

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο  
Σ.Ε.Μ.Φ.Ε.



Διπλωματική Εργασία με τίτλο:

Πλεγματική Θεωρία Βαθμίδας  
 $SU(2)$  στις Τέσσερις Διαστάσεις

Συμεωνίδης Παντελεήμων

ge13551

Επιβλέπων:

Αναγνωστόπουλος Κωνσταντίνος

Τριμελής επιτροπή:

Αναγνωστόπουλος Κωνσταντίνος, Αναπληρωτής  
Καθηγητής, Σ.Ε.Μ.Φ.Ε.

Έργες Νικόλαος, Καθηγητής, Σ.Ε.Μ.Φ.Ε.

Φαράκος Κωνσταντίνος, Καθηγητής, Σ.Ε.Μ.Φ.Ε.

Αθήνα

Ιούνιος 2022



# Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή Αναγνωστόπουλο Κωνσταντίνο που μου έδωσε την ευκαιρία να ολοκληρώσω αυτήν την έρευνα υπό την καθοδήγηση του. Η βοήθεια του διαδραμάτισε καίριο ρόλο στην ολοκλήρωση αυτής της διπλωματικής εργασίας, και μου έδωσε την δυνατότητα να κατανοήσω το συγκεκριμένο ερευνητικό πεδίο.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω επίσης την σχολή μου Σ.Ε.Μ.Φ.Ε. του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, για όλες τις παροχές που συντέλεσαν στην επιτυχή ολοκλήρωση των σπουδών μου.

Συμεωνίδης Παντελής

© (2022) Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. All rights Reserved. Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σ' αυτό το έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευτεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.



# Πρόλογος

Στην σύγχρονη φυσική οι ισχυρές αλληλεπιδράσεις μεταξύ σωματιδίων περιγράφεται από μια κβαντική θεωρία πεδίου που ονομάζεται κβαντική χρωμοδυναμική (Quantum Chromodynamics or QCD). Τέτοιες αλληλεπιδράσεις συμβαίνουν για παράδειγμα μεταξύ μη θεμελιωδών σωματιδίων όπως είναι τα κουάρκ (quark) και χρησιμοποιούν ως μέσο αλληλεπίδρασης τα γλουόνια (gluons).

Πιστεύουμε πως τα κουάρκ και τα γλουόνια είναι μόνιμα συνδεδεμένα, το οποίο σημαίνει πως δεν μπορούν να βρεθούν 'μοναχικά' κάτω από την συνθήκη που τα κουάρκ βρίσκονται στον πυρήνα, πάντοτε είναι σε ζεύγη, είτε ζεύγη κουάρκ-κουάρκ είτε κουάρκ-αντικουάρκ.

Σε μικρές αποστάσεις μεταξύ κουάρκ η ενεργός σταθερά σύζευξης γίνεται μικρή και οι πειραματικές μετρήσεις είναι δυνατόν να συγκριθούν με τις θεωρητικές προβλέψεις βάση της θεωρίας διαταραχών (perturbation theory). Το πρόβλημα της μη συμβάδισης πειράματος και θεωρίας διαταραχών αναδύεται όταν οι αποστάσεις μεταξύ κουάρκ μεγαλώνουν που έχει σαν αποτέλεσμα την πολύ ισχυρή αλληλεπίδραση μεταξύ τους. Σε εκείνο το σημείο η θεωρία διαταραχών καταρρέει και δεν μας δίνει αξιόπιστες προβλέψεις.

Για τον λόγο αυτό χρειάζεται να εφαρμόσουμε κάποιες μη διαταρακτικές τεχνικές σε ποσότητες που είναι ευαίσθητες στην απόσταση. Μια τέτοια τεχνική είναι η Πλεγματική Κβαντική Χρωμοδυναμική (Lattice QCD). Εμείς θα περιγράψουμε πλεγματικές θεωρίες βαθμίδας που είναι ο προάγγελος για την Κβαντική Χρωμοδυναμική.

Αυτή η προσέγγιση απαιτεί την προσαρμογή της QCD εισάγοντας ένα χωροχρονικό πλέγμα. Τα κουάρκ περιορίζονται στο να καταλαμβάνουν της θέσης του πλέγματος ενώ τα γλουόνια αντιπροσωπεύονται από τους συνδέσμούς τους.

Με την εισαγωγή αυτού του χωροχρονικού πλέγματος αυτό που επιτυγχάνουμε είναι να μετατρέψουμε το Feynman ολοκλήρωμα διαδρομής (path integral) σε ένα απλό ολοκλήρωμα μεγάλης διαστατικότητας. Η αναμενόμενη τιμή του ολοκληρώματος διαδρομής μιας παρατηρήσιμης ποσότητας, μπορεί να υπολογιστεί με υπολογιστικές μεθόδους σε έναν υπολογιστή που συνήθως χρησιμοποιείται η τεχνική δειγματοληψίας με κριτήριο σημαντικότητας (importance sampling).

Η ιδέα να αντικαταστήσουμε μια μεταβλητή πεδίου που προσδιορίζεται σε κάθε χωροχρονικό σημείο, από μια μεταβλητή σε μια συγκεκριμένη θέση πάνω σε ένα πλέγμα προϋπήρχε. Όμως η πλεγματική θεωρία βαθμίδας εισήχθη το 1974 από τον Kenneth G. Wilson.

# Abstract

In modern physics the strong interactions between particles is described by a Quantum field theory that is called Quantum Chromodynamics (QCD). These interactions occur between non elementary particles such as quarks where they use gluons as an interaction medium.

We believe that quarks and gluons are always connected with each other, which means that we can't find isolated quarks under the assumption that quarks can be found in the nucleus, there are always in couples, either couples of quark-quark or quark-antiquark.

When the distance between interacting quarks is short the effective coupling constant of QCD is small and the experimental measurements can be compared with the theoretical predictions based on perturbation theory. The problem of the non agreement behavior, experiment and perturbation theory, arises when the distances between quarks is getting bigger, which results in truly strong interactions. At that point perturbation theory breaks down and can't give as reliable predictions.

For this reason, we need to apply some non-perturbative techniques at quantities that are more sensitive to distance. One technique that can be used for such purpose is Lattice QCD. At this project we will describe lattice gauge theories which are toy models of Quantum Chromodynamics.

The lattice gauge theory approach requires the regularization of QCD by introducing a space-time lattice. Quarks are limited to occupy positions on the lattice, while gluons are represented by their links.

With the introduction of this space-time lattice, what we achieve is that we can transform a Feynman path integral into an ordinary integral with very large dimensionality. The expectation value of a quantity using a path integral is calculated by a computer using Monte Carlo importance sampling techniques.

The idea of replacing a field variable, which we define at each space-time point, with a variable at a specific point on a lattice pre-existed. But the gauge lattice theory was first introduced at 1974 by Kenneth G.Wilson.

# Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Ολοκλήρωμα Διαδρομής</b>	<b>7</b>
1.1	Δράση . . . . .	7
1.2	Ευκλείδειο ολοκλήρωμα διαδρομής . . . . .	10
1.2.1	Ευκλείδειοι συσχετιστές (Euclidean correlators) . . . . .	11
1.3	Κβάντωση με βάση το ολοκλήρωμα διαδρομής . . . . .	11
1.4	SU(2) και SU(3) ομάδες . . . . .	13
<b>2</b>	<b>Μεταβλητές συνδέσμων (link variables) στα πεδία βαθμίδας</b>	<b>16</b>
2.1	Φορμαλισμός Wilson για την θεωρία πεδίου . . . . .	16
2.1.1	Η Αβελιανή περίπτωση . . . . .	16
2.1.2	Η μη-Αβελιανή περίπτωση . . . . .	20
2.2	Εισαγωγή των πεδίων βαθμίδας ως μεταβλητές συνδέσμων . . . . .	24
2.2.1	Πεδία βαθμίδας στο πλέγμα . . . . .	26
2.2.2	Περιγραφή δράσης με χρήση συνδέσμων μεταβλητών . . . . .	27
2.3	Δράση βαθμίδας Wilson . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Θεωρία βαθμίδας σε πλέγμα</b>	<b>30</b>
3.1	Μέτρο Haar . . . . .	31
3.2	Βρόχος Wilson και Polyakov . . . . .	33
3.3	Στατικό Δυναμικό . . . . .	35
3.4	Ανάπτυγμα ισχυρής ζεύξης(Strong coupling expansion) . . . . .	37

3.5	Θερμοκρασία και πλεγματική θεωρία βαθμίδας . . . . .	40
3.5.1	Καθαρή θεωρία βαθμίδας . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Προσομοίωση της θεωρίας βαθμίδας αριθμητικά</b>	<b>43</b>
4.1	Η μέθοδος Monte Carlo . . . . .	43
4.1.1	Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας (importance sampling) . . . . .	44
4.1.2	Αλυσίδα Markov . . . . .	46
4.2	Ο αλγόριθμος Metropolis . . . . .	48
4.2.1	Αλγόριθμος Metropolis για την δράση βαθμίδας Wilson . . . . .	49
4.3	Δημιουργώντας υποψήφιους συνδέσμους . . . . .	51
4.4	Συνοριακές και αρχικές συνθήκες . . . . .	54
4.5	Βελτιώσεις-Τροποποιήσεις του αλγόριθμου Monte Carlo . . . . .	55
4.5.1	Ο αλγόριθμος Heatbath . . . . .	56
4.5.2	Η μέθοδος Overrelaxation . . . . .	59
4.5.3	Ο αλγόριθμος Langevin . . . . .	60
4.6	Ανάλυση δεδομένων . . . . .	62
4.6.1	Στατιστική Ανάλυση . . . . .	63
4.6.2	Αυτοσυσχετισμοί . . . . .	64
4.6.3	Τεχνικές δειγματοληψίας . . . . .	66
<b>5</b>	<b>Ανάλυση δεδομένων</b>	<b>69</b>
5.1	Έλεγχος Ορθότητας . . . . .	69
5.2	Πολυπλοκότητα αλγορίθμων και σύγκριση ταχυτήτων εκτέλεσης . . . . .	75
5.3	Ανάλυση μετρήσεων για $L = 16$ και $L_t = 16$ . . . . .	75
<b>A'</b>	<b>Κώδικας</b>	<b>81</b>
A.1	Su(2) python code . . . . .	81
A.2	Su(2) python code version 2 . . . . .	88



# Κεφάλαιο 1

## Ολοκλήρωμα Διαδρομής

Το βασικότερο εργαλείο για να χβαντώσουμε το πεδίο πάνω σε ένα πλέγμα είναι το Ευκλείδειο ολοκλήρωμα διαδρομής (Euclidean path integral). Για το λόγο αυτό το πρώτο κεφάλαιο είναι αφιερωμένο στο να περιγράψουμε συνοπτικά κάποια βασικά θεωρητικά στοιχεία πάνω στο ολοκλήρωμα διαδρομής. Επειδή όμως το αντικείμενο της παρούσας εργασίας δεν είναι αυτό, δεν θα ασχοληθούμε με υπολογιστικές μαθηματικές πράξεις παρά μόνο με την επεξήγηση κάποιων βασικών εννοιών και εξισώσεων που κρίνονται απαραίτητες.

Το ολοκλήρωμα διαδρομής αποτελεί έναν από τους τρεις βασικούς φορμαλισμούς της χβαντομηχανικής. Ο πρώτος φορμαλισμός η μηχανική των πινάκων είναι αυτός που εισήχθη από τον Heisenberg το 1925 και την ακολούθησε η μηχανική των κυμάτων που εισήγαγε λίγο αργότερα ο Schrodinger το 1926. τελευταίος εισήχθη ο φορμαλισμός των ολοκληρωμάτων διαδρομής από τον Feynman το 1942.

Το μεγάλο πλεονέκτημα αυτού του φορμαλισμού έγκειται στην απλότητα της περιγραφής του έναντι των άλλων δύο αλλά και στην δυνατότητα του να εφαρμόζεται σε πολλά διαφορετικά πεδία της φυσικής.

### 1.1 Δράση

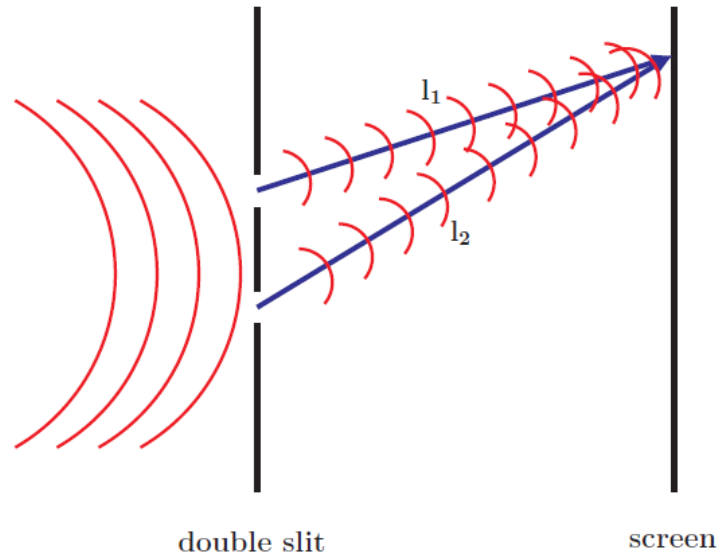
Στην κλασική μηχανική ένα σύστημα με συντεταγμένες  $q(t)$  περιγράφεται από την Λαγκρανζιανή:

$$L(q(t), \dot{q}(t), t) \quad (1.1)$$

Αυτή είναι μια δυναμική περιγραφή, διότι για κάθε δυνατή διαδρομή (path) από ένα αρχικό σημείο  $q(t_\alpha) = q_\alpha$  σε ένα τελικό  $q(t_\beta) = q_\beta$  επιλέγεται εκείνη η διαδρομή η οποία κάνει την δράση(action)

$$S = \int_{t_\alpha}^{t_\beta} dt L(q(t), \dot{q}(t), t) \quad (1.2)$$

την ελάχιστη δυνατή



Σχήμα 1.1: Πείραμα περίθλασης φωτός. Η εικόνα είναι από τις σημειώσεις του Rosenfelder [21].

$$\delta S = 0. \quad (1.3)$$

Η λεγόμενη ‘Αρχή της ελάχιστης δράσης’ (least effect principle). Με βάση αυτό προκύπτουν και οι εξισώσεις κίνησης από την παρακάτω εξίσωση:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = 0. \quad (1.4)$$

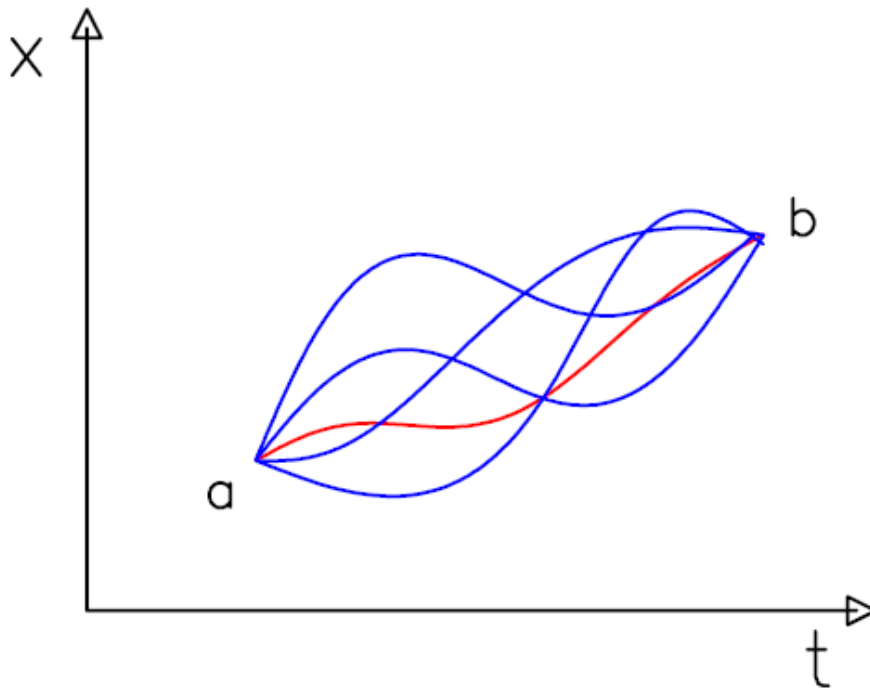
Στην κλασική μηχανική το σύστημα επιλέγει την ελάχιστη δυνατή διαδρομή μέσα από μια διαδικασία σύγκρισης όλων των δυνατών διαδρομών και επιλέγοντας εκείνη με την ελάχιστη δράση. Από το πεδίο της οπτικής γνωρίζουμε μέσω του πειράματος των δύο σχισμών Σχήμα (1.1) ότι όταν το μήκος κύματος είναι συγκρίσιμο με την σχισμή τότε εμφανίζεται το φαινόμενο περίθλασης όπου τα δύο κύματα παρεμβάλλονται μεταξύ τους και δίνουν ένα καινούριο διαθλώμενο κύμα που αποτελείται από δύο μέρη

$$\Phi \propto e^{ikl_1} + e^{ikl_2}. \quad (1.5)$$

Το φαινόμενο αυτό συμβαίνει και για σωματίδια της ύλης όταν το μήκος κύματος de Broglie είναι συγκρίσιμο με της διαστάσεις των σχισμών. Από την κβαντομηχανική έχουμε ότι τι πλάτος πιθανότητας είναι μια υπέρθεση των δύο καταστάσεων

$$\Phi = \Phi_1 + \Phi_2, \quad (1.6)$$

με πιθανότητα ανίχνευσης



Σχήμα 1.2: Διαδρομή από το σημείο α στο σημείο β. Οι μπλε γραμμές αναπαριστούν την κβαντομηχανική διαδρομή και η κόκκινη την κλασική. Η εικόνα είναι από τις σημειώσεις του Rosenfelder [21].

$$P \sim |\Phi|^2. \quad (1.7)$$

Αυτό μπορεί να ερμηνευτεί ως:

Αν αθροίσουμε όλες τις δυνατές διαδρομές που μπορούν να συμβούν, ισοδυναμούν με πλάτος πιθανότητας να συμβεί το συγκεκριμένο γεγονός. Αν τώρα συνεχίσουμε να δημιουργούμε όλο και περισσότερες δυνατές διαδρομές από αυτές που υπάρχουν στο Σχήμα (1.1) όπου όλες τις αντιμετωπίζουμε με τον ίδιο τρόπο τότε έχουμε Σχήμα (1.2):

$$\Phi(a, b) = \sum_{\text{all paths from } a \text{ to } b} \Phi_i. \quad (1.8)$$

Μας απομένει βέβαια να προσδιορίσουμε με τι συντελεστή βάρους συμβάλει κάθε διαδρομή. Γνωρίζοντας πως η σταθερά του Planck  $\hbar$  έχει διαστάσεις δράσης και προσδιορίζει τα κβαντομηχανικά φαινόμενα προκύπτει ο κανόνας:

Όλες οι διαδρομές συμβάλλουν με την ίδια απόλυτη τιμή όμως με διαφορετική φάση. Η φάση κάθε διαδρομής  $x(t)$  καθορίζεται από την δράση  $S[x(t)]$  διαιρεμένη με την σταθερά  $\hbar$ . Δηλαδή:

$$\Phi(a, b) = \sum_{\text{all paths from } a \text{ to } b} \text{const. } e^{iS[x(t)]/\hbar}. \quad (1.9)$$

Με τον παραπάνω φορμαλισμό το κλασικό όριο προσεγγίζεται όταν  $\hbar \rightarrow 0$ .

## 1.2 Ευκλείδειο ολοκλήρωμα διαδρομής

Με βάση αυτά που περιγράψαμε παραπάνω προκύπτει πως η κυματοσυνάρτηση στο χώρο των θέσεων περιγράφεται από την εξίσωση

$$\Psi(x, t) = N \int dx_i \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t)=x} Dx \exp(iS) \Psi(x_i, 0), \quad (1.10)$$

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \langle x | \exp(-i\Delta t H) | \psi \rangle \\ &= \int \langle x | \exp(-i\Delta t \hat{H}) | \psi \rangle \langle x_i | \psi \rangle dx_i \\ &= \int dx_i \langle x | \exp(-i\Delta t \hat{H}) | x_i \rangle \Psi(x_i, 0), \end{aligned} \quad (1.11)$$

όπου το  $Dx$  δηλώνει ολοκλήρωση πάνω σε όλα τα  $x(t)$  με το  $x(0) = x$  και το  $Z$  να είναι σταθερά κανονικοποίησης. Το  $S$  δηλώνει την δράση όπως είπαμε και παραπάνω

$$S[x, \dot{x}] = \int dt L(x(t), \dot{x}(t)). \quad (1.12)$$

Αυτό που αποκαλούμε Ευκλείδειο ολοκλήρωμα διαδρομής είναι ένα ολοκλήρωμα διαδρομής που ο χρόνος έχει υποστεί μια στροφή στο μιγαδικό επίπεδο. Από την κβαντομηχανική έχουμε τον τελεστή εξέλιξης στον χρόνο  $e^{-it\hat{H}/\hbar}$  ο οποίος έχει φανταστικό εκθέτη. Για να τον κάνουμε πραγματικό απαιτεί μια στροφή κατά  $t = i\tau$ . Τότε παίρνουμε τον ευκλείδειο τελεστή εξέλιξης που είναι  $e^{-t\hat{H}/\hbar}$ . Αυτό του είδους η στροφή καλείται στροφή Wick και ουσιαστικά αυτό που κάνει είναι την αλλαγή της μετρικής Minkowski του χωροχρόνου

$$ds^2 = -(dt^2) + dx^2 + dy^2 + dz^2, \quad (1.13)$$

που είχαμε αρχικά στην Ευκλείδεια μετρική

$$ds^2 = d\tau^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (1.14)$$

Εφαρμόζοντας την ίδια τεχνική και για την φάση της κυματοσυνάρτησης, καταλήγουμε στο Ευκλείδειο ολοκλήρωμα διαδρομής

$$\Psi(x, t) = N \int dx_i \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t)=x} Dx \exp(-S_{Euclidean}) \Psi(x_i, 0), \quad (1.15)$$

το οποίο θα μας απασχολήσει και περισσότερο.

### 1.2.1 Ευκλείδειοι συσχετιστές (Euclidean correlators)

Σαν Ευκλείδειο συσχετιστή ορίζουμε τον  $\langle O_2(t)O_1(0) \rangle_T$ . Τα  $O_1$  και  $O_2$  αποτελούν μετρούμενες ποσότητες του συστήματος και περιγράφονται από την σχέση:

$$\langle O_2(t)O_1(0) \rangle_T = \frac{1}{Z_T} \text{tr}[e^{-(T-t)\hat{H}} \hat{O}_2 e^{-t\hat{H}} \hat{O}_1] \quad (1.16)$$

όπου ο συντελεστής κανονικοποίησης  $Z_T$  είναι:

$$Z_T = \text{tr}[e^{-T\hat{H}}] \quad (1.17)$$

Εδώ τα  $\hat{O}_1$  και  $\hat{O}_2$  μπορεί να είναι τελεστές που μετρούν παρατηρήσιμες ποσότητες. Ο Ερμιτιανός αυτο-συζυγής τελεστής  $\hat{H}$  είναι ο Χαμιλτονιανός τελεστής του συστήματος ο οποίος μετρά την ενέργεια του συστήματος και επίσης διαχειρίζεται την χρονική εξέλιξη του. Οι παράμετροι  $T$  και  $t$  είναι πραγματικοί, μη αρνητικοί αριθμοί που δηλώνουν Ευκλείδεια χρονικά διαστήματα διάδοσης. Το  $t$  δηλώνει την πραγματική χρονική απόσταση που θέλουμε, ενώ το  $T$  είναι μια μέγιστη χρονική απόσταση που εν δυνάμει πηγαίνει στο άπειρο.

### 1.3 Κβάντωση με βάση το ολοκλήρωμα διαδρομής

Ξεκινώντας από τα παραπάνω καταλήγουμε στην παρακάτω σχέση για τους Ευκλείδειους συσχετιστές

$$\langle O_2(t)O_1(0) \rangle_T = \frac{1}{Z_T} \int D[\Phi] e^{-S_E[\Phi]} O_2[\Phi(., n_t)] O_1[\Phi(., 0)], \quad (1.18)$$

όπου το  $S_E$  είναι η Ευκλείδεια δράση, τα συναρτησοειδή  $O_2$  και  $O_1$  έχουν προκύψει από τους αρχικούς  $\hat{O}_2$  και  $\hat{O}_1$  τελεστές που δρουν στο χώρο Hilbert. Το συναρτησοειδές  $O_1[\Phi(., 0)]$  υπολογίζεται από το πεδίο  $\Phi(., 0)$  με χρονική παράμετρο 0 ενώ το  $O_2[\Phi(., n_t)]$  υπολογίζεται από το πεδίο  $\Phi(., n_t)$  με χρονική παράμετρο  $n_t$  η οποία συνδέεται με τον Ευκλείδειο χρόνο  $t$  μέσω της σχέσης  $t = \epsilon n_t$ . Οι χωρικές μεταβλητές των συναρτησοειδών έχουν αντικατασταθεί με τελείες (.) καθώς χαρτογραφούν όλο το χωρικό πλέγμα.

Η συνάρτηση επιμερισμού δίνεται από ένα ολοκλήρωμα διαδρομής

$$Z_T = \int D[\Phi] e^{-S_E[\Phi]}, \quad (1.19)$$

και η μεταβλητή  $D[\Phi]$  είναι μια μέτρηση

$$D[\Phi] = \prod_{n \in \Lambda} d\Phi(n), \quad (1.20)$$

που αποτελεί μέτρο ολοκλήρωσης για τις μεταβλητές πεδίου σε όλα τα σημεία  $n$  ενός  $4D$  χώρου πάνω σε ένα πλέγμα  $\Lambda$ .

Εν τέλει καταλήγουμε στην σχέση

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \langle O_2(t) O_1(0) \rangle_T = \sum_n \langle 0 | \hat{O}_2 | n \rangle \langle n | \hat{O}_1 | 0 \rangle e^{-tE_n}, \quad (1.21)$$

Η παραπάνω εξίσωση αποτελεί ένα άθροισμα από εκθετικά και κάθε εκθέτης αποτελεί ένα διαφορετικό ενεργειακό επίπεδο, όπου τα αντίστοιχα ενεργειακά επίπεδα μπορούν να υπολογιστούν ως εξής: Έστω ότι θέλουμε να υπολογίσουμε την ενέργεια ενός πρωτονίου  $p$ . Στην θέση του τελεστή  $\hat{O}_1$  επιλέγουμε τον τελεστή  $\hat{O}_p^\dagger$  που δημιουργεί από το κενό μια κατάσταση με τους κβαντικούς αριθμούς του πρωτονίου και στην θέση του τελεστή  $\hat{O}_2$  που είναι ο συζυγής του, τον τελεστή  $\hat{O}_p$  που εξαυλώνει το πρωτόνιο. Τότε το στοιχείο πίνακα  $\langle n | \hat{O}_p^\dagger | 0 \rangle$  εξαφανίζεται (μηδενίζεται) για όλες τις καταστάσεις  $\langle n |$  που δεν έχουν τους κβαντικούς αριθμούς του πρωτονίου. Η πρώτη κατάσταση  $\langle n |$  που βρίσκουμε μια συνεισφορά είναι η κατάσταση που περιγράφει το πρωτόνιο, δηλαδή  $\langle n | = \langle p |$ . Συνεχίζοντας στις επόμενες καταστάσεις βρίσκουμε τις διεγερμένες καταστάσεις  $\langle p' |, \langle p'' |, \dots$ , που επίσης έχουν μη-μηδενική επικάλυψη με την  $\hat{O}_p^\dagger | 0 \rangle$ . Έτσι καταλήγουμε στην σχέση

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \langle O_p(t) O_p(t)^\dagger \rangle_T = |\langle p | \hat{O}_p(t)^\dagger | 0 \rangle|^2 e^{-tE_p} + |\langle p' | \hat{O}_p(t)^\dagger | 0 \rangle|^2 e^{-tE_{p'}} + \dots, \quad (1.22)$$

όπου για επαρκώς μεγάλα  $t$  οι όροι των διεγερμένων καταστάσεων γίνονται αρκετά μικροί καθώς  $E_{p'} > E_p$ . Άρα, για αρκετά μεγάλο  $t$  παίρνουμε την  $E_p$  από την εκθετική πτώση του Ευκλείδειου συσχετιστή. Όταν χρησιμοποιούμε διαφορετικούς τελεστές  $\hat{O}_1, \hat{O}_2$  που δημιουργούν άλλες καταστάσεις από το κενό, μπορούμε να εξάγουμε τις θεμελιώδεις ενεργειακές καταστάσεις για όλα τα σωματίδια στο φάσμα της θεωρίας με έναν τρόπο παρόμοιο με αυτόν που περιγράψαμε για τα πρωτόνια.

Στην εικόνα του Heisenberg, όπου οι τελεστές είναι χρονοεξαρτώμενοι, ένας τελεστής στον χρόνο  $\tau$  δίνεται από:

$$\hat{O}(\tau) = e^{i\tau\hat{H}} \hat{O}^{-i\tau\hat{H}}. \quad (1.23)$$

Γι' αυτό, τον Ευκλείδειο συσχετιστή (1.18) μπορούμε να τον δούμε ως τον συσχετιστή του τελεστή  $\hat{O}_1$  σε χρόνο 0 με τον τελεστή  $\hat{O}_2$  στον φανταστικό χρόνο  $t = i\tau$  επί έναν ακόμη χρονικό μεταθέτη  $\exp(-T\hat{H})$  που προβάλλεται στο κενό για  $T \rightarrow \infty$ .

## 1.4 SU(2) και SU(3) ομάδες

Σε αυτό το κεφάλαιο θα αναφέρουμε μερικές ιδιότητες των ομάδων Lie, πιο συγκεκριμένα των  $SU(2)$  και  $SU(3)$  πάνω στις οποίες στηρίζεται και η παρούσα εργασία.

Η κύρια αναπαράσταση της  $SU(N)$  δίνεται από μιγαδικούς πίνακες  $N \times N$  οι οποίοι είναι μοναδιαίοι και έχουν ορίζουσα  $1$  ( $\det[\Omega] = 1$ ). Το σύνολο των πινάκων που αποτελούν την  $SU(N)$  ομάδα είναι κλειστό κάτω από την πράξη του πολλαπλασιασμού. Αυτό σημαίνει ότι: Έστω δύο στοιχεία  $\Omega_1$  και  $\Omega_2$  της  $SU(N)$ , τότε έχουν τις ιδιότητες  $\Omega_i^\dagger = \Omega_i^{-1}$  και  $\det[\Omega_i] = 1$ . Κάνοντας κάποιες βασικές πράξεις προκύπτει:

$$\begin{aligned} (\Omega_1 \Omega_2)^\dagger &= \Omega_1^\dagger \Omega_2^\dagger = \Omega_1^{-1} \Omega_2^{-1} = (\Omega_1 \Omega_2)^{-1} \\ \det[\Omega_1 \Omega_2] &= \det[\Omega_1] \det[\Omega_2] = 1 \end{aligned} \quad (1.24)$$

και έτσι δείξαμε ότι το γινόμενο δύο στοιχείων της ομάδας  $SU(N)$  ανήκει και αυτό στην ομάδα  $SU(N)$ . Ακόμη ο μοναδιαίος πίνακας ανήκει στην  $SU(N)$  και για κάθε πίνακα υπάρχει ο ερμιτιανός συζυγής του. Για το λόγο αυτό το σύνολο της  $SU(N)$  αποτελεί ομάδα. Επειδή όμως ο πολλαπλασιασμός στην  $SU(N)$  δεν έχει την μεταθετική ιδιότητα αποτελεί μια μη-αβελιανή ομάδα.

Ένας μιγαδικός  $N \times N$  πίνακας έχει  $2N^2$  πραγματικές παραμέτρους. Η απαίτηση ο πίνακας να είναι μοναδιαίος μας εισάγει  $N^2$  ανεξάρτητες συνθήκες που οι μεταβλητές θα πρέπει να πληρούν. Άλλη μια παράμετρος χρησιμοποιείται για να πληρεί την συνθήκη της ορίζουσας και επομένως χρειαζόμαστε  $N^2 - 1$  παραμέτρους συνολικά.

Συνήθως μας βολεύει να αναπαριστούμε τους πίνακες της  $SU(N)$  μέσω γεννητόρων. Δηλαδή, πιο συγκεκριμένα γράφουμε ένα στοιχείο  $\Omega$  που ανήκει στην  $SU(N)$  ως:

$$\Omega = \exp \left( i \sum_{j=1}^{N^2-1} \omega^{(j)} T_j \right), \quad (1.25)$$

όπου  $\omega^{(j)}$ ,  $j = 1, 2, \dots, N^2 - 1$ , είναι οι πραγματικές μεταβλητές που χρησιμοποιούνται για να παραμετροποιήσουν το  $\Omega$ . Σε αυτό το σημείο θα πρέπει να σημειώσουμε ότι οι παράμετροι  $\omega^{(j)}$  μπορούν να αλλάζουν συνεχώς, πράγμα το οποίο κάνει την  $SU(N)$  να ανήκει στις ομάδες Lie, ομάδες που τα στοιχεία τους εξαρτώνται συνεχώς από τις παραμέτρους τους. Για να καλύψουμε όλον τον χώρο της ομάδας, οι παράμετροι μπορούν κυμαίνονται μόνο μεταξύ πεπερασμένων διαστημάτων, το οποίο κάνει την  $SU(N)$  μια συμπαγή ομάδα Lie.

Οι γεννήτορες  $T_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, N^2 - 1$ , θα πρέπει να είναι άιχνοι (traceless), μιγαδικοί και ερμιτιανοί  $N \times N$  πίνακες που υπακούουν την συνθήκη κανονικοποίησης

$$\text{tr}[T_j T_k] = \frac{1}{2} \delta_{jk} \quad (1.26)$$

Επιπλέον, ικανοποιούν την παρακάτω σχέση

$$[T_j, T_k] = i f_{jkl} T_l \quad (1.27)$$

Οι πλήρως αντισυμμετρικές σταθερές  $f_{jkl}$  καλούνται σταθερές δομής.

Αρχικά θα πρέπει να δείξουμε ότι η αναπαράσταση της (1.26) όντως περιγράφει στοιχεία της ομάδας  $SU(N)$ . Κάνοντας χρήση ότι οι γεννήτορες είναι ερμιτιανοί και ότι τα στοιχεία  $\omega^{(j)}$  είναι πραγματικά, μπορούμε εύκολα να βρούμε το ερμιτιανό συζυγές της εξίσωσης (1.26) και ότι απλά αλλάζει μόνο το πρόσημο στον εκθέτη λόγω του μιγαδικού συζυγούς του  $i$ . Επομένως είναι προφανές, ότι ισχύει η σχέση  $\Omega^\dagger = \Omega^{-1}$ . Τώρα θα πρέπει να δείξουμε ότι η ορίζουσα κάνει 1:

$$\det[\Omega] = \exp(\text{tr}[\ln \Omega]) = \exp\left(i \sum_{j=1}^{N^2-1} \omega^{(j)} \text{tr} T_j\right) = e^0 = 1 \quad (1.28)$$

όπου στο πρώτο βήμα κάναμε χρήση της εξίσωσης

$$\det[\Omega] = \exp(\text{tr}[\ln \Omega]) \quad (1.29)$$

και στο τελευταίο βήμα κάναμε χρήση του ότι το  $T_j$  είναι άιχνο. Πέρα από τα στοιχεία, ακόμα και οι εκθέτες έχουν μια ενδιαφέρουσα δομή. Ο γραμμικός συνδιασμός

$$\sum_{j=1}^{N^2-1} \omega^{(j)} \text{tr} T_j \quad (1.30)$$

των  $T_j$  δημιουργούν αυτό που λέμε άλγεβρα Lie της  $su(N)$ . Οι μεταθετικές τους ιδιότητες περιγράφονται από την σχέση (1.27). Στοιχεία της  $su(N)$  είναι επίσης μιγαδικοί πίνακες  $N \times N$  που όμως έχουν κάποιες διαφορετικές ιδιότητες από αυτές της ομάδας. Μια σημαντική διαφορά είναι ότι ο μοναδιαίος πίνακας ανήκει στην ομάδα αλλά δεν ανήκει στην άλγεβρα.

Η βασική αναπαράσταση των γεννητόρων της  $SU(2)$  δίνεται από την σχέση

$$T_j = \frac{1}{2} \sigma_j, \quad (1.31)$$

όπου  $\sigma_j$  είναι οι πίνακες του Pauli

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (1.32)$$

Στην περίπτωση αυτή οι σταθερές δομής είναι σχετικά απλές, δίνονται από τον πλήρως αντισυμμετρικό τελεστή  $f_{jkl} = \epsilon_{jkl}$ .

