infty$ ,  $m \rightarrow 0$ ,  $mL_k$  fest.

$$\begin{aligned}
\Omega\left(\frac{4\pi t}{m^2 L_k^2}; L_k\right) &\rightarrow \Omega\left(\frac{4\pi t}{m^2 L_k^2}\right) \\
&= mL_k (4\pi t)^{-1/2} \Omega\left(\frac{m^2 L_k^2}{4\pi t}\right) \\
L \tilde{I}_0(2t/m^2) &\rightarrow mL (4\pi t)^{-1/2} \\
\Rightarrow -\zeta'_d(0; L_1 \dots L_d) &\rightarrow b_d(m) L^d \\
&\quad - (mL)^d (4\pi)^{-d/2} \int_0^\infty dt t^{-1-d/2} e^{-t} \left[ \prod_k \Omega\left(\frac{m^2 L_k^2}{4\pi t}\right) - 1 \right]
\end{aligned}$$

Der bulk Beitrag  $b(m)$  für kleine  $m$  ist in (B.112) ff diskutiert. Das Ergebnis weicht vom  $\zeta$ -Funktionsresultat (erster Term in Gl. (B.57)) um ein Polynom in  $m^2$  ab. Auf der anderen Seite stimmt der finite size effect (zweiter Term in Gl. (B.57)) mit dem Kontinuumsliches des Gitterresultats überein.

### B.4.4 $d = 1$

Mit Hilfe von Gl. (B.103) ist die exakte eindimensionale Modensumme

$$\sum_p \log[m^2 + 2(1 - \cos p)] = ML + 2 \log(1 - e^{-ML})$$

$$\begin{aligned} \text{mit } \cosh M &\equiv 1 + m^2/2, \quad M > 0 \\ \Leftrightarrow \sinh(M/2) &= m/2 \end{aligned}$$

$M$  ist die Polmasse.

$$\begin{aligned} \Rightarrow b_1(m) &= M \\ &= 2 \operatorname{arsinh}(m/2). \end{aligned} \tag{B.69}$$

## B.5 Riemannsche $\zeta$ -Funktion

$$\zeta_R(s) \equiv \sum_{n \geq 1} n^{-s} \quad \operatorname{Re} s > 1 \tag{B.70}$$

$$= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt \frac{t^{s-1}}{e^t - 1} \tag{B.71}$$

$$\frac{\Gamma(\nu)}{\mu^\nu} = \int_0^\infty dt t^{\nu-1} e^{-\nu t}, \quad \operatorname{Re} \mu, \operatorname{Re} \nu > 0 \tag{B.72}$$

$$\Gamma\left(\frac{s}{2}\right) \zeta_R(s) = \pi^{s-\frac{1}{2}} \Gamma\left(\frac{1-s}{2}\right) \zeta_R(1-s) \tag{B.73}$$

siehe [83], 1.12(25),(26).

Pol:

$$\zeta_R(1 + \epsilon) = \frac{1}{\epsilon} + C_E + \mathcal{O}(\epsilon) \tag{B.74}$$

einige Funktionswerte:

$$\zeta_R(0) = -\frac{1}{2} \tag{B.75}$$

$$\zeta'_R(0) = -\frac{1}{2} \log 2\pi \tag{B.76}$$

$$\zeta_R(2) = \frac{\pi^2}{6} \tag{B.77}$$

$$\zeta_R(4) = \frac{\pi^4}{90} \tag{B.78}$$

$$\zeta_R(6) = \frac{\pi^6}{945} \tag{B.79}$$

$$\zeta_R(-1) = -\frac{1}{12} \tag{B.80}$$

$$\zeta_R(-3) = \frac{1}{120} \tag{B.81}$$

$$\zeta_R(-2n) = 0 \quad n \in \mathbb{N} \tag{B.82}$$



## B.6 Kontinuumssummen

Impulse:

$$p = \frac{2\pi n}{L}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

Poisson-Summen:

$$\sum_n f(n) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} dn e^{2\pi i \nu n} f(n) \quad (\text{B.83})$$

$$\sum_p f(p) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} L \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{i\nu L p} f(p) \quad (\text{B.84})$$