Για την  $SU(3)$  οι γεννήτορες δίνονται από την σχέση

$$T_j = \frac{1}{2} \lambda_j, \quad (1.33)$$

όπου  $\lambda_j$  είναι οι πίνακες Gell-Mann οι οποίοι είναι οι  $3 \times 3$  πίνακες:



$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \lambda_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \lambda_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\
\lambda_4 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \lambda_5 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \lambda_6 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \\
\lambda_7 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{1.34}$$

Όπως είναι προφανές η  $SU(2)$  είναι απλούστερη της  $SU(3)$  και για τον λόγο αυτό στην ανάλυση των δεδομένων θα επικεντρωθούμε στην  $SU(2)$ .

## Κεφάλαιο 2

# Μεταβλητές συνδέσμων (link variables) στα πεδία βαθμίδας

### 2.1 Φορμαλισμός Wilson για την θεωρία πεδίου

Μια θεωρία βαθμίδας ουσιαστικά είναι μια θεωρία η οποία είναι αμετάβλητη κάτω από τοπικούς μετασχηματισμούς κάποιας συγκεκριμένης συνεχούς ομάδας συμμετρίας, όπως είναι οι ομάδες Lie. Ο K.Wilson βρήκε έναν γεωμετρικό τρόπο για να περιγράψει τις θεωρίες βαθμίδας. Στο παρακάτω κεφάλαιο θα δούμε την Αβελιανή (Abelian) ομάδα  $U(1)$  χρησιμοποιώντας τον φορμαλισμό του Wilson για να κατανοήσουμε τη συμμετρία βαθμίδας. Στην συνέχεια θα μιλήσουμε για τις  $SU(N)$  ομάδες και θα αναφερθούμε στην τοπική αναλλοιώτητα της Λαγκρανζιανής. Στην περίπτωση της  $N = 3$  παίρνουμε την γνωστή Κβαντική Χρωμοδυναμική (QCD), θεωρία που αφορά αλληλεπιδράσεις μεταξύ κουάρκ και γλουονίων. Τα κουάρκς είναι φερμιόνια, δηλαδή σωματίδια της ύλης με ήμι-ακέραιο spin. Τα γλοιόνια είναι μποζόνια, δηλαδή σωματίδια φορείς των αλληλεπιδράσεων με ακέραιο spin. Αυτή η θεωρία είναι επίσης γνωστή ως η ισχυρή πυρηνική δύναμη το Καθιερωμένου Προτύπου.

#### 2.1.1 Η Αβελιανή περίπτωση

Αρχικά, θεωρούμε ένα βαθμωτό πεδίο  $\phi(x)$ . Η φάση του πεδίου αυτού αποτελεί μια σύμβαση επομένως το πεδίο μιας τέτοιας θεωρίας θα πρέπει είναι αμετάβλητο κάτω από μετασχηματισμούς της φάσης  $\phi(x) \rightarrow e^{ia}\phi(x)$ . Αυτό είναι ένας Αβελιανός μετασχηματισμός  $U(1)$ , το οποίο σημαίνει ότι έχει έναν αντιμεταθετικό γεννήτορα (η μοναδιαία ομάδα Lie  $U(N)$  με  $N = 1$  βαθμούς ελευθερίας έχει ως γεννήτορα στον εκθέτη της φάσης το ταυτοτικό στοιχείο). Αυτή τη φάση γεωμετρικά μπορούμε να την δούμε μια στροφή πάνω σε έναν κύκλο στο μιγαδικό επίπεδο.

Θέλουμε να εξετάσουμε το πεδίο σε δύο σημεία  $x^\mu$  και  $y^\mu$ , όπου το  $\mu$  παίρνει τιμές από το 1 μέχρι το 4 που δηλώνει τις τέσσερις διαστάσεις του χωροχρόνου. Σε μια θεωρία βαθμίδας, η φάσεις των  $x^\mu$  και  $y^\mu$  είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους. Επομένως πως μπορούμε να δούμε αν το  $\phi(x) = \phi(y)$ ; Επειδή  $\phi(y) - \phi(x) \rightarrow \phi(y)e^{ia(y)} - \phi(x)e^{ia(x)}$

και ακόμη και το  $|\phi(y) - \phi(x)|$  εξαρτάται από την επιλογή της τοπικής φάσης. Πέραν τούτου, είναι αδύνατον να υπολογίσουμε την σχέση  $\partial_\mu \phi(x)$  διότι το διαφορικό είναι η διαφορά μεταξύ δύο σημείων του πεδίου, και η διαφορά εξαρτάται από την επιλογή της φάσης.

Αυτό μας δίνει ένα έξτρα κίνητρο για να εισάγουμε τη γραμμή Wilson το οποίο πεδίο θα πρέπει να υπακούει στον παρακάτω μετασχηματισμό

$$U(x, y) \rightarrow e^{ia(x)}U(x, y)e^{-ia(y)} \quad (2.1)$$

έτσι ώστε:

$$\begin{aligned} U(x, y)\phi(y) - \phi(x) &\rightarrow e^{ia(x)}U(x, y)e^{-ia(y)}e^{ia(y)}\phi(y) - e^{ia(x)}\phi(x) \\ &= e^{ia(x)}[U(x, y)\phi(y) - \phi(x)] \end{aligned} \quad (2.2)$$

Αυτό που κερδίσαμε με την εισαγωγή του  $U(x, y)$  είναι ότι πλέον η διαφορά των πεδίων μετασχηματίζεται όπως το  $\phi(x)$ .

Τώρα με βάση την σχέση  $U(x, y)\phi(y) - \phi(x)$ , παίρνουμε  $y^\mu = x^\mu + \delta x^\mu$ . Αν διαιρέσουμε με  $\delta x^\mu$  και ταυτόχρονα πάρουμε το όριο όπου  $\delta x^\mu \rightarrow 0$ , μπορούμε να μετατρέψουμε την διαφορά αυτή σε παράγωγο όπως φαίνεται στην παρακάτω σχέση

$$D_\mu \phi(x) \equiv \lim_{\delta x^\mu \rightarrow 0} \frac{U(x, x + \delta x)\phi(x + \delta x) - \phi(x)}{\delta x^\mu}, \quad (2.3)$$

η οποία μετασχηματίζεται ως

$$D_\mu \phi(x) \rightarrow e^{ia(x)}D_\mu \phi(x), \quad (2.4)$$

η οποία ισχύει ακόμα και όταν το  $\delta x^\mu$  δεν είναι μικρό.

Κανονικά θα θέλουμε το  $U(x, x) = 1$ . Επομένως αν το  $\delta x_\mu$  είναι μικρό τότε θα μπορούμε να το αναπτύξουμε

$$U(x, x + \delta x) = 1 - ie\delta x^\mu A_\mu(x) + \mathcal{O}(\delta x^2), \quad (2.5)$$

όπου το  $e$  είναι μια αυθαίρετη σταθερά(ή η μη κανονικοποιημένη σταθερά σύζευξης του ηλεκτρικού φορτίου στην Κβαντική Ηλεκτροδυναμική (QED) που περιγράφεται από μια Αβελιανή ομάδα συμμετρίας  $U(1)$ ) και το  $A_\mu$  είναι το πεδίο βαθμίδας(ή το πεδίο φωτονίων από την πλευρά των μποζονίων για την QED).

Μετά ακολουθεί ο μετασχηματισμός του  $A_\mu(x)$ , που θα μας χρειαστεί και στον μετασχηματισμό του  $U(x, y)$ :

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + \frac{1}{e}\partial_\mu a(x). \quad (2.6)$$

Τώρα αν αντικαταστήσουμε την εξίσωση (2.6) στην (2.5) έχουμε:

$$\begin{aligned}
U(x, x + \delta x) &= 1 - ie\delta x^\mu A_\mu(x) - i\delta x_\mu \partial_\mu a(x) + \mathcal{O}(\delta x^2) \\
&= (1 - ie\delta x^\mu A_\mu(x))(1 - i\delta x_\mu \partial_\mu a(x)) + \mathcal{O}(\delta x^2) \\
&= (1 - ie\delta x^\mu A_\mu(x)) \left( 1 - i\delta x_\mu \left[ \lim_{\delta x^\mu \rightarrow 0} \frac{a(x + \delta x) - a(x)}{\delta x^\mu} \right] \right) + \mathcal{O}(\delta x^2) \\
&= e^{ia(x)} U(x, x + \delta x) e^{-ia(x+\delta x)}.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (2.3) σε συνδυασμό με την εξίσωση (2.5) βρίσκουμε συναλλοίωτη παράγωγο (covariant derivative):

$$\begin{aligned}
D_\mu \phi(x) &= \lim_{\delta x^\mu \rightarrow 0} \frac{(1 - ie\delta x^\mu A_\mu(x))(\phi(x) + \delta x^\mu \partial_\mu \phi(x)) - \phi(x)}{\delta x^\mu} \\
&= \lim_{\delta x^\mu \rightarrow 0} \frac{-ie\delta x^\mu A_\mu(x)\phi(x) + \delta x^\mu \partial_\mu \phi(x) + \mathcal{O}(\delta x^2)}{\delta x^\mu} \\
&= (\partial_\mu - ieA_\mu)\phi(x).
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Με αυτόν τον τρόπο το πεδίο βαθμίδας εισάγεται ως ένας σύνδεσμος, που μας επιτρέπει να συγκρίνουμε τιμές του πεδίου σε διαφορετικά σημεία, παρά τις διαφορετικές τους φάσεις. Αυτό είναι ισοδύναμο με τα σύμβολα Christoffel της Γενικής θεωρίας της Σχετικότητας, που είναι ένα άλλο παράδειγμα σύνδεσης: μας επιτρέπει να συγκρίνουμε τιμές των πεδίων σε διαφορετικά σημεία παρόλο το διαφορετικό τους τοπικό σύστημα αναφοράς.

Υπάρχει η δυνατότητα να γράψουμε το  $U(x, y)$  σε μια κλειστή έκφραση:

$$U_P(x, y) = \exp \left( ie \int_y^x A_\mu(z) dz^\mu \right). \tag{2.9}$$

Αυτό το ολοκλήρωμα βρίσκεται σε μια διαδρομή  $P$  από το σημείο  $y^\mu$  στο σημείο  $x^\mu$ . Πιο συγκεκριμένα, η διαδρομή  $P$  είναι μια συνάρτηση  $z^\mu(\lambda)$  με  $0 \leq \lambda \leq 1$  και έχουμε  $z^\mu(0) = y^\mu$  και  $z^\mu(1) = x^\mu$  και επομένως

$$U_P(x, y) = \exp \left( ie \int_0^1 \frac{dz^\mu(\lambda)}{d\lambda} A_\mu(z(\lambda)) d\lambda \right). \tag{2.10}$$

Επομένως, αναπτύσσοντας με βάση το θεμελιώδες θεώρημα της ανάλυσης έχουμε:

$$\begin{aligned}
U_P(x, x + \delta x) &= 1 - ie \frac{d}{dx} \int_0^1 \frac{dz^\mu(\lambda)}{d\lambda} A_\mu(z(\lambda)) d\lambda + \mathcal{O}(\delta x^2) \\
&= 1 - ie\delta x^\mu A_\mu + \mathcal{O}(\delta x^2).
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Μπορούμε να ελέγξουμε την έκφραση για την γραμμή Wilson εφαρμόζοντας έναν μετασχηματισμό βαθμίδας στο πεδίο βαθμίδας, εξίσωση(2.6), για να δείξουμε ότι μετασχηματίζεται όπως πρέπει:

$$\begin{aligned}
U_P(x, y) &\rightarrow \exp\left(ie \int_y^x A_\mu(z) dz^\mu + i \int_y^x \partial_\mu a(z) dz^\mu\right) \\
&= e^{ia(x)} U_P(x, y) e^{-ia(y)}.
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Αν  $x = y$  τότε έχουμε ένα κλειστό ολοκλήρωμα, το οποίο λέγεται βρόχος Wilson (Wilson loop):

$$U_P^{loop} = \exp\left(ie \oint_P A_\mu(z) dx^\mu\right). \tag{2.13}$$

Οι βρόχοι Wilson είναι αμετάβλητοι στο μετασχηματισμό βαθμίδας, βάση της εξίσωσης (2.12). Εισάγοντας το θεώρημα του Stokes, μπορούμε να γράψουμε το κλειστό ολοκλήρωμα ως:

$$U_P^{loop} = \exp\left(ie \int_\Sigma \frac{1}{2}(\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu) d\sigma^{\mu\nu}\right) \equiv \exp\left(i\frac{e}{2} \int_\Sigma F_{\mu\nu} d\sigma^{\mu\nu}\right), \tag{2.14}$$

όπου ολοκληρώνουμε πάνω στην επιφάνεια  $\Sigma$  (με στοιχεία επιφάνειας  $\sigma_{\mu\nu}$ ) που περιφράσσεται από την διαδρομή  $P$ . Ορίζουμε την μεταβλητή  $F_{\mu\nu}$  ως τον ταυνοστή έντασης του πεδίου (field strength tensor).

Στην συνέχεια, σημειώστε ότι, αφού το  $D_\mu\phi(x)$  μετασχηματίζεται σωστά, το ίδιο θα συμβαίνει και στο  $D_\mu D_\nu\phi(x)$  και επομένως

$$[D_\mu, D_\nu]\phi(x) \rightarrow e^{ia(x)} [D_\mu, D_\nu]\phi(x) \tag{2.15}$$

όπου ο συμβολισμός  $[\cdot, \cdot]$  δηλώνει την αντιμετάθεση. Και στην συνέχεια έχουμε:

$$[D_\mu, D_\nu]\phi(x) = ([\partial_\mu, \partial_\nu] - ie[A_\mu, \partial_\nu] - ie[\partial_\mu, A_\nu] - e^2[A_\mu, A_\nu])\phi(x) \tag{2.16}$$

Χρησιμοποιώντας τις παρακάτω σχέσεις

$$[\partial_\mu, \partial_\nu]\phi(x) = 0 \tag{2.17}$$

$$[A_\mu, A_\nu]\phi(x) = 0 \tag{2.18}$$

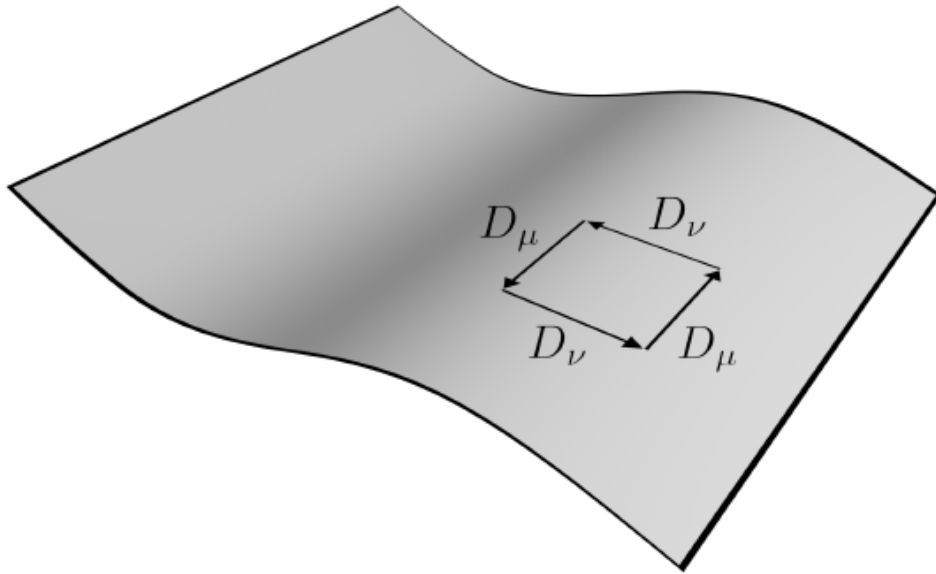
$$[A_\mu, \partial_\nu]\phi(x) = A_\mu\partial_\nu\phi(x) - \partial_\nu(A_\mu\phi(x)) = -(\partial_\nu A_\mu)\phi(x) \tag{2.19}$$

$$[\partial_\mu, A_\nu]\phi(x) = (\partial_\mu A_\nu)\phi(x) \tag{2.20}$$

Βρίσκουμε:

$$\begin{aligned}
[D_\mu, D_\nu]\phi(x) &= ie(\partial_\nu A_\mu - \partial_\mu A_\nu)\phi(x) \\
&= -ie(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)\phi(x) = -ieF_{\mu\nu}\phi(x)
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Ως αποτέλεσμα, ο μεταθέτης  $[D_\mu, D_\nu]$  προκύπτει να είναι ο ταυνοστής της έντασης πεδίου της QED:  $F_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{e}[D_\mu, D_\nu]$ . Ο ταυνοστής της έντασης πεδίου έχει αποκτήσει



Σχήμα 2.1: Γεωμετρική ερμηνεία του ταυιστή έντασης πεδίου  $F_{\mu\nu}$ . Σχήμα από την εργασία του J.Bor [7]

τώρα μια γεωμετρική ερμηνεία: είναι η διαφορά που παίρνουμε από τα  $D_\mu D_\nu$ , που συγκρίνει τιμές πεδίων που διαχωρίζονται στην  $\nu$  διεύθυνση και στην συνέχεια στην  $\mu$  διεύθυνση, σε σχέση με το τι παίρνουμε με την σύγκριση με την αντίθετη σειρά. Ισοδύναμα, είναι το αποτέλεσμα τις σύγκρισης τιμών του πεδίου γύρω από έναν απείρως μικρό βρόχο στο επίπεδο  $\mu \rightarrow \nu$ , όπως φαίνεται και στο Σχήμα (2.1).

### 2.1.2 Η μη-Αβελιανή περίπτωση

Στην μη-Αβελιανή περίπτωση αντιμετωπίζουμε το ίδιο πρόβλημα με την Αβελιανή περίπτωση: δεν μπορούμε να συγκρίνουμε τιμές του πεδίου σε διαφορετικά σημεία και δεν μπορούμε να φτιάξουμε μια καλά ορισμένη παράγωγο. Ερευνούμε τώρα την συμμετρία  $SU(N)$ , όπου το γράμμα 'S' αντιστοιχεί στην λέξη special που σημαίνει δηλαδή ότι η ορίζουσα μιας ομάδας στοιχείων θα πρέπει να κάνει 1, ως επιπλέον απαίτηση στην μοναδιότητα που έχουμε από την προηγούμενη ενότητα, όπου το  $U$  είναι για το unitary. Παίρνουμε μη-μεταθετικούς γεννήτορες στον εκθέτη της φάσης, δηλαδή  $\psi_i(x) \rightarrow (e^{ia^a T^a})_{ij} \psi_j(x)$ . Τα  $\psi(x)$  είναι τώρα σπίνορες Dirac που αναπαριστούν πεδία φερμιονίων, τα  $i$  και  $j$ , έχουν ένα εύρος τιμών  $1, 2, \dots, N$ .  $T^a$  είναι ένας γεννήτορας της ομάδας στην θεμελιώδη αναπαράσταση (παραλείπουμε έναν δείκτη  $F$  για αυτούς τους πίνακες), και υπάρχουν  $N^2 - 1$  γεννήτορες για την ομάδα  $SU(N)$ , δηλαδή  $a = 1, \dots, N^2 - 1$ . Για την  $SU(2)$ , αυτοί είναι οι τρεις πολύ γνωστοί  $(2 \times 2)$  πίνακες του Pauli, ενώ για την  $SU(3)$  είναι οκτώ πίνακες  $(3 \times 3)$  του Gell-Mann. Αυτοί οι πίνακες μπορούν να κατασκευαστούν από την άλγεβρα των ομάδων. Οι γεννήτορες της ομάδας Lie από την άλγεβρα Lie που ορίζεται μέσω της μεταθετικής της σχέσης και της κανονικοποίησης είναι:

$$[T^a, T^b] = if^{abc}T^c, \quad \sum_{c,d} f^{acd}f^{bcd} = N\delta^{ab}, \quad (2.22)$$

όπου  $f^{abc}$  είναι οι σταθερές δόμησης (structure constants), ένας πλήρως αντισυμμετρικός ταυιστής στους δείκτες του περιγράφει την δομή της άλγεβρας (για  $SU(3)$  :  $f^{abc} = \epsilon^{abc}$ , ο ταυιστής Levi-Civita). Όπως είδαμε στην προηγούμενη υποενοότητα, η Αβελιανή ομάδα  $U(1)$  έχει  $f^{abc} = 0$ .

Τώρα που κατανοούμε την συμμετρία της  $SU(N)$ , επιστρέφουμε στο φορμαλισμό Wilson. Δεν είναι πλέον τόσο δύσκολο, διότι για την μη Αβελιανή συμμετρία η γραμμή Wilson κατασκευάζεται με τον ίδιο τρόπο. Θα πρέπει όμως να είμαστε προσεκτικοί για την μη μεταθετική φύση των γεννητόρων της ομάδας. Για να δώσουμε έμφαση ότι πλέον χρησιμοποιούμε μια διαφορετική θεωρία με διαφορετική σύζευξη αντικαθιστούμε το  $e \rightarrow g$ . Έτσι έχουμε:

$$U_P(x, y) = P \left\{ \exp \left( ig \int_y^x A_\mu^a(z) T^a dz^\mu \right) \right\}, \quad (2.23)$$

όπου το  $P\{\dots\}$  είναι ο τελεστής διάταξης διαδρομής (path-ordering operator), ο οποίος είναι σημαντικός γιατί οι γεννητόρες των ομάδων που βρίσκονται σε διαφορετικά σημεία δεν μετατίθενται. Το εκθετικό στην γραμμή Wilson ορίζεται από το ανάπτυγμα του κατά Taylor και η διάταξη διαδρομής εφαρμόζεται στα πεδία σε κάθε όρο. Πιο συγκεκριμένα:

$$U_P(x, y) = \mathbb{1} + ig \int_0^1 \frac{dz^\mu(\lambda)}{d\lambda} A_\mu^a(z(\lambda)) T^a d\lambda - \frac{1}{2} g^2 \int_0^1 d\lambda \int_0^1 d\tau \frac{dz^\mu(\lambda)}{d\lambda} \frac{dz^\nu(\tau)}{d\tau} \\ \times A_\mu^a(z(\lambda)) A_\nu^b(z(\tau)) [T^a T^b \theta(\lambda - \tau) + T^a T^b \theta(\tau - \lambda)] + \dots \quad (2.24)$$

όπου  $\mathbb{1}$  είναι ο ταυτοτικός  $N \times N$  πίνακας και  $\theta$  είναι η συνάρτηση Heaviside για να διασφαλίσουμε διάταξη της διαδρομής. Η γραμμή Wilson μετασχηματίζεται παρόμοια με την Αβελιανή περίπτωση:

$$U_P(x, y) \rightarrow e^{ia^a(x)T^a} U_P(x, y) e^{-ia^a(y)T^a}. \quad (2.25)$$

Για το λόγο αυτό, είναι πιο βολικό να γράψουμε

$$\mathbf{A}_\mu \equiv A_\mu^a T^a, \quad (2.26)$$

έτσι ώστε η γραμμή Wilson να γίνει παρόμοια με αυτήν της Αβελιανής περίπτωσης:

$$U_P(x, y) = P \left\{ \exp \left( ig \int_y^x \mathbf{A}_\mu dz^\mu \right) \right\}. \quad (2.27)$$

Το απειροστό ανάπτυγμα γίνεται

$$U_P(x, x + \delta x) = \mathbb{1} - ig\mathbf{A}_\mu dx^\mu + \mathcal{O}(\delta x^2), \quad (2.28)$$

και η συναλλοίωτη παράγωγος είναι τώρα:

$$D_\mu = \partial_\mu - ig\mathbf{A}_\mu. \quad (2.29)$$

Για να κάνουμε τον συμβολισμό μας ακόμα πιο συμπαγές, εκφράζουμε τον τοπικό μετασχηματισμό ως εξής:

$$\Omega(x) = e^{ia^a(x)T^a} \in SU(N). \quad (2.30)$$

Συνοψίζοντας, έχουμε:

$$\psi(x) \rightarrow \Omega(x)\psi(x), \quad (2.31)$$

και

$$U_P(x, y) \rightarrow \Omega(x)U_P(x, y)\Omega(y)^\dagger. \quad (2.32)$$

Για να καθορίσουμε με ποιόν τρόπο μετασχηματίζεται το  $A_\mu^a$ , μπορούμε να αναπτύξουμε τον μετασχηματισμό του  $U$ . Όμως, ένας πιο αποτελεσματικός τρόπος, είναι να χρησιμοποιήσουμε το γεγονός ότι συναλλοίωτη παράγωγος πρέπει να μετασχηματίζεται όπως το πεδίο  $D_\mu\psi \rightarrow \Omega D_\mu\psi$ . Γι' αυτό μπορούμε να γράψουμε:

$$(\partial_\mu - ig\mathbf{A}'_\mu)\Omega\psi = \Omega(\partial_\mu - ig\mathbf{A}_\mu)\psi \quad (2.33)$$

$$\partial_\mu\Omega\psi + \Omega\partial_\mu\psi - ig\mathbf{A}'_\mu\Omega\psi = \Omega\partial_\mu\psi - ig\Omega\mathbf{A}_\mu\psi \quad (2.34)$$

$$\partial\Omega - ig\mathbf{A}'_\mu\Omega = -ig\Omega\mathbf{A}_\mu \quad (2.35)$$

$$\Rightarrow \mathbf{A}'_\mu = \Omega\mathbf{A}_\mu\Omega^{-1} - \frac{i}{g}(\partial_\mu\Omega)\Omega^{-1}, \quad (2.36)$$

όπου το  $\mathbf{A}'_\mu$  είναι η μετασχηματισμένη εκδοχή του  $\mathbf{A}_\mu$ . Συνεπώς,  $\Omega^{-1} = \Omega^\dagger$ , και αναπτύσσοντας δίνει:

$$\begin{aligned} A_\mu^{a'} T^a &= e^{i\alpha^b T^b} A_\mu^a T^a \Omega^{-1} e^{-i\alpha^b T^b} - \frac{i}{g} (e^{i\alpha^a T^a}) e^{-i\alpha^a T^a} \\ &= (\mathbb{1} + i\alpha^b T^b) A_\mu^a T^a (\mathbb{1} - i\alpha^b T^b) - \frac{i}{g} (i\partial_\mu \alpha^a T^a) (\mathbb{1} - i\alpha^a T^a) + \mathcal{O}(\alpha^2) \\ &= A_\mu^a T^a + i\alpha^b A_\mu^a [T^b, T^a] + \frac{1}{g} \partial_\mu \alpha^a T^a + \mathcal{O}(\alpha^2). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Συνδιάζοντας την εξίσωση (2.12), με το γεγονός ότι μπορούμε να αλλάξουμε τους δείκτες, και ότι ένας αντισυμμετρικός ταυνοστής έχει το ίδιο πρόσημο μετά από δύο μεταθέσεις, μας επιτρέπει να γράψουμε:



$$i\alpha^b A_\mu^a [T^b, T^a] = -f^{bac} \alpha^b A_\mu^a T^c = -f^{bca} \alpha^b A_\mu^c T^a = -f^{abc} \alpha^b A_\mu^c T^a. \quad (2.38)$$

Αν τώρα διαιρέσουμε την εξίσωση (2.37) με  $T^a$ , παίρνουμε τον νόμο μετασχηματισμού για το πεδίο βαθμίδας:

$$A_\mu^a(x) \rightarrow A_\mu^a(x) + \frac{1}{g} \partial_\mu \alpha^a(x) - f^{abc} \alpha^b(x) A_\mu^c(x). \quad (2.39)$$

Ο μη Αβελιανός ταυυστής δύναμης πεδίου παίρνει και αυτός έναν έξτρα όρο λόγω της μη μεταθετικότητας των γεννητόρων. Χρησιμοποιώντας την Αβελιανή περίπτωση εξίσωση (2.21), και συνειδητοποιώντας ότι τα πεδία στην εξίσωση (2.18) πρέπει να πολλαπλασιαστούν με γεννήτορες, γράφουμε:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{\mu\nu} &= F_{\mu\nu}^a T^a = \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu - ig A_\mu^a A_\nu^b [T^a, T^b] \\ &= \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu + g A_\mu^a A_\nu^b f^{abc} T^c \\ &= \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c T^a. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Πάλι τα γραμμικώς ανεξάρτητα με  $T^a$  μας δίνει:

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c. \quad (2.41)$$

Σημειώστε ότι η αντισυμμετρική φύση του ταυυστή δύναμης πεδίου ( $F_{\mu\nu}^a = -F_{\nu\mu}^a$ ) διατηρείται ακόμη και στην μη Αβελιανή περίπτωση, με  $f^{abc} \neq 0$ . Χρησιμοποιώντας ένα παρόμοιο επιχείρημα με αυτό του πεδίου βαθμίδας, δηλαδή ότι ο ταυυστής δύναμης πεδίου θα πρέπει να μετασχηματίζεται όπως το πεδίο  $F_{\mu\nu} \phi \rightarrow \Omega F_{\mu\nu} \phi$ , βρίσκουμε τον μετασχηματισμό του  $F_{\mu\nu}$  ως ακολούθως:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}'_{\mu\nu} &= \Omega \mathbf{F}_{\mu\nu} \Omega^{-1} \\ &= (\mathbb{1} + i\alpha^b T^b) F_{\mu\nu}^a T^a (\mathbb{1} - i\alpha^b T^b) \\ &= F_{\mu\nu}^a T^a + i\alpha^b F_{\mu\nu}^a [T^a, T^b] \\ &= F_{\mu\nu}^a T^a + f^{abc} \alpha^a F_{\mu\nu}^c T^a, \end{aligned} \quad (2.42)$$

και συνεπώς έχουμε:

$$F_{\mu\nu}^a \rightarrow F_{\mu\nu}^a + f^{abc} \alpha^a F_{\mu\nu}^c, \quad (2.43)$$

που είναι ίδιο για μια σταθερά  $\alpha$  ή για μια τοπική μεταβλητή  $\alpha(x)$ . Γι' αυτό, παρόλο που αρχικά  $\mathbf{F}_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}^a T^a$  είχε οριστεί βάση γεννητόρων στην θεμελιώδη αναπαράσταση, ο κινητικός όρος εξαρτάται από τα πεδία  $F_{\mu\nu}^a$ , που μετασχηματίζεται σύμφωνα με τον adjoint μετασχηματισμό.

Πλέον έχουμε βρει όχι μόνο όλα τα πεδία που χρησιμοποιούνται στην  $SU(N)$  θεωρία, αλλά ακόμη και το πώς αυτά μετασχηματίζονται. Έχουμε βρει  $N$  το πλήθος πεδία

φερμιονίων που μετασχηματίζονται στην θεμελιώδη αναπαράσταση, και  $N^2 - 1$  πεδία μποζονίων που μετασχηματίζονται στην adjoint αναπαράσταση  $f^{abc} = i(T_{adj}^a)^{bc}$ . Αυτά τα φερμιονικά και μποζονικά πεδία αναπαριστούν τα κουάρκ και τα γλιόνια, αντίστοιχα.

Μπορούμε τώρα να γράψουμε μια τοπικά αναλλοίωτη  $SU(N)$  Λαγκρανζιανή:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}(F_{\mu\nu}^a)^2 + \sum_{i,j=1}^N \bar{\psi}_i (\delta_{ij} i \not{\partial} + g A^a T_{ij}^a - m \delta_{ij}) \psi_j, \quad (2.44)$$

όπου έχουμε  $\not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu$  και  $\not{A} = \gamma^\mu A_\mu$ .

Ο πρώτος όρος είναι ακριβώς ο κινητικός όρος

$$\mathcal{L}_{YM} = -\frac{1}{4} \sum_a (\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c)^2. \quad (2.45)$$

Αυτός ο κινητικός όρος είναι γνωστός ως Yang-Mills Lagrangian.

## 2.2 Εισαγωγή των πεδίων βαθμίδας ως μεταβλητές συνδέσμων

Κατά την προσπάθεια μας να αναπαραστήσουμε την κβαντική χρωμοδυναμική (QCD) σε πλέγμα προκύπτουν διάφορα προβλήματα.

Με τον όρο πλέγμα εννοούμε ένα πλήθος διακριτών σημείων, που στόχο έχουν να προσομοιώσουν έναν συνεχή χώρο. Κατά τον Ευκλείδειο φορμαλισμό το πλέγμα εκτείνεται στις τέσσερις διαστάσεις (συνήθως είναι είτε κύβος είτε υπερρθογώνιο) σε αντίθεση με τον Χαμιλτονιανό όπου ο χρόνος τρέχει στο συνεχές. Το πλέγμα ορίζεται μέσα σε ένα  $d$ -διάστατο Ευκλείδειο χώρο από σημεία που έχουν με συντεταγμένες

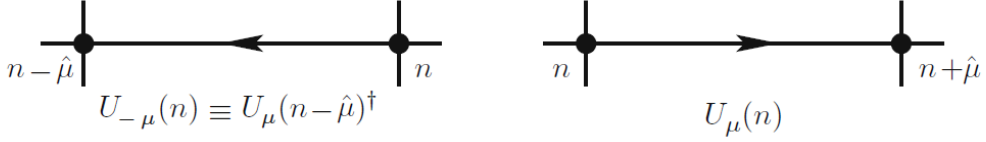
$$x_\mu = n_\mu a, \quad (2.46)$$

όπου το διάνυσμα  $n_\mu$  έχει συνιστώσες

$$n_\mu = n_1, n_2, \dots, n_d. \quad (2.47)$$

Τα σημεία της εξίσωσης (2.46) καλούνται πλεγματικά σημεία (lattice sites). Η διαστατική σταθερά  $a$ , η οποία ισούται με την απόσταση μεταξύ των πλεγματικών σημείων ονομάζεται διάστημα πλέγματος (lattice spacing). Η διαστατικές ποσότητες μετρώνται σε μονάδες μέτρησης  $a$ , και γι' αυτό συνήθως θέτουμε  $a = 1$ .

Ένα από τα προβλήματα που προκύπτουν καθώς προσπαθούμε να περάσουμε από τον συνεχές στον διακριτό χώρο είναι και η αναλλοιότητα της δράσης των ελεύθερων φερμιονίων όταν συμβαίνει μια τοπική στροφή σε κάθε σημείο του χώρου. Για να υλοποιήσουμε μια τέτοια στροφή στο πλέγμα εισάγουμε ένα στοιχείο  $\Omega(n)$  που ανήκει



Σχήμα 2.2: Μεταβλητές συνδέσμων (link variables) πάνω σε πλέγμα. Στα αριστερά βλέπουμε τον σύνδεσμο με αριστερή μετατόπιση (αρνητική) από τον κόμβο  $n$  στον κόμβο  $n - \hat{\mu}$ , ενώ δεξιά βλέπουμε τον σύνδεσμο με δεξιά μετατόπιση (θετική) από τον κόμβο  $n$  στον κόμβο  $n + \hat{\mu}$ . Το σχήμα αυτό είναι από το βιβλίο του Gattlinger [8].

στην ομάδα  $SU(3)$  για κάθε πλεγματοειδή θέση  $n$  το οποίο μετασχηματίζει το πεδίο των φερμιονίων ακολούθως

$$\psi(n) \rightarrow \psi'(n) = \Omega(n)\psi(n), \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}'(n) = \bar{\psi}(n)\Omega(n)^\dagger. \quad (2.48)$$

Στην περίπτωση του συνεχούς, ο παράγοντας μάζας παραμένει αναλλοίωτος κάτω από τέτοιους μετασχηματισμούς. Το πρόβλημά ανακύπτει όταν πηγαίνουμε στο διακριτό πλέγμα όπου πλέον δεν ισχύει η αναλλοίωτη αυτή. Η δράση σε πλέγμα δίνεται από τον παρακάτω τύπο

$$S_F^0[\psi, \bar{\psi}] = a^4 \sum_{n \in \Lambda} \bar{\psi}(n) \left( \sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \frac{\psi(n + \hat{\mu}) - \psi(n - \hat{\mu})}{2a} + m\psi(n) \right). \quad (2.49)$$

Για να καταφέρουμε να κάνουμε τη φερμιονική δράση αναλλοίωτη θα πρέπει να εισάγουμε τα βαθμωτά πεδία  $U_\mu(n)$  σαν στοιχεία της ομάδας  $SU(3)$  με τις παρακάτω ιδιότητες

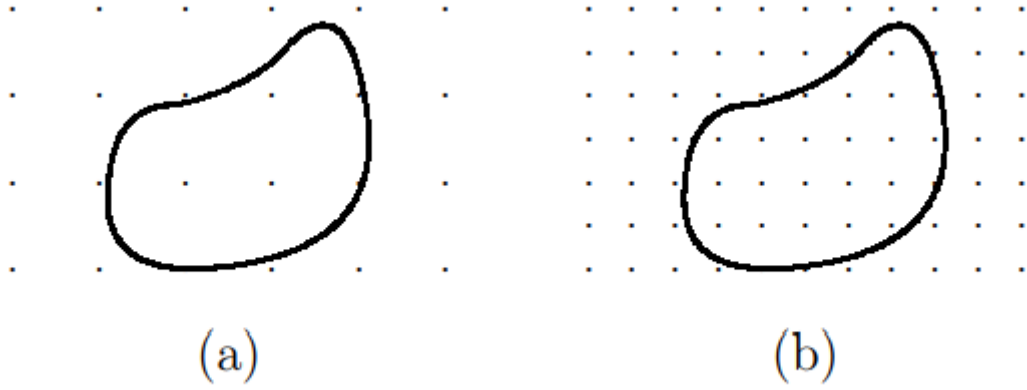
$$U_\mu(n) \rightarrow U'_\mu(n) = \Omega(n)U_\mu(n)\Omega(n + \hat{\mu})^\dagger. \quad (2.50)$$

Αυτοί οι πίνακες μεταβλητών είναι διατεταγμένοι στο πλέγμα και είναι προσαρτημένοι σε κάθε σύνδεσμο (link) του πλέγματος, γι' αυτό και αναφέρονται ως 'μεταβλητές συνδέσμων'. Το  $U_\mu(n)$  βρίσκεται στο σύνδεσμο που συνδέει το σημείο-κόμβο  $n$  με το  $n + \hat{\mu}$  Σχήμα (2.2).

Επειδή όπως είπαμε έχουμε διάταξη μεταξύ των συνδέσμων, μπορούμε να ορίσουμε και συνδέσμους που δείχνουν στην αντίθετη κατεύθυνση  $\mu$ . Αυτές οι μεταβλητές δεν είναι ανεξάρτητες από τις αρχικές, αλλά χρησιμοποιούνται κυρίως για λόγους αναπαράστασης και συντομίας. Πιο συγκεκριμένα, το  $U_{-\mu}(n)$  δείχνει από το σημείο  $n$  στο σημείο  $n - \hat{\mu}$  και σχετίζεται με την θετική φορά  $U_\mu(n - \hat{\mu})$  μέσω της σχέσης

$$U_{-\mu}(n) \equiv U_\mu(n - \hat{\mu})^\dagger. \quad (2.51)$$

Από τις εξισώσεις (2.3) και (2.4) προκύπτουν οι ιδιότητες μετασχηματισμού του συνδέσμου στην αρνητική κατεύθυνση



Σχήμα 2.3: Αριστερά στην εικόνα (a) έχουμε ένα πλέγμα με μεγάλη πλεγματοική σταθερά. Στα δεξιά(εικόνα (b)) έχουμε ένα πλέγμα με μικρότερη πλεγματοική σταθερά. Το σχήμα αυτό είναι από το άρθρο του Yuri Makeenko, A Brief Introduction to Wilson Loops and Large  $N$  [16].

$$U_{-\mu}(n) \rightarrow U'_{-\mu}(n) = \Omega(n)U_{-\mu}(n)\Omega(n - \hat{\mu})^\dagger. \quad (2.52)$$

### 2.2.1 Πεδία βαθμίδας στο πλέγμα

Ένα συνεχές πεδίο  $\phi(x)$  προσεγγίζεται από τις τιμές του στα πλεγματοικά σημεία ως

$$\phi(x) \rightarrow \phi_x, \quad (2.53)$$

όπου  $\phi_x$  είναι το πεδίο του πλέγματος. Το πεδίο  $\phi_x$  του πλέγματος προσεγγίζει καλά το πεδίο  $\phi(x)$  του συνεχούς όταν η πλεγματοική σταθερά  $a$  είναι πολύ μικρότερη από το χαρακτηριστικό μέγεθος της δεδομένης διαμόρφωσης του πεδίου.

Στο Σχήμα (2.3) φαίνεται μια γραφική αναπαράσταση του συνεχούς πεδίου στο διακριτό πλέγμα. Στην εικόνα (a) βλέπουμε ότι η πλεγματοική σταθερά είναι πολύ μεγάλη για την περιγραφή του συγκεκριμένου πεδίου καθώς δεν μπορούμε να ακολουθήσουμε κάποια κλειστή διαδρομή πάνω στα σημεία που να μας δίνει ένα πεδίο παρόμοιο με του συνεχούς. Σε αντίθεση με το (b), όπου η περιγραφή μπορεί να γίνει πολύ καλύτερα, μιας και έχουμε ένα πεδίο με μικρότερη σταθερά  $a$ , το οποίο έχει σαν αποτέλεσμα περισσότερα πλεγματοικά σημεία στον ίδιο χώρο και συνεπώς καλύτερη διακριτική ικανότητα.

Το πεδίο βαθμίδας αποδίδεται σε σχέση με τους συνδέσμους βαθμίδας ως

$$A_\mu(x) \rightarrow U_\mu(x), \quad (2.54)$$

όπου και τα δύο εκφράζονται με μια συντεταγμένη και ένα δείκτη που δηλώνει

κατεύθυνση. Το  $U_\mu(x)$  μπορεί κανείς να το δει και ως

$$U_\mu(x) = P e^{i \int_x^{x+\hat{\mu}} dz^\mu A_\mu(z)}. \quad (2.55)$$

όπου το ολοκλήρωμα γίνεται πάνω στον σύνδεσμο  $x, \mu$ . Στο όριο  $a \rightarrow 0$  έχουμε

$$U_\mu(x) = e^{iaA_\mu(x)}. \quad (2.56)$$

## 2.2.2 Περιγραφή δράσης με χρήση συνδέσμων μεταβλητών

Εφόσον έχουμε εισάγει τους συνδέσμους μεταβλητών, καθώς και τις ιδιότητες τους κάτω από τον μετασχηματισμό βαθμίδας, μπορούμε να επαναεκφράσουμε τη δράση των ελεύθερων φερμιονίων πάνω σε ένα βαθμωτό πεδίο  $U$  ως εξής

$$S_F[\psi, \bar{\psi}, U] = a^4 \sum_{n \in \Lambda} \bar{\psi}(n) \gamma_\mu \left( \frac{U_\mu(n) \psi(n + \hat{\mu}) - U_{-\mu}(n) \psi(n - \hat{\mu})}{2a} + m \psi(n) \right). \quad (2.57)$$

Η εξίσωση (2.57) συχνά αναφέρεται ως 'απλοϊκή' δράση φερμιονίων (naive fermion action).

Τελικά, κάνοντας χρήση των εξισώσεων (2.48), (2.50) και (2.52) για το μετασχηματισμό βαθμίδας, εύκολα προκύπτει η αναλλοιώτητα βαθμίδας της δράσης των φερμιονίων,  $S_F[\psi, \bar{\psi}, U] = S_F[\psi', \bar{\psi}', U']$ .

## 2.3 Δράση βαθμίδας Wilson

Αρχικά θα χτίσουμε 'αντικείμενα' της θεωρίας τα οποία είναι αναλλοίωτα στο μετασχηματισμό βαθμίδας μέσω των μεταβλητών συνδέσμων. Το πρώτο που θα επιχειρήσουμε είναι να δημιουργήσουμε μια αλληλουχία μεταβλητών συνδέσμων πάνω σε μια διαδρομή από συνδέσμους. Έστω  $P$  μια τέτοια διαδρομή με  $k$  το πλήθος ενδιάμεσα σημεία που συνδέουν τον κόμβο  $n_0$  με τον κόμβο  $n_1$

$$P[U] = U_{\mu_0}(n_0) U_{\mu_1}(n_0 + \hat{\mu}) \dots U_{\mu_{k-1}}(n_1 - \hat{\mu}_{k-1}) \equiv \prod_{(n, \mu) \in P} U_\mu(n), \quad (2.58)$$

όπου το  $P$  μπορεί να περιέχει συνδέσμους και στις δυο κατευθύνσεις,  $\pm \mu$ .

Από τις ιδιότητες των μετασχηματισμών προκύπτει ότι κάτω από τις στροφές βαθμίδας (gauge rotations) όλοι οι όροι αλληλοακυρώνονται με εξαίρεση τα δυο ακριανά σημεία  $n_0$  και  $n_1$  και έτσι προκύπτει το ακόλουθο

$$P[U] \rightarrow P[U'] = \Omega(n_0)P[U]\Omega(n_1)^\dagger. \quad (2.59)$$

Επομένως αυτό μας δημιουργεί πρόβλημα στην αναλλοιώτητα αυτής της διαδρομής στον μετασχηματισμό βαθμίδας. Για να το λύσουμε αυτό ένας απλός τρόπος είναι αντί της διαδρομής  $P$  να διαλέξουμε μια κλειστή διαδρομή  $L$  και παίρνοντας το ίχνος

$$L[U] = \text{tr} \left[ \prod_{(n,\mu) \in L} U_\mu(n) \right]. \quad (2.60)$$

Όμως όπως είδαμε και στην εξίσωση (2.8) μόνο τα ακριανά στοιχεία της διαδρομής αφήνουν πίνακες μετασχηματισμού και στην περίπτωση της κλειστής διαδρομής το αρχικό στοιχείο  $n_0$  είναι και το τελευταίο, οπότε

$$L[U'] = \text{tr} \left[ \Omega(n_0) \prod_{(n,\mu) \in L} U_\mu(n) \Omega(n_0)^\dagger \right] = \text{tr} \left[ \prod_{(n,\mu) \in L} U_\mu(n) \right] = L[U], \quad (2.61)$$

όπου φαίνεται πως το στοιχείο  $L$  παραμένει αναλλοίωτο.

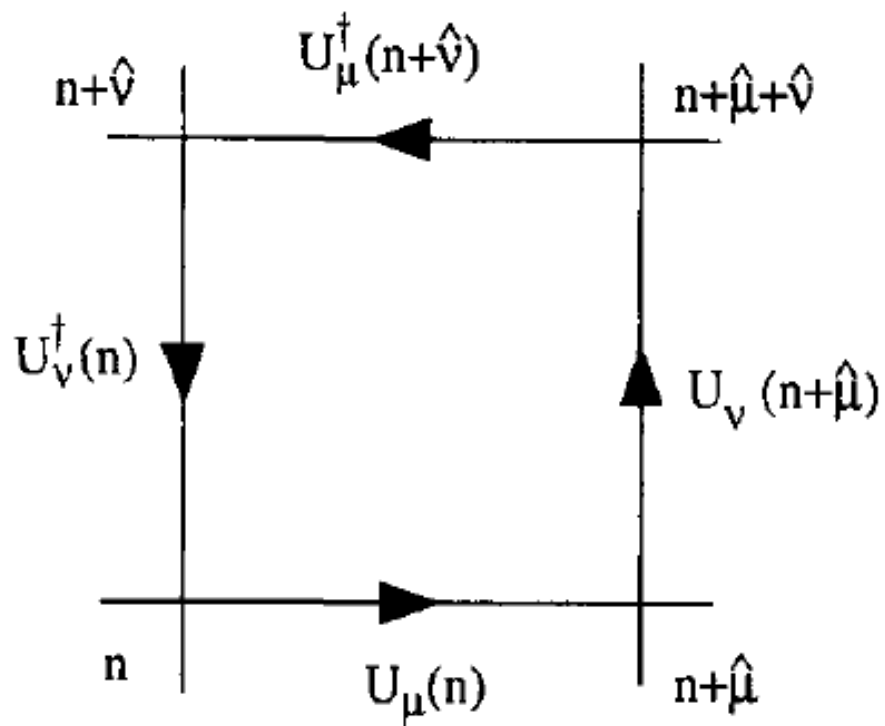
Ο στόχος μας είναι να ορίσουμε τη δράση βαθμίδας και έχοντας δείξει ότι οι μεταβλητές συνδέσμων είναι αναλλοίωτες σε μια κλειστή διαδρομή καθιστά τα πράγματα πιο εύκολα. Επιλέγουμε την μικρότερη κλειστή διαδρομή αυτή που λέμε 'πλακέτα' (plaquette). Η πλακέτα  $U_{\mu\nu}$  Σχήμα (2.4) αποτελείται από το γινόμενο τεσσάρων συνδέσμων μεταβλητών

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}(n) &= U_\mu(n)U_\nu(n + \hat{\mu})U_{-\mu}(n + \hat{\mu} + \hat{\nu})U_{-\nu}(n + \hat{\nu}) \\ &= U_\mu(n)U_\nu(n + \hat{\mu})U_\mu(n + \hat{\nu})^\dagger U_\nu(n)^\dagger. \end{aligned} \quad (2.62)$$

Η δράση βαθμίδας Wilson είναι ένα άθροισμα πάνω σε όλες τις πλακέτες, όπου κάθε πλακέτα υπολογίζεται με έναν μόνο προσανατολισμό. Αυτό το άθροισμα μπορεί να περιγραφεί ως το άθροισμα πάνω σε όλα τα πλεγματικά σημεία  $n$  όπου βρίσκονται οι πλακέτες μαζί με το άθροισμα πάνω σε όλους τους δείκτες Lorentz  $1 \leq \mu < \nu \leq 4$ .

$$S_G[U] = \frac{2}{g^2} \sum_{n \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} \text{Re tr} [\mathbb{1} - U_{\mu\nu}(n)] \quad (2.63)$$

Εντός των αθροισμάτων υπολογίζεται το πραγματικό μέρος των ιχνών του μοναδιαίου πίνακα μείον την πλακέτα που υπολογίζουμε σε κάθε σημείο. Ο συντελεστής  $2/g^2$  έχει επιλεγεί έτσι ώστε η δράση να προσεγγίζει αυτή του συνεχούς στο όριο  $a \rightarrow 0$ , όπου  $a$  είναι η σταθερά του πλέγματος.



Σχήμα 2.4: Πλακέτα  $U_{\mu\nu}$  βάση της οποίας υπολογίζεται και η δράση Wilson. Τα βελόνια πάνω στους συνδέσμους δείχνουν την φορά με την οποία κινούμαστε πάνω στην πλακέτα. Σχήμα από το βιβλίο του H.J. Rothe [1].

## Κεφάλαιο 3

### Θεωρία βαθμίδας σε πλέγμα

Στην προσπάθεια μας να περιγράψουμε την θεωρία της κβαντικής χρωμοδυναμικής σε πλέγμα χρειάστηκε να εισάγουμε κάποιους διαφορετικούς φορμαλισμούς στο προηγούμενο κεφάλαιο. Πλέον θα κάνουμε χρήση αυτών των φορμαλισμών ώστε να μπορέσουμε να περιγράψουμε ποσότητες που εισάγαμε στο πρώτο κεφάλαιο και εν συνεχεία να θεμελιώσουμε την θεωρία βαθμίδας σε πλέγμα.

Θα ξεκινήσουμε αναδιατυπώνοντας κάποιες ποσότητες όπως είναι η αναμενόμενη τιμή μιας παρατηρήσιμης ποσότητας  $O$

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int D[U] e^{-S_G[U]} O[U], \quad (3.1)$$

όπου το  $Z$  ονομάζεται συνάρτηση επιμερισμού και υπολογίζεται από τον τύπο

$$Z = \int D[U] e^{-S_G[U]}. \quad (3.2)$$

Η ποσότητα  $D[U]$  είναι το μέτρο ολοκλήρωσης και ορίζεται από την σχέση

$$\int D[U] = \prod_{n \in \Lambda} \prod_{\mu=1}^4 \int dU_{\mu}(n). \quad (3.3)$$

Η δράση Wilson για την ομάδα  $SU(N)$  δίνεται από την σχέση

$$S_G[U] = \frac{\beta}{N} \sum_{n \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} \text{Re tr}[\mathbf{1} - U_{\mu\nu}(n)], \quad (3.4)$$

όπου εδώ εισάγαμε την σταθερά  $\beta$  η οποία δίνεται από

$$\beta = \frac{2N}{g^2}, \quad (3.5)$$

και καλείται *αντίστροφη σταθερά σύζευξης* (inverse coupling) .



Η τελευταία ποσότητα που χρειάζεται να αναφέρουμε είναι το  $dU_\mu(n)$ . Καθώς περιγράψαμε την δράση για την QCD σε πλέγμα χρειάστηκε να εισάγουμε την δράση Wilson και τις μεταβλητές συνδέσμων  $U_\mu(n)$  ως στοιχεία της ομάδας  $SU(N)$ . Η ποσότητα  $dU_\mu(n)$  αποτελεί το διαφορικό στοιχείο για την ολοκλήρωσή της  $U_\mu(n)$  σε όλο τον χώρο της  $SU(N)$  και πρέπει να είναι αναλλοίωτο ως προς τον μετασχηματισμό βαθμίδας.

### 3.1 Μέτρο Haar

Αυτό το μέτρο ολοκλήρωσης καλείται μέτρο Haar και πρέπει να είναι αναλλοίωτο ως προς τον μετασχηματισμό βαθμίδας. Κάτω από έναν μετασχηματισμό βαθμίδας έχουμε

$$U_\mu(n) \rightarrow U'_\mu(n) = \Omega(n)U_\mu(n)\Omega(n + \mu)^\dagger. \quad (3.6)$$

Η δράση Wilson έχουμε δείξει ότι μένει αναλλοίωτη

$$S_G[U'] = S_G[U]. \quad (3.7)$$

Όσον αφορά το ολοκλήρωμα διαδρομής και αυτό θα πρέπει να είναι αναλλοίωτο στην αλλαγή  $U_\mu \rightarrow U'_\mu$

$$Z = \int D[U]e^{-S_G[U]} = \int D[U']e^{-S_G[U']} = \int D[U']e^{-S_G[U]}, \quad (3.8)$$

όπου στην τελευταία ισότητα κάναμε χρήση της αναλλοιότητας της δράσης (3.7). Από την (3.8) προκύπτει πως θα πρέπει να ισχύει

$$D[U] = D[U']. \quad (3.9)$$

Το  $D[U]$  θα πρέπει να έχει την ιδιότητα

$$dU_\mu(n) = dU'_\mu(n) = d(\Omega(n)U_\mu(n)\Omega(n + \mu)^\dagger). \quad (3.10)$$

Στην συνέχεια εφόσον τα  $\Omega(n)$  και  $\Omega(n + \mu)^\dagger$  μπορούν να επιλεγθούν να είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους θα πρέπει το μέτρο  $dU$  να είναι αναλλοίωτο όταν πολλαπλασιάζεται είτε δεξιά είτε αριστερά με ένα στοιχείο  $V$  της ίδιας ομάδας που ανήκει και το  $U$

$$dU = d(UV) = d(VU). \quad (3.11)$$

Τέλος, καθώς θα ολοκληρώνεται σε όλο το χώρο της ομάδας που ανήκει θα πρέπει να κανονικοποιείται

$$\int dU 1 = 1. \quad (3.12)$$

Για να εξοικειωθούμε λίγο με τον τρόπο λειτουργίας του μέτρου ολοκλήρωσης Haar , θα δείξουμε μερικά ολοκληρώματα της  $SU(N)$ . Το βασικό εργαλείο για την ανάλυση αυτών των ολοκληρωμάτων είναι η ακόλουθη εξίσωση για ολοκληρώματα πάνω σε συναρτήσεις  $f(U)$

$$\int dU f(U) = \int dU f(VU) = \int dU f(UQ), \quad (3.13)$$

όπου τα  $V, Q$  είναι αυθαίρετοι πίνακες που ανήκουν στην  $SU(N)$ . Η σχέση αυτή προκύπτει άμεσα από την εξίσωση (3.11). Ξεκινάμε από το ολοκλήρωμα που αφορά μόνο ένα σύνδεσμο

$$\int dU U_{ij} = \int dU (VU)_{ij} = V_{ik} \int dU U_{kj}, \quad (3.14)$$

όπου οι δείκτες δηλώνουν την δομή των πινάκων που περιέχουν τους συνδέσμους. Για την εξίσωση (3.14) θα πρέπει να έχουμε  $V_{ik} = \delta_{ik}$ . Όμως, η τελευταία εξίσωση θα πρέπει να ισχύει για αυθαίρετη ομάδα στοιχείων της  $SU(N)$ , επομένως το ολοκλήρωμα εξαφανίζεται:

$$\int dU U_{ij} = 0, \quad (3.15)$$

και αντίστοιχα για το ολοκλήρωμα πάνω σε δύο συνδέσμους:

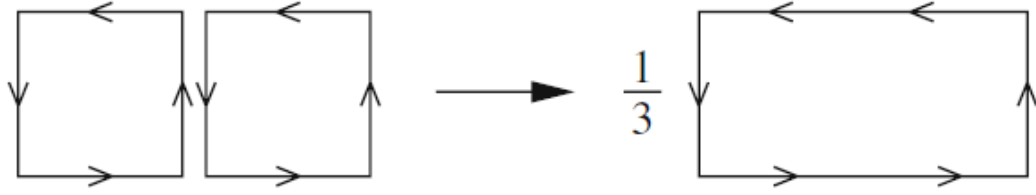
$$\int dU U_{ij} U_{lk} = 0. \quad (3.16)$$

Παρόλα αυτά το ακόλουθο ολοκλήρωμα θα μας δώσει ένα μη-μηδενικό αποτέλεσμα:

$$\begin{aligned} & \int dU U_{ij} (U^\dagger)_{lk} \stackrel{j=l}{=} \int dU (U_{i1} (U^\dagger)_{1k} + U_{i2} (U^\dagger)_{2k} + \dots U_{iN} (U^\dagger)_{Nk}) \\ & = \int dU (UU^{-1})_{ik} = \int dU \delta_{ik} = \delta_{ik} \Rightarrow \int dU U_{ij} (U^\dagger)_{lk} = \frac{1}{N} \delta_{ik} \delta_{jl}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Στην εξίσωση (3.17) έχουμε χρησιμοποιήσει την σχέση  $W^\dagger = W^{-1}$  καθώς και την κανονικοποίηση του μέτρου Haar , εξίσωση (3.12). Για το άνω δεξί μέρος της (3.17) είναι σημαντικό να καταλάβουμε ότι οι  $N$  συνιστώσες είναι εντελώς ισοδύναμες. Για παράδειγμα, ο πρώτος όρος μπορεί να μετατραπεί στον δεύτερο όρο αν ανταλλάξουμε τις γραμμές 1 και 2 όπως και τις στήλες 1 και 2. Αυτή η διαδικασία μετατρέπει ένα στοιχείο της  $SU(N)$  σε ένα άλλο στοιχείο της ίδιας ομάδας. Αυτή η ιδιότητα σημαίνει ότι κάθε όρος  $N$  συνεισφέρει κατά  $1/N$  στο συνολικό αποτέλεσμα. Αυτή η εξίσωση έχει ενδιαφέρον, διότι επιτρέπει σε κάποιο να ολοκληρώσει την συνήθεις μεταβλητή συνδέσμων που υπάρχει στο γινόμενο ιχνών δύο πλακετών, που έχει ως αποτέλεσμα το ίχνος των συνδέσμων μεταβλητών γύρω από τις δύο πλακέτες, όπως φαίνεται στο σχήμα (3.1)

$$\int dU \text{tr}[VU] \text{tr}[U^\dagger Q] = \frac{1}{N} \text{tr}[VU]. \quad (3.18)$$



Σχήμα 3.1: Ολοκλήρωση σε ένα απλό σύνδεσμο σε έναν  $SU(3)$  πλέγμα. Το σχήμα αυτό είναι από το βιβλίο του Gattringer [8].

## 3.2 Βρόχος Wilson και Polyakov

Ο βρόχος Wilson είναι μια μετρούμενη ποσότητα (observable) η οποία υπολογίζεται πάνω στο πλέγμα με σκοπό να υπολογίσουμε φυσικές ποσότητες όπως είναι το στατικό δυναμικό.

Οι φυσικές ποσότητες που θέλουμε να υπολογίσουμε, βάση της θεωρίας μας θα πρέπει να παραμένουν αναλλοίωτες σε μετασχηματισμούς βαθμίδας. Για να το πετύχουμε αυτό, όπως δείξαμε και πιο πάνω θα πρέπει κατά τον υπολογισμό να κινούμαστε σε ένα κλειστό βρόχο. Ο βρόχος Wilson λοιπόν, αποτελεί και αυτός έναν τέτοιο κλειστό βρόχο όπως περιγράψαμε και στην εξίσωση (2.9)

$$L[U] = \text{tr} \left[ \prod_{(n,\mu) \in L} U_\mu(n) \right], \quad (3.19)$$

όπου εδώ το  $L$  είναι ένας κλειστός βρόχος από συνδέσμους πάνω στο πλέγμα και το γινόμενο διατρέχει όλους αυτούς τους συνδέσμους.

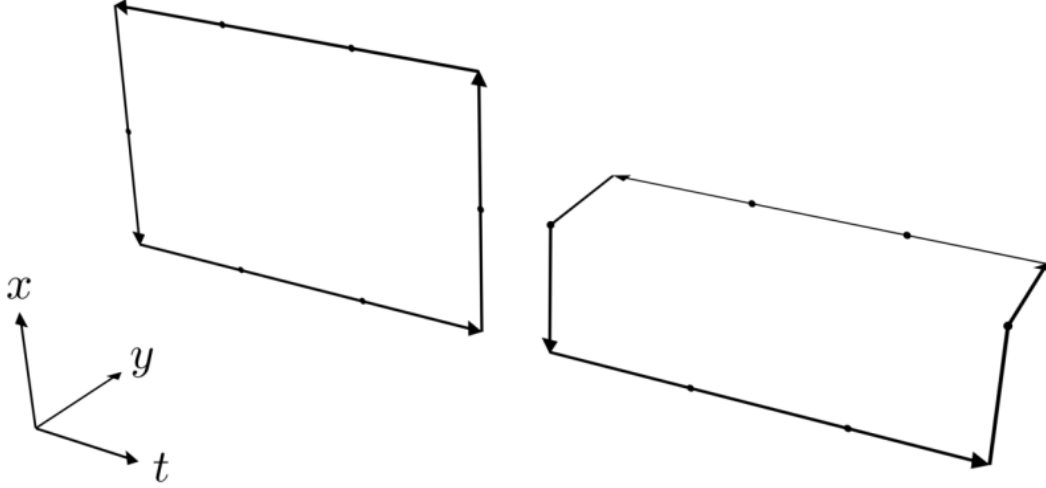
Ο βρόχος Wilson  $W_L$  ανήκει στην κατηγορία που μόλις αναφέραμε και αποτελείται από τέσσερα μέρη, δύο χωρικές μετατοπίσεις οι οποίες καλούνται γραμμές Wilson  $S(\mathbf{m}, \mathbf{n}, n_t)$ ,  $S(\mathbf{m}, \mathbf{n}, 0)$  και δύο χρονικές μετατοπίσεις  $T(\mathbf{n}, n_t)$ ,  $T(\mathbf{m}, n_t)$ . Η χωρική μετατόπιση  $S(\mathbf{m}, \mathbf{n}, n_t)$  συνδέει τα σημεία  $\mathbf{m}$  και  $\mathbf{n}$  του χώρου πάνω σε μια διαδρομή  $C_{\mathbf{m},\mathbf{n}}$  για μια δεδομένη χρονική στιγμή  $n_t$  για όλους τους συνδέσμους στην διαδρομή αυτή

$$S(\mathbf{m}, \mathbf{n}, n_t) = \prod_{(\mathbf{k},j) \in C_{\mathbf{m},\mathbf{n}}} U_j(\mathbf{k}, n_t). \quad (3.20)$$

Η χρονική μετατόπιση  $T(\mathbf{n}, n_t)$  είναι μια ευθεία γραμμή αποτελούμενη από  $n_t$  συνδέσμους μεταβλητών στην κατεύθυνση του χρόνου και για το σημείο  $\mathbf{n}$  του χώρου

$$T(\mathbf{n}, n_t) = \prod_{j=0}^{n_t-1} U_4(\mathbf{n}, j). \quad (3.21)$$

Αν τώρα βάλουμε στην σειρά όλους αυτούς τους συνδέσμους μεταβλητών θα έχουμε



Σχήμα 3.2: Ένας επίπεδος (στα αριστερά) και ένα μη-επίπεδος (στα δεξιά) βρόχος Wilson . Σχήμα από την εργασία του J.Bor [7].

$$L : (\mathbf{m}, n_t) \xrightarrow{S} (\mathbf{n}, n_t) \xrightarrow{T^\dagger} (\mathbf{n}, 0) \xrightarrow{S^\dagger} (\mathbf{m}, 0) \xrightarrow{T} (\mathbf{m}, n_t) \quad (3.22)$$

και για να πάρουμε το βρόχο Wilson θα πρέπει να πάρουμε το ίχνος από το γινόμενο των συνδέσμων αυτών

$$W_L[U] = \text{tr}[S(\mathbf{m}, \mathbf{m}, n_t)T(\mathbf{n}, n_t)^\dagger S(\mathbf{m}, \mathbf{n}, 0)^\dagger T(\mathbf{m}, n_t)] = \text{tr} \left[ \prod_{(k,\mu) \in L} U_\mu(k) \right]. \quad (3.23)$$

Στην περίπτωση όπου ο βρόχος  $C_{\mathbf{m},\mathbf{n}}$  που χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό του  $S(\mathbf{m}, \mathbf{n}, n_t)$  αποτελείται από ευθείες συν-επίπεδες γραμμές το αυτό καλείται επίπεδος βρόχος Wilson . Αλλιώς ο βρόχος Wilson καλείται μη-επίπεδος. Στο σχήμα (3.2) φαίνονται δύο τέτοιοι βρόχοι.

Μια παραλλαγή του βρόχου Wilson είναι αυτό που καλούμαι βρόχο *Polyakov* ή αλλιώς *θερμική γραμμή Wilson* . Σε αυτή την περίπτωση δουλεύουμε με συνοριακές συνθήκες οι οποίες είναι περιοδικές στην κατεύθυνση του χρόνου για τα πεδία βαθμίδας. Αρχικά μεγαλώνουμε την χρονική παράμετρο  $n_t$  όσο περισσότερο γίνεται στο πλέγμα, δηλαδή  $n_t = N_T$ , όπου  $N_T$  είναι ο μέγιστος αριθμός σημείων στην κατεύθυνση του χρόνου πάνω στο πλέγμα.

Όσον αφορά τώρα τα χωρικά μέρη του βρόχου Wilson , δηλαδή της κάθετες γραμμές της εικόνας (3.2) είναι προσανατολισμένες με αντίθετη φορά η μια από την άλλη. Λόγω των περιοδικών συνοριακών συνθηκών δεν μπορούμε να μετατρέψουμε όλους τους χρονικούς συνδέσμους μέσω μετασχηματισμών βαθμίδας σε  $\mathbb{1}$ , αυτό όμως που μπορούμε είναι να μετασχηματίσουμε τα χωρικά μέρη του βρόχου σε  $\mathbb{1}$ . Έτσι, ο βρόχος Wilson πλέον αποτελείται από τις δύο ανεξάρτητες διαδρομές  $T(\mathbf{m}, N_T), T(\mathbf{n}, N_T)^\dagger$  των χρονικών συνδέσμων μεταβλητών, που βρίσκονται στις χωρικές θέσεις  $\mathbf{m}$  και  $\mathbf{n}$ .

Για να κάνουμε αυτή την μετρούμενη ποσότητα αναλλοίωτη-βαθμίδας θα πρέπει να πάρουμε το ίχνος(trace) των δύο βρόχων ξεχωριστά. Αυτό ουσιαστικά αποτελεί μια νέα διευθέτηση των δεικτών χρώματος και αφήνει την ερμηνεία της μετρούμενης ποσότητας ίδια. Με αυτό τον τρόπο καταφέρνουμε να εισάγουμε αυτό που αποκαλούμε βρόχο Polyakov

$$P(\mathbf{m}) = \text{tr} \left[ \prod_{j=0}^{N_T} U_4(\mathbf{m}, j) \right], \quad (3.24)$$

και επειδή αποτελεί ίχνος σε κλειστό βρόχο είναι αναλλοίωτο κάτω από τον μετασχηματισμό βαθμίδας. Με αυτό τον τρόπο καταφέρνουμε να αποκόψουμε την χωρική βαθμίδα και να πάρουμε για  $r = a|\mathbf{m} - \mathbf{n}|$ :

$$\langle P(\mathbf{m})P(\mathbf{n})^\dagger \rangle \propto e^{-N_T a V(r)} (1 + \mathcal{O}(e^{-N_T a \Delta E})). \quad (3.25)$$

Ο βρόχος Polyakov μας χρησιμεύει ιδιαίτερα στον υπολογισμό του στατικού δυναμικού.

### 3.3 Στατικό Δυναμικό

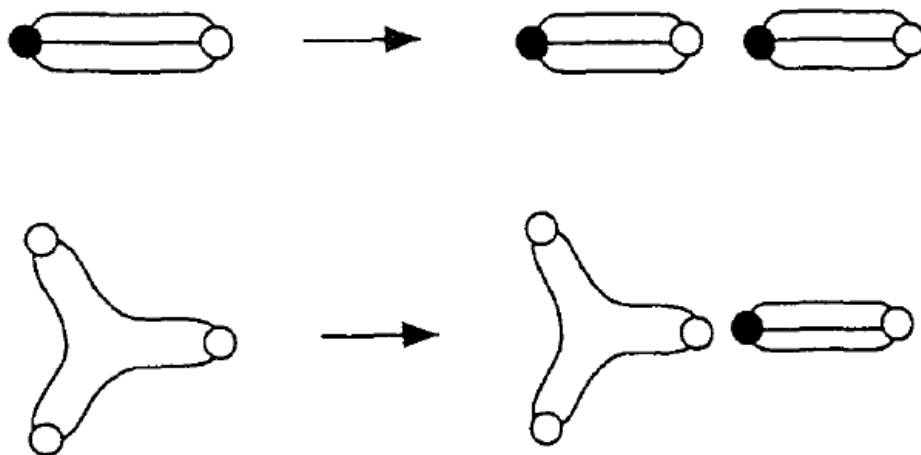
Ένας σημαντικό εγχείρημα που πρέπει να πετύχει η QCD είναι να δείξει αν μπορούν να υπάρξουν απομονωμένα κουάρκ στην φύση. Γενικά πιστεύουμε ότι αυτός ο περιορισμός των κουάρκ είναι μια συνέπεια της μη-αβελιανής φύσης των αλληλεπιδράσεων βαθμίδας στην QCD. Σε αντίθεση με την QED όπου στην περίπτωση αντίθετων φορτίων οι γραμμές του πεδίου μπορούν να επεκτείνονται, στην περίπτωση της QCD αναμένουμε ότι τα κουάρκ που βρίσκονται μέσα σε ένα αδρόνιο είναι οι πηγές της χρωμοηλεκτρικής ροής η οποία βρίσκεται συγκεντρωμένη σε στενούς σωλήνες(χορδές) συνδέοντας τα συστατικά στοιχεία όπως φαίνονται στο σχήμα (3.3).

Καθώς η ενέργεια δεν επιτρέπεται να εξαπλωθεί, το δυναμικό ενός ζεύγους κουάρκ-αντικουάρκ ( $q\bar{q}$ ) θα αυξηθεί κατά τον διαχωρισμό τους, όσο τα φαινόμενα πόλωσης του κενού δεν καλύπτουν(screen) το φορτίο χρώματος τους. Για έναν μεγάλο σχετικά διαχωρισμό των κουάρκ, η ενέργεια που έχει αποθηκευτεί στην χορδή επαρκεί για να παράξει πραγματικά ζεύγη κουάρκ, και το σύστημα θα χαμηλώσει την ενέργεια του πηγαίνοντας σε μια νέα αδρονική κατάσταση, αποτελούμενο από χρωματικά ουδέτερα αδρόνια. Στο σχήμα (3.4) φαίνεται μια ποιοτική αναπαράσταση αυτής της αδρονικής διαδικασίας για την περίπτωση όπου τα κουάρκ βρίσκονται σε μια κατάσταση μεσονίου( $q\bar{q}$ ) και σε μια βαρυονίου( $qqq$ ).

Εφόσον έχουμε εισάγει το βρόχο Wilson ως μια μετρήσιμη ποσότητα για τον υπολογισμό του στατικού δυναμικού  $V(r)$ , μπορούμε τώρα να συζητήσουμε την γενική μορφή που θα έχει το δυναμικό  $V(r)$ . Αρχικά υπολογίσαμε το δυναμικό στο όριο την ισχυρής σύζευξης  $g$  (που αντιστοιχεί σε μικρό  $\beta$  βάση της εξίσωση 3.5) και βρήκαμε ότι γεννά έναν γραμμικό όρο. Ταυτόχρονα, για μικρή σταθερά ζεύξης  $g$ , παίρνουμε έναν όρο  $1/r$  παρόμοιο με αυτόν της ηλεκτροδυναμικής. Επομένως βρίσκουμε ότι το στατικό δυναμικό μεταξύ των κουάρκ μπορεί να πάρει την παρακάτω μορφή:



Σχήμα 3.3: (a) Μια εικόνα ενός μεσονίου που αποτελείται από ένα ζεύγος κουάρκ-αντικουάρκ και συγκρατείται από ένα χορδοειδές χρωμοηλεκτρικό πεδίο. (b) Αντίστοιχη εικόνα βαρυονίου το οποίο αποτελείται από τρία κουάρκς. Σχήμα από το βιβλίο του H.J. Rothe [1].



Σχήμα 3.4: Αδρονιοποίηση ενός μεσονίου και ενός βαρυονίου καθώς το ένα κουάρκ τραβιέται έως ότου διακοπή η σύνδεση του. Σχήμα από το βιβλίο του H.J. Rothe [1].