Definition:

$$\Omega(t) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(-\pi n^2 t) \quad (\text{B.85})$$

$$= t^{-1/2} \Omega(t^{-1}) \quad (\text{B.86})$$

$$\Omega(t) = \begin{cases} t^{-1/2} (1 + \mathcal{O}(e^{-\pi/t})) & t \rightarrow 0 \\ 1 + \mathcal{O}(e^{-\pi t}) & t \rightarrow \infty \end{cases} \quad (\text{B.87})$$

Kern:

$$\sum_p e^{-tp^2} = \Omega(4\pi t/L^2) \quad (\text{B.88})$$

## B.7 Gitter Summen

$$L = Na$$

Impulse:

$$p = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0 \dots (N-1)$$

Poisson-Summation:

$$\sum_p f(p) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} L \int_0^{2\pi/a} \frac{dp}{2\pi} e^{i\nu L p} f(p) \quad (\text{B.89})$$

mit  $f(p) = f(p + 2\pi/a)$ .

Definition:

$$\Omega(t; N) \equiv \sum_{n=0}^{N-1} \exp\left(-t \frac{N^2}{4\pi} 2(1 - \cos \frac{2\pi n}{N})\right) \quad (\text{B.90})$$

$$= \sum_{n=0}^{N-1} \exp\left(-t \frac{N^2}{\pi} \sin^2 \frac{\pi n}{N}\right) \quad (\text{B.91})$$

$$\begin{aligned} \Omega(t; N) &= \sum_p \exp\left(-t \frac{N^2}{4\pi} 2(1 - \cos pa)\right) \\ &= \sum_\nu N \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \exp\left(i\nu N\varphi - t \frac{N^2}{4\pi} 2(1 - \cos \varphi)\right) \\ &= N \sum_\nu \tilde{I}_{\nu N} \left(\frac{N^2}{2\pi} t\right) \end{aligned} \quad (\text{B.92})$$

mit

$$\tilde{I}_\nu(z) \equiv I_\nu(z) e^{-z} \quad (\text{B.93})$$

wobei  $I_\nu(z)$  die modifizierte Bessel Funktion[82] ist.

Kleine und große Argumente:

$$\tilde{I}_0(z) = 1 - z + \frac{3}{4}z^2 + \mathcal{O}(z^3) \quad (\text{B.94})$$

$$= (2\pi z)^{-1/2} \left\{ 1 + \frac{1}{8}z^{-1} + \frac{9}{128}z^{-2} + \mathcal{O}(z^{-3}) \right\} \quad (\text{B.95})$$

$$\Omega(0; N) = N \quad (\text{B.96})$$

$$\Omega(t; N) = 1 + \mathcal{O}(e^{-ct}), \quad t \rightarrow \infty \quad (\text{B.97})$$

$$\text{mit } c = \frac{N^2}{\pi} \sin^2 \frac{\pi}{N}$$

$\Omega(t; N)$  für große  $N$ :

(entwickle den Exponenten in Gl. (B.91))

$$\begin{aligned} \frac{N^2}{4\pi} 2(1 - \cos \frac{2\pi n}{N}) &= \pi n^2 \left\{ 1 - \frac{1}{12} \left(\frac{2\pi n}{N}\right)^2 + \mathcal{O}(N^{-4}) \right\} \\ \Rightarrow \Omega(t; N) &= \Omega(t) + \Omega^{(1)}(t) N^{-2} + \mathcal{O}(N^{-4}) \end{aligned} \quad (\text{B.98})$$

$$\text{mit } \Omega^{(1)}(t) = \frac{\pi^3}{3} t \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^4 \exp(-\pi n^2 t) \quad (\text{B.99})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\pi}{3} t \Omega''(t) \\ &= \frac{\pi}{4} t^{-3/2} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \left( 1 - 4\pi \nu^2 t^{-1} + \frac{4}{3} \pi^2 \nu^4 t^{-2} \right) \exp(-\pi \nu^2 / t) \end{aligned} \quad (\text{B.100})$$

Kern:

$$\sum_p e^{-t 2a^{-2}(1-\cos pa)} = \Omega(4\pi t/L^2; L/a) \quad (\text{B.101})$$

Produkte und Summen:

$$\begin{aligned} \prod_{n=0}^{N-1} (z - e^{\pm 2\pi i n/N}) &= z^N - 1 \\ \Rightarrow \prod_{n=0}^{N-1} [2 \cosh \alpha - 2 \cos(2\pi n/N)] &= \prod_{n=0}^{N-1} [e^{-\alpha}(e^\alpha - e^{2\pi i n/N})(e^\alpha - e^{-2\pi i n/N})] \\ &= e^{-N\alpha}(e^{N\alpha} - 1)^2 \\ &= 4 \sinh^2(N\alpha/2) \end{aligned} \quad (\text{B.102})$$

$$\Rightarrow \sum_{n=0}^{N-1} \log[2 \cosh \alpha - 2 \cos(2\pi n/N)] = N\alpha + 2 \log(1 - e^{-N\alpha}) \quad (\text{B.103})$$

$$\begin{aligned} \prod_{n=1}^{N-1} (1 - e^{\pm 2\pi i n/N}) &= (z - 1)^{-1} \prod_{n=0}^{N-1} (z - e^{\pm 2\pi i n/N}) \Big|_{z=1} \\ &= \frac{z^N - 1}{z - 1} \Big|_{z=1} \\ &= N \\ \Rightarrow \prod_{n=1}^{N-1} [2 - 2 \cos(2\pi n/N)] &= \prod_{n=1}^{N-1} (2 - e^{2\pi i n/N} - e^{-2\pi i n/N}) \\ &= \prod_{n=1}^{N-1} [(1 - e^{2\pi i n/N})(1 - e^{-2\pi i n/N})] \\ &= N^2 \end{aligned} \quad (\text{B.104})$$

$$\Rightarrow \sum_{n=1}^{N-1} \log[2 - 2 \cos(2\pi n/N)] = 2 \log N \quad (\text{B.105})$$

Für eine in  $(0, 2\pi)$  glatte Funktion  $f(\varphi)$  kann die folgende Variante der *Euler-MacLaurin* Summenformel hergeleitet werden:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N-1} f(2\pi n/N) &= \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} N \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} e^{i\nu N\varphi} f(\varphi) \\ &= N \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} f(\varphi) \\ &+ 2N \sum_{\nu=1}^{\infty} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \cos(\nu N\varphi) f(\varphi) \\ &\int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\nu N\varphi} f(\varphi) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\nu N} [f(2\pi) - f(0)] + \frac{i}{\nu N} \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\nu N\varphi} f'(\varphi) \\
&= \dots \\
&= \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{i}{\nu N}\right)^{k+1} [f^{(k)}(0) - f^{(k)}(2\pi)] \\
&\quad + \left(\frac{i}{\nu N}\right)^n \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\nu N\varphi} f^{(n)}(\varphi) \\
\Rightarrow \sum_{n=0}^{N-1} f(2\pi n/N) &= N \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} f(\varphi) \\
&\quad + \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^n (-)^k N^{1-2k} \zeta_R(2k) [f^{(2k-1)}(0) - f^{(2k-1)}(2\pi)] \\
&\quad + (-)^n N^{1-2n} 2 \sum_{\nu=1}^{\infty} \nu^{-2n} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \cos(\nu N\varphi) f^{(2n)}(\varphi)
\end{aligned} \tag{B.106}$$

falls  $f(+0) \neq f(2\pi - 0)$ , ist der Mittelwert zu verwenden:

$$f(0) = \frac{1}{2} [f(+0) + f(2\pi - 0)]$$

## B.8 Gitter-Integrale

$$\int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} \log(2 \cosh \alpha - 2 \cos p) = \alpha \quad (\alpha \geq 0) \tag{B.107}$$

$$\begin{aligned}
&\int_0^{2\pi} \frac{dp}{2\pi} 2 \operatorname{arsinh} \sin(p/2) \\
&= \frac{4}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\varphi \operatorname{arsinh} \sin \varphi \\
&= \frac{4}{\pi} \sum_{k \geq 0} (-)^k \frac{(2k)!}{2^{2k} (k!)^2 (2k+1)} \int_0^{\pi/2} d\varphi \sin^{2k+1} \varphi \\
&= \frac{4}{\pi} \sum_{k \geq 0} (-)^k \frac{(2k)!}{2^{2k} (k!)^2 (2k+1)} \frac{\Gamma(k+1)\Gamma(1/2)}{2\Gamma(k+3/2)} \\
&= \frac{4}{\pi} \sum_{k \geq 0} \frac{(-)^k}{(2k+1)^2} \\
&= \frac{4}{\pi} G
\end{aligned} \tag{B.108}$$