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + \sigma r. \quad (3.26)$$

Ως γνωστόν η δύναμη μεταξύ των κουάρκς δίνεται από την παράγωγο του δυναμικού  $V(r)$  επομένως η σταθερά  $A$  είναι μια αυθαίρετη σταθερά της ενέργειας. Ο δεύτερος όρος της εξίσωσης αποτελεί το δυναμικό Coulomb. Τέλος, ο τρίτος όρος της εξίσωσης είναι ένας γραμμικά αυξανόμενος όρος, και η πραγματική σταθερά  $\sigma$  είναι αυτό που αποκαλούμε τάση χορδής (string tension). Από την φαινομενολογία της QCD αναμένουμε ότι  $\sigma \approx 900 \text{ MeV/fm}$ .

### 3.4 Ανάπτυγμα ισχυρής ζεύξης (Strong coupling expansion)

Στην QCD το δυναμικό που περιγράφηκε παραπάνω εγκλωβίζει-περιορίζει τα κουάρκς, πιο ακριβέστερα, αναμένουμε ότι για μεγάλο διαχωρισμό ενός ζεύγους κουάρκ-αντικουάρκ, το  $V(r)$  αυξάνεται γραμμικά με το  $r$  μέχρι την απόσταση όπου το φαινόμενο της πώλωσης του κενού, λόγω της παρουσίας δυναμικών φερμιονίων, θωρακίζει την αλληλεπίδραση. Δυστυχώς αυτού του είδους η συμπεριφορά του δυναμικού δεν μπορεί να περιγραφεί από τη θεωρία διαταραχών. Για το λόγο αυτό καταφεύγουμε σε αριθμητικούς υπολογισμούς. Από την άλλη μπορούν να γίνουν αναλυτικοί υπολογισμοί στην περίπτωση της ισχυρής ζεύξης στο πλέγμα. Πράγματι, καθώς δεν υπάρχουν δυναμικά φερμιόνια, η δομή της εξίσωσης της δράσης (3.4) μας ωθεί σε μια ανάπτυξη σε δυνάμεις της αντίστροφης σταθερά ζεύξης. Αυτό είναι το ανάλογο του αναπτύγματος σε υψηλή θερμοκρασία στην στατιστική μηχανική.

Θεωρούμε την  $SU(N)$  πλεγματοειδή θεωρία βαθμίδας στο τμήμα της καθαρής βαθμίδας. Η αντίστοιχη δράση στο πλέγμα δίνεται από την σχέση:

$$S = -\beta \sum_P S_P + \text{const.} \quad (3.27)$$

όπου

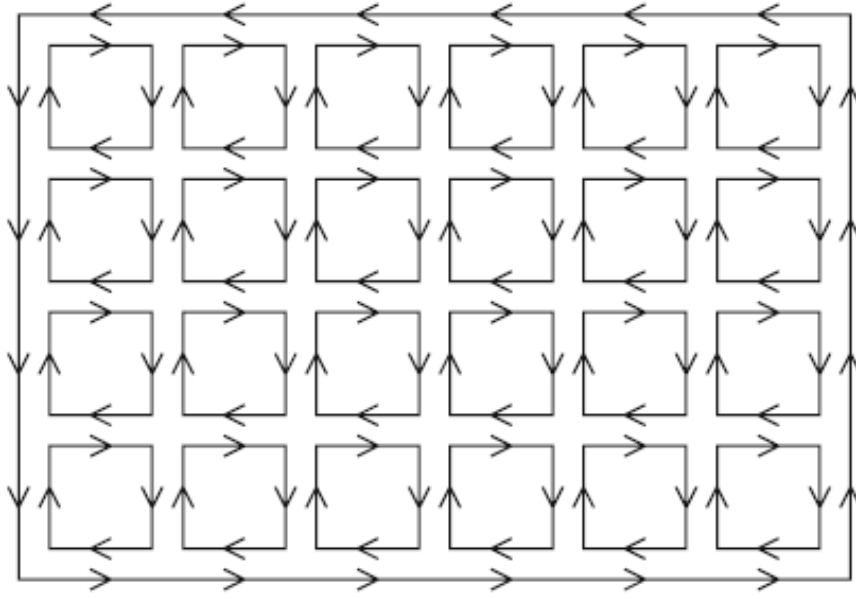
$$\beta = 2N/g_0^2, \quad (3.28)$$

και

$$S_P = \frac{1}{2N} \text{tr}(U_P + U_P^\dagger), \quad (3.29)$$

είναι η συνεισφορά της δράσης που σχετίζεται με την πλακέτα  $P$ . Η αντίστοιχη συνάρτηση επιμερισμού είναι:

$$Z = \int DU e^{\beta \sum_P S_P}, \quad (3.30)$$



Σχήμα 3.5: Κύρια συνεισφορά του  $\langle W_L \rangle$  στην προσέγγιση της ισχυρής ζεύξης. Σχήμα από το βιβλίο του Gattringer [8].

και η αναμενόμενη τιμή του βρόχου Wilson με χωρική και χρονική μεταβλητή  $\hat{R}$  και  $\hat{T}$ , δίνεται:

$$\langle W_L[U] \rangle = \frac{\int DU W_L[U] \prod_P e^{\beta S_P}}{\int DU \prod_P e^{\beta S_P}}, \quad (3.31)$$

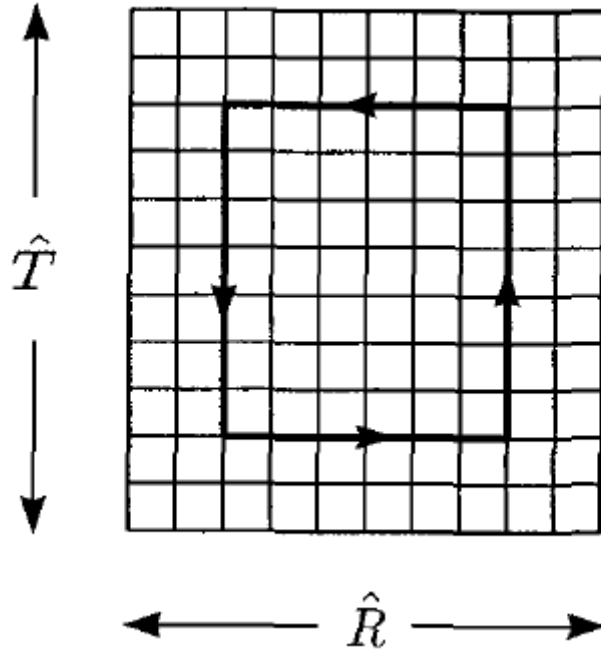
όπου το  $W_L$  έχει οριστεί στην εξίσωση (3.23). Στην συνέχεια αναπτύσσουμε το εκθετικό στην εξίσωση (3.31) σε δυνάμεις του  $\beta$ :

$$e^{\beta \sum_P S_P} = \prod_P \left[ \sum_n \frac{\beta^n}{n!} (S_P)^n \right]. \quad (3.32)$$

Καθώς κάθε πλακέτα στο ανάπτυγμα κοστίζει κατά έναν παράγοντα  $\beta$ , η κύρια συνεισφορά, για  $\beta \rightarrow 0$  στον αριθμητή της (3.31) μπορεί να αποκτηθεί αλλάζοντας το εσωτερικό του βρόχου Wilson με τον μικρότερο αριθμό στοιχειωδών πλακετών που δίνουν μια μη-μηδενική τιμή στο ολοκλήρωμα.

Ας θεωρήσουμε την περίπτωση της  $SU(2)$ . Όπως προκύπτει από τους κανόνες ολοκλήρωσης, η σχετική κατάσταση φαίνεται στο σχήμα (3.5). Για τον λόγο αυτό ο κύριος όρος στο ανάπτυγμα της ισχυρής ζεύξης του αριθμητή είναι ανάλογος του  $\beta^{\hat{A}}$ , όπου το  $\hat{A}$  είναι η ελάχιστη περιοχή που έχει όρια το ορθογώνιο  $C : \hat{A} = \hat{R}\hat{T}$ . Από την άλλη, ο κύριος όρος που συνεισφέρει στον παρονομαστή προκύπτει κάνοντας την αντικατάσταση  $\exp(\beta \sum S_P) \rightarrow 1$ . Άρα καταλήγουμε ότι ο κύριος όρος της ισχυρής ζεύξης είναι:





Σχήμα 3.6: Περίγραμμα ολοκλήρωσης για το στατικό δυναμικό. Σχήμα από το βιβλίο του H.J. Rothe [1].

$$\langle W_L[U] \rangle \approx \left( \frac{\beta}{4} \right)^{\hat{R}\hat{T}} \quad (3.33)$$

και επομένως το δυναμικό μεταξύ κουάρκ-αντικουάρκ( $q\bar{q}$ ) στην ισχυρή ζεύξη γίνεται:

$$\hat{V}(\hat{R}) = - \lim_{\hat{T} \rightarrow \infty} \frac{1}{\hat{T}} \ln \langle W_L[U] \rangle = \hat{\sigma}(g_0) \hat{R} \quad (3.34)$$

όπου

$$\alpha^2 \hat{\sigma} = - \ln \left( \frac{\beta}{4} \right) \quad (3.35)$$

είναι η τάση της χορδής υπολογισμένη σε μονάδες του πλέγματος, όπου  $\alpha$  η σταθερά του πλέγματος. Σύμφωνα με το άρθρο του Creutz [14] στην περίπτωση που έχουμε μεγάλο  $\beta$  αναμένουμε μια ασυμπτωτική συμπεριφορά των μετρήσεων μας σύμφωνα με την εξίσωση

$$\alpha^2 \sigma \sim \exp \left( \frac{-6\pi^2 \beta}{11} \right). \quad (3.36)$$

### 3.5 Θερμοκρασία και πλεγματική θεωρία βαθμίδας

Για την περίπτωση της κβαντομηχανικής όπως έχουμε αναφέρει η συνάρτηση επιμερισμού δίνεται από την σχέση:

$$Z(T) = \text{tr} \left[ e^{-\hat{H}/(k_\beta T)} \right] = \text{tr} \left[ e^{-\beta \hat{H}} \right], \quad (3.37)$$

όπου το  $\hat{H}$  είναι ο Χαμιλτονιανός τελεστής και το  $\beta$  τώρα δηλώνει την αντίστροφη θερμοκρασία  $\beta = 1/(k_\beta T)$ , με το  $k_\beta$  να είναι η σταθερά του Boltzmann. Αυτός ο συμβολισμός του  $\beta$  έχει παρθεί από την στατιστική μηχανική και δημιουργεί μια σύγχυση με τον προηγούμενο συμβολισμό του  $\beta$  ως το αντίστροφο της σταθεράς ζεύξης, γι' αυτό σε περίπτωση που θέλουμε να αναφερθούμε στην σταθερά ζεύξης θα το επισημάνουμε. Επίσης για τους υπολογισμούς μας παρακάτω έχουμε πάρει την σχέση  $k_\beta = 1$ . Επομένως η θερμοκρασία  $T$  δίνεται σε μονάδες ενέργειας η μάζας και  $\beta = 1/T$ .

Λόγω του ίχνους που υπάρχει στην σχέση (3.37) περιοριζόμαστε σε πεδία που είναι περιοδικά (μποζόνια) ή αντί-περιοδικά (φερμιόνια) στον χρόνο. Όπως έχουμε αναφέρει και σε προηγούμενο κεφάλαιο η συνάρτηση επιμερισμού μπορεί να μετασχηματιστεί σε ένα ολοκλήρωμα διαδρομής με τέτοιες καταστάσεις των πεδίων. Όμως, σε αντίθεση με τις προηγούμενες υποθέσεις μας, τώρα δεν υποθέτουμε πως ο χρόνος εκτείνεται στο άπειρο. Αντιθέτως, προκύπτει το ολοκλήρωμα συναρτήσεων:

$$Z(T) = \int D[\Phi] e^{-S_E[\Phi]}, \quad (3.38)$$

με το  $\Phi$  να είναι κάποιο γενικό πεδίο και η ολοκλήρωση προφανώς γίνεται πάνω σε πεδία, (αντί-)περιοδικά στην πεπερασμένη κατεύθυνση του χρόνου. Η Ευκλείδεια δράση προκύπτει από ένα ολοκλήρωμα πάνω σε όλο το χώρο αλλά σε πεπερασμένο χρόνο:

$$S_E[\Phi] = \int_0^\beta dt \int_{\mathbb{R}^3} d^3x L_E(\Phi(t, \xi), \partial_\mu \Phi(t, \xi)). \quad (3.39)$$

Το μέτρο  $D[\Phi]$  και η δράση  $S_E[\Phi]$  διακριτοποιούνται στο πλέγμα ως συνήθως. Κατά την διακριτοποίηση καταλαβαίνουμε ότι μόνο η οπτική γωνία αλλάζει. Μέχρι τώρα εργαζόμασταν για την θερμοκρασία μηδέν διότι μας ενδιέφεραν αποτελέσματα στο όριο του άπειρου χωροχρονικού όγκου. Η έκταση του χώρου και του χρόνου θεωρήθηκε πολύ μεγαλύτερη από το μεγαλύτερο μήκος συσχετισμού. Τώρα ο χώρος ακόμα θεωρείται σε αυτό το όριο αλλά η φυσική έκταση του χρόνου τώρα περιορίζεται στο  $\beta$ . Για ένα πεπερασμένο πλέγμα η έκταση του χώρου είναι  $\alpha N$  και η χρονική έκταση είναι  $\alpha N_T$ . Έτσι, έχουμε:

$$\beta = \alpha N_T = \frac{1}{T} \quad (3.40)$$

και βρίσκουμε ότι στο όριο  $\beta \rightarrow \infty$  αντιστοιχεί σε  $T \rightarrow 0$ . Αυτό το ερμηνεύουμε ως ένα σύστημα με πεπερασμένο χωρικό όγκο και σταθερή θερμοκρασία  $T$ . Το όριο της

συνέχειας ενός τέτοιου συστήματος αντιστοιχεί σε  $\alpha \rightarrow 0$  ενώ ταυτόχρονα κρατάμε τα  $\alpha N$  και  $\alpha N_T$  σταθερά. Τα φαινόμενα πεπερασμένου όγκου γίνονται μικρότερα όσο ο όρος  $N/N_T$  είναι μεγάλος.

### 3.5.1 Καθαρή θεωρία βαθμίδας

Σε προηγούμενη ενότητα έχουμε εισάγει μια σημαντική ποσότητα, τον βρόχο Polyakov. Ο βρόχος αυτός δίνεται από την σχέση (3.24). Ο συσχετιστής  $\langle P(m)P(n)^\dagger \rangle$  σχετίζεται με το στατικό δυναμικό ενός ζεύγους κουάρκ-αντικουάρκ μέσω της σχέσης (3.25) από το οποίο προκύπτει η αντίστοιχη σχέση για την ελεύθερη ενέργεια σε μια δεδομένη θερμοκρασία:

$$\langle P(\mathbf{m})P(\mathbf{n})^\dagger \rangle = e^{-\alpha N_T F_{q\bar{q}}(a|\mathbf{m}-\mathbf{n}|)} = e^{-F_{q\bar{q}}(r)/T}. \quad (3.41)$$

Ως συνήθως η ενέργεια πρέπει να κανονικοποιηθεί σε μια απόσταση. Για μεγάλες αποστάσεις αναμένουμε την παρακάτω παραγοντοποίηση:

$$\lim_{a|\mathbf{m}-\mathbf{n}| \rightarrow \infty} \langle P(\mathbf{m})P(\mathbf{n})^\dagger \rangle = \langle P(\mathbf{m}) \rangle \langle P(\mathbf{n})^\dagger \rangle = |\langle P \rangle|^2. \quad (3.42)$$

Όπου στην παραπάνω σχέση έχουμε αντικαταστήσει το  $P$  ως εξής:

$$P = \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{m}} P(\mathbf{m}), \quad (3.43)$$

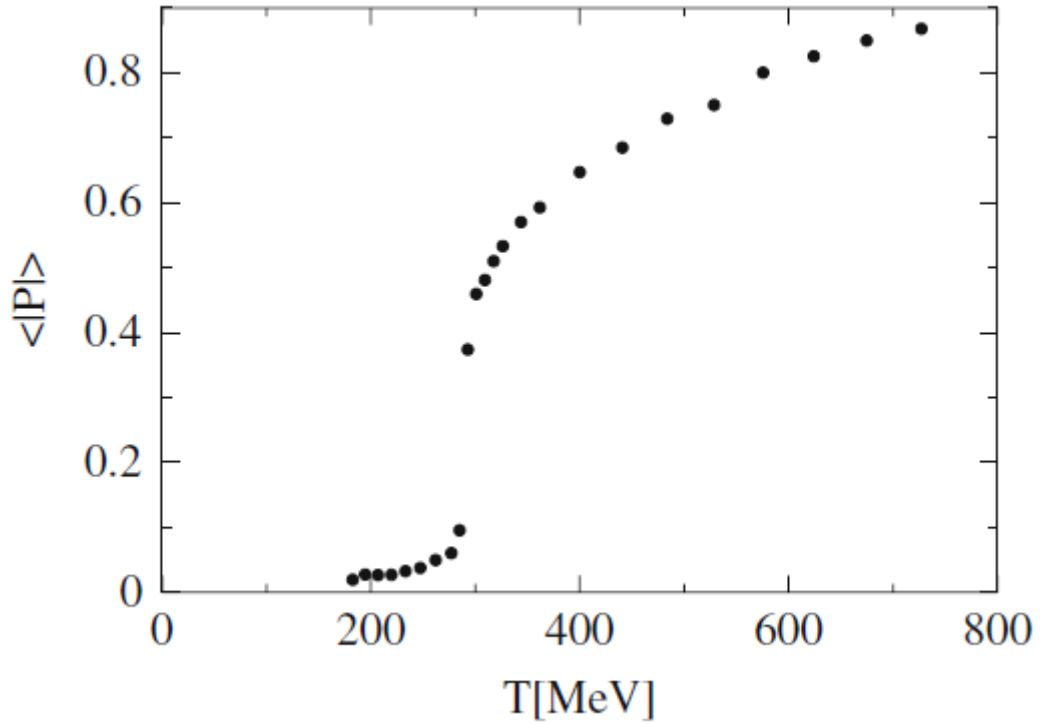
που είναι η μέση τιμή των θέσεων. Παρατηρούμε ότι για στατικά δυναμικά που μεγάλωνουν απεριόριστα όσο η απόσταση διαχωρισμού αυξάνεται, όπως στην σχέση (3.26) για  $\sigma > 0$ , το  $|\langle P \rangle|$  πρέπει να μηδενίζεται. Επομένως καταλήγουμε στο συμπέρασμα:

$$\begin{aligned} \langle P \rangle = 0 &\iff \text{εγκλεισμένη,} \\ \langle P \rangle \neq 0 &\iff \text{μη-εγκλεισμένη.} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Στις χαμηλές θερμοκρασίες η QCD είναι εγκλεισμένη (confining). Καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται, η καθαρή θεωρία βαθμίδας περνά από μια μετάβαση φάσης σε μια κρίσιμη θερμοκρασία  $T_c$  περίπου στα  $270 \text{ MeV}$ . Εκεί το σύστημα βγαίνει από την κατάσταση εγκλεισμού (deconfines) και το  $\langle P \rangle$  αποκτά μη μηδενική τιμή.

Ένας μεμονωμένος βρόχος Polyakov δεν είναι τίποτα άλλο παρά ένας βρόχος Wilson σε ένα σταθερό σημείο του χώρου που εκτείνεται στην χρονική κατεύθυνση και κάνει κυκλική διαδρομή λόγω περιοδικότητας. Μπορούμε να ερμηνεύσουμε αυτή την αναμενόμενη τιμή ως την πιθανότητα να παρατηρήσουμε ένα 'μοναχικό' στατικό φορτίο. Όταν ισχύει:

$$\langle P \rangle \sim e^{-F_q/T}, \quad (3.45)$$



Σχήμα 3.7: Η αναμενόμενη τιμή του βρόχου Polyakov  $\langle |P| \rangle$  σε συνάρτηση με την Θερμοκρασία  $T$  για την ομάδα  $SU(3)$ . Το σχήμα αυτό είναι από το βιβλίο του Gattringer [8].

συσχετίζουμε την αναμενόμενη τιμή με την ελεύθερη ενέργεια ενός μεμονωμένου φορτίου χρώματος, η περίπτωση της  $SU(3)$  φαίνεται στο σχήμα (3.7). Από την (3.44) συμπεραίνουμε ότι  $F_q \rightarrow \infty$  για τον εγκλεισμό και το  $F_q$  πρέπει να είναι πεπερασμένο για τον απεγκλεισμό.

## Κεφάλαιο 4

# Προσομοίωση της θεωρίας βαθμίδας αριθμητικά

Στο παρόν κεφάλαιο θα αναφέρουμε τα βασικά κομμάτια του αλγόριθμου προσομοίωσης που υλοποιήσαμε για την παραγωγή δεδομένων, καθώς επίσης και κάποια βασικά στοιχεία θεωρίας που απαιτούνται. Πιο συγκεκριμένα θα αναφερθούμε στη μέθοδο Monte Carlo και πώς με βάση αυτήν θα υπολογίσουμε τις αναμενόμενες τιμές των παρατηρήσιμων ποσοτήτων του συστήματος. Ανανεώνοντας το πλέγμα με νέες καταστάσεις του συστήματος βάση της διαδικασίας Markov καταφέρνουμε να φτάσουμε το πλέγμα σε μια κατάσταση θερμικής ισορροπίας μετά από μια σειρά μετρήσεων, της οποίας το πλήθος εξαρτάται από το σύστημα. Ο αλγόριθμος Metropolis, τον οποίο και θα αναλύσουμε παρακάτω, υλοποιείται μέσω της γλώσσας προγραμματισμού Python. Στην συνέχεια θα περιγράψουμε με ποιόν τρόπο δημιουργούμε τους  $N \times N$  πίνακες συνδέσεων που συνδέουν τα μεταξύ τους πλεγματικά σημεία, αλλά και πώς στην συνέχεια τα ενημερώνουμε με βάση τις νέες καταστάσεις. Στην συνέχεια θα αναφερθούμε στις συνοριακές συνθήκες αλλά και τις συνθήκες εκκίνησης για τα πεδία βαθμίδας. Θα αναφέρουμε μεθόδους με τις οποίες θα βελτιστοποιήσουμε τους χρόνους εκτέλεσης καθώς και τα αποτελέσματα μας. Τέτοιες μέθοδοι είναι για παράδειγμα η Overrelaxation και η Heatbath που τρέχουν συνδυαστικά με το Metropolis. Τέλος θα μιλήσουμε και για μεθόδους που μας βοηθούν στον υπολογισμό του σφάλματος των μετρήσεων καθώς και των αναμενόμενων τιμών, όπως επίσης και για το πως να υπολογίσουμε μετρούμενες ποσότητες, όπως το στατικό δυναμικό μεταξύ δύο ακίνητων quark. Ο κώδικας που έχουμε υλοποιήσει αφορά καθαρά την ομάδα  $SU(2)$  αλλά στη θεωρία θα γίνονται και αναφορές για  $SU(3)$ .

### 4.1 Η μέθοδος Monte Carlo

Όπως αναφέραμε και σε προηγούμενο κεφάλαιο η αναμενόμενη τιμή μιας παρατηρήσιμης ποσότητας στο κενό σε μια κβαντισμένη Ευκλείδεια θεωρία βαθμίδας πεδίου πάνω σε πλέγμα, δίνεται από τα ακόλουθα ολοκληρώματα:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int D[U] e^{-S_G[U]} O[U], \quad (4.1)$$

με τη συνάρτηση επιμερισμού  $Z$  να είναι:

$$Z = \int D[U] e^{-S_G[U]}, \quad (4.2)$$

όπου  $S_G[U]$  είναι η καθαρή δράση βαθμίδας στο πλέγμα και  $O[U]$  η παρατηρήσιμη ποσότητα. Δυστυχώς όμως, αυτές οι εκφράσεις δεν μπορούν να υπολογιστούν με αναλυτικό τρόπο. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιούμε μια προσομοίωση Monte Carlo, η οποία προσεγγίζει το ολοκλήρωμα με την μέση τιμή μιας ποσότητας, παίρνοντας ένα δείγμα  $N$  το πλήθος από καταστάσεις του  $U_n$  του πεδίου βαθμίδας, το οποίο κατανέμεται με μια πιθανότητα  $\propto \exp(-S[U_n])$ .

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{\substack{U_n \text{ with} \\ \text{probability} \\ \propto e^{-S[U_n]}}} O[U_n] \quad (4.3)$$

Το άθροισμα αυτό μπορεί να υπολογιστεί για ένα αρκετά μεγάλο δείγμα, το οποίο παράγεται μέσω του αλγόριθμου Monte Carlo.

#### 4.1.1 Δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας (importance sampling)

Από την θεωρία πιθανοτήτων, γνωρίζουμε ότι μπορούμε να προσεγγίσουμε το ολοκλήρωμα μιας συνάρτησης βρίσκοντας το μέσω όρο των τιμών της συνάρτησης  $f(x_n)$  για τυχαία επιλεγμένες τιμές  $x_n$  βάση της ομοιόμορφης κατανομής (uniform distribution)  $\rho_u(x_n) = 1/(b-a)$ :

$$\frac{1}{b-a} \int_a^b dx f(x) = \langle f \rangle_{\rho_u} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n) \quad (4.4)$$

Αυτή η μέθοδος μας δίνει την δυνατότητα να αντικαταστήσουμε την ακριβή μέση τιμή με την μέση τιμή του δείγματος. Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο καθώς περιορίζομαστε από το πεπερασμένο πλήθος του δείγματος που έχουμε στα πειράματά μας. Το σφάλμα (error) της μέσης τιμής του δείγματος συμπεριφέρεται ως  $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ , το οποίο από μόνο του είναι μια πιθανολογική δήλωση καθώς το ίδιο το σφάλμα των μετρήσεων έχει και αυτό με την σειρά του δικό του σφάλμα.

Η ολοκλήρωση κατά Monte Carlo στην εξίσωση (4.4) μπορεί εύκολα να εφαρμοστεί σε μεγαλύτερης διάστασης ολοκληρώματα. Αυτό που αλλάζει μόνο είναι η μεταβλητή  $x_n$ , η οποία δηλώνει ένα διάνυσμα με τυχαίες μεταβλητές, που έχει επιλεγεί για έναν πολυδιάστατο χώρο. Κανονικά, η υπολογιστική ισχύς που απαιτείται για μια συνηθισμένη τεχνική τετραγωνισμού (quadrature) αυξάνει εκθετικά με την ζητούμενη ακρίβεια. Όμως, για την ολοκλήρωση Monte Carlo το εκτιμώμενο σφάλμα είναι πάντα  $\propto 1/\sqrt{N}$ . Αυτό σημαίνει ότι αν θέλουμε να αυξήσουμε την ακρίβεια του ολοκληρώματος κατά έναν παράγοντα του δύο, θα πρέπει να πάρουμε τέσσερις φορές μεγαλύτερο δείγμα.

Επιπλέον, θα πρέπει να λάβουμε υπόψιν μας τον παράγοντα Boltzmann  $\exp(-S)$ , ο οποίος, ανάλογα με την δράση, προσθέτει έναν διαφορετικό συντελεστή βάρους για

διαφορετικές καταστάσεις. Όταν αθροίζουμε πάνω σε διαφορετικές καταστάσεις του συστήματος, είναι πιο σημαντικό να λαμβάνουμε υπ' όψιν καταστάσεις με μεγαλύτερο συντελεστή βάρους απ' ότι καταστάσεις με μικρό συντελεστή. Αυτό είναι γνωστό σαν δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας. Στην δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας Monte Carlo, μπορούμε να προσεγγίσουμε το μεγάλο άθροισμα από τις διαφορετικές καταστάσεις του συστήματος θεωρώντας ένα μόνο μικρό υποσύνολο, δειγματοληπτώντας με βάση το βάρος των καταστάσεων. Η αναμενόμενη τιμή από κάποια συνάρτηση  $f(x)$  και η οποία έχει μια κατανομή πιθανότητας με πυκνότητα  $\rho(x)$  δίνεται από την σχέση:

$$\langle f \rangle_\rho = \frac{\int_a^b dx \rho(x) f(x)}{\int_a^b dx \rho(x)} \quad (4.5)$$

Όπως και στην εξίσωση (4.4), η αναμενόμενη τιμή στην δειγματοληψία με κριτήριο σημαντικότητας Monte Carlo όταν το δείγμα αποτελείται από  $x_n$  που έχουν επιλεγεί με πυκνότητα πιθανότητας  $\rho(x) = \int_a^b \rho(x) dx$  προσεγγίζεται από έναν μέσο όρο που αποτελείται από  $N$  τιμές

$$\langle f \rangle_\rho = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n) \quad (4.6)$$

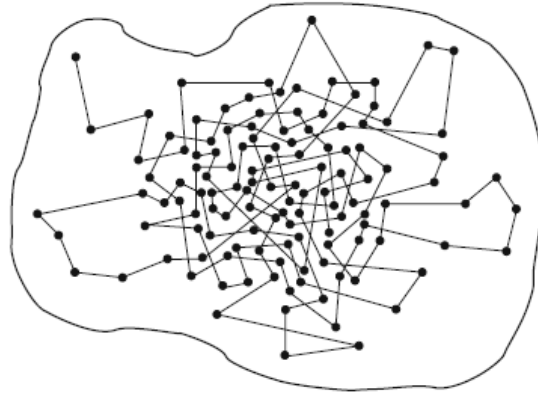
για κάθε  $x_n \in (a, b)$  που βρίσκεται στο δείγμα με την κανονικοποιημένη πυκνότητα πιθανότητας  $\frac{\rho(x)}{\int_a^b dx \rho(x)}$ . Το συναρτησιακό ολοκλήρωμα, της εξίσωσης (4.1), είναι της μορφής (4.5) και επομένως μπορεί να χρησιμοποιηθεί το κριτήριο σημαντικότητας. Για τον λόγο αυτό η αναμενόμενη τιμή μιας παρατηρήσιμης ποσότητας  $O$  προσεγγίζεται από τον εκτιμητή:

$$\langle O \rangle_\rho = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N O[U_n] \quad (4.7)$$

με κάθε  $U_n$  να έχει επιλεγεί με βάση την κατανομή:

$$dP(U) = \frac{e^{-S[U]} D[U]}{\int D[U] e^{-S[U]}} \quad (4.8)$$

γνωστό και ως μέτρο Gibbs. Οι  $U_n$  αποτελούν τις τυχαίες μεταβλητές μας. Προσεγγίζουμε το ολοκλήρωμα χρησιμοποιώντας ένα δείγμα με  $N$  τέτοιες καταστάσεις. Στους πραγματικούς υπολογισμούς αυτό το νούμερο μπορεί να διαφέρει από μερικές εκατοντάδες μέχρι μερικά εκατομμύρια, το οποίο εξαρτάται από τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους και την πολυπλοκότητα του προβλήματος που επιλύουμε. Το στατιστικό σφάλμα του αποτελέσματος θα είναι ανάλογο το  $1/\sqrt{N}$  και η ακριβής τιμή προκύπτει στο όριο  $N \rightarrow \infty$ . Τα αποτελέσματα όμως αφορούν ένα πεπερασμένο πλέγμα και η ελαχιστοποίηση αυτού του στατιστικού σφάλματος είναι σημαντικό πρόβλημα στους υπολογισμούς Monte Carlo.



Σχήμα 4.1: Μια σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας Markov στο χώρο των καταστάσεων. Οι τελείες αντιπροσωπεύουν καταστάσεις οι οποίες επισκέπτονται μεταγενέστερα από τους συνδέσμους μεταξύ των τελειών. Η αλυσίδα Markov ξεκινάει στην πάνω αριστερή γωνία και μέσω μερικών βημάτων καταλήγει στο κέντρο του χώρου, όπου εκεί έχουμε και την μεγαλύτερη πυκνότητα σημείων. Το τελευταίο αντιστοιχεί σε μια περιοχή καταστάσεων με μεγάλο συντελεστή Boltzmann και γι' αυτό και σε μεγάλη πιθανότητα. Η αλυσίδα Markov είναι κατασκευασμένη με τέτοιο τρόπο ώστε να επισκέπτεται καταστάσεις με μεγαλύτερη πιθανότητα. Το σχήμα αυτό είναι από το βιβλίο του Gatttringer [8].

#### 4.1.2 Αλυσίδα Markov

Το πρόβλημα που προκύπτει τώρα είναι να βρούμε καταστάσεις  $U_n$  οι οποίες να ακολουθούν κατανομή πιθανότητας της εξίσωσης (4.8). Η ιδέα είναι να ξεκινήσουμε από αυθαίρετες καταστάσεις του συστήματος και στην συνέχεια να κατασκευάσουμε μια στοχαστική σειρά από καταστάσεις οι οποίες τελικά θα φτάσουν σε μια κατανομή ισορροπίας  $P[U]$ , η οποία καλείται ομογενής αλυσίδα Markov (homogeneous Markov chain) ή διαδικασία Markov (Markov process):

$$U_0 \rightarrow U_1 \rightarrow U_2 \rightarrow \dots \quad (4.9)$$

Οι καταστάσεις  $U_n$  παράγονται μεταγενέστερα, όπου ο δείκτης  $n$  δηλώνει τις καταστάσεις από την σειρά της αλυσίδας. Αυτή η αλλαγή σε μια νέα κατάσταση του πεδίου καλείται ενημέρωση (update), ή βήμα Monte Carlo. Στην εικόνα 4.1 αναπαρίσταται μια σχηματική περιγραφή της αλυσίδας Markov, στην οποία τα σύνορα περιορίζουν το χώρο όλων των δυνατών καταστάσεων.

Η διαδικασία Markov χαρακτηρίζεται από μια υπό συνθήκη πιθανότητας, δηλαδή την πιθανότητα να μεταβεί στην κατάσταση  $U'$  ξεκινώντας από την  $U$ :

$$P(U_n = U' | U_{n-1} = U) = T(U' | U) \quad (4.10)$$

Αυτή η πιθανότητα εξαρτάται μόνο από της καταστάσεις  $U'$  και  $U$ , αλλά όχι από τον δείκτη  $n$ . Η πιθανότητα μετάβασης υπακούει τους παρακάτω κανόνες:



$$0 \leq T(U'|U) \leq 1, \quad \sum_{U'} T(U'|U) = 1. \quad (4.11)$$

Σημειώστε επίσης ότι στην δεύτερη συνθήκη της εξίσωσης (4.11), το κανονικοποιημένο άθροισμα συμπεριλαμβάνει και τους όρους  $U' = U$ . Εκτός αυτού, υπάρχει ακόμη ένας σημαντικός περιορισμός στο  $T(U'|U)$ . Μόλις βρεθεί σε κατάσταση ισορροπίας, η διαδικασία Markov δεν μπορεί να έχει μέγιστα και ελάχιστα πιθανοτήτων, το οποίο σημαίνει ότι η πιθανότητα να πάει σε μια νέα κατάσταση  $U'$  κατά την διάρκεια του βήματος  $U_{n-1} \rightarrow U_n$  θα πρέπει να είναι ίση με την πιθανότητα να βγει-φύγει από την κατάσταση  $U'$ . Η αντίστοιχη εξίσωση ισορροπίας γράφεται ως:

$$\sum_U T(U'|U)P(U) = \sum_{U'} T(U|U')P(U') \quad (4.12)$$

Στο αριστερό μέρος της εξίσωσης, αθροίζουμε πάνω σε όλες τις πιθανότητες μετάβασης που οδηγούν στην τελική κατάσταση  $U'$ , με συντελεστή βάρους πιθανότητας  $P(U)$  ότι το σύστημα βρίσκεται όντως στην κατάσταση  $U$ . Αυτό μας δίνει την συνολική πιθανότητα το σύστημα να καταλήξει στην κατάσταση  $U'$ , και θα πρέπει να είναι ίση με την πιθανότητα να φύγει από την κατάσταση  $U'$ , όπως υπολογίζεται με παρόμοιο τρόπο στο δεξί μέρος της εξίσωσης. Σημειώνουμε επίσης ότι η εξίσωση (4.12) ισχύει και για την περίπτωση  $U' = U$ , δηλαδή όταν δεν υπάρχει μετάβαση σε νέα κατάσταση. Το άθροισμα στο δεξί μέρος της εξίσωσης (4.12) μπορεί να εκτιμηθεί χρησιμοποιώντας την ιδιότητα της κανονικοποίησης, εξίσωση (4.11), και έτσι καταλήγουμε στην σχέση:

$$\sum_U T(U'|U)P(U) = P(U') \quad (4.13)$$

Αυτό δείχνει ότι η κατανομή ισορροπίας  $P(U)$  είναι ένα σταθερό σημείο στην διαδικασία Markov όταν το σύστημα φτάνει στην επιθυμητή κατανομή, παραμένει εκεί. Ξεκινώντας την διαδικασία από μια αυθαίρετη κατάσταση  $U_0$  με μια αρχική κατανομή  $P_0$ , ενημερώνοντας κατ' επανάληψη τις καταστάσεις καταλήγουμε τελικά να παίρνουμε την κατανομή ισορροπίας:

$$P_0 \rightarrow P_1 \rightarrow P_2 \rightarrow \dots \rightarrow P(U). \quad (4.14)$$

Για να πάρουμε τα σωστά αποτελέσματα από την διαδικασία Markov, οι εξισώσεις (4.11) και (4.12) θα πρέπει να τηρούνται αυστηρά. Στην πράξη, ξεκινάμε να υπολογίζουμε την αναμενόμενη τιμή μιας παρατηρήσιμης ποσότητας, χρησιμοποιώντας την εξίσωση (4.7), αφότου έχουν πραγματοποιηθεί ήδη κάποια βήματα Monte Carlo, καθώς θέλουμε το πλέγμα να έχει φτάσει σε μια κατανομή ισορροπίας. Αν το σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία τότε λέμε ότι έχει θερμοποιηθεί (thermalized). Για να αποφασίσουμε αν έχει φτάσει σε κατάσταση θερμοποίησης μπορεί να είναι δύσκολο και συνήθως βασιζόμαστε στο αν μια μεταβλητή-μετρούμενη ποσότητα έχει φτάσει σε κατανομή ισορροπίας στο πλέγμα.