## B.9 Massiver Gitter-Propagator

$$\begin{aligned}
G_d(x, m) &= \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \frac{e^{ip \cdot x}}{m^2 + \sum_k 2(1 - \cos p_k)} \\
&= \int_0^\infty dt e^{-tm^2} \prod_k \tilde{I}_{x_k}(2t)
\end{aligned} \tag{B.109}$$

$$G_d(0, m) = \int_0^\infty dt e^{-tm^2} \tilde{I}_0(2t)^d \tag{B.110}$$

$$G_d(0, 0) = \int_0^\infty dt \tilde{I}_0(2t)^d \quad (d > 2) \tag{B.111}$$

$$\begin{aligned}
b_d(m) &\equiv \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \log[m^2 + \sum_k 2(1 - \cos p_k)] \\
&= b_d + \int_0^{m^2} d\mu^2 G_d(0, \mu) \\
&= b_d + \int_0^\infty \frac{dt}{t} (1 - e^{-tm^2}) \tilde{I}_0(2t)^d \quad (d > 0)
\end{aligned} \tag{B.112}$$

### B.9.1 $0 < d < 2$

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dt e^{-tm^2} \tilde{I}_0(2t)^d &= (4\pi)^{-d/2} \int_0^\infty dt e^{-tm^2} t^{-d/2} \\
&\quad + \int_0^\infty dt e^{-tm^2} [\tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2}] \\
&= (4\pi)^{-d/2} \Gamma(1 - d/2) m^{d-2} \\
&\quad + \int_0^\infty dt [\tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2}] \\
&\quad - \int_0^\infty dt (1 - e^{-tm^2}) [\tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2}] \\
&= (4\pi)^{-d/2} \Gamma(1 - d/2) m^{d-2} \\
&\quad + \int_0^\infty dt [\tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2}] + \mathcal{O}(m^d)
\end{aligned} \tag{B.113}$$

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \int_0^\infty \frac{dt}{t} (1 - e^{-tm^2}) \tilde{I}_0(2t)^d &= (4\pi)^{-d/2} \Gamma(1 - d/2) \frac{2}{d} m^d + \mathcal{O}(m^2) \\
&= -(4\pi)^{-d/2} \Gamma(-d/2) m^d + \mathcal{O}(m^2)
\end{aligned} \tag{B.114}$$

### B.9.2 $d = 2$

$$d = 2 - 2\epsilon$$

$$(4\pi)^{-d/2} \Gamma(1 - d/2) m^{d-2} = (4\pi)^{-d/2} (\epsilon^{-1} - C_E + \dots) (1 - 2\epsilon \log m + \dots)$$

$$\begin{aligned}
&= (4\pi)^{-d/2}(\epsilon^{-1} - C_E - 2 \log m + \dots) \\
&\Rightarrow \int_0^1 dt (4\pi t)^{-d/2} = (4\pi)^{-d/2} \epsilon^{-1} \\
&\Rightarrow \int_0^\infty dt e^{-tm^2} \tilde{I}_0(2t)^2 = -\frac{1}{2\pi} \log m + \text{const} + \mathcal{O}(m^2 \log m) \quad (\text{B.115}) \\
&\quad \text{mit } \text{const} = -\frac{C_E}{4\pi} + \int_0^\infty dt \left[ \tilde{I}_0(2t)^2 - \frac{\theta(t-1)}{4\pi t} \right] \\
&\quad = 0.275795 \\
&\Rightarrow \int_0^\infty \frac{dt}{t} (1 - e^{-tm^2}) \tilde{I}_0(2t)^2 = \left(-\frac{1}{2\pi} \log m + \text{const}\right) m^2 + \mathcal{O}(m^4 \log m) \quad (\text{B.116}) \\
&\quad \text{mit } \text{const} = \frac{1 - C_E}{4\pi} + \int_0^\infty dt \left[ \tilde{I}_0(2t)^2 - \frac{\theta(t-1)}{4\pi t} \right] \\
&\quad = 0.355372
\end{aligned}$$