Αν η εξίσωση ισορροπίας, εξίσωση (4.12), ισχύει όρο προς όρο, τότε παίρνουμε την αναλυτική εξίσωση ισορροπίας (detailed balanced equation), που αυτή χρησιμοποιείται κυρίως στους αλγόριθμους Monte Carlo:

$$T(U'|U)P(U) = T(U|U')P(U'). \quad (4.15)$$

Παρακάτω θα περιγράψουμε τον αλγόριθμο Metropolis, όπου και θα χρησιμοποιήσουμε την αναλυτική εξίσωση ισορροπίας.

## 4.2 Ο αλγόριθμος Metropolis

Ο αλγόριθμος Metropolis, ο οποίος εξελίσσει την αλυσίδα Markov από την κατάσταση  $U_{n-1}$  σε μια νέα κατάσταση  $U_n$ , αποτελείται από τα παρακάτω βήματα όπου χρησιμοποιούμε την συνθήκη  $P(U) \propto \exp(-S[U])$ :

**Βήμα 1:** Διαλέγουμε κάποια υποψήφια κατάσταση  $U'$  με βάση μια εκ των προτέρων (a priori) πιθανότητα  $T_0(U'|U)$ , όπου  $U = U_{n-1}$ .

**Βήμα 2:** Αποδεχόμαστε την υποψήφια κατάσταση  $U'$  ως την νέα κατάσταση  $U_n$  με πιθανότητα αποδοχής:

$$T_A(U'|U) = \min \left( 1, \frac{T_0(U|U') \exp(-S[U'])}{T_0(U'|U) \exp(-S[U])} \right) \quad (4.16)$$

Αν η προτεινόμενη αλλαγή δεν γίνει αποδεκτή, η κατάσταση που δεν έχει αλλάξει ξανά λαμβάνεται υπόψιν στην αλυσίδα Markov και συμπεριλαμβάνεται όπως κάθε άλλη μέτρηση.

**Βήμα 3:** Επαναλαμβάνονται τα βήματα έως ότου ο επιθυμητός αριθμός επαναλήψεων επιτευχθεί.

Όπως έχει αναφερθεί και προηγουμένως, η συνολική πιθανότητα μετάβασης  $T = T_0 T_A$  πληρεί την αναλυτική εξίσωση ισορροπίας:

$$\begin{aligned} T(U'|U) \exp(-S[U]) &= T_0(U'|U) \min \left( 1, \frac{T_0(U|U') \exp(-S[U'])}{T_0(U'|U) \exp(-S[U])} \right) \exp(-S[U]) \\ &= \min(T_0(U'|U) \exp(-S[U]), T_0(U|U') \exp(-S[U'])) \\ &= T(U|U') \exp(-S[U']) \end{aligned} \quad (4.17)$$

λόγω της συμμετρίας της πράξης  $\min$ . Σε πολλές περιπτώσεις κάποιοι επιλέγουν μια συμμετρική επιλογή πιθανότητας που υπακούει στην εξίσωση:

$$T_0(U|U') = T_0(U'|U) \quad (4.18)$$

όπου βάση αυτής η εξίσωση(4.16) απλοποιείται στην:

$$T_A(U'|U) = \min(1, \exp(-\Delta S)) \quad (4.19)$$

όπου  $\Delta S$

$$\Delta S = S[U'] - S[U]. \quad (4.20)$$

Επομένως, για την συμμετρική πιθανότητα επιλογής η πληροφορία με βάση την οποία αποφασίζεται η υποψήφια κατάσταση, δηλαδή αν θα την αποδεχτούμε ή θα την απορρίψουμε εξαρτάται μόνο βάση της αλλαγής της δράσης.

### 4.2.1 Αλγόριθμος Metropolis για την δράση βαθμίδας Wilson

Τώρα εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο Metropolis στην  $SU(N)$  δράση Wilson πάνω στο πλέγμα, εξίσωση(2.18). Ξεκινώντας από την κατάσταση  $U$ , η υποψήφια κατάσταση  $U'$  για την ενημέρωση του Metropolis διαφέρει από την κατάσταση  $U$  κατά έναν παράγοντα ενός συνδέσμου μεταβλητών  $U_\mu(n)$ , έτσι ώστε η αλλαγή στην δράση να είναι τοπική. Στις τέσσερις διαστάσεις, ο σύνδεσμος μοιράζεται με έξι διαφορετικές πλακέτες, και μόνο αυτές οι πλακέτες επηρεάζονται όταν πραγματοποιείται ένα βήμα Metropolis. Η τοπική συνεισφορά τους στην δράση είναι:

$$S[U_\mu(n)']_{loc} = \frac{\beta}{N} \sum_{i=1}^6 \text{Re tr}[\mathbb{1} - U_\mu(n)' P_i] = \frac{\beta}{N} \text{Re tr}[6\mathbb{1} - U_\mu(n)' A] \quad (4.21)$$

όπου η μεταβλητή  $A$  είναι:

$$A = \sum_{i=1}^6 P_i = \sum_{\nu \neq \mu} (U_\nu(n + \hat{\mu}) U_{-\mu}(n + \hat{\mu} + \hat{\nu}) U_{-\nu}(n + \hat{\nu})) + U_{-\nu}(n + \hat{\mu}) U_{-\mu}(n + \hat{\mu} - \hat{\nu}) U_\nu(n - \hat{\nu}). \quad (4.22)$$

Όπου τα  $P_i$  είναι γινόμενα από τους άλλους τρεις συνδέσμους μεταβλητών βαθμίδας που απαρτίζουν τις πλακέτες μαζί με το  $U_\mu(n)'$ . Αυτά τα γινόμενα καλούνται 'συνδετήρες' (staples) και έχουμε γράψει ξεχωριστά το άθροισμα πάνω σε όλους τους συνδετήρες ως  $A$ .

Για την αλλαγή της δράσης παίρνουμε:

$$\Delta S = S[U_\mu(n)']_{loc} - S[U_\mu(n)]_{loc} = -\frac{\beta}{N} \text{Re tr}[(U_\mu(n)' - U_\mu(n))A], \quad (4.23)$$

όπου το  $A$  δεν επηρεάζεται από την αλλαγή του  $U_\mu(n)$ .

Ένα σημαντικό μέρος του αλγόριθμου αυτού είναι η επιλογή του υποψήφιου συνδέσμου  $U_\mu(n)'$ . Θα πρέπει να είναι στοιχείο της ομάδας  $SU(N)$  το οποίο δεν θα βρίσκεται πολύ μακριά από τον παλιό σύνδεσμο  $U_\mu(n)$ , τέτοιο ώστε η μέση πιθανότητα αποδοχής για τον υποψήφιο σύνδεσμο, εξίσωση (4.16), να μην γίνεται πολύ μικρή. Μια τυπική τεχνική είναι να χρησιμοποιήσουμε την παρακάτω σχέση:

$$U_\mu(n)' = X U_\mu(n), \quad (4.24)$$

όπου το  $X$  είναι ένα τυχαίο στοιχείο της ομάδας  $SU(N)$  στην περιοχή του  $\mathbb{1}$ . Για να πετύχουμε μια συμμετρική επιλογή πιθανότητας  $T_0$ , τα  $X$  και  $X^{-1}$  θα πρέπει να επιλεγθούν με ίση πιθανότητα.

Βάση των εξισώσεων (4.21),(4.22) και (4.23), μπορούμε πλέον να διατυπώσουμε μια μεθοδολογία για το πως θα ενημερώνουμε-υπολογίζουμε έναν μεταβλητό σύνδεσμο χρησιμοποιώντας βέβαια και την συμμετρική επιλογή πιθανότητας  $T_0$ :

**Βήμα 1:** Δεδομένης κάποιας κατάστασης του πεδίου βαθμίδας, επιλέξτε μια θέση  $n$  και μια κατεύθυνση  $\mu$  και μια υποψήφια τιμή  $U_\mu(n)$  βάση της συμμετρικής επιλογής πιθανότητας  $T_0$ .

**Βήμα 2:** Υπολογίστε το άθροισμα πάνω σε όλους τους συνδετήρες και μετά με βάση αυτό την αλλαγή της δράσης  $\Delta S$  σύμφωνα με την εξίσωση (4.22). Υπολογίστε ένα τυχαίο αριθμό  $r$  ομοιόμορφα κατανομημένος στο διάστημα  $[0, 1)$ . Αποδεχτείτε την νέα μεταβλητή  $U_\mu(n)$  αν ισχύει  $r \leq \exp(-\Delta S)$ , αλλιώς το απορρίψτετε.

**Βήμα 3:** Επαναλάβετε τα βήματα από την αρχή.

Σημειώστε ότι στο δεύτερο βήμα της μεθοδολογίας η αλλαγή γίνεται πάντα αποδεκτή όταν η δράση μειώνεται ή παραμένει ίδια, γιατί,  $\exp(-\Delta S) \geq 1$ . Αυτό από μόνο του οδηγεί στην ελάχιστη δυνατή δράση στον χώρο των καταστάσεων, που σημαίνει ότι σιγά σιγά φέρνει το σύστημα μας σε μια κατάσταση θερμική ισορροπίας. Παρόλα αυτά, λόγω της τυχαίας μεταβλητής  $r$ , που και που γίνονται αποδεκτές και καταστάσεις που αυξάνουν την δράση. Αυτό θα μπορούσε να ερμηνευτεί ως μια προσομοίωση των κβαντικών διακυμάνσεων του συστήματος.

Αυτή η μεθοδολογία που περιγράψαμε χρησιμοποιείται για κάθε σύνδεσμο, με τέτοιο τρόπο όπου ενημερώνουμε όλο το πλέγμα σε μια νέα κατάσταση. Εν τέλει, για να εκτελέσουμε την ολοκλήρωση Monte Carlo μια παρατηρήσιμης ποσότητας στο πλέγμα, θα πρέπει να αποθηκευτούν πολλαπλές καταστάσεις. Σημειώστε ότι ο αλγόριθμος Metropolis μπορεί εύκολα να εφαρμοστεί και σε άλλες 'βελτιωμένες' δράσεις, όπως είναι η εξίσωση (4.25), το οποίο προτείνεται στην εργασία του Solbrig [23]:

$$S_L^{gauge} = \sum_{n \in lattice} \left\{ \beta_0 \sum_{\mu, \nu}^{\mu < \nu} \left[ 1 - \frac{1}{N} \text{Re tr} U_{\mu\nu}(n) \right] + \beta_1 \sum_{\mu, \nu}^{\mu < \nu} \left[ 1 - \frac{1}{N} \text{Re tr} U_{\mu\nu}^{long}(n) \right] + \beta_1 \sum_{\mu, \nu}^{\mu < \nu} \left[ 1 - \frac{1}{N} \text{Re tr} U_{\mu\nu}^{wide}(n) \right] \right\}, \quad (4.25)$$

όπου η πλακέτα long ορίζεται ως:

$$U_{\mu\nu}^{long}(n) = U_\mu(n) U_\mu(n + a\hat{\mu}) U_\nu(n + 2a\hat{\mu}) U_\mu^\dagger(n + a\hat{\nu} + a\hat{\mu}) U_\mu^\dagger(n + a\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(n), \quad (4.26)$$

και η πλακέτα wide:

$$U_{\mu\nu}^{wide}(n) = U_\mu(n) U_\nu(n + a\hat{\mu}) U_\nu(n + a\hat{\mu} + a\hat{\nu}) U_\mu^\dagger(n + 2a\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(n + a\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(n), \quad (4.27)$$

και η σταθερά  $a$  είναι η απόσταση των πλεγματικών σημείων. Οι σχετικοί συντελεστές βάρους έχουν επιλεγθεί ώστε να ελαχιστοποιούν τα σφάλματα διακριτοποίησης σύμφωνα με την εργασία των M. Lüscher και P. Weisz [20].

Οι σταθερές  $\beta_0$  και  $\beta_1$  σχετίζονται με την σταθερά ζεύξης μέσω της εξίσωσης:

$$\beta = \beta_0 + 8\beta_1. \quad (4.28)$$

Μια καλή επιλογή των σταθερών  $\beta_0$  και  $\beta_1$  είναι [19]:

$$\beta_0 = \frac{5}{3}\beta, \quad \beta_1 = \frac{5}{3}\beta. \quad (4.29)$$

Επειδή ο υπολογισμός των αθροισμάτων από τους συνδετήρες  $A$  είναι υπολογιστικά δαπανηρό, όταν το υπολογίζουμε δίνουμε στο σύστημα επανειλημμένα υποψήφιους συνδέσμους  $U_\mu(n)$  σύμφωνα με το βήμα 2. Αυτή η τροποποίηση είναι γνωστή σαν multihit Metropolis algorithm [7], και ο αριθμός των υποψηφίων μπορεί να ρυθμιστεί για την βέλτιστη απόδοση. Παρακάτω θα συζητήσουμε τον αλγόριθμο heatbath, ο οποίος ουσιαστικά είναι μια 'άπειρη' επανάληψη του multihit Metropolis αλγόριθμου για κάθε σύνδεσμο, βελτιστοποιώντας τον τοπικό ρυθμό αποδοχής.

### 4.3 Δημιουργώντας υποψήφιους συνδέσμους

Για κάθε σύνδεσμο υπάρχει ένας πίνακας που αναπαριστά το γλοιονικό πεδίο, και σε αυτή την ενότητα θα περιγράψουμε πώς γίνεται η κατασκευή αυτών των μιγαδικών  $SU(N)$  πινάκων που έχουν μέγεθος  $N \times N$ . Πιο συγκεκριμένα για την ομάδα  $U(1)$  η αναπαράσταση είναι ένας μιγαδικός αριθμός,, για την  $SU(2)$  είναι ένας μιγαδικός πίνακας  $2 \times 2$ , και για την ομάδα  $SU(3)$  είναι ένας μιγαδικός πίνακας  $3 \times 3$ . Όμως λόγω της μοναδιότητας των στοιχείων της ομάδας υπάρχουν περαιτέρω περιορισμοί. Ο ελάχιστος αριθμός παραμέτρων για τις τρεις αυτές ομάδες είναι ίσος με τον αριθμό των γεννητόρων, 1, 3, και 8. Παρόλο που υπάρχουν αναπαραστάσεις με αυτό τον ελάχιστο αριθμό στοιχείων των ομάδων, στην πράξη είναι πιο βολικό να χρησιμοποιούμε πιο 'περιττές' αναπαραστάσεις. Αυτό οδηγεί σε πιο γρήγορη εκτίμηση του πολλαπλασιασμού των στοιχείων. Αυτή η διαδικασία είναι η πιο δαπανηρή από άποψη χρόνου καθώς πρέπει να πραγματοποιείται αρκετά συχνά.

Για την  $U(1)$  χρησιμοποιείται ο μιγαδικός αριθμός  $z$  με μέτρο  $|z| = 1$ . Αυτό σημαίνει ότι θα πρέπει να αποθηκευτούν 2 πραγματικοί αριθμοί αντί μιας φάσης.

Για την  $SU(2)$  είναι βολικό να αποθηκεύσουμε την πρώτη γραμμή  $(a, b)$  του πίνακα

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

όπου θα πρέπει να ισχύει

$$|a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (4.31)$$

Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να αποθηκεύουμε δύο μιγαδικούς αριθμούς (τέσσερις πραγματικούς έναντι των τριών που είναι το ελάχιστο). Έχοντας  $a = x_0 + ix_4$  και  $b = x_3 + ix_2$ , αυτό είναι ισοδύναμο με το να χρησιμοποιήσουμε ένα διάνυσμα  $x = (x_0, \mathbf{x})$  που αποτελείται από τέσσερις συντελεστές στην αναπαράσταση

$$U = x_0 \mathbf{1} + i \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (4.32)$$

με την ορίζουσα του  $U$  να είναι:

$$\det[U] = |x|^2 = x_0^2 + |\mathbf{x}|^2 = \sum_{i=0}^3 x_i^2 = 1, \quad (4.33)$$

όπου το  $\boldsymbol{\sigma}$  δηλώνει τους τρεις πίνακες του Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (4.34)$$

Τα στοιχεία της ομάδας  $SU(3)$  μπορούν να αναπαρασταθούν είτε με ολόκληρο τον μιγαδικό πίνακα (9 μιγαδικούς αριθμούς = 18 πραγματικούς αντί για τους 8 ελάχιστους) ή με τις δύο πρώτες γραμμές, που αντιστοιχούν στα 3 μιγαδικά διανύσματα  $\mathbf{u}$  και  $\mathbf{v}$  (6 μιγαδικοί αριθμοί = 12 πραγματικούς). Τα διανύσματα θα πρέπει να είναι μοναδιαία και θα πρέπει επίσης να είναι ορθογώνια μεταξύ τους:

$$\begin{aligned} |\mathbf{u}|^2 &= \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{u} = |u_1|^2 + |u_2|^2 + |u_3|^2 = 1, \\ |\mathbf{v}|^2 &= \mathbf{v}^* \cdot \mathbf{v} = |v_1|^2 + |v_2|^2 + |v_3|^2 = 1, \\ (\mathbf{u}, \mathbf{v}) &= \mathbf{u}^* \cdot \mathbf{v} = u_1^* v_1 + u_2^* v_2 + u_3^* v_3 = 0. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Λόγω των ιδιοτήτων των πινάκων της  $SU(3)$ , η τρίτη γραμμή του πίνακα μπορεί να κατασκευαστεί από τις πρώτες δύο:

$$U = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \\ \mathbf{u}^* \times \mathbf{v}^* \end{pmatrix}. \quad (4.36)$$

Για να υπολογίσουμε το  $|\mathbf{x}|$  θα μπορούσαμε να επιλέξουμε έναν τυχαίο αριθμό  $x_0$  ομοιόμορφα κατανομημένο στο διάστημα  $[0, 1)$ . Τα υπόλοιπα  $x$  να τα υπολογίσουμε, δημιουργώντας τυχαίους αριθμούς  $\cos \theta \in [-1, 1]$  και  $\phi \in [0, 2\pi)$  εξίσου ομοιόμορφα κατανομημένα:

$$\begin{aligned} x_1 &= |\mathbf{x}| \sin \theta \cos \phi \\ x_2 &= |\mathbf{x}| \sin \theta \sin \phi \\ x_3 &= |\mathbf{x}| \cos \theta, \end{aligned} \quad (4.37)$$

όπου θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί στην εξίσωση (4.32) για να κατασκευάσουμε τον πίνακα. Όμως, σύμφωνα με την εξίσωση (4.24) χρειαζόμαστε ένα τυχαία επιλεγμένο  $X$  για τον αλγόριθμο Metropolis. Περιορίζουμε τον ρυθμό αποδοχής σε λογικές τιμές μετριάζοντας την διασπορά του  $X$  κοντά στην μονάδα. Μεγάλος ρυθμός αποδοχής σημαίνει μικρές αλλαγές στο σύστημα και χαμηλή κινητικότητα στις καταστάσεις μας, ο χαμηλός ρυθμός από την άλλη είναι πολύ δαπανηρός μιας και μικρός αριθμός καταστάσεων γίνεται αποδεκτός. Ένας σχετικά λογικός ρυθμός αποδοχής είναι 0.5, έτσι

ώστε κατά μέσο όρο μια στις δύο καταστάσεις να γίνονται αποδεκτές σε ένα βήμα Monte Carlo.

Η επιλογή των υποψήφιων στοιχείων για κάθε βήμα στον αλγόριθμο Metropolis γίνεται με τυχαίο τρόπο. Θα ξεκινήσουμε περιγράφοντας την πιο απλή περίπτωση που είναι η ομάδα  $U(1)$ , όπου κάποιος μπορεί να επιλέξει ένα  $X = e^{i\phi}$  με το  $\phi \in (-\varepsilon, \varepsilon)$  να είναι τυχαία επιλεγμένο με μια ομοιόμορφη κατανομή. Το  $\varepsilon$  μπορεί να ρυθμιστεί κατάλληλα για καλύτερο ρυθμό αποδοχής. Όμως επειδή είναι αρκετά δαπανηρό σε υπολογιστικούς πόρους να υπολογίζουμε συνεχώς το συνημίτονο, είναι πιο αποτελεσματικό να χρησιμοποιείται η προσέγγιση  $X = (1 + i\phi)/\sqrt{1 + \phi^2}$ , όσο βέβαια το  $\varepsilon$  είναι μικρότερο του 1.

Για τις ομάδες  $SU(2)$  και  $SU(3)$  ο προσδιορισμός των τυχαίων στοιχείων είναι πιο δαπανηρός. Υπάρχουν διάφορες μέθοδοι που μπορεί κανείς να χρησιμοποιήσει για να προτείνει στοιχεία του πίνακα κοντά στην μονάδα. Εμείς αυτό που χρησιμοποιούμε είναι η επιλογή τεσσάρων τυχαίων αριθμών  $r_i$  ομοιόμορφα κατανομημένων στο διάστημα  $(-1/2, 1/2)$ . Τότε ο  $SU(2)$  πίνακας κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας την εξίσωση(4.32) όπου τα  $x_0$  και  $\mathbf{x}$  δίνονται:

$$\mathbf{x} = \varepsilon \mathbf{r}/|\mathbf{r}|, \quad x_0 = \text{sign}(r_0)\sqrt{1 - \varepsilon^2} \quad (4.38)$$

όπου η παράμετρος  $\varepsilon$  ελέγχει την διασπορά του  $X$  γύρω από το  $\mathbb{1}$

Για την  $SU(3)$ , η ενημέρωση του πίνακα  $X$  μπορεί να γίνει από τους πίνακες της  $SU(2)$  ενσωματωμένοι σε  $3 \times 3$  πίνακες, όπως παρακάτω:

$$R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 \\ r_{21} & r_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, S = \begin{pmatrix} s_{11} & 0 & s_{12} \\ 0 & 1 & 0 \\ s_{21} & 0 & s_{22} \end{pmatrix}, T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & t_{11} & t_{12} \\ 0 & t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

Μια πιθανή επιλογή του  $X$  δίνεται από το γινόμενο:

$$X = R S T. \quad (4.40)$$

Εφόσον οι πίνακες  $R, S, T$  είναι κοντά στο  $\mathbb{1}$ , το ίδιο θα συμβαίνει και για το γινόμενο  $X$ . Για να διατηρείται η συμμετρία της πιθανότητας επιλογής  $T_0(U'|U)$ , τα  $X$  και  $X^{-1} = X^\dagger$  πρέπει να επιλεγούν με ίση πιθανότητα.

Κατά την διάρκεια των υπολογισμών, οι πίνακες πρέπει να ελέγχεται αν πληρούν τις προϋποθέσεις ενός μοναδιαίου πίνακα, επειδή κατά τους πολλαπλασιασμούς των πινάκων συσσωρεύονται σφάλματα τα οποία χαλάνε κάποιες από τις ιδιότητες τους. Η περίοδος που το σφάλμα αυτό γίνεται σημαντικό εξαρτάται και από την ακρίβεια των αριθμών αλλά επίσης κρίνεται και με βάση την παρατήρηση. Συνήθως τρέχοντας ποικίλα τεστ με διαφορετικές παραμέτρους ώστε να δούμε την περιοδικότητα τους. Η διαδικασία για να ξανακάνουμε τους πίνακες μοναδιαίους στην  $SU(2)$  είναι η ακόλουθη: κανονικοποιούμε την πρώτη γραμμή, και επανακατασκευάζουμε την δεύτερη γραμμή βάση της πρώτης, όπως φαίνεται και στην εξίσωση(4.30). Για την ομάδα  $SU(3)$  και μεγαλύτερες, ακολουθούμε την διαδικασία Gram-Schmidt για να φτιάχνουμε ορθοκα-

νονικές βάσης στον διανυσματικό χώρο. Η πρώτη γραμμή κανονικοποιείται, η δεύτερη κατασκευάζεται από τις νέες κανονικοποιημένες τιμές της πρώτης γραμμής,

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_{new} &= \mathbf{u}/|\mathbf{u}|, \\ \mathbf{v}_{new} &= \mathbf{v}'/|\mathbf{v}'|, \end{aligned} \quad (4.41)$$

όπου το  $\mathbf{v}'$  είναι

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} - \mathbf{u}_{new}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{u}_{new}^*), \quad (4.42)$$

και η τρίτη γραμμή κατασκευάζεται από τις δύο πρώτες όπως γίνεται στην εξίσωση (4.36).

## 4.4 Συνοριακές και αρχικές συνθήκες

Εφόσον δημιουργούμε μια αριθμητική προσομοίωση σε ένα πεπερασμένο πλέγμα, θα πρέπει να εισάγουμε κάποιες συνοριακές συνθήκες. Έχουμε επιλέξει περιοδικές συνοριακές συνθήκες για τα πεδία βαθμίδας, όπου  $N$  και  $N_T$  είναι το πλήθος των σημείων στην χωρική και χρονική κατεύθυνση, αντίστοιχα:

$$\begin{aligned} U_\mu(N, n_2, n_3, n_4) &= U_\mu(0, n_2, n_3, n_4), \quad U_\mu(n_1, N, n_3, n_4) = U_\mu(n_1, 0, n_3, n_4), \\ U_\mu(n_1, n_2, N, n_4) &= U_\mu(n_1, n_2, 0, n_4), \quad U_\mu(n_1, n_2, n_3, N_T) = U_\mu(n_1, n_2, n_3, 0). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Οι συνοριακές συνθήκες αντιστοιχούν στην υποκείμενη πολυπλοκότητα του συστήματος, στην περίπτωση των τεσσάρων διαστάσεων πρόκειται για σχήμα τόρου(παρόμοιο σχήμα με ένα donut): κάθε κατεύθυνση του υπερκύβου συμπεριφέρεται σαν κύκλος. Αυτό έχει το πλεονέκτημα να διατηρεί την συμμετρία του διακριτού πλέγματος.

Πέραν των συνοριακών συνθηκών θα πρέπει να επιλεγούν και κατάλληλες αρχικές καταστάσεις για τους συνδέσμους του πλέγματος προτού ξεκινήσουμε να εφαρμόζουμε τον αλγόριθμο μας. Γνωρίζουμε ότι η αρχική θέση δεν μας επηρεάζει την αλυσίδα Markov, διότι μετά από έναν ικανοποιητικό αριθμό ενημερώσεων το πλέγμα βρίσκεται σε θερμική ισορροπία. Δύο τυπικές αρχικές καταστάσεις του συστήματος είναι η ζεστή(hot) και η κρύα(cold) αρχή:

**Ζεστή αρχή** Σε αυτή την περίπτωση οι καταστάσεις του πεδίου βαθμίδας επιλέγονται με τυχαίες μεταβλητές στον χώρο.

**Κρύα αρχή** Εδώ όλοι οι σύνδεσμοι παίρνουν την τιμή της μονάδας. Σε αυτή την περίπτωση η δράση της βαθμίδας είναι η ελάχιστη δυνατή, που προσεγγιστικά αναμένεται για την ασθενή σύζευξη (μεγάλο  $\beta$ ). Στα στατιστικά μοντέλα αυτή η υπόθεση αντιστοιχεί σε χαμηλές θερμοκρασίες, εξ και το όνομα της 'κρύας' αρχής.



Παρόλο που μπορούμε να ξεκινήσουμε το σύστημα μας από οποιαδήποτε δυνατή κατάσταση, είτε κρύα είτε ζεστή είτε ακόμη μια ενδιάμεση κατάσταση, δεν πρέπει να ξεχνάμε ότι προτού μετρήσουμε οποιαδήποτε παρατηρήσιμη ποσότητα το σύστημα μας θα πρέπει πρώτα να έχει φτάσει σε μια θερμοκή ισορροπία.

Συνήθως πολύ μεγάλες σειρές ενημερώσεων πρέπει να μοιραστούν σε υπό-εκτελέσεις του αλγόριθμου Monte Carlo, όπου σε τέτοιες περιπτώσεις το αποτέλεσμα της προηγούμενης εκτέλεσης λειτουργεί ως αφετηρία για την επόμενη.

## 4.5 Βελτιώσεις-Τροποποιήσεις του αλγόριθμου Monte Carlo

Παραπάνω περιγράψαμε τον τρόπο λειτουργίας της μεθόδου Monte Carlo με τον αλγόριθμο Metropolis . Υπάρχει όμως μια ολόκληρη συλλογή από μεθόδους που στόχο έχουν να βελτιστοποιήσουν την στατιστική του δείγματος. Στην απλή περίπτωση του Metropolis, οι αλλαγές που γίνονται σε ένα βήμα Monte Carlo επηρεάζουν μόνο μερικές μεταβλητές τοπικά, τέτοιοι αλγόριθμοι καλούνται τοπικοί. Δυστυχώς όμως, οι τοπικοί αλγόριθμοι μπορούν να κάνουν μόνο μικρά βήματα πράγμα το οποίο έχει μεγάλο αντίκτυπο στην αποτελεσματικότητά τους. Ο λόγος είναι προφανείς, μικρά βήματα σημαίνουν πολλές επαναλήψεις και ενημερώσεις ώστε να πάρουμε καταστάσεις που δεν συσχετίζονται μεταξύ τους.

Υπάρχει όμως και η κατηγορία των αλγορίθμων οι οποίοι δεν δρουν τοπικά, με αποτέλεσμα μεγαλύτερο υποσύνολο των πεδίων μεταβλητών να αλλάζει σε κάθε ενημέρωση. Παρόλο που για μοντέλα σπιν και για βαθμωτές θεωρίες πεδίου υπάρχουν μη τοπικοί αλγόριθμοι που δουλεύουν πολύ καλά, στα πεδία βαθμίδας, μέχρι σήμερα, δεν υπάρχει κάποια απολύτως αποτελεσματική μη-τοπική μέθοδος, για το λόγο αυτό παραθέτουμε μερικούς από τους αλγόριθμους που χρησιμοποιούνται συνήθως:

**Heatbath:** Είναι ισοδύναμος με επαναλαμβανόμενες ενημερώσεις του Metropolis, με την διαφορά ότι βελτιώνουμε τον τοπικό ρυθμό αποδοχής καταστάσεων. Θα τον δούμε πιο αναλυτικά σε επόμενη ενότητα.

**Overrelaxation:** Μια μέθοδος που συχνά αποδεικνύεται ιδιαίτερα αποτελεσματική στο να βελτιώνει το μέγεθος του βήματος στην αλυσίδα Markov, αυτό επιτυγχάνεται με την εκμετάλλευση συμμετρικών ιδιοτήτων της δράσης. Αλλά για να υπάρχει εργοδικότητα στο σύστημα μας πρέπει να συνδυαστεί και με άλλους αλγορίθμους. Για παράδειγμα στον αλγόριθμο που υλοποιήσαμε για την παραγωγή δεδομένων χρησιμοποιούμε έναν συνδυασμό Metropolis με Overrelaxation , κατά μια αναλογία 1-2 ή 1-4 επαναλήψεις.

**Microcanonical:** Αναδιατυπώνει τους όρους που ενημερώνονται, μιας ντετερμινιστικής και διακριτής Χαμιλτονιανής εξέλιξης χρησιμοποιώντας τις διπλές μεταβλητές:  $(U, \Pi)$ . Μια παραλλαγή αυτής της μεθόδου εισάγει έναν μικροκανονικό 'δαίμονα'.

**Hybrid Monte Carlo:** Συνδυάζει έναν αιθμό από microcanonical ενημερώσεις με ένα τελικό βήμα αποδοχής Monte Carlo.

**Langevin:** Χρησιμοποιεί μια στοχαστική διαφορική εξίσωση για την κατασκευή καταστάσεων του συστήματος.

Είναι λογικό κάθε ένας από τους παραπάνω αλγόριθμους ή κάποιος συνδυασμός τους να έχει διαφορετικές υπολογιστικές απαιτήσεις, όπως επίσης και διαφορετικά αποτελέσματα όσον αφορά το βήμα στην αλυσίδα Markov.

### 4.5.1 Ο αλγόριθμος Heatbath

Ο αλγόριθμος heatbath, συνδυάζει τα βήματα 1 και 2 που πραγματοποιούνται για την ενημέρωση ενός συνδέσμου κατά την εκτέλεση του Metropolis, σε ένα βήμα. Επιλέγει την τιμή του νέου συνδέσμου  $U_\mu(n)'$  με βάση την τοπική κατανομή πιθανότητας χρησιμοποιώντας τους γύρω συνδετήρες:

$$dP(U) = dU \exp\left(\frac{\beta}{N} \text{Re tr}[UA]\right). \quad (4.44)$$

Σημειώστε ότι το  $dU$  δηλώνει το μέτρο ολοκλήρωσης Haar. Σε αυτό τον αλγόριθμο ο σύνδεσμος μεταβλητών έχει το πλεονέκτημα ότι αλλάζει συνεχώς.

Θα περιγράψουμε τον αλγόριθμο heatbath για την  $SU(2)$  ομάδα, βάση του άρθρου από τον M.Creutz [14]. Η μέθοδος της  $SU(2)$  μετά μπορεί να επεκταθεί και για τις ομάδες  $SU(N)$ . Η ομάδα  $SU(2)$  είναι ιδιαίτερη περίπτωση διότι το άθροισμα δύο  $SU(2)$  πινάκων είναι ανάλογος με κάποιον άλλον  $SU(2)$  πίνακα. Χρησιμοποιώντας αυτή την ιδιότητα μπορούμε να γράψουμε το άθροισμα των συνδετήρων  $A$  ως:

$$A = aV \quad \text{όπου} \quad a = \sqrt{\det(A)}, \quad (4.45)$$

όπου αναμένουμε το  $\det(A) \geq 0$ . Αν για κάποιο λόγο το  $\det(A)$  μηδενίζεται, διαλέγουμε ένα τυχαίο  $SU(2)$  πίνακα για τον νέο σύνδεσμο. Αλλιώς ο πίνακας  $V = A/a$  είναι ένας σωστά κανονικοποιημένος πίνακας της  $SU(2)$ , και χρησιμοποιούμε κανονικά τον αλγόριθμο heatbath για να παράξουμε τον νέο σύνδεσμο. Αν αντικαταστήσουμε την εξίσωση (4.45) στην εξίσωση (4.44) και θέσουμε  $N = 2$ , τότε έχουμε:

$$dP(U) = dU \exp\left(\frac{1}{2}a\beta \text{Re tr}[UV]\right). \quad (4.46)$$

Το μέτρο Haar, όπως έχουμε δει και σε άλλο κεφάλαιο μπορεί να γραφτεί ως  $d(UV)$ . Ορίζουμε το  $X = UV$ , και γράφουμε την τοπική κατανομή πιθανότητας για το  $X$  ως:

$$dP(X) = dX \exp\left(\frac{1}{2}a\beta \text{Re tr}[X]\right). \quad (4.47)$$

Αν τώρα παράξουμε έναν πίνακα  $X$  με βάση αυτή την κατανομή, ο υποψήφιος σύνδεσμος λαμβάνεται από την σχέση:

$$U_\mu(n)' = U = XV^\dagger = XA^\dagger \frac{1}{a}. \quad (4.48)$$

Επομένως έχουμε βελτιώσει το πρόβλημα παραγωγής πινάκων  $X$  με βάση την εξίσωση (4.47). Από τις εξισώσεις (4.32) και (4.33), θα πρέπει να γράψουμε το μέτρο Haar με όρους πραγματικής παραμέτρου:

$$\begin{aligned} dX &= \frac{1}{\pi^2} d^4x \delta(x_0^2 + |\mathbf{x}|^2 - 1) \\ &= \frac{1}{\pi^2} d^4x \frac{\theta(1 - x_0^2)}{2\sqrt{1 - x_0^2}} \left( \delta\left(|\mathbf{x}| - \sqrt{1 - x_0^2}\right) + \delta\left(|\mathbf{x}| + \sqrt{1 - x_0^2}\right) \right) \end{aligned} \quad (4.49)$$

όπου στην δεύτερη γραμμή έχουμε χρησιμοποιήσει την εξίσωση του Dirac για τις συναρτήσεις δέλτα. Το στοιχείο όγκου το ξαναγράφουμε ως:

$$d^4x = d|\mathbf{x}||\mathbf{x}|^2 d^2\Omega dx_0, \quad (4.50)$$

όπου το  $d^2\Omega$  δηλώνει το στοιχείο της σφαιρικής γωνίας πάνω σε ένα τρισδιάστατο διάνυσμα  $\mathbf{x}$ . Μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τα δέλτα του Dirac για να αφαιρέσουμε τα  $\mathbf{x}$  από την ολοκλήρωση. Μόνο το πρώτο δέλτα του Dirac στην εξίσωση (4.47) συνεισφέρει και πλέον το  $\mathbf{x}$  έχει παγιωθεί στην τιμή  $\sqrt{1 - x_0^2}$ . Εν τέλει το μέτρο Haar παίρνει την μορφή:

$$dX = \frac{1}{\pi^2} d^2\Omega dx_0 \frac{(1 - x_0^2)\theta(1 - x_0^2)}{2\sqrt{1 - x_0^2}} = \frac{1}{2\pi^2} d^2\Omega dx_0 \sqrt{1 - x_0^2} \theta(1 - x_0^2) \quad (4.51)$$

Σημειώστε ότι στην αναπαράσταση του πίνακα  $X$  που έχουμε επιλέξει, έχουμε  $|x_0| \leq 1$  και για τον λόγο αυτό θα μπορούσαμε να παραλείψουμε το  $\theta$ . Επειδή το  $\text{tr}[X] = 2x_0$ , καταλήγουμε στην κατανομή του  $X$  που έχει την μορφή(χρησιμοποιώντας  $d^2\Omega = d\cos\theta d\phi$ ):

$$dP(X) = \frac{1}{2\pi^2} d\cos\theta d\phi dx_0 \sqrt{1 - x_0^2} e^{a\beta x_0}, \quad (4.52)$$

με  $x_0 \in [-1, 1]$ ,  $\cos\theta \in [-1, 1]$ , και  $\phi \in [0, 2\pi)$ . Για να βρούμε τον πίνακα  $X$ , θα πρέπει πρώτα να βρούμε τις μεταβλητές  $x_0$ ,  $\theta$  και  $\phi$  κατανεμημένες με βάση την εξίσωση (4.50). Οι τελευταίες δύο είναι ομοιόμορφα κατανεμημένες και χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό του  $\mathbf{x}$  χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (4.37), γνωρίζοντας βέβαια το  $x_0$ , αφού  $\mathbf{x} = \sqrt{1 - x_0^2}$ .