### B.9.3 $2 < d < 4$

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dt e^{-tm^2} \tilde{I}_0(2t)^d &= \int_0^\infty dt \tilde{I}_0(2t)^d \\
&\quad - \int_0^\infty dt (1 - e^{-tm^2}) \tilde{I}_0(2t)^d \\
&= G_d(0, 0) \\
&\quad - \int_0^\infty dt (1 - e^{-tm^2}) (4\pi t)^{-d/2} \\
&\quad - \int_0^\infty dt (1 - e^{-tm^2}) \left[ \tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2} \right] \\
&= G_d(0, 0) \\
&\quad + (4\pi)^{-d/2} \Gamma(1 - d/2) m^{d-2} \\
&\quad - m^2 \int_0^\infty dt t \left[ \tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2} \right] \\
&\quad + \int_0^\infty dt (e^{-tm^2} - 1 + tm^2) \left[ \tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2} \right] \\
&\hspace{15em} (\text{B.117}) \\
\Rightarrow \int_0^\infty \frac{dt}{t} (1 - e^{-tm^2}) \tilde{I}_0(2t)^d &= G_d(0, 0) m^2 - (4\pi)^{-d/2} \Gamma(-d/2) m^d + \mathcal{O}(m^4) \\
&\hspace{15em} (\text{B.118})
\end{aligned}$$

### B.9.4 $d = 4$

$$d = 4 - 2\epsilon$$

$$\begin{aligned}
(4\pi)^{-d/2} \Gamma(1 - d/2) m^{d-2} &= (4\pi)^{-d/2} \Gamma(-1 + \epsilon) m^{2-2\epsilon} \\
&= (4\pi)^{-d/2} m^2 (-\epsilon^{-1} + C_E - 1 + \dots)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (1 - 2\epsilon \log m + \dots) \\
& = (4\pi)^{-d/2} m^2 (-\epsilon^{-1} + C_E - 1 + 2 \log m + \dots) \\
\Rightarrow \int_0^1 dt t (4\pi t)^{-d/2} & = (4\pi)^{-d/2} \epsilon^{-1} \\
\Rightarrow \int_0^\infty dt e^{-tm^2} \tilde{I}_0(2t)^4 & = G_4(0, 0) + \left(\frac{1}{8\pi^2} \log m + \text{const}\right) m^2 \quad (\text{B.119})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \mathcal{O}(m^4 \log m) \\
\text{mit const} & = \frac{C_E - 1}{16\pi^2} - \int_0^\infty dt t \left[ \tilde{I}_0(2t)^4 - (4\pi t)^{-2} \theta(t-1) \right] \\
& = -0.030346 \\
\Rightarrow \int_0^\infty \frac{dt}{t} (1 - e^{-tm^2}) \tilde{I}_0(2t)^4 & = G_4(0, 0) m^2 + \left(\frac{1}{16\pi^2} \log m + \text{const}\right) m^4 \quad (\text{B.120}) \\
& + \mathcal{O}(m^6 \log m) \\
\text{mit const} & = \frac{C_E - 3/2}{32\pi^2} - \frac{1}{2} \int_0^\infty dt t \left[ \tilde{I}_0(2t)^4 - (4\pi t)^{-2} \theta(t-1) \right] \\
& = -0.016756
\end{aligned}$$

## B.9.5 Zusammenfassung

In Dimensionen  $d \neq 2, 4, \dots$  kann  $G_d(0, m)$  in zwei Reihen entwickelt werden:

$$\begin{aligned}
G_d(0, m) & = (4\pi)^{-d/2} \Gamma(1 - d/2) m^{d-2} \left[ 1 - \frac{m^2}{8} + \frac{d+8}{d+2} \frac{m^4}{128} + \dots \right] \\
& + a_0(d) + a_1(d) m^2 + a_2(d) m^4 + \dots
\end{aligned}$$

für  $d = 1$ :

$$\begin{aligned}
[\dots] & = \left(1 + \frac{m^2}{4}\right)^{-1/2} \\
a_i(1) & = 0
\end{aligned}$$

allgemein:

$$\begin{aligned}
a_0(d) & = G_d(0, 0) = \int_0^\infty dt \tilde{I}_0(2t)^d \quad (\text{Re } d > 2) \\
& = (4\pi)^{-d/2} \frac{2}{d-2} \\
& + \int_0^\infty dt \left[ \tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2} \theta(t-1) \right] \quad (\text{Re } d > 0) \quad (\text{B.121})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_1(d) & = - \int_0^\infty dt t \tilde{I}_0(2t)^d \quad (\text{Re } d > 4) \\
& = -(4\pi)^{-d/2} \left( \frac{2}{d-4} + \frac{d}{8(d-2)} \right) \\
& - \int_0^\infty dt t \left[ \tilde{I}_0(2t)^d - (4\pi t)^{-d/2} \left(1 + \frac{d}{16} t^{-1}\right) \theta(t-1) \right] \quad (\text{B.122})
\end{aligned}$$

( $\operatorname{Re} d > 0$ )

$d$	$a_0(d)$	$a_1(d)$
0	1/8	-1/32
1	0	0
2	$\infty$	$\infty$
3	0.252731	-0.012164
4	0.154933	$\infty$
5	0.115631	-0.019349

Tabelle B.4:  $a_0(d)$  and  $a_1(d)$

In geraden Dimensionen stimmen die beiden Reihen überein. Die Koeffizienten entwickeln Pole, die sich in der Summe wegheben und logarithmische Beiträge produzieren.



# Literaturverzeichnis

- [1] M. Göckeler, R. Horsley, V. Linke, P. Rakow, G. Schierholz and H. Stüben :  
Phys.Rev.Lett. **80** (1998) 4119-4122.
- [2] J. Jersak: hep-lat/0010014.
- [3] R. P. Feynman: Rev. Mod. Phys. **29** (1948) 367.
- [4] G. P. Lepage: Nucl. Phys. Proc. Suppl. **47** (1996) 3.
- [5] A. M. Polyakov: Phys. Lett. **59B** (1975) 82.
- [6] M. Creutz, L. Jacobs, C. Rebbi: Phys. Rev. D **20** (1979) 1915.
- [7] J. Jersák, T. Neuhaus, and P. M. Zerwas: Phys. Lett. **133B** (1983) 103.
- [8] T. A. DeGrand, D. Toussaint: Phys. Rev. D **22** (1980) 2478.
- [9] V. Grösch et al.: Phys. Lett. **162B** (1985) 171.
- [10] J. Jersak, Th. Neuhaus and P.M. Zerwas: Nucl.Phys. **B251** (1985) 299-310.
- [11] J. Cox, W. Franzki, J. Jersák, C. B. Lang, T. Neuhaus, P. W. Stephenson Nucl.  
Phys. **B499** (1997) 371.
- [12] M. E. Peskin: Ann. Phys. **113** (1978) 122.
- [13] K. G. Wilson: Phys. Rev. D**10** (1974) 2445.
- [14] A. H. Guth: Phys. Rev. D**21** (1980) 2291.
- [15] J. Fröhlich and T. Spencer: Commun. Math. Phys. **83** (1982) 411.
- [16] B. Lautrup and M. Nauenberg: Phys. Lett. **95B** (1980) 63.
- [17] G. Bhanot: Phys. Rev. D**24** (1981) 461.
- [18] K.-H. Mütter and K. Schilling, Nucl. Phys. **B200** (1982) 362.
- [19] R. Gupta, A. Novotny, and R. Cordery: Phys. Lett. **172B** (1986) 86.
- [20] V. Azcoiti, G. di Carlo, and A. Grillo: Phys. Lett. **268B** (1991) 101.