Το πρόβλημα μας τώρα είναι ο υπολογισμός της μεταβλητής  $x_0$  κατανεμημένη σύμφωνα  $\sqrt{1 - x_0^2} e^{a\beta x_0}$ . Ο M.Creutz στο άρθρο του [14] προτείνει έναν αλγόριθμο για τον υπολογισμό αυτό, όμως οι A.D.Kenedy και B.J.Pendelton στο άρθρο τους [6] βρήκαν έναν καλύτερο αλγόριθμο που και εμείς χρησιμοποιούμε εδώ. Πρώτα, εισάγουμε την μεταβλητή  $\lambda$  ως εξής:

$$\begin{aligned} x_0 &= 1 - 2\lambda^2 \text{ όπου } x_0 \in [-1, 1] \\ \Rightarrow dx_0 \sqrt{1 - x_0^2} e^{a\beta x_0} &\propto d\lambda \lambda^2 \sqrt{1 - \lambda^2} e^{-2a\beta\lambda^2}. \end{aligned} \quad (4.53)$$

Μετά από αυτόν τον μετασχηματισμό, χρειάζεται να παράγουμε το  $\lambda$  με την τροποποιημένη Γκαουσιανή πυκνότητα κατανομής

$$p_1(\lambda) = \lambda^2 e^{-2a\beta\lambda^2}, \quad (4.54)$$

την οποία είτε την αποδεχόμαστε, είτε την απορρίπτουμε βάσει της συνάρτησης:

$$p_2(\lambda) = \sqrt{1 - \lambda^2}. \quad (4.55)$$

Αυτό δουλεύει ως εξής:

**Βήμα 1:** Παράγουμε τρεις τυχαίους αριθμούς  $r_i$ , με  $i = 1, 2, 3$  ομοιόμορφα κατανεμημένους στο διάστημα  $(0, 1]$ . Τότε έχουμε :

$$\lambda^2 = -\frac{1}{2a\beta}(\ln(r_1) + \cos^2(2\pi r_2)\ln(r_3)), \quad (4.56)$$

η οποία ακολουθεί την Γκαουσιανή κατανομή  $p_1(\lambda^2)$  που απαιτείται.

**Βήμα 2:** Πρέπει να διορθώσουμε τον παράγοντα  $p_2(\lambda)$  και γι' αυτό να πρέπει να δεχόμαστε μόνο τιμές του  $\lambda$  που υπακούουν στην συνθήκη:

$$r \leq \sqrt{1 - \lambda^2} \Rightarrow r^2 \leq 1 - \lambda^2, \quad (4.57)$$

όπου  $r$  είναι μια τυχαία μεταβλητή ομοιόμορφα κατανεμημένη στο διάστημα  $[0, 1)$  και οι τιμές που γίνονται αποδεκτές δίνουν  $x_0 = 1 - 2\lambda^2$ , που ακολουθεί την ζητούμενη κατανομή.

Επομένως, πλέον είμαστε σε θέση να μπορούμε να υπολογίσουμε τα  $x$ , που και αυτά με την σειρά τους βοηθούν στον υπολογισμό του πίνακα  $X$  χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις (4.32) και (4.33). Συνοψίζοντας, ενημέρωση των συνδέσμων μεταβλητών στον αλγόριθμο Heatbath στην ομάδα  $SU(2)$  γίνεται ως εξής:

**Βήμα 1:** Βρίσκουμε πρώτα το άθροισμα των συνδετήρων  $A$  με βάση την εξίσωση (4.22), υπολογίζουμε την μεταβλητή  $a = \sqrt{\det(A)}$  και βρίσκουμε τον λόγο  $V = A/a$ .

**Βήμα 2:** Βρίσκουμε μια ομάδα στοιχείων  $X$  σύμφωνα με την κατανομή (4.52) όπως περιγράψαμε και παραπάνω.

**Βήμα 3:** Υπολογίζουμε το νέο σύνδεσμο μεταβλητών σύμφωνα με την σχέση  $U = XV^\dagger$ .

Δυστυχώς, δεν υπάρχει κάποιος αλγόριθμος Heatbath ο οποίος να μπορεί άμεσα να παράγει συνδέσμους μεταβλητών για ομάδες  $SU(3)$  ή μεγαλύτερου  $N$ . Όμως, οι N.Cabbibo και E.Marinari στην δημοσίευσή τους [10], βρήκαν μια ψευδο-Heatbath μέθοδο στην οποία πραγματοποιούν επανάληψεις με τον αλγόριθμο Heatbath για  $SU(2)$  υποομάδες των  $SU(N)$ . Δύο υποομάδες θα ήταν αρκετές για να καλύψουν όλων τον χώρο της ομάδας, αλλά για λόγους συμμετρίας συνήθως επιλέγουμε τρεις τέτοιες υποομάδες όπως φαίνεται και στην εξίσωση (4.40).

Κάθε ένας από τους υποπίνακες έχει προσδιοριστεί χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο HeatBath για  $SU(2)$  ομάδα. Για να το αναπαραστήσουμε αυτό, τροποποιούμε τον  $SU(3)$  σύνδεσμο μεταβλητών  $U$  πολλαπλασιάζοντας τον από αριστερά με τον πίνακα  $R$  (4.39). Ο εκθέτης στον τοπικό συντελεστή βάρους Boltzmann, εξίσωση (4.44), θα γίνει ( $N = 3$  αφού μιλάμε για  $SU(3)$ ):

$$\frac{\beta}{3} \text{Re tr}[RUA] \quad (4.58)$$

Δηλώνοντας ως  $W = UA$ , το ίχνος εμπεριέχει τους όρους:

$$\text{tr}[RW] = r_{11}w_{11} + r_{12}w_{21} + r_{21}w_{12} + r_{22}w_{22} + \text{όροι χωρίς } r_{ij}. \quad (4.59)$$

Επομένως ένας αλγόριθμος Heatbath με έναν δεδομένο πίνακα  $R$  επηρεάζεται μόνο από τους όρους του  $W$  που πολλαπλασιάζουν τέσσερις μη τετριμμένους όρους στον  $R$ , δηλαδή την υπό-περιοχή του  $W$  που αντιστοιχεί στον σχετικό υπό-πίνακα του  $R$ . Βρίσκουμε ότι το  $W$  παίζει τον ρόλο του  $A$  στην εξίσωση (4.44) που αναφέραμε κατά την περιγραφή της  $SU(2)$  περίπτωσης του αλγόριθμου Heatbath.

Πολλαπλασιάζοντας το παραγόμενο  $R$  με το  $W$  παίρνουμε ένα νέο  $W = RUA$ , το οποίο μας δίνει τους παράγοντες του  $S$  (4.39) για τον αλγόριθμο Heatbath της  $SU(2)$ . Το  $S$  που υπολογίζεται στην συνέχεια πολλαπλασιάζει και αυτό το  $W$  και μας δίνει το  $T$ . Οι τρεις αυτοί παράγοντες πινάκων του  $SU(2)$  Heatbath αλγόριθμου, μας δίνουν την τιμή του νέου συνδέσμου μεταβλητών:

$$U \Rightarrow U' = T S R U. \quad (4.60)$$

Προφανώς αυτές οι ψευδο-ενημερώσεις Heatbath της  $SU(2)$  μπορούν να συνδυαστούν και με κάποια βήματα overrelaxation.

## 4.5.2 Η μέθοδος Overrelaxation

Ο S.L.Adler εισήγαγε [22] έναν στοχαστικό αλγόριθμο Overrelaxation για πολυτετραγωνικές δράσεις. Ο αλγόριθμος Overrelaxation αλλάζει μια υποψήφια μεταβλητή πηγαίνοντας πέρα από το ελάχιστο της τοπικής δράσης, όπου εξαρτάται από μια μεταβλητή  $\omega \in [1, 2]$ . Ο αλγόριθμος επιταχύνει την κίνηση στον χώρο των καταστάσεων του συστήματος καθώς συσχετίζει την υποψήφια κατάσταση ( $U$ ) με την καινούργια υποψήφια κατάσταση ( $U'$ ) ως προς την ελάχιστη δράση, η οποία έχει την ίδια πιθανότητα με την παλιά κατάσταση ( $U$ ). Αυτό που θέλουμε να αξιοποιήσουμε είναι ότι στον αλγόριθμο Metropolis, νέες καταστάσεις του συστήματος γίνονται συνεχώς αποδεκτές αν δεν υπάρχει αλλαγή στην δράση. Η ιδέα της μεθόδου Overrelaxation, είναι να βρίσκει μια νέα τιμή του  $U'$  που έχει το ίδιο βάρος πιθανότητας με το  $U$  και γι' αυτό να γίνεται αυτομάτως αποδεκτή.

Σύμφωνα με το άρθρο [24] των F.R.Brown και T.J.Woch η λύση για τους συνδέσμους της  $SU(2)$  είναι ιδιαίτερα απλός αν κάποιος πάρει  $\omega = 2$ . Αυτό αλλάζει τον σύνδεσμο ως εξής:

$$U \rightarrow U' = U_0 U^\dagger U_0 \quad (4.61)$$

όπου η δράση για έναν σύνδεσμο  $U$  δίνεται:

$$S(U) = -\frac{\beta}{2} \text{tr}(UV). \quad (4.62)$$

Η δράση ελαχιστοποιείται όταν ισχύει:

$$U_0 = V^\dagger / |V| \quad (4.63)$$

με το  $|V|$  να είναι η ορίζουσα  $\det(V)$ . Το  $V$  είναι στοιχείο της ομάδας βαθμίδας και γι' αυτό είναι αμετάβλητο. Για το  $V$ , διαλέγουμε ξανά το κανονικοποιημένο άθροισμα των συνδετήρων, και βρίσκουμε ότι η δράση παραμένει αμετάβλητη:

$$\text{tr}[U'A] = \text{tr}[V^\dagger U^\dagger V^\dagger A] = \text{tr}[V^\dagger U^\dagger] = \text{tr}[A^\dagger U^\dagger] = \text{tr}[UA] \quad (4.64)$$

η αλλιώς

$$S(U') = S(U). \quad (4.65)$$

Σημειώστε ότι η πιθανότητα επιλογής  $T_0$  είναι συμμετρική, διότι  $U' = V^\dagger U^\dagger V^\dagger$  υποδηλώνει  $U = V^\dagger U'^\dagger V^\dagger$ . Ακόμη και στην περίπτωση όπου το  $\det(A)$  εξαφανίζεται, χρησιμοποιείται οποιοσδήποτε τυχαίος σύνδεσμος μεταβλητών και γίνεται αποδεκτός.

Η εκτέλεση της μεθόδου για μεγαλύτερες ομάδες βαθμίδας  $SU(N)$  είναι και πάλι πιο δύσκολη σε σχέση με την περίπτωση της  $SU(2)$  που παρουσιάσαμε πιο πάνω και γι' αυτό συνήθως πραγματοποιούνται *Overrelaxations* σε  $SU(2)$  υποομάδες. Ενδιαφέρον παρουσιάζει ένας αλγόριθμος *Overrelaxation* που παρουσιάστηκε από τον P. de Forcrand στο [18] όπου γίνεται σε ολόκληρη την  $SU(N)$  ομάδα χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο Metropolis.

Να σημειωθεί ότι η μέθοδος *Overrelaxation* από μόνη της δεν είναι εργοδική: δειγματοληπτεί μόνο της καταστάσεις στον χώρο όπου η δράση παραμένει σταθερή (στο μικροκανονικό σύνολο). Παρόλα αυτά, επειδή θέλουμε να προσδιορίσουμε καταστάσεις με βάση το κανονικό σύνολο, δηλαδή σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann, χρειάζεται να συγχωνεύσουμε τον αλγόριθμο *Overrelaxation* μαζί με τον αλγόριθμο Metropolis ή με τον αλγόριθμο Heatbath.

### 4.5.3 Ο αλγόριθμος Langevin

Ο αλγόριθμος Langevin αρχικά εισήχθη από τους Parisi και Wu το 1981 [26], και προτάθηκε σαν μέθοδος ενημέρωσης σε αριθμητικές προσομοιώσεις στην QCD από τους Fukugita και Ukawa το 1985 [5] και ύστερα από Batrouni και άλλους [11] επίσης το 1985. Παρακάτω θα περιγράψουμε τον αλγόριθμο για ένα μποζονικό σύστημα το οποίο αποτελείται από πεπερασμένο αριθμό βαθμών ελευθερίας.

Έστω ότι συμβολίζουμε με  $q_i (i = 1, \dots, N)$  στις συντεταγμένες ενός συστήματος με δράση  $S[q]$ . Στην περίπτωση της καθαρής θεωρίας βαθμίδας αυτοί είναι οι σύνδεσμοι μεταβλητών στο χωροχρονικό πλέγμα. Θέλουμε να βρούμε έναν κανόνα που θα με βάση αυτόν θα ενημερώνουμε τις συντεταγμένες μέσω μιας αριθμητικής προσομοίωσης, η οποία θα πρέπει να ικανοποιεί τις απαιτήσεις της εργοδικότητας και της αναλυτικής εξίσωσης ισορροπίας. Όταν διακριτοποιούμε αυτές τις συντεταγμένες, τότε πλέον εξαρτώνται από μια νέα χρονική μεταβλητή  $\tau$  η οποία είναι και δείκτης των στοιχείων της αλυσίδας Markov. Θεωρούμε την παρακάτω διαφορική εξίσωση η οποία συνδέει της μεταβλητές στην χρονική στιγμή  $\tau_{n+1} = (n+1)\epsilon_L$  με αυτές στην χρονική στιγμή  $\tau_n = n\epsilon_L$ . Το  $\epsilon_L$  καλείται χρονικό βήμα Langevin.

$$q_i(\tau_{n+1}) = q_i(\tau_n) + \epsilon_L \left( -\frac{\partial S[q]}{\partial q_i(\tau_n)} + \eta_i(\tau_n) \right). \quad (4.66)$$

Εδώ ο όρος  $\eta(\tau_n)$  είναι ένα σύνολο από ανεξάρτητες τυχαία κατανομημένες Γκαουσιανές μεταβλητές των οποίων η κατανομή των πιθανοτήτων δίνεται από την σχέση

$$P(\{\eta_i(\tau_n)\}) = \prod_i \sqrt{\frac{\epsilon_L}{4\pi}} \exp \left[ -\frac{\epsilon_L}{4} \eta_i(\tau_n)^2 \right]. \quad (4.67)$$

Στο όριο  $\epsilon \rightarrow 0$ , η εξίσωση (4.66) γίνεται η εξίσωση Langevin:

$$\frac{dq_i}{d\tau} = -\frac{\partial S[q]}{\partial q_i} + \eta_i(\tau) \quad (4.68)$$

Εφόσον το πλάτος της κατανομής (4.66) είναι της τάξης  $1/\sqrt{\epsilon_L}$ , ο όρος του Γκαουσιανού 'θορύβου' είναι της τάξης  $\sqrt{\epsilon_L}$ . Αυτό γίνεται πιο ξεκάθαρο αν εισάγουμε μια νέα τυχαία μεταβλητή

$$\tilde{\eta}_i(\tau_n) = \left( \sqrt{\epsilon_L/2} \right) \eta_i(\tau_n). \quad (4.69)$$

Τότε η εξίσωση (4.66) παίρνει την μορφή:

$$q_i(\tau_{n+1}) = q_i(\tau_n) - (2\epsilon_L) \frac{1}{2} \frac{\partial S[q]}{\partial q_i(\tau_n)} + \sqrt{2\epsilon_L} \tilde{\eta}_i(\tau_n), \quad (4.70)$$

όπου τώρα ο όρος  $\tilde{\eta}_i(\tau_n)$  είναι τυχαίες μεταβλητές κατανομημένες σύμφωνα με την

$$\tilde{P}(\tilde{\eta}(\tau_n)) = \left( \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right) e^{-\sum_i \frac{1}{2} \tilde{\eta}_i(\tau_n)^2}, \quad (4.71)$$

με διακύμανση

$$\langle \tilde{\eta}_i(\tau_n) \tilde{\eta}_j(\tau_m) \rangle = \delta_{ij} \delta_{nm}. \quad (4.72)$$

Όσον αφορά τώρα την εξίσωση (4.70), δηλώνει ότι η πιθανότητα να γίνει η μετάβαση από την κατάσταση  $q_i$  την χρονική στιγμή  $\tau_n$  στην κατάσταση  $q'_i$  στην στιγμή  $\tau_{n+1}$  είναι ίση με την πιθανότητα το  $\tilde{\eta}_i (i = 1, 2, \dots)$  να είναι ίσο με  $\sqrt{2\epsilon_L} \frac{1}{2} \frac{\partial S[q]}{\partial q_i} + (q'_i - q_i) / \sqrt{2\epsilon_L}$ . Έτσι καταλήγουμε ότι η πιθανότητα μετάβασης  $P(q \rightarrow q')$  δίνεται από την σχέση:

$$P(q \rightarrow q') = N_0 \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_i \left[ \frac{q'_i - q_i}{\sqrt{2\epsilon_L}} + \frac{1}{2} \sqrt{2\epsilon_L} \frac{\partial S}{\partial q_i} \right]^2 \right\}, \quad (4.73)$$

όπου το  $N_0$  είναι μια κανονικοποιημένη σταθερά.

Τώρα ισχυριζόμαστε ότι στο όριο  $\epsilon_L \rightarrow 0$  αυτή η πιθανότητα μετάβασης ικανοποιεί την αναλυτική εξίσωση ισορροπίας, δηλαδή:

$$e^{-S(q)} P(q \rightarrow q') = e^{-S(q')} P(q' \rightarrow q). \quad (4.74)$$

Όντως, αφού το  $q' - q$  είναι της τάξης  $\mathcal{O}(\sqrt{\epsilon_L})$ , από την εξίσωση (4.73) προκύπτει

$$\begin{aligned} \frac{P(q \rightarrow q')}{P(q' \rightarrow q)} &\xrightarrow{\epsilon_L \rightarrow 0} e^{\sum_i (q'_i - q_i) \frac{\partial S}{\partial q_i}} \\ &\xrightarrow{\epsilon_L \rightarrow 0} e^{-[S(q') - S(q)]}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Έτσι καταλήγουμε ότι στο όριο  $\epsilon_L \rightarrow 0$  η πιθανότητα μετάβασης (4.73) ικανοποιεί την εξίσωση (4.74). Για πεπερασμένο πλήθος βήματα Langevin, αυτός ο αλγόριθμος οδηγεί σε συστηματικά σφάλματα τα οποία θα πρέπει να ελέγχονται και να περιοριστούν. Στην πράξη αυτό σημαίνει ότι τα δεδομένα που παράγονται βάσει του αλγορίθμου θα πρέπει προσαρμοστούν στο όριο  $\epsilon_L \rightarrow 0$ . Για το λόγο αυτόν είμαστε αναγκασμένοι να παράγουμε καταστάσεις για διαφορετικά χρονικά βήματα Langevin, όπου δυστυχώς η διαδικασία αυτή είναι πολύ χρονοβόρα.

Από την άλλη μεριά όμως, είναι ένας απλός αλγόριθμος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να ενημερώσουμε όλες τις μεταβλητές ταυτόχρονα χωρίς να χρειάζεται να ανησυχούμε για τον ρυθμό αποδοχής, όπως γίνεται δηλαδή με τον αλγόριθμο Metropolis. Επομένως ο αλγόριθμος Langevin είναι πολύ χρήσιμος όταν έχουμε να κάνουμε με συστήματα μη τοπικής δράσης, όπως είναι δηλαδή η QCD με δυναμικά φερμιόνια.

## 4.6 Ανάλυση δεδομένων

Η στατιστική ανάλυση των μετρούμενων ποσοτήτων είναι το τελευταίο βήμα μιας προσομοίωσης Monte Carlo αλλά είναι ταυτόχρονα και από τα πιο σημαντικά. Με βάση αυτή την ανάλυση θα καταλάβουμε πόσες είναι οι καταστάσεις που πρέπει να γίνουν ώστε το σύστημα μας να φτάσει σε θερμοκή ισορροπία όπως επίσης και το πόσες επαναλήψεις πρέπει να γίνουν μεταξύ δύο μετρήσεων. Το αποτέλεσμα αυτής της ανάλυσης ουσιαστικά είναι η μέση τιμή των μετρήσεων όπου αποτελεί ουσιαστικά την μετρούμενη ποσότητα μας και το αντίστοιχο στατιστικό σφάλμα των μετρήσεων αυτών.



### 4.6.1 Στατιστική Ανάλυση

Υποθέτουμε ότι έχουμε υπολογίσει τις τιμές  $(x_1, x_2, \dots, x_N)$  κάποιας μετρούμενης ποσότητας για μια διαδικασία Markov από καταστάσεις Monte Carlo που έχουν φτάσει σε μια κατάσταση ισορροπίας. Κάθε τιμή του δείγματος αντιστοιχεί σε μια τυχαία μεταβλητή  $X_i$ . Όλες αυτές οι μεταβλητές έχουν την ίδια αναμενόμενη τιμή:

$$\langle X_i \rangle = \langle X \rangle \quad (4.76)$$

και την ίδια διακύμανση:

$$\sigma_{X_i}^2 = \langle (X_i - \langle X_i \rangle)^2 \rangle = \sigma_X^2. \quad (4.77)$$

Υποψήφιοι για αμερόληπτους εκτιμητές για αυτές τις τιμές είναι:

$$\hat{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i, \quad \hat{\sigma}_X^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \hat{X})^2. \quad (4.78)$$

Αν τα  $X_i$  δεν συσχετίζονται τότε για  $i \neq j$  έχουμε:

$$\langle X_i X_j \rangle = \langle X_i \rangle \langle X_j \rangle = \langle X \rangle^2 \quad (4.79)$$

και η διακύμανση  $\hat{\sigma}_X^2$  επιτρέπει σε κάποιον να καθορίσει το στατιστικό σφάλμα του  $\hat{X}$ . Η μέση τιμή του δείγματος  $\hat{X}$  είναι μια τυχαία μεταβλητή, μιας και από το ένα σετ  $N$  καταστάσεων στο άλλο η τιμή του μπορεί να αλλάζει. Η διακύμανση σε αυτή την εκτίμηση είναι:

$$\begin{aligned} \sigma_{\hat{X}}^2 &= \left\langle \left( \hat{X} - \langle X \rangle \right)^2 \right\rangle = \left\langle \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (X_i - \langle X \rangle) \right)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_{i,j=1}^N (X_i - \langle X \rangle)(X_j - \langle X \rangle) \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 + \frac{1}{N^2} \sum_{i \neq j} \langle X_i X_j \rangle, \end{aligned} \quad (4.80)$$

Για μη συσχετισμένα  $X_i$  οι συνεισφορές από τα  $i \neq j$  παραγοντοποιούνται λόγω της εξίσωσης (4.79) και γίνονται

$$\sigma_{\hat{X}}^2 = \frac{1}{N} \sigma_X^2, \quad (4.81)$$

η οποία είναι μια πολύ γνωστή σχέση για μετρήσεις που είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους. Γι' αυτό, για την μετρούμενη ποσότητα που είναι βασισμένη σε  $N$  μετρήσεις, το στατιστικό σφάλμα ή αλλιώς η τυπική απόκλιση είναι  $\sigma_{\hat{X}}$ . Στην εξίσωση (4.81) το  $\sigma_X$

στο δεξί μέρος προσεγγίζεται χρησιμοποιώντας το  $\hat{\sigma}_X$  από την εξίσωση (4.78). Για την περίπτωση των  $N$  ανεξάρτητων μετρήσεων έχουμε το τελικό αποτέλεσμα:

$$\hat{X} \pm \sigma \quad \text{όπου} \quad \sigma = \frac{\hat{\sigma}_X}{\sqrt{N}}. \quad (4.82)$$

Αυτό που καταλαβαίνουμε από την εξίσωση (4.82) είναι πως το στατιστικό σφάλμα σε  $N$  το πλήθος ανεξάρτητες καταστάσεις μειώνεται με τον τρόπο  $1/\sqrt{N}$

## 4.6.2 Αυτοσυσχετισμοί

Σε αυτή την ενότητα εξετάζουμε το κατά πόσο τα δεδομένα που παράγουμε μέσω προσομοιώσεων Monte Carlo σε χρονοσειρές συσχετίζονται μεταξύ τους. Αυτό καλείται αυτοσυσχέτιση και μελετάται μέσω της συνάρτησης αυτοσυσχετισμού

$$\begin{aligned} C_X(X_i, X_{i+t}) &= \langle (X_i - \langle X_i \rangle)(X_{i+t} - \langle X_{i+t} \rangle) \rangle \\ &= \langle X_i X_{i+t} \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_{i+t} \rangle. \end{aligned} \quad (4.83)$$

Για μια αλυσίδα Markov που έχει φτάσει σε κατάσταση θερμοποίησης η συνάρτηση αυτοσυσχετισμού εξαρτάται μόνο από τον υπολογιστικό χρόνο  $t$  και επομένως γράφεται

$$C_X(t) = C_X(X_i, X_{i+t}). \quad (4.84)$$

Σημειώστε ότι  $C_X(0) = \sigma_X^2$ . Σε μια τυπική περίπτωση η κανονικοποιημένη συνάρτηση συσχετισμού  $\Gamma_X$ , ασυμπτωτικά για μεγάλο χρόνο  $t$  έχει εκθετική συμπεριφορά:

$$\Gamma_X(t) \equiv \frac{C_X(t)}{C_X(0)} \sim \exp\left(-\frac{t}{\tau_{X,exp}}\right), \quad (4.85)$$

όπου ο όρος  $\tau_{X,exp}$  καλείται εκθετικός χρόνος αυτοσυσχετισμού για το  $X$ . Ο ολοκληρωμένος τύπος για την έκφραση  $\Gamma_X(t)$  περιλαμβάνει ένα άθροισμα πάνω σε διάφορους παρόμοιους όρους. Στην εξίσωση (4.85) έχουμε λάβει υπόψιν μόνο τον ασυμπτωτικό όρο που έχει και τον μεγαλύτερο χρόνο αυτοσυσχετισμού. Αυτό μας δίνει μια πολύ σημαντική πληροφορία, μας δείχνει κατά πόσο διαδοχικές μετρήσεις είναι ισχυρά συσχετισμένες. Ο εκθετικός χρόνος αυτοσυσχετισμού  $\tau_{exp}$  είναι το μέγιστο άνω όριο (supremum) της μεταβλητής  $\tau_{X,exp}$ , για όλες τις δυνατές μετρούμενες ποσότητες  $X$ :

$$\tau_{exp} = \sup_X \tau_{X,exp}. \quad (4.86)$$

Οι αυτοσυσχετισμοί οδηγούν σε συστηματικά σφάλματα της τάξης  $\mathcal{O}(\exp(-t/\tau_{exp}))$  δεδομένου ότι ο υπολογιστικός χρόνος μεταξύ διαδοχικών μετρήσεων είναι  $t$ .

Για τις τυχαίες μεταβλητές  $X_i$ , όπου υπάρχει συσχετισμός οι όροι με  $i \neq j$ , στην τρίτη γραμμή της εξίσωσης (4.80) δεν μηδενίζονται και συνεχίζοντας αυτή την εξίσωση παίρνουμε την παρακάτω εξίσωση για την περίπτωση συσχετισμένων μεταβλητών :

$$\begin{aligned}
\sigma_{\hat{X}^2} &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N C_X(|i-j|) = \frac{1}{N^2} \sum_{t=-(N-1)}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-|t|} C_X(|t|) \\
&= \sum_{t=-N}^N \frac{N-|t|}{N^2} C_X(|t|) = \frac{C_X(0)}{N} \sum_{t=-N}^N \Gamma_X(|t|) \left(1 - \frac{|t|}{N}\right) \\
&\approx \frac{\sigma_X^2}{N} 2 \left( \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^N \Gamma_X(|t|) \right) \equiv \frac{\sigma_X^2}{N} 2\tau_{X,int},
\end{aligned} \tag{4.87}$$

όπου ο όρος  $\tau_{X,int}$  καλείται ολοκληρωμένος χρόνος αυτοσυσχετισμού (integrated autocorrelation time) και υπολογίζεται μέσω της σχέσης

$$\tau_{X,int} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^N \Gamma_X(t). \tag{4.88}$$

Το όνομα έχει προκύψει από το γεγονός ότι για μια εκθετική συμπεριφορά έχουμε

$$\tau_{X,int} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^N \Gamma_X(|t|) \approx \int_0^\infty dt e^{-t/\tau} = \tau. \tag{4.89}$$

Όταν υπολογίζουμε την διακύμανση βάσει της εξίσωσης (4.87) και αυτή προκύπτει μεγαλύτερη από ότι αν την υπολογίζαμε με την εξίσωση (4.80), τότε η διαφορά αυτή οφείλεται στον συσχετισμό των μετρήσεων. Ο αριθμός των ανεξάρτητων δεδομένων από  $N$  το πλήθος τιμών είναι

$$N_{indep} = \frac{N}{2\tau_{X,int}}, \tag{4.90}$$

ή

$$\sigma_{\hat{X},corrected} = 2\tau_{X,int}\sigma_X^2. \tag{4.91}$$

Για μια κατάσταση ισορροπίας ξεκινώντας από κάποια αρχική κατάσταση θα πρέπει να πετάξουμε τουλάχιστον  $20\tau$  καταστάσεων του συστήματος, και για καλή στατιστική ακρίβεια ίσως  $1000\tau$ . Όταν θέλουμε να παράγουμε δεδομένα με σφάλμα 1% χρειαζόμαστε  $> 10,00\tau$  τιμές.

Συνοψίζοντας, στην περίπτωση των συσχετισμένων μετρήσεων τα αποτελέσματα δίνονται βάση των σχέσεων

$$\hat{X} \pm \sigma \quad \text{όπου} \quad \sigma = \sqrt{\frac{1}{N} 2\tau_{X,int} \hat{\sigma}_X^2} \tag{4.92}$$

Ο χρόνος αυτοσυσχετισμού εξαρτάται από τον αλγόριθμο ενημέρωσης (Metropolis, Heatbath, Overrelaxation κ.α.) αλλά και από τις παραμέτρους του συστήματος. Για πλεγματικά συστήματα θα πρέπει να έχουμε χρόνους

$$\tau_{X,int} \sim (\xi_X)^z, \quad \tau_{exp} \sim \xi^z, \quad (4.93)$$

όπου  $\xi_X$  είναι το μήκος συσχετισμού (correlation length) για την μετρούμενη ποσότητα  $X$  και  $\xi$  είναι το μεγαλύτερο δυνατό μήκος συσχετισμού του συστήματος. Το μήκος συσχετισμού ορίζεται βάση της εκθετικής μείωσης των συναρτήσεων συσχετισμού μεταξύ των τοπικά μετρούμενων ποσοτήτων που έχουν υπολογιστεί σε διαφορετικά σημεία του πλέγματος, δηλαδή  $\langle X(x)X(y) \rangle \sim e^{-|x-y|/\xi_X}$  για μεγάλο  $|x-y|$ . Ο δυναμικός κρίσιμος εκθέτης  $z \geq 0$  εξαρτάται από τον αλγόριθμο ενημέρωσης. Στα κρίσιμα σημεία το  $\xi$  προσεγγίζει το άπειρο, όμως για πεπερασμένα πλέγματα γραμμικής διάστασης  $L$  έχουμε  $\xi \leq L$ . Γι' αυτό κοντά στα κρίσιμα σημεία, η υπολογιστική ισχύς μεγαλώνει σύμφωνα με το μέγεθος του πλέγματος

$$\text{numerical cost} \propto L^z \quad (4.94)$$

Αυτό καλείται κρίσιμη επιβράδυνση (critical slowing down). Για πρώτης τάξης μεταθέσεις φάσης, ο χρόνος αυτοσυσχετισμού είναι της τάξης  $\exp(cL^{D-1})$ , όπου  $D$  είναι η διάσταση του πλέγματος.

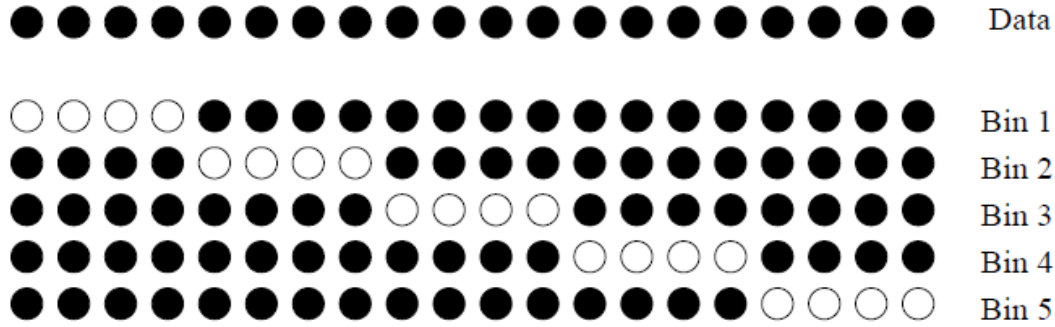
### 4.6.3 Τεχνικές δειγματοληψίας

Συχνά είναι αρκετά κοστοβόρο το να υπολογίσουμε τις αναμενόμενες τιμές σε υπολογισμούς Monte Carlo. Επίσης, ο αριθμός των μετρήσεων μπορεί να μην είναι αρκετά μεγάλος για να μπορέσουμε να έχουμε μια αξιόπιστη εκτίμηση για την διακύμανση των υπολογιζόμενων αναμενόμενων τιμών.

**Μέθοδοι "καλαθιών" (Data Blocking):** Ξεκινάμε χωρίζοντας τα δεδομένα μας σε υπό-καλάθια (sub-blocks) από δεδομένα μεγέθους  $K$ , υπολογίζουμε την μέση τιμή τους, και πλέον τις θεωρούμε σαν μια νέα μεταβλητή  $X_i$ . Η διακύμανση αυτών των καλαθιών δεδομένων  $X_i$  θα πρέπει να μειώνεται σαν το  $1/\sqrt{K}$ , δεδομένου ότι τα αρχικά δεδομένα ήταν ανεξάρτητα. Μετά επαναλαμβάνουμε αυτή την διαδικασία για διαφορετικές τιμές του  $K$ . Όταν παρατηρηθεί-επιτευχθεί η μείωση  $1/\sqrt{K}$  για αρκετά μεγάλο  $K$  τότε τα δεδομένα των καλαθιών μπορούν να θεωρηθούν ανεξάρτητα μεταξύ τους. Η ανεξαρτησία αυτή επιτυγχάνεται όταν ο αριθμός των μετρήσεων σε κάθε καλάθι είναι  $K = N/N_b \gg \tau_X$ . Όπου  $N$  είναι το πλήθος των αρχικών δεδομένων μας, και  $N_b$  είναι το πλήθος των καλαθιών. Αν  $X_i^b$  με  $i = 0, 1, \dots, N_b - 1$  είναι οι μέσες τιμές του  $X$  στο καλάθι  $i$ , τότε το σφάλμα θα δίνεται από την σχέση:

$$\sigma_X^2 = \frac{1}{N_b - 1} \left\{ \frac{1}{N_b} \sum_{i=0}^{N_b-1} (X_i^b - \langle X^b \rangle)^2 \right\} \quad (4.95)$$

Αν λοιπόν τα καλάθια δεν είναι μεταξύ τους ανεξάρτητα, τότε το σφάλμα υποεκτιμάται κατά έναν παράγοντα  $2\tau_X/(N_b - 1)$ . Τα καλάθια είναι στατιστικά ανεξάρτητα όταν  $b \sim 2\tau_X$ . Στην περίπτωση που δεν γνωρίζουμε το  $\tau_X$  υπολογίζουμε επανειλημμένα τα σφάλματα μειώνοντας διαδοχικά τον αριθμό των καλαθιών  $N_b$ .



Σχήμα 4.2: Στο σχήμα φαίνεται ένα αρχικό δείγμα που αποτελείται από  $N = 20$  μετρήσεις. Χωρίζουμε τα δεδομένα σε  $N_b = 5$  bins το οποίο κάθε bin περιέχει  $b = N - (N/N_b) = 20 - 4 = 16$  μετρήσεις (Απεικονίζονται ως μαύρες κουκίδες). Για κάθε γράμμη-bin υπολογίζουμε την αντίστοιχη μέση τιμή  $X_i^b$  και το αντίστοιχο σφάλμα  $\sigma_X$ . Το σχήμα αυτό είναι από το βιβλίο του Κ.Αναγνωστόπουλου [2].

Εφόσον τα δεδομένα μπορούν να θεωρηθούν πλέον ανεξάρτητα, μπορούμε να υπολογίσουμε τις αναμενόμενες τιμές των μετρούμενων ποσοτήτων και τα αντίστοιχα σφάλματά τους. Συνήθως όμως, όπως είπαμε ο αριθμός των δεδομένων μπορεί να είναι μικρός με αποτέλεσμα να επηρεάζει την αξιοπιστία των δεδομένων μας. Παρακάτω θα αναφέρουμε δύο μεθόδους που χρησιμοποιούνται αρκετά συχνά και είναι εύκολες στην χρήση για να λύσουμε αυτό το πρόβλημα.

## Jackknife

Η μέθοδος Jackknife είναι παρόμοια με την μέθοδο των καλάθιων που μόλις περιγράψαμε. Οι διαφορές βρίσκονται κυρίως στην διαφορετική διαμόρφωση των καλάθιων και στην διαφορετική σχέση υπολογισμού του σφάλματος των αντίστοιχων καλάθιων. Χωρίζουμε τα δεδομένα μας σε  $N_b$  καλάθια τα οποία περιέχουν  $b = N - (N/N_b)$  στοιχεία. Τα στοιχεία δομούνται με το εξής τρόπο: το καλάθι(bin)  $j$  προκύπτει αν αφαιρέσουμε από τα αρχικά δεδομένα  $X_0, X_1, \dots, X_{N-1}$  του καλάθιού τα στοιχεία από  $j$  μέχρι  $j + b$ . Αυτό γίνεται πιο εύκολα κατανοητό αν δούμε την γραφική παράσταση Σχήμα(4.2).

Για κάθε καλάθι υπολογίζουμε την μέση τιμή  $X$  του, και έτσι προκύπτει ένα σύνολο από μέσες τιμές  $X_0^b, X_1^b, \dots, X_{N_b-1}^b$ . Το σφάλμα υπολογίζεται από την σχέση:

$$\sigma_X^2 = \sum_{j=0}^{N_b-1} (X_j^b - \langle X^b \rangle)^2 = N_b (\langle (X^b)^2 \rangle - \langle X^b \rangle^2). \quad (4.96)$$

Ο αριθμός των καλάθιων καθορίζεται μεταβάλλοντας τον έως ότου το σφάλμα μας σταθεροποιηθεί. Η μέθοδος jackknife υλοποιείται και στο πειραματικό μέρος της εργασίας αυτής καθώς την χρησιμοποιούμε για την ανάλυση των δεδομένων. Παρακάτω θα δείξουμε πως την υλοποιήσαμε σε python.

## Bootstrap

Μια άλλη μέθοδος που χρησιμοποιείται για την ανάλυση των δεδομένων, είναι η μέθοδος Bootstrap. Πάλι, ας υποθέσουμε ότι έχουμε ένα δείγμα με  $N$  το πλήθος των μετρήσεων. Στην συνέχεια δημιουργούμε  $N_S$  τυχαία δείγματα. Αυτό επιτυγχάνεται επιλέγοντας με ομοιόμορφη κατανομή πιθανότητας μια τυχαία μεταβλητή από τις  $N$ . Στην συνέχεια επαναλαμβάνουμε την ίδια διαδικασία για  $N$  φορές χωρίς όμως να αφαιρούμε την προηγούμενη τυχαία επιλεγμένη μεταβλητή. Το οποίο σημαίνει ότι το δείγμα μας θα περιέχει  $\sim 1 - 1/e \approx 63\%$  ίδιες μετρήσεις. Για κάθε δείγμα υπολογίζουμε προφανώς την μέση τιμή

$$\langle X^S \rangle = \frac{1}{N_S} \sum_{i=0}^{N_S-1} X_i^S \quad (4.97)$$

και την

$$\langle (X^S)^2 \rangle = \frac{1}{N_S} \sum_{i=0}^{N_S-1} (X_i^S)^2 \quad (4.98)$$

Το σφάλμα της μέτρησης  $\langle X \rangle$  υπολογίζεται ως εξής:

$$\sigma_X^2 = \langle (X^S)^2 \rangle - \langle X^S \rangle^2. \quad (4.99)$$

Σημειώστε ότι οι παραπάνω εξισώσεις ισχύουν για ανεξάρτητες μετρήσεις. Στην περίπτωση των μη ανεξάρτητων μετρήσεων, δηλαδή αυτών των οποίων οι χρόνοι αυτοσυσχετισμού δεν είναι αμελητέοι η σχέση που πρέπει να χρησιμοποιηθεί είναι η

$$\sigma_X^2 = (1 + 2\tau_X) \left( \langle (X^S)^2 \rangle - \langle X^S \rangle^2 \right). \quad (4.100)$$

# Κεφάλαιο 5

## Ανάλυση δεδομένων

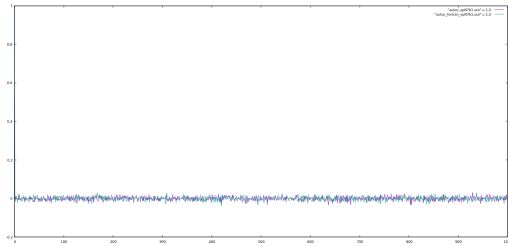
Σε αυτό το κεφάλαιο στόχος μας είναι να περιγράψουμε την διαδικασία που ακολουθήσαμε ώστε να παράγουμε τα δεδομένα και στην συνέχεια να κάνουμε την ανάλυση τους.

Αρχικά σχεδιάστηκε ένα πρόγραμμα σε Python όπου στόχο είχε την υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων που περιγράφηκαν στο κεφάλαιο 4. Το πρόγραμμα αυτό υπάρχει στο παράρτημα της παρούσας εργασίας, το οποίο έχει υλοποιηθεί με δύο διαφορετικούς τρόπους που θα εξηγήσουμε παρακάτω γιατί έγινε αυτό.

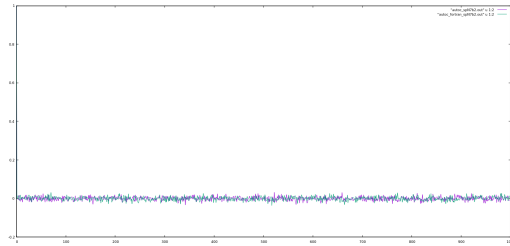
Η Python επιλέχθηκε για τα διάφορα πλεονεκτήματα που μας προσφέρει. Αρχικά είναι μια γλώσσα η οποία διαβάζεται, γράφεται και κυρίως μαθαίνεται εύκολα, πράγμα το οποίο μας βοηθάει και στην παραγωγικότητα του προγράμματος καθώς αφιερώνουμε περισσότερο χρόνο στο πρόβλημα που θέλουμε να υλοποιήσουμε, στην προκειμένη περίπτωση ένα φυσικό πρόβλημα και λιγότερο χρόνο στον να μάθουμε τις ιδιοτροπίες της γλώσσας προγραμματισμού. Επίσης η Python είναι μια διερμηνευμένη γλώσσα το οποίο σημαίνει ότι ο κώδικας εκτελείται γραμμή γραμμή και όχι όλος μαζί. Αυτό μας βοηθάει στην διαδικασία της απεντόμωσης (debugging) διότι σε περίπτωση σφάλματος σταματά και μας τυπώνει ένα σφάλμα την φορά όσα και αν είναι τα ήδη υπάρχοντα, επομένως έχουμε να αντιμετωπίσουμε ένα πρόβλημα κάθε φορά. Ίσως το μεγαλύτερο της πλεονέκτημα είναι ότι έχει πολύ μεγάλες βιβλιοθήκες ήδη έτοιμες αλλά και εξωτερικές βιβλιοθήκες που έχουν αναπτυχθεί για επίλυση πιο εξειδικευμένων προβλημάτων.

### 5.1 Έλεγχος Ορθότητας

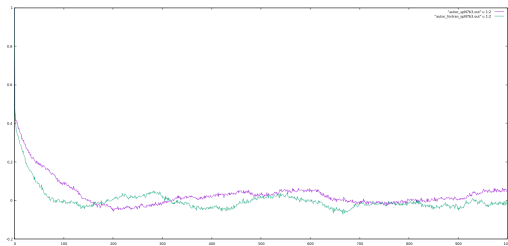
Ένα από τα βασικά μειονεκτήματα της Python είναι ο χρόνος εκτέλεσης. Παρ' όλο που έγινε χρήση της βιβλιοθήκης Numpy, η οποία έχει σχεδιαστεί για καλύτερη ταχύτητα πράξεων, οι χρόνοι ολοκλήρωσης του προγράμματος ήταν μεγάλοι, καθώς οι μετρήσεις που θέλαμε ήταν πολλές και ο χρόνος ανέβαινε σαν μια δύναμη του  $N = L^{D-1}L_t$  όσο μεγάλωνε το πλέγμα. Για το λόγο αυτό αναπτύχθηκε ανεξάρτητα ένα αντίστοιχο πρόγραμμα σε Fortran από τον επιβλέποντα καθηγητή της εργασίας Κωνσταντίνο Αναγνωστόπουλο, και το πρόγραμμα σε Python χρησιμοποιήθηκε για έλεγχο ορθότητας των μετρήσεων σε μικρότερα πλέγματα, μεγέθους έως  $N = 7$ . Αφού είδαμε ότι τα απο-



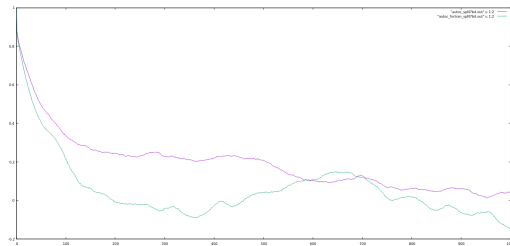
(α) Σύγκριση αυτοσυσχετισμού στατικού δυναμικού για  $\beta = 1.0$  Python - Fortran



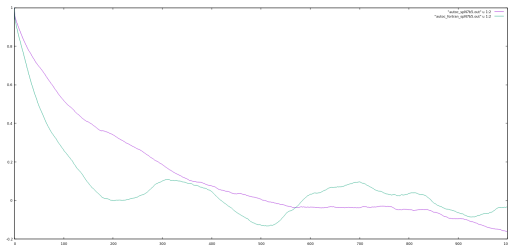
(β') Σύγκριση αυτοσυσχετισμού στατικού δυναμικού για  $\beta = 2.0$  Python - Fortran



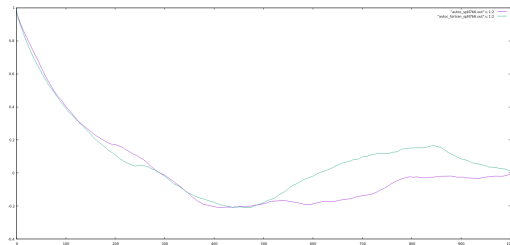
(γ') Σύγκριση αυτοσυσχετισμού στατικού δυναμικού για  $\beta = 3.0$  Python - Fortran



(δ') Σύγκριση αυτοσυσχετισμού στατικού δυναμικού για  $\beta = 4.0$  Python - Fortran



(ε') Σύγκριση αυτοσυσχετισμού στατικού δυναμικού για  $\beta = 5.0$  Python - Fortran



(ς') Σύγκριση αυτοσυσχετισμού στατικού δυναμικού για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran

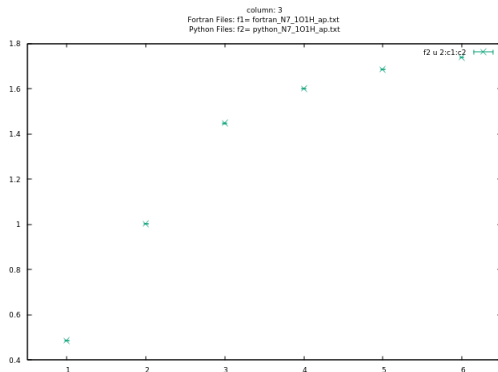
Σχήμα 5.1: Συναρτήσεις αυτοσυσχετισμού για το στατικό δυναμικό

τελέσματα των δύο αυτών προγραμμάτων ταυτίζονται πλήρως μετρήσεις για μεγαλύτερα  $N$ .

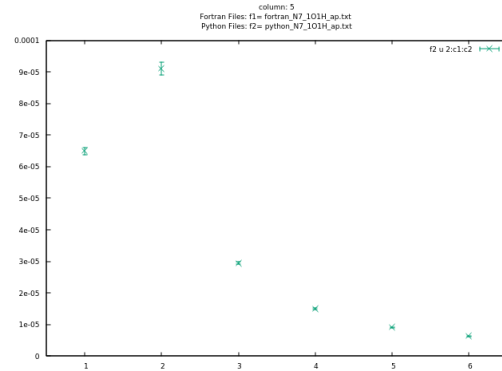
Στα προγράμματα που αναπτύχθηκαν υλοποιήθηκαν οι εξής τρεις μέθοδοι Monte Carlo: Metropolis, Overrelaxation και HeatBath. Ο έλεγχος ορθότητας έγινε για διάφορους συνδυασμούς αυτών των τριών μεθόδων. Μερικά παραδείγματα αυτών των συνδυασμών είναι : Metropolis μόνο του χωρίς κάποιον άλλον αλγόριθμο, για κάθε μια επανάληψη Metropolis να γίνεται μια Overrelaxation, μια Metropolis και τέσσερις Overrelaxation, μια Heatbath και τέσσερις Overrelaxation κ.α. Όπως είχαμε αναφέρει και στο κεφάλαιο 4 η μέθοδος Overrelaxation δεν μπορεί να λειτουργήσει μόνη της χρειάζεται να υπάρχει συνδυαστικά και με κάποια άλλη μέθοδο.

Στις γραφικές παραστάσεις που παραθέτουμε από τον έλεγχο ορθότητας χρησιμοποιήθηκε ο συνδυασμός 1 Overrelaxation και 1 Heatbath. Στο σχήμα (5.1) βλέπουμε τις συναρτήσεις αυτοσυσχετισμού των μετρήσεων του στατικού δυναμικού για  $\beta = 1.0$  έως  $6.0$ . Με πράσινο χρώμα είναι οι μετρήσεις που παρήχθησαν μέσω Fortran και με μοβ είναι αυτές που παρήχθησαν μέσω Python. Βλέπουμε ότι μέχρι  $\beta = 3.0$  οι γραφικές είναι ακριβώς ίδιες ενώ για μεγαλύτερα  $\beta$  υπάρχει σε μερικά σημεία μια απόκλιση, η οποία όμως για μικρά σχετικά δείγματα είναι απολύτως λογική. Επομένως τα δύο





(α') Σύγκριση μέσης τιμής της πλακέτας για Python - Fortran. Το στατιστικό σφάλμα είναι μικρότερο από τα σημεία.



(β') Σύγκριση διακύμανσης μέσης τιμής της πλακέτας για Python - Fortran. Το στατιστικό σφάλμα είναι μικρότερο από τα σημεία.

Σχήμα 5.2: Μέση τιμή πλακέτας

αποτελέσματα είναι συνεπή.

Στην συνέχεια στην γραφική παράσταση (5.2α') βλέπουμε τις τιμές της μέσης τιμής της πλακέτας και τις αντίστοιχες διασπορές τους. Πάλι οι γραφικές παραστάσεις συμβαδίζουν πράγμα το οποίο μας δείχνει ότι και αυτή η μέτρηση υπολογίζεται σωστά.

Στο σχήμα (5.3) βλέπουμε τα time histories του στατικού δυναμικού. Ο χρωματισμός των γραφικών παραστάσεων παραμένει ίδιος με αυτό που έχουμε ήδη αναφέρει πιο πάνω. Πάλι βλέπουμε μια μικρή απόκλιση στα μεγάλα  $\beta$  αλλά λόγω του μεγέθους του δείγματος (10.000 μετρήσεις) θεωρούμε ότι η απόκλιση είναι στα πλαίσια των στατιστικών διακυμάνσεων.

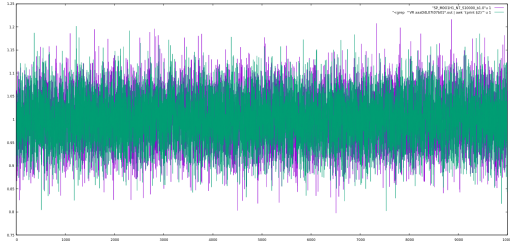
Η γραφική παράσταση (5.4) είναι η γραφική του στατικού δυναμικού συναρτήσει του  $\beta$ , όπου το στατικό δυναμικό έχει υπολογιστεί βάσει της εξίσωσης

$$V(r) = -\frac{1}{L_t} \ln \langle P(m)P(n)^\dagger \rangle. \quad (5.1)$$

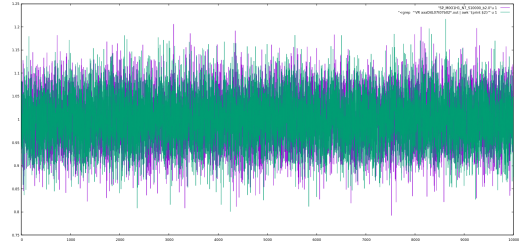
Το πλέγμα στο οποίο υπολογίστηκαν ήταν μεγέθους  $N = 7$ . Ο 8ος κόμβος είναι το πρώτο πλεγματοειδές σημείο το οποίο όμως έχει υπολογιστεί με βάση την κατοπτρική ιδιότητα του πλέγματος επομένως θα πρέπει να είναι ίδιο με το 1ο. Όπως βλέπουμε από τις γραφικές παραστάσεις οι τιμές των δύο προγραμμάτων ταυτίζονται το οποίο είναι ακόμη μια επιβεβαίωση ότι το πρόγραμμά μας τρέχει σωστά.

Τέλος στο διάγραμμα (5.5) βλέπουμε την διακύμανση των τιμών του στατικού δυναμικού. Πάλι οι γραφικές είναι συναρτήσει του  $\beta$  και κάθε γραφική είναι για διαφορετικό κόμβο με το τελευταίο να αναπαριστά τον πρώτο κόμβο κατοπτρικά. Παρατηρούμε μόνο μια μικρή απόκλιση που οριακά είναι εκτός σφάλματος για την τιμή που παίρνει το δυναμικό σε κάθε κόμβο για  $\beta = 6.0$ .

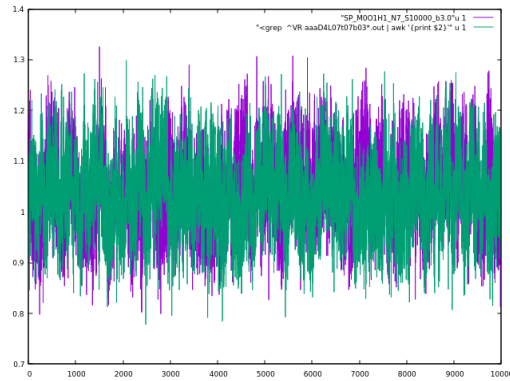
Επομένως καταλήγουμε ότι τα δύο αυτά προγράμματα παράγουν παρόμοιες τιμές και μπορούμε με μεγαλύτερη βεβαιότητα να παράγουμε δεδομένα για μεγαλύτερα πλέγματα.



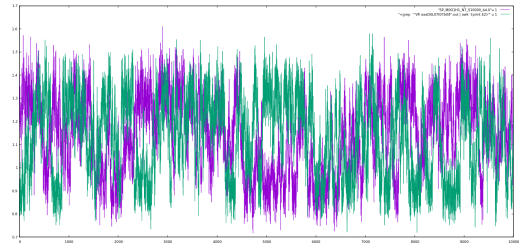
(α) Σύγκριση των time histories του στατικού δυναμικού για  $\beta = 1.0$  Python - Fortran



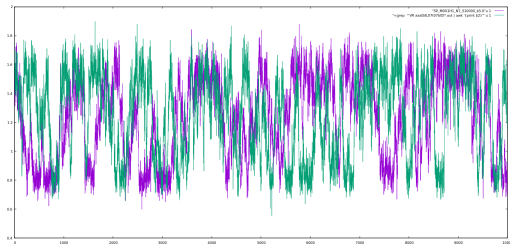
(β') Σύγκριση των time histories του στατικού δυναμικού για  $\beta = 2.0$  Python - Fortran



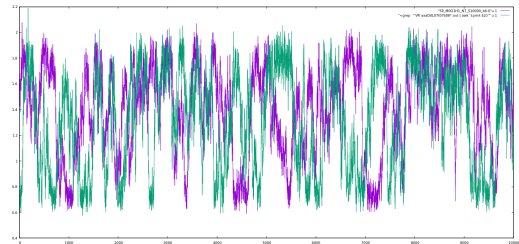
(γ') Σύγκριση των time histories του στατικού δυναμικού για  $\beta = 3.0$  Python - Fortran



(δ') Σύγκριση των time histories του στατικού δυναμικού για  $\beta = 4.0$  Python - Fortran

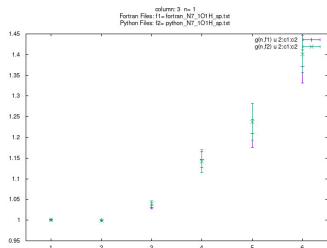


(ε') Σύγκριση των time histories του στατικού δυναμικού για  $\beta = 5.0$  Python - Fortran

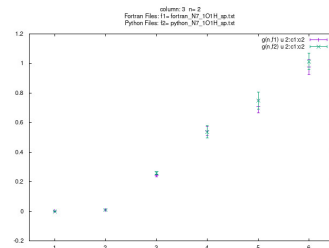


(ς') Σύγκριση των time histories του στατικού δυναμικού για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran

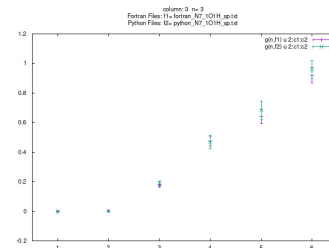
Σχήμα 5.3: Time histories στατικού δυναμικού



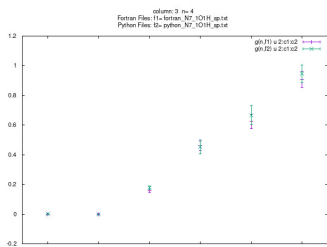
(α') Σύγκριση στατικού δυναμικού για τον 1ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



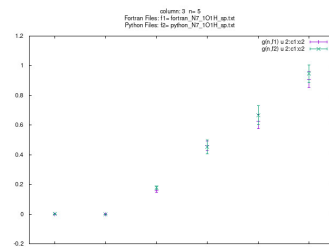
(β') Σύγκριση στατικού δυναμικού για τον 2ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



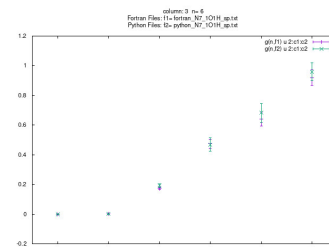
(γ') Σύγκριση στατικού δυναμικού για τον 3ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



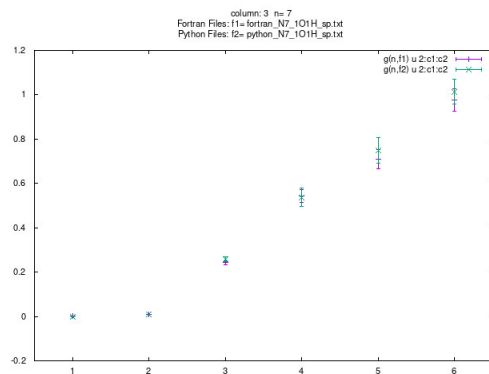
(δ') Σύγκριση στατικού δυναμικού για τον 4ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



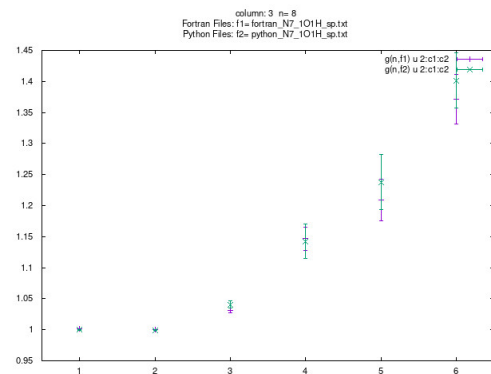
(ε') Σύγκριση στατικού δυναμικού για τον 5ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



(ς') Σύγκριση στατικού δυναμικού για τον 6ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran

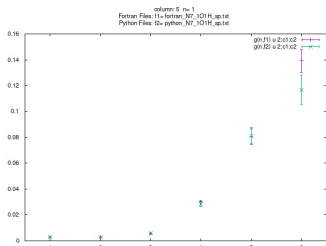


(ζ') Σύγκριση στατικού δυναμικού για τον 7ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran

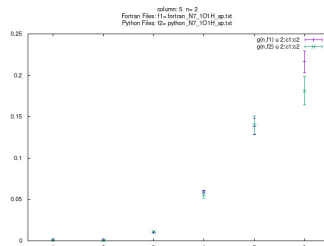


(η') Σύγκριση στατικού δυναμικού για τον 1ο κόμβο(έλεγχος συμμετρίας) για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran

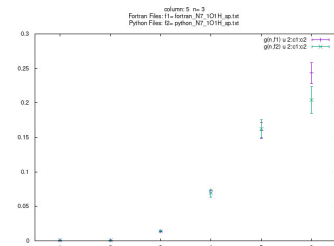
Σχήμα 5.4: Στατικό Δυναμικό



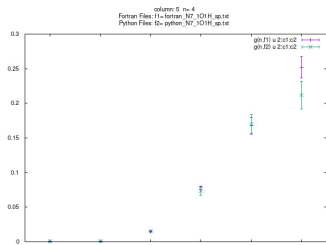
(α) Σύγκριση διακύμανσης στατικού δυναμικού για τον 1ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



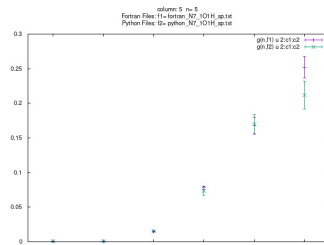
(β) Σύγκριση διακύμανσης στατικού δυναμικού για τον 2ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



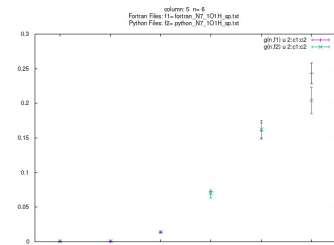
(γ) Σύγκριση διακύμανσης στατικού δυναμικού για τον 3ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



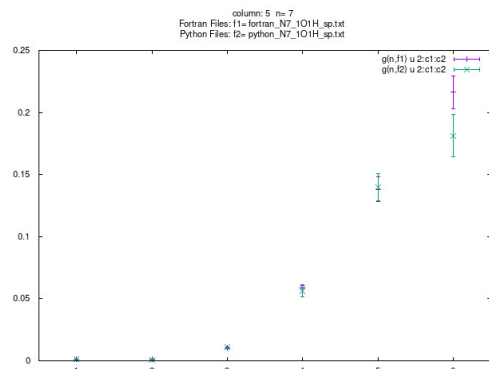
(δ) Σύγκριση διακύμανσης στατικού δυναμικού για τον 4ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



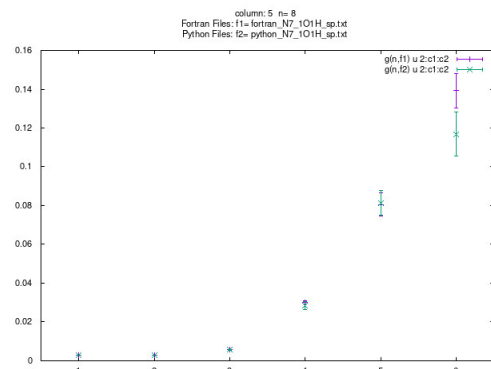
(ε) Σύγκριση διακύμανσης στατικού δυναμικού για τον 5ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



(ς) Σύγκριση διακύμανσης στατικού δυναμικού για τον 6ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



(ζ) Σύγκριση διακύμανσης στατικού δυναμικού για τον 7ο κόμβο για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran



(η) Σύγκριση διακύμανσης στατικού δυναμικού για τον 1ο κόμβο (έλεγχος συμμετρίας) για  $\beta = 6.0$  Python - Fortran

Σχήμα 5.5: Στατικό Δυναμικό

## 5.2 Πολυπλοκότητα αλγορίθμων και σύγκριση ταχυτήτων εκτέλεσης

Σε αυτή την ενότητα θα ασχοληθούμε κυρίως με τον χρόνο εκτέλεσης του προγράμματος καθώς επίσης θα κάνουμε και μια σύγκριση ταχυτήτων μεταξύ των δύο προγραμμάτων. Αρχικά το πρόγραμμα που υλοποιήθηκε μέσω Python, μπορείτε να το δείτε και στο παράρτημα της εργασίας, βάση του ορισμού από τον Donald E. Knuth της πολυπλοκότητας των αλγορίθμων στο άρθρο με τίτλο "BIG OMICRON AND BIG OMEGA AND BIG THETA", ήταν τουλάχιστον  $O(n^4)$ . Αυτό συμβαίνει στο κομμάτι του κώδικα όπου ενημερώνεται το πλέγμα. Ο υπολογισμός των μετρήσεων έχει μικρότερη πολυπλοκότητα. Επομένως για να βελτιώσουμε την ταχύτητα αλλάξαμε τον τρόπο με τον οποίο γίνεται η ενημέρωση του πλέγματος, το οποίο μας οδηγεί στον κώδικα του παραρτήματος "Su(2) python code version 2". Εδώ απλοποιήσαμε τον πίνακα του πλέγματος σε μονοδιάστατο από τετραδιάστατο και υπολογίσαμε του πλησιέστερους γείτονες κάθε σημείου με την βοήθεια εξισώσεων. Έτσι μειώσαμε την χρήση των for loops και κατά συνέπεια τον βαθμό πολυπλοκότητας. Η πολυπλοκότητα μειώθηκε σε περίπου  $O(n^2)$ , με αποτέλεσμα να έχουμε καλύτερη ταχύτητα υπολογισμών. Παρ' όλα αυτά πάλι η ταχύτητα του κώδικα σε σχέση με την ταχύτητα της Fortran ήταν σημαντικά πιο αργή.

Στην συνέχεια για να συγκρίνουμε την ταχύτητα εκτέλεσης των δύο προγραμμάτων σε Python αλλά και του προγράμματος σε Fortran υπολογίσαμε τον χρόνο που χρειάζονται ενδεικτικά τα προγράμματα για να ολοκληρώσουν μια ενημέρωση. Τα τρία αυτά προγράμματα ελέγχθηκαν για μέγεθος πλέγματος  $N = 4$  και  $N = 10$ . Η πρώτη έκδοση του προγράμματος που γράψαμε είχε χρόνο ενημέρωσης του πλέγματος  $t_{p4u} = 0.553s$  και  $t_{p10u} = 21.759s$  ενώ για την δεύτερη έκδοση έχουμε  $t_{2p4u} = 0.308s$  και  $t_{2p10u} = 10.961s$ . Για την Fortran οι αντίστοιχοι χρόνοι είναι  $t_{f4u} = 0.031s$  και  $t_{f10u} = 0.157s$ .

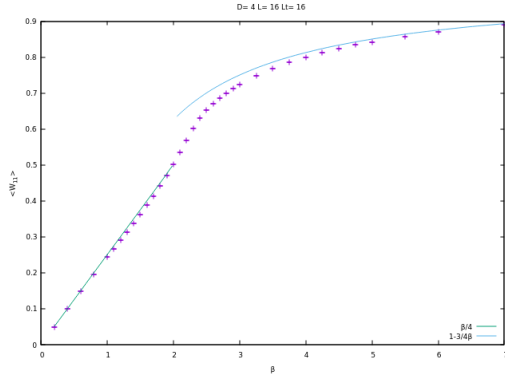
Αρχικά βλέπουμε ότι οι χρόνοι σε Python είναι κατά πολύ μεγαλύτεροι από τον χρόνο της Fortran, κάτι το οποίο το περιμέναμε καθώς η Python δεν είναι γρήγορη αλλά η διαφορά είναι ιδιαίτερα σημαντική. Επίσης η μείωση της πολυπλοκότητας φαίνεται να έχει παίξει σημαντικό ρόλο καθώς έχει μειώσει περίπου τον χρόνο εκτέλεσης στο μισό στην περίπτωση όπου το πλέγμα έχει μέγεθος  $N = 10$ . Διαφορά βλέπουμε και σε μικρότερα  $N$  αλλά όσο μεγαλώνει το πλέγμα έχουμε καλύτερα αποτελέσματα. Ακόμη παρατηρούμε ότι στην περίπτωση της Python ο χρόνος έχει μια αύξηση κοντά στο  $L^\alpha$  ενώ στην περίπτωση της Fortran φαίνεται να είναι πιο ομαλή.

## 5.3 Ανάλυση μετρήσεων για $L = 16$ και $L_t = 16$

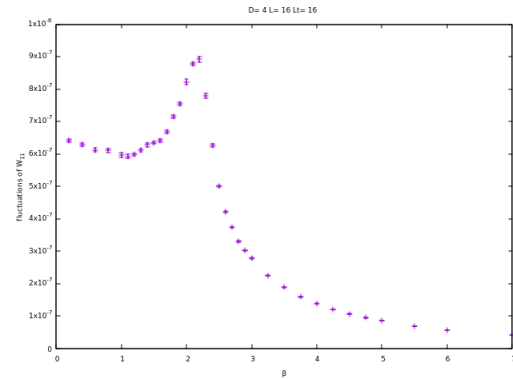
Για την ανάλυση των μετρήσεων μας επιλέξαμε ένα πλέγμα  $L = 16^4$  για το οποίο πήραμε ένα δείγμα περίπου 600.000 μετρήσεων.