- [21] G. Bhanot, Th. Lippert, K. Schilling, and P. Ueberholz: Nucl. Phys. **B378** (1992) 633.
- [22] C. B. Lang: Nucl. Phys. **B280** FS[18] (1987) 255.
- [23] K. Decker, A. Hasenfratz, and P. Hasenfratz: Nucl. Phys. **B295** FS[21] (1988) 21.
- [24] B. Klaus and C. Roiesnel: Phys. Rev. **D58** (1998) 114509.
- [25] G. Bhanot Nucl. Phys. **B205** (1982) 168
- [26] I. Campos, A. Cruz, and A. Tarancón: Phys. Lett. **B424B** (1998) 328.
- [27] I. Campos, A. Cruz, and A. Tarancón: Nucl. Phys. **B528** (1998) 325.
- [28] H. G. Evertz, J. Jersák, T. Neuhaus, and P. M. Zerwas: Nucl. Phys. **B251** (1985) 279.
- [29] J. Cox, W. Franzki, J. Jersák, C. B. Lang, T. Neuhaus, A. Seyfried, and P. W. Stephenson Nucl. Phys. Proc. Suppl. **63** (1998) 691.
- [30] J. Jersák, C. B.Lang and T. Neuhaus: Phys. Rev. **D54** (1996) 6909.
- [31] R. J. Wensley; *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)* **34** (1994) 204
- [32] M. Baig and H. Fort: Phys. Lett. **332B** (1994) 428.
- [33] M. Baig: Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **42** (1995) 654.
- [34] W. Kerler, C. Rebbi, and A. Weber: Phys. Rev. **D50** (1994) 6984.
- [35] W. Kerler, C. Rebbi, and A. Weber: Nucl. Phys. **B450** (1995) 452.
- [36] W. Kerler, C. Rebbi, and A. Weber: Phys.Lett. **B392** (1997) 438-443
- [37] G. Damm, W. Kerler: Phys.Rev. **D59** (1999) 014510.
- [38] A. Bode, Th. Lippert, and K. Schilling: Nucl. Phys. Proc. Suppl. **34** (1994) 1205.
- [39] Th. Lippert, A. Bode, V. Bornyakov, and K. Schilling: Nucl. Phys. Proc. Suppl. **42** (1995) 684.
- [40] Th. Lippert, V. Bornyakov, A. Bode, and K. Schilling: *Monopoles in Compact U(1) - Anatomy of the Phase Transition*, in H. Toki, Y. Mizuno, H. Suganuma, T. Suzuki, O. Miyamura (eds.): International RCNP Workshop on Color Confinement and Hadrons (CONFINEMENT 95), Osaka, Japan, 22-24 Mar, 1995, Proceedings CONFINEMENT 95, World Scientific, 1995, pp. 247-254.
- [41] C. B.Lang and T. Neuhaus: Nucl. Phys. Proc. Suppl. **34** (1994) 543.

- [42] C. B.Lang and T. Neuhaus: Nucl. Phys. **B431** (1994) 119.
- [43] J. Jersák, C. B.Lang and T. Neuhaus: Nucl. Phys. Proc. Suppl. **42** (1995) 672.
- [44] J. Cox, T. Neuhaus and H. Pfeiffer: Poster on LAT99 (1999) (unpublished)
- [45] G. M. Torrie and J. P. Valleau: J. Comp. Phys. **23** (1977) 187.
- [46] G. M. Torrie and J. P. Valleau: J. Chem. Phys. **66** (1977) 1402.
- [47] J. P. Valleau: J. Comp. Phys. **91** (1996) 193.
- [48] K. Ding and J. P. Valleau: J. Chem. Phys. **98** (1993) 3306.
- [49] B. A. Berg and T. Neuhaus: Phys. Lett. **267B** (1991) 249.
- [50] B. A. Berg and T. Neuhaus: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 9.
- [51] B. A. Berg: J. Stat. Phys. **82** (1996) 323.
- [52] B. A. Berg: Proceedings of the International Conference on Multiscale Phenomena and Their Simulations (Bielefeld, October 1996), edited by F. Karsch, B. Monien and H. Satz (World Scientific, 1997).
- [53] B. A. Berg: Nucl. Phys. Proc. Suppl. **63** (1998) 982.
- [54] A.M. Ferrenberg. R.H. Swendsen: Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 1658s.
- [55] R.T. Scalettar, D.J. Scalapino, R.L. Sugar (1986): Phys. Rev. **B34**, 7911
- [56] H.J. Herrmann, W. Janke, F. Karsch, *Dynamics of First Order Transitions* World Scientific, Singapore, 1992
- [57] K. Binder, Z. Phys. **B43** (1981) 119, Phys Rev. **A25** (1982) 1699.
- [58] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller and E. Teller: J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087
- [59] G. Bhanot: Rep. Prog. Phys. **51** (1988) 429-457.
- [60] S. Duane et al.: Phys. Lett. **195B** (1987) 216.
- [61] S. A. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R. L. Renken, and R. L. Sugar: Phys. Rev. **D35** (1987) 2531.
- [62] Th. Lippert in: H. Meyer-Ortmanns and A. Klümper (edts.): Proceedings of *Workshop of the Graduiertenkolleg at the University of Wuppertal on 'Field Theoretical Tools for Polymer and Particle Physics'* (Springer, Berlin, 1998), p. 122.
- [63] S. Duane: Nucl. Phys. **B257** (1985) 652.

- [64] G. G. Batrouni, G. R. Katz, A. S. Kronfeld, G. P. Lepage, B. Svetitsky, and K. G. Wilson: Phys. Rev. D**32** (1985) 2736.
- [65] S. L. Adler: Phys. Rev. D**23** (1981) 2901.
- [66] G. Arnold , Diplomarbeit Universität Wuppertal, WU D 98-24 (1998).
- [67] C. Borgs and R. Kotecky: J. Stat. Phys. **61** (1990) 79.
- [68] C. Borgs and R. Kotecky: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 1734.
- [69] C. Borgs and R. Kotecky and S. Miracle-Sole: J. Stat. Phys. **62** (1991) 529.
- [70] W. Janke and R. Villanova: Nucl. Phys. **B489** (1997) 679-696.
- [71] I. Vattulainen, T. Ala-Nissilia, and K. Kankaala: Phys.Rev.Lett **73** (1994)
- [72] The Scalable Parallel Random Number Generators Library (SPRNG): <http://sprng.cs.fsu.edu/>
- [73] J. Lee, J. M. Kosterlitz: Phys. Rev. **B43** (1991) 3625.
- [74] A. Billoire, T. Neuhaus and B. A. Berg: Nucl. Phys. **B413** (1994) 795.
- [75] G. Arnold, Th. Lippert, Th. Neuhaus and K. Schilling: Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 94 (2001) 651-656
- [76] G. Arnold, B. Bunk, Th. Lippert and K. Schilling: hep-lat/0210010 to appear in Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.).
- [77] B. Bunk, Int. J. Mod. Phys. C 3 (1992) 889.
- [78] B. Bunk: U(1)-Simulationen auf Gittern der Größe  $L = 12, 14, 16$  bei  $\beta = 1.010$ , unpublished.
- [79] A.D. Sokal, *Bosonic Algorithms in Quantum Fields on the Computer* Advanced Series on Directions in High Energy Physics Vol. 11, M. Creutz Editor, World Scientific, Singapore 1992
- [80] M.B. Priestley: *Spectral Analysis and Time Series* Probability and Mathematical Statistics, Academic Press, London 1984
- [81] S. W. Hawking: Commun. Math. Phys. 55 (1977) 133.
- [82] A. Erdélyi ed.: Higher Transcendental Functions, Vol. II, McGraw-Hill, New York 1953.
- [83] A. Erdélyi ed.: Higher Transcendental Functions, Vol. I, McGraw-Hill, New York 1953.

## Danksagung

An erster Stelle möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. Klaus Schilling danken, der diese Arbeit initiiert und ermöglicht hat. Ebenso herzlichen Dank möchte ich an PD Dr. Dr. Thomas Lippert richten. Beiden möchte ich sowohl für die inhaltlich physikalische Unterstützung, als auch für den notwendigen organisatorischen Rahmen meiner bisherigen wissenschaftlichen Arbeiten danken. Dazu zählen auch die Beantragung bzw Beschaffung der erheblichen Computerressourcen, welche u.a. für diese Arbeit grundlegende Voraussetzung waren. Beiden möchte ich ebenfalls für das Vertrauen danken, welches es mir möglich gemacht hat, den Anfang dieses Projektes während meiner Abwesenheit von Wuppertal "remote" durchzuführen.

Desweiteren möchte ich Dr. Thomas Neuhaus danken, mit dem ich in Aachen und Wuppertal viele aufschlussreiche Gespräche führen konnte und von dem viele Anregungen stammen, die in diese Arbeit eingeflossen sind.

Analog gilt Dr. Burkhard Bunk mein Dank für seine Diskussionsbereitschaft und für den wichtigen Beitrag der äußerst aufwendigen perturbativen Rechnungen auf dem Gitter, welche die numerischen Analysen hervorragend ergänzen.

Für die finanzielle Unterstützung meiner Promotion danke ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft und der Universität Wuppertal.

Für die hervorragende Betreuung und Schulung nicht nur in computeradministrativen Belangen möchte ich den Kollegen und Experten Dr. Norbert Eicker, Thomas Moschny, Boris Orth und Uwe Brodatzki danken.

Desweiteren gilt mein Dank für die alltäglichen, anregenden Unterhaltungen den Mitessern aus der theoretischen Physik und dem philosophischen Café unter der Leitung von Dr. Oliver Passon.

Guido Arnold

Wuppertal, Januar 2003