Στην ανάλυση μας υποθέτουμε ότι ο βρόχος Wilson είναι

$$W(C) = \exp(-tV(r)) \quad (5.2)$$



(α) Συμπεριφορά του βρόχου Wilson σε χαμηλές και υψηλές θερμοκρασίες



(β') Διακυμάνσεις του βρόχου Wilson

Σχήμα 5.6

όπου  $C$  είναι ένα ορθογώνιο  $r \times t$  όπως φαίνεται και στο σχήμα (3.5). Τώρα αν υποθέσουμε ότι το δυναμικό έχει την μορφή

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + \sigma r \quad (5.3)$$

προκύπτει η εξίσωση

$$W(C) = \exp(-\sigma r t - B \left(\frac{t}{r}\right) - A t + c). \quad (5.4)$$

Για τον τετραγωνικό βρόχο έχουμε  $l = r = t$ , και επομένως

$$W(C) = \exp(-\sigma l^2 - A l - B) \quad (5.5)$$

και αναμένουμε το  $\sigma$  να έχει την τιμή

$$\sigma = -\ln\left(\frac{\beta}{4}\right) (1 + \mathcal{O}(\beta)). \quad (5.6)$$

Τέλος για τους βρόχους Polyakov χρησιμοποιήθηκε η σχέση

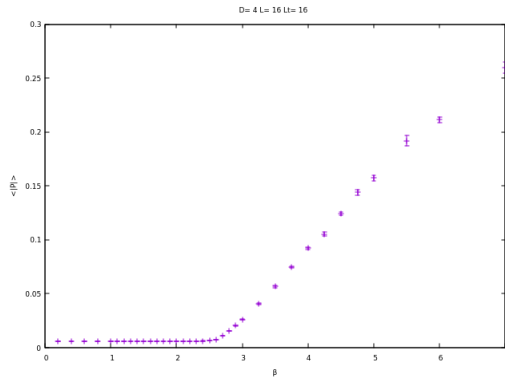
$$\langle P(m)P(n)^\dagger \rangle \sim \exp(-L_t V(r))(1 + \mathcal{O}(\exp(-t\Delta E))) \quad (5.7)$$

όπου μας δίνει την σχέση για το στατικό δυναμικό

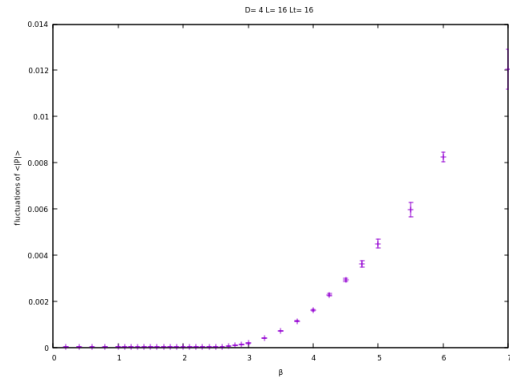
$$V(r) = -\frac{1}{L_t} \ln \langle P(m)P(n)^\dagger \rangle \quad (5.8)$$

με την απόσταση  $r$  να είναι  $r = |m - n|$ .

Στο σχήμα (5.6) φαίνεται ο έλεγχος που έχουμε κάνει για υψηλές και χαμηλές θερμοκρασίες. Όπως αναφέρεται στο βιβλίο [8] του Gattringer για τις ομάδες  $SU(N)$



(α) Μέση τιμή της απόλυτης τιμής του βρόχου Polyakov συναρτήσε του  $\beta$



(β) Διακυμάνσεις του βρόχου Polyakov συναρτήσε του  $\beta$

Σχήμα 5.7

με  $N > 1$  η θεωρία είναι confining για όλα τα  $\beta$ . Στην περίπτωση της  $U(1)$  υπάρχει μετάβαση φάσης στο κρίσιμο σημείο για  $\beta_c \approx 1.01$ . Επομένως στην γραφική βλέπουμε ένα crossover σημείο, δηλαδή είναι μια "ομαλή" μετάβαση, και αυτό συμβαίνει γιατί δεν μπορούμε να έχουμε μεταβάσεις φάσεων για την  $SU(2)$ . Η αντίστοιχη γραφική έχει υλοποιηθεί από τον M.Creutz στη δημοσίευση [14](FIG.4).

Στο σχήμα (5.7) βλέπουμε την αναμενόμενη τιμή της απόλυτης τιμής των βρόχων Polyakov συναρτήσε του  $\beta$ , καθώς επίσης και τις διακυμάνσεις των τιμών τους.

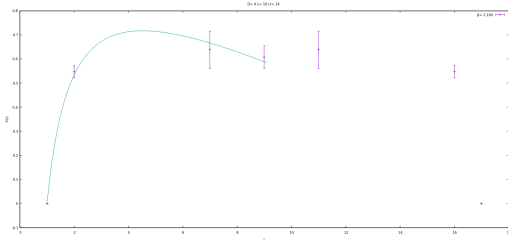
Στην συνέχεια έχουμε τις γραφικές παραστάσεις σχήματα (5.8, 5.9) του στατικού δυναμικού ως συνάρτηση της απόστασης για πολλά διαφορετικά  $\beta$ . Παρατηρούμε ότι καθώς το  $\beta$  μεγαλώνει έχουμε καλύτερη εικόνα του δυναμικού. Επίσης έχουμε απεικονίσει μόνο το μισό διότι το υπόλοιπο είναι συμμετρικό, κάτι το οποίο φαίνεται και από τα σημεία της γραφικής παράστασης.

Στο σχήμα (5.10) βλέπουμε το δυναμικό για  $\beta = 2.7$ , όπου εδώ φαίνεται καλύτερα, και δίπλα έχουμε την τάση χορδής  $\sigma$  για τις διάφορες τιμές του  $\beta$ , όπου και αυτό έχει υπολογιστεί με βάση τους βρόχους Polyakov. Οι σχέσεις που χρησιμοποιήθηκαν είναι αυτές που έχουμε αναφέρει και πιο πάνω στην αρχή της ενότητας.

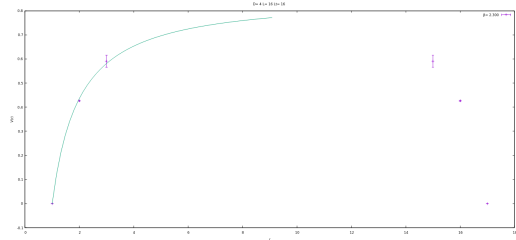
Οι γραφικές παραστάσεις (5.11) στο αριστερό μέρος, μας δείχνουν την εξάρτηση του βρόχου Wilson  $W_{1 \times 1}$  από το  $\beta$ , όπου για μικρό  $\beta$  μας δείχνει την συμπεριφορά για την ισχυρή δράση και για μεγάλο  $\beta$  για την ασθενείς. Στο δεξί μέρος βλέπουμε την προσαρμογή στην σχέση (5.5).

Τέλος στο σχήμα (5.12) βλέπουμε την τάση χορδής υπολογισμένη από την προσαρμογή στη σχέση (5.5) καθώς επίσης και της εξίσωσης (5.6) όπου έχουν την αναμενόμενη συμπεριφορά ισχυρής/ασθενής ζεύξης. Μπορούμε να δούμε το αντίστοιχο σχήμα στην δημοσίευση [14] (FIG.6) όπου βλέπουμε ότι υπάρχει παρόμοια συμπεριφορά. Στην περιοχή για  $\beta < 2.0$  βλέπουμε την προσαρμογή των ελαχίστων τετραγώνων καθώς επίσης και την υπόθεση ότι έχουμε εξάρτηση καθαρά από τον νόμο του όγκου.

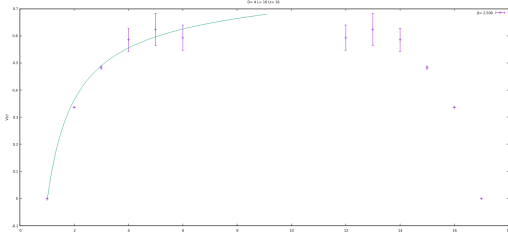
Τα αποτελέσματα μας όπως επίσης και τις γραφικές παραστάσεις, τις συγκρίναμε με τη δημοσίευση του M.Creutz [14] με την οποία βρισκόμαστε σε συμφωνία.



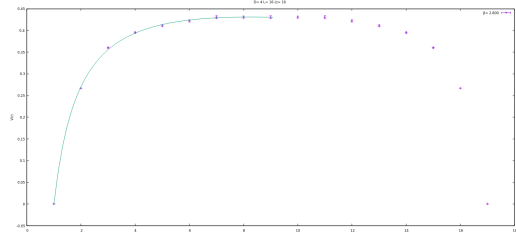
(α) Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 2.1$



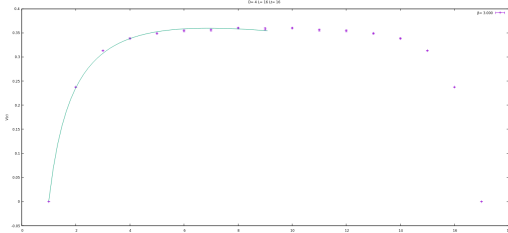
(β') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 2.3$



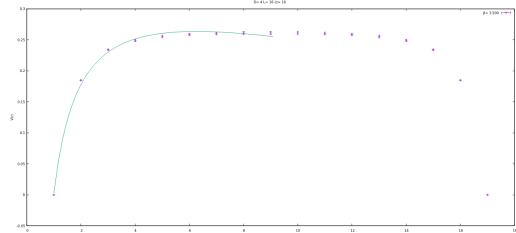
(γ') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 2.5$



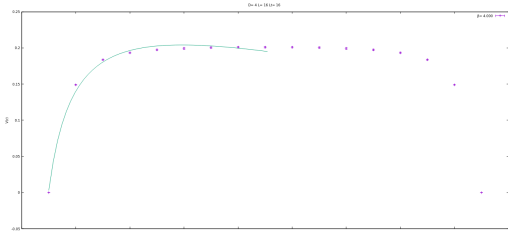
(δ') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 2.8$



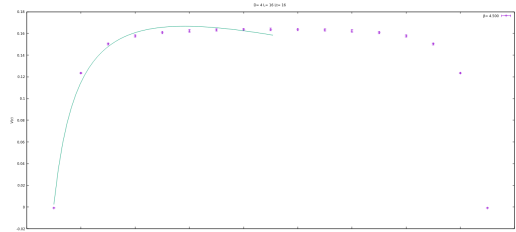
(ε') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 3.0$



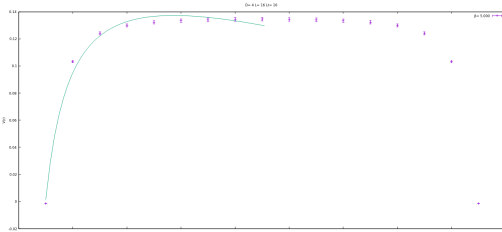
(ϕ') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 3.5$



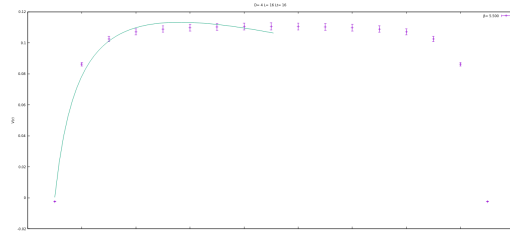
(ζ') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 4.0$



(η') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 4.5$



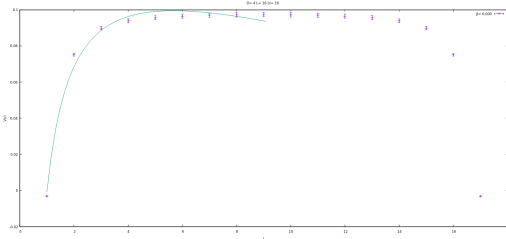
(θ') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 5.0$



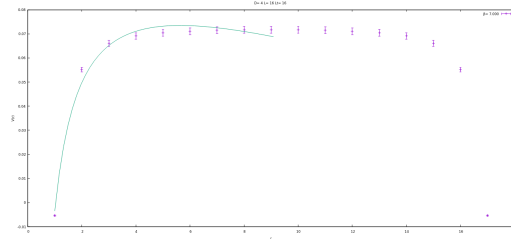
(ι') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσει της απόστασης για  $\beta = 5.5$

Σχήμα 5.8



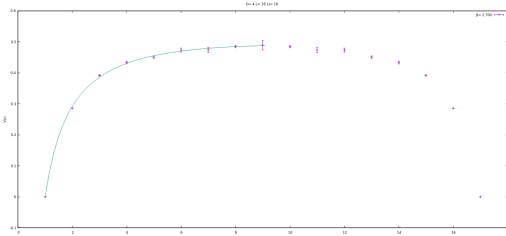


(α') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσεως της απόστασης για  $\beta = 6.0$

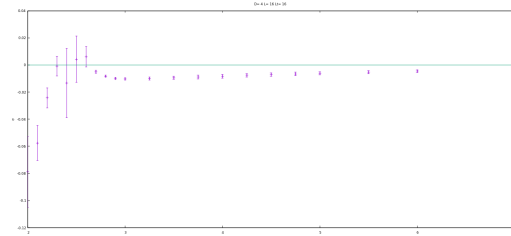


(β') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσεως της απόστασης για  $\beta = 7.0$

Σχήμα 5.9

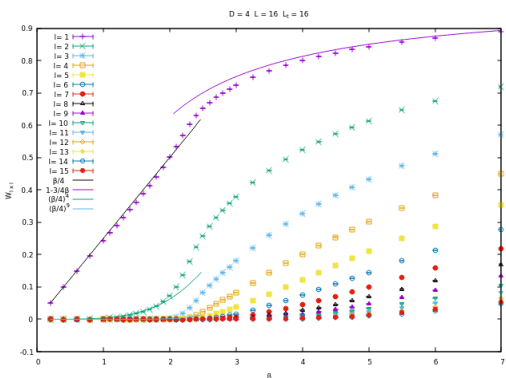


(α') Στατικό δυναμικό  $V(r)$  συναρτήσεως της απόστασης για  $\beta = 2.7$

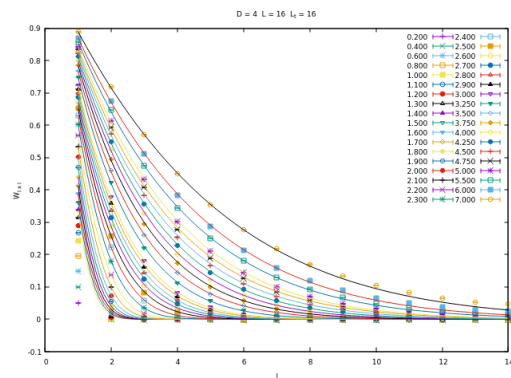


(β') Τάσης χορδής που έχει υπολογιστεί βάση των βρόχων Polyakov

Σχήμα 5.10

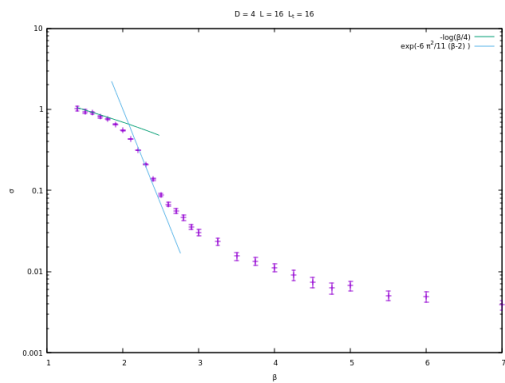


(α') Εξάρτηση του βρόχου Wilson από το  $\beta$

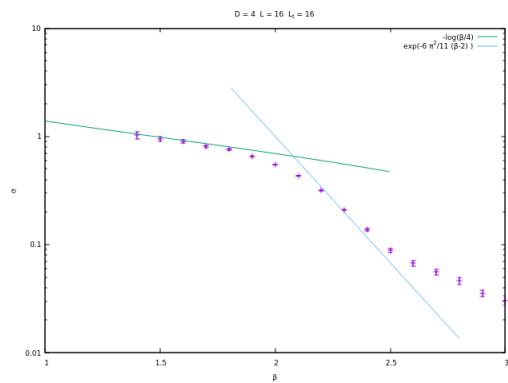


(β') Βρόχος Wilson συναρτήσεως της απόστασης  $l$

Σχήμα 5.11



(α')



(β')

Σχήμα 5.12: Τάση χορδής  $\sigma$  βάσει των βρόχων Wilson

# Παράρτημα Α'

## Κώδικας

### A.1 Su(2) python code

---

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
np.set_printoptions(precision=16)
from random_su2 import*
from numpy.linalg import multi_dot
from unitarity_check import*
from overrelaxation_debugging import*

N = 7 # N is the number of lattice points for each dimension
N_mi = 4 #Number of mi, ni arguments
group_dim = 2 # group_dim is the dimensions of the lattice
U = np.zeros((N,N,N,N,N_mi,group_dim,group_dim), np.complex128) #4D lattice
    link variables
N_configurations = 1 #Times of configurations(sweeps) we want to occure
beta = 6.0 #Coupling constant beta
eps = 0.24 #Random parameter that controls the acceptance ratio
    static_potential_list = [] #Here we save the Static Potential measurements
plaquete_size = N #The size of the plaquete we want to loop around
N_thermalazation = 1 #Number of configurations until thermalization
N_Metropolis = 0 #Number of Metropolis iterations per configuration
N_Overrelaxation = 1 #Number of Overrelaxation iterations per configuration
N_Heatbath = 1 #Number of Heatbath iterations per configuration

#Here we initialize the lattice with two options. 0 for cold start and 1 for hot
def initialize_lattice (parameter=0): #parameter is 0 for cold start and 1 for
    hot start
    for t in range(N):
```

```

for x in range(N):
    for y in range(N):
        for z in range(N):
            for mi in range(N_mi): # mi is the directional index
                if parameter == 0 :
                    U[t,x,y,z,mi] = np.identity(group_dim)
                else:
                    U[t,x,y,z,mi] = generate_su2_U(eps)

def calculate_staple (t,x,y,z,mi):
    staple = np.zeros((group_dim, group_dim) , np.complex128)
    mi_hat = [0,0,0,0]
    mi_hat[mi] = 1
    for ni in range(N_mi):
        if ni != mi:
            ni_hat = [0,0,0,0]
            ni_hat[ni] = 1
            staple += multi_dot([
                U[(t+mi_hat[0])%N , (x+mi_hat[1])%N , (y+mi_hat[2])%N , (z+
                    mi_hat[3])%N , ni],
                U[(t+ni_hat[0])%N , (x+ni_hat[1])%N , (y+ni_hat[2])%N , (z+
                    ni_hat[3])%N , mi].conj().T,
                U[t , x , y , z , ni].conj().T])

            staple += multi_dot([
                U[(t+mi_hat[0]-ni_hat[0])%N , (x+mi_hat[1]-ni_hat[1])%N , (y+
                    mi_hat[2]-ni_hat[2])%N , (z+mi_hat[3]-ni_hat[3])%N , ni].
                    conj().T,
                U[(t-ni_hat[0])%N , (x-ni_hat[1])%N , (y-ni_hat[2])%N , (z-
                    ni_hat[3])%N , mi].conj().T,
                U[(t-ni_hat[0])%N , (x-ni_hat[1])%N , (y-ni_hat[2])%N , (z-
                    ni_hat[3])%N , ni]])
    return staple

def calculate_S (t,x,y,z,mi,staple):
    trace_of_UA = (np.trace(np.dot( U[t,x,y,z,mi], staple))).real
    S = -(beta*trace_of_UA) / group_dim
    return S

def Overrelaxation(t,x,y,z,mi):

    staple = calculate_staple (t,x,y,z,mi)
    old_link = U[t,x,y,z,mi].copy()
    old_S = calculate_S(t,x,y,z,mi,staple)

    Uo = staple.conj().T / np.sqrt(np.linalg.det(staple))

```

```

U[t,x,y,z,mi] = multi_dot([Uo,old_link.conj() . T,Uo])

new_S = calculate_S(t,x,y,z,mi,staple)
dS = new_S - old_S
# ov_debug(Uo,dS)

#Acceptance Condition
if ( (dS > 0.0) and (np.exp(-dS) < np.random.uniform(0,1)) ):
    U[t,x,y,z,mi] = old_link

#Checking for unitarity violation and re-unitarise if necessary
U[t,x,y,z,mi] = check_unitarity(U[t,x,y,z,mi])

def Metropolis(t,x,y,z,mi):

    staple = calculate_staple(t,x,y,z,mi)
    old_link = U[t,x,y,z,mi].copy()
    old_S = calculate_S(t,x,y,z,mi,staple)

    U[t,x,y,z,mi] = np.dot(generate_su2_U(eps) , old_link)

    new_S = calculate_S(t,x,y,z,mi,staple)
    dS = new_S - old_S

    #Acceptance Condition
    if ( (dS > 0.0) and (np.exp(-dS) < np.random.uniform(0,1)) ):
        U[t,x,y,z,mi] = old_link

    #Checking for unitarity violation and re-unitarise if necessary
    U[t,x,y,z,mi] = check_unitarity(U[t,x,y,z,mi])

def Heatbath(t,x,y,z,mi):
    A = calculate_staple(t,x,y,z,mi)
    a = np.sqrt(np.linalg.det(A)).real
    if(a == 0.):
        r0 = np.random.uniform(-0.5,0.5)
        x0 = np.sign(r0)*np.sqrt(1-eps**2)

        r = np.random.random((3)) - 0.5
        x = eps*r/np.linalg.norm(r)

    U[t,x,y,z,mi] = x0*np.identity(2) + 1j*x[0]*sx + 1j*x[1]*sy + 1j*x[2]*sz
else:

```

```

#Generating x0
random_generated_number = np.random.random(3)
lambda2 = (np.log(random_generated_number[0]) + (np.cos(2*np.pi*
random_generated_number[1])**2)*np.log(random_generated_number
[2]))/(-2*a*beta)
while(np.random.random()**2 > 1 - lambda2):
    random_generated_number = np.random.random(3)
    lambda2 = (np.log(random_generated_number[0]) + (np.cos(2*np.pi*
random_generated_number[1])**2)*np.log(
random_generated_number[2]))/(-2*a*beta)
x0 = 1 - 2*lambda2

#Generating x1 x2 x3
x_vector = 2*np.random.random(3) - 1
while( x_vector[0]**2 + x_vector[1]**2 + x_vector[2]**2 > 1):
    x_vector = 2*np.random.random(3) - 1
x_vector *= np.sqrt(1-x0**2)/np.sqrt(x_vector[0]**2 + x_vector[1]**2 +
x_vector[2]**2)

#Building the X matrix of SU(2)
X = x0*np.identity(2) + 1j*x_vector[0]*sx + 1j*x_vector[1]*sy + 1j*
x_vector[2]*sz

U[t,x,y,z,mi] = np.dot(X , A.conj()).T/a

#Checking for unitarity violation and re-unitarise if necessary
U[t,x,y,z,mi] = check_unitarity(U[t,x,y,z,mi])

```

```

def update_lattice():

```

```

    for t in range(N):
        for x in range(N):
            for y in range(N):
                for z in range(N):
                    for mi in range(N_mi):
                        for i in range(N_Metropolis):
                            Metropolis(t,x,y,z,mi)
                        for i in range(N_Heatbath):
                            Heatbath(t,x,y,z,mi)
                        for i in range(N_Overrelaxation):
                            Overrelaxation(t,x,y,z,mi)

```

```

def measure_polyakov_loop():
    polyakov_trace = 0

```

```

for x in range(N):
    for y in range(N):
        for z in range(N):
            polyakov_loop = np.identity(group_dim)
            for t in range(N):
                polyakov_loop = np.dot(polyakov_loop,U[t,x,y,z,0])
            polyakov_trace += np.trace(polyakov_loop)
return polyakov_trace/(group_dim*N**3)

def measure_static_potential(): # runs for each N_configuration
    pmpn = np.zeros (N+1, np.complex128)
    count = np.zeros (N+1, np.int64)
    pm = np.zeros((N,N,N),np.complex128)
    for x in range(N):
        for y in range(N):
            for z in range(N):
                pm[x,y,z] = calculate_polyakov_line(x,y,z)

    for x in range(N):
        for y in range(N):
            for z in range(N):

                for mi in range(1,4):
                    mi_hat = [0,0,0,0]
                    mi_hat[mi] = 1
                    for r in range(0,N+1):
                        pn = pm[(x + mi_hat[1]*r)%N, (y + mi_hat[2]*r)%N , (z
                            + mi_hat[3]*r)%N]
                        pmpn[r] = pmpn[r] + pm[x,y,z]*(pn.conj())
                        count[r] = count[r] + 1

    return pmpn/count

def calculate_polyakov_line(x,y,z):

    P = U[0,x,y,z,0]
    for t in range(1,N):
        P = np.dot(P,U[t,x,y,z,0])
    return np.trace(P)

def Average_Wilson_plaquette(i,j):
    sum_avege_plaqtte = 0.0
    plaquette_av = []

    for t in range(N):
        for x in range(N):
            for y in range(N):
                for z in range(N):
                    for ni in range(N_mi-1):

```

```

ni_hat = [0,0,0,0]
ni_hat[ni] = 1
for mi in range(ni+1,N_mi):
    mi_hat = [0,0,0,0]
    mi_hat[mi] = 1
    I=0
    J=0

    temp = np.identity(group_dim)

    #Horisontal displacement to the left
    for I in range(0,i):
        temp = np.dot(temp, U[(t+I*mi_hat[0])%N , (x+
            I*mi_hat[1])%N , (y+I*mi_hat[2])%N , (z+I*
            mi_hat[3])%N ,mi])
    #Vertical displacement upwards
    for J in range(0,j):
        temp = np.dot(temp, U[(t+ (I+1)*mi_hat[0] + J
            *ni_hat[0])%N , (x+ (I+1)*mi_hat[1]+ J*
            ni_hat[1])%N , (y+ (I+1)*mi_hat[2]+ J*
            ni_hat[2])%N , (z+ (I+1)*mi_hat[3]+ J*ni_hat
            [3])%N , ni])
    #Horisontal displacement to the right
    for I in range(I,-1,-1):
        temp = np.dot(temp, U[(t+ I*mi_hat[0] + (J+1)
            *ni_hat[0])%N , (x+ I*mi_hat[1]+ (J+1)*
            ni_hat[1])%N , (y+ I*mi_hat[2]+ (J+1)*
            ni_hat[2])%N , (z+ I*mi_hat[3]+ (J+1)*ni_hat
            [3])%N , mi].conj().T)
    #Vertical displacement downwards
    for J in range(J,-1,-1):
        temp = np.dot(temp, U[(t+ J*ni_hat[0])%N , (x
            + (J)*ni_hat[1])%N , (y+ (J)*ni_hat[2])%N ,
            (z+ (J)*ni_hat[3])%N , ni].conj().T )
    plaquette_av.append((np.trace(temp)).real)
    sum_averge_plaquette += (np.trace(temp)).real
return (sum_averge_plaquette)/(6*N**4),plaquette_av

```

```

def calculate_spatial_transporter (t,xm,ym,zm,xn,yn,zn):

```

```

    S = np.identity(group_dim)
    for x in range(xm,xn):
        S = np.dot(S,U[t,x,ym,zm,1])
    for y in range(ym,yn):
        S = np.dot(S,U[t,xn,y,zm,2])
    for z in range(zm,zn):
        S = np.dot(S,U[t,xn,yn,z,3])

```



```
return S
```

```
#Prints the average of Monte_Carlo_loop method
```

```
def MCaverage():
```

```
    sp = []
```

```
    sp_wilson = 0
```

```
    s = 0
```

```
    p = 0
```

```
    sum = []
```

```
    p_av = []
```

```
    for i in range(N_configurations + N_thermalization):
```

```
        update_lattice ()
```

```
        #Start measuring after the N_thermalization configurations
```

```
        if (i > N_thermalization-1):
```

```
            # polyakov_loop = measure_polyakov_loop()
```

```
            sp.append(measure_static_potential())
```

```
            #sp_wilson = Wilson_loop_static_potential()
```

```
            s , p = Average_Wilson_plaquette(1,1)
```

```
            sum.append(s)
```

```
            p_av.append(p)
```

```
#Printing the results
```

```
f = open(f"SP_M{N_Metropolis}O{N_Overrelaxation}H{N_Heatbath}_N{N}  
_S{N_configurations}_b{beta}", "w")
```

```
g = open(f"AP_M{N_Metropolis}O{N_Overrelaxation}H{N_Heatbath}_N{N}  
_S{N_configurations}_b{beta}", "w")
```

```
for i in range (N_configurations):
```

```
#Writing Static Potential
```

```
f.write(f" {(sp[i][0]) . real} \t {(sp[i][1]) . real} \t {(sp[i][2]) . real} \t {(sp[  
i][3]) . real} \t {(sp[i][4]) . real} \t {(sp[i][5]) . real} \t {(sp[i][6]) . real  
} \t {(sp[i][7]) . real} \n")
```

```
#Writing Static Potential
```

```
#f = open(f"SPW_M{N_Metropolis}O{N_Overrelaxation}H{N_Heatbath}  
_N{N}_S{N_configurations}_b{beta}", "a")
```

```
#f.write(f" {(sp_wilson[0]) . real} \t {(sp_wilson[1]) . real} \t {(sp_wilson[2])  
. real} \t {(sp_wilson[3]) . real} \n")
```

```
#f.close ()
```

```
#Writing Average Plaquette
```

```
g.write(f" {(sum[i]) . real} \t {p_av} \n")
```

```
f.close ()
```

```
g.close()
```

```
#-----Running the Program-----
```

```
initialize_lattice ()      # Initializing the lattice . Choose 0 or leave blank  
    for cold.Choose 1 for hot start
```

```
MCaverage()
```

---

## A.2 Su(2) python code version 2

---

```
import numpy as np  
np.set_printoptions (precision=16)  
from random_su2 import *  
from numpy.linalg import multi_dot  
from unitarity_check import *  
import copy  
  
N = 7 # N is the number of lattice points for each dimension  
D = 4 #Number of mi, ni arguments  
group_dim = 2 # group_dim is the dimensions of the lattice  
U = np.zeros ((group_dim,group_dim,2*D+1,N**D+1), np.complex128) #4D  
    lattice link variables  
nn = np.zeros((2*D+1,N**D+1),np.int64) #Nearest neighbors  
N_configurations = 10000 #Times of configurations(sweeps) we want to occure  
beta = 6.0 #Coupling constant  
eps = 0.24 #Random parameter that controls the acceptance ratio  
    static_potential_list = [] #Here we save the Static Potential measurements  
plaquete_size = N #The size of the plaquete we want to loop around  
N_thermalazation = 500 #Number of configurations until thermalization  
N_Metropolis = 1 #Number of Metropolis iterations per configuration  
N_Overrelaxation = 0 #Number of Overrelaxation iterations per configuration  
N_Heatbath = 0 #Number of Heatbath iterations per configuration  
  
def nearest_neighbors():  
    x = np.zeros(D+1,np.int64)  
    xnn = np.zeros(D+1,np.int64)  
    for n in range(1,N**D+1):
```

```

LHS = n-1
x[D] = LHS/(N**(D-1))+1

for j in range (D-1,0,-1):
    LHS = LHS - (x[j+1]-1) * N**(j)
    x[j] = LHS / (N**(j-1)) + 1

for mi in range (1,D):
    xnn = copy.copy(x)
    xnn [mi] = x[mi] + 1
    if (xnn[mi] > N):
        xnn[mi] = xnn[mi] - N
    nn [mi,n] = 0

    for j in range(1,D+1):
        nn[mi,n] = nn[mi,n] + (xnn[j]-1) * N**(j-1)
    nn[mi,n] = nn[mi,n] + 1

    xnn[mi] = x[mi] - 1
    if(xnn[mi] < 1 ):
        xnn[mi] = xnn[mi] + N
    nn [-(mi),n] = 0

    for j in range(1,D+1):
        nn[-(mi),n] = nn[-(mi),n] + (xnn[j]-1) * N**(j-1)
    nn [-(mi),n] = nn [-(mi),n] + 1

```

### #Temporal dimension

```

mi = D
xnn = copy.copy(x)
xnn[mi] = x[mi] + 1
if(xnn[mi] > N):
    xnn[mi] = xnn[mi] - N
nn[mi,n] = 0

for j in range(1,D+1):
    nn[mi,n] = nn[mi,n] + (xnn[j]-1) * N**(j-1)
nn[mi,n] = nn[mi,n] + 1

xnn[mi] = x[mi] - 1
if(xnn[mi] < 1 ):
    xnn[mi] = xnn[mi] + N
nn [-(mi),n] = 0

for j in range(1,D+1):
    nn[-mi,n] = nn[-mi,n] + (xnn[j]-1) * N**(j-1)
nn[-mi,n] = nn[-mi,n] + 1

```

```

    print(n, ' || ', nn[:,n])

def initialize_lattice (parameter=0):
    for n in range(0,N**D+1):
        for mi in range(0,D):

            if parameter == 0 :
                U[:,:,mi,n] = np.identity(group_dim)
            else:
                U[:,:,mi,n] = generate_su2_U(eps)

def calculate_staple (n,mi):
    staple = np.zeros((group_dim, group_dim) , np.complex128)

    for ni in range(-D,D + 1):
        if ( ni ==0 or ni == mi or ni == -(mi)):
            continue
        staple += Amn(mi,ni,n)

    return staple

def Amn(mi,ni,n):
    n2 = nn[mi,n]
    n3 = nn[ni,n2]
    n4 = nn[ni,n]

    U2 = U[:,:, ni,n2]
    U3 = U[:,:,-mi,n3]
    U4 = U[:,:,-ni,n4]

    V = U2
    V = np.matmul(V,U3)
    V = np.matmul(V,U4)
    return V

def calculate_S (n,mi,staple):
    trace_of_UA = (np.trace(np.matmul( U[:,:,mi,n], staple))).real
    S = -(beta*trace_of_UA) / group_dim
    return S

def Metropolis(n,mi):
    accept = False

    staple = calculate_staple (n,mi)
    old_link = U[:,:,mi,n].copy()
    old_S = calculate_S(n,mi,staple)

```

```

U[:, :, mi, n] = np.matmul(generate_su2_U(eps), old_link)
new_S = calculate_S(n, mi, staple)
dS = new_S - old_S

#Acceptance Condition
if ( (dS > 0.0) and (np.exp(-dS) < np.random.uniform(0,1)) ):
    U[:, :, mi, n] = old_link
    accept = True

if accept == True:
    U[:, :, -mi, nn[mi, n]] = U[:, :, mi, n].conj().T
#print(U[:, :, mi, n])
#Checking for unitarity violation and re-unitarise if necessary
# U[:, :, mi, n] = check_unitarity(U[:, :, mi, n])

def update_lattice():

    for n in range(1, N**D+1):
        for mi in range(1, D+1):
            for i in range(N_Metropolis):
                Metropolis(n, mi)

def measure_static_potential():
    pmpn = np.zeros(N+2, np.complex128)
    count = np.zeros(N+2, np.int64)
    pm = np.zeros(N**3+1, np.complex128)

    for n in range(1, N**3+1):
        p = calculate_polyakov_line(n)
        pm[n] = np.trace(p)

    for n in range(1, N**3+1):

        for mi in range(1, D):
            m = n
            for r in range(1, N+2):
                pn = pm[m]
                pmpn[r] = pmpn[r] + pm[n]*pn.conj()
                count[r] = count[r] + 1
                m = nn[mi, m]

    return pmpn/count

def calculate_polyakov_line(n):

    mi = D-1
    P = U[:, :, mi, n]
    m = n

```

```

for n in range(0,N-1):
    m = nn[mi,m]
    P = np.matmul(P,U[:,:,mi,n])
return P

def MCaverage():
    sp = []

    for i in range(N_configurations + N_thermalazation):
        update_lattice ()

        #Start measuring after the N_thermalazation configurations
        if (i > N_thermalazation-1):

            sp.append(measure_static_potential() )

        #Printing the results
        #Writing Static Potential
    f = open(f"SP2_M{N_Metropolis}O{N_Overrelaxation}H{N_Heatbath}_N{N}
        _S{N_configurations}_b{beta}", "w")
    for i in range(N_configurations):
        f.write(f"{(sp[i ][1]) . real}\t{(sp[i ][2]) . real}\t{(sp[i ][3]) . real}\t{(sp[
            i ][4]) . real}\t{(sp[i ][5]) . real}\t{(sp[i ][6]) . real}\t{(sp[i ][7]) . real
            }\t{(sp[i ][8]) . real}\n")
    f.close ()

#-----Running the Program-----

initialize_lattice ()          # Initializing the lattice . Choose 0 or leave blank
    for cold.Choose 1 for hot start

MCaverage()

```

---

# Βιβλιογραφία

- [1] H.J. Rothe . *Lattice Gauge Theories*. 3η έκδοση, 2015.
- [2] K. Anagnostopoulos . *Computational Physics*. 2015.
- [3] M.D. Schwartz . *Quantum Field Theory and the Standard Model*. Cambridge University Press, 2014.
- [4] T.A. DeGrand . *Lattice methods for Quantum Chromodynamics*. 2006.
- [5] Fukugita M. και A. Ukawa. ‘Langevin Simulation Including Dynamical Quark Loops’. στο: *Physics Review Letters* 5 (1985).
- [6] A.D.Kennedy και B.J.Pendleton. ‘Improved heat bath method for Monte Carlo calculations in lattice gauge theories’. στο: *Physics Letters* 156B.5,6 (1985).
- [7] J. Bor. *The Glueball spectrum in large- $N$  QCD*. Master thes. Van Swinderen Institute for Particle Physics and Gravity. 2019.
- [8] C. Gattringer και C.B. Lang. *Quantum Chromodynamics on the lattice*. 2010.
- [9] D.Toussaint. *Introduction to Algorithms for Monte Carlo Simulations and their Application to QCD*. lectures presented at the Symposium on New Developments in Hardware and Software for Computational Physics, Buenos Aires. 1988.
- [10] N.Cabbibo και E.Marinari. ‘A new method for updating SU(N) matrices in computer simulations of gauge theories’. στο: *Physics Letters* 119 B.4,5,6 (1982).
- [11] G.G.Batrouni et al. ‘Langevin simulations of lattice field theories’. στο: *Physical Review* 32 D (1985), σ. 2736.
- [12] Donald E. Knuth. ‘Big omicron and big omega and big theta’. στο: *SIGACT News* (1976).
- [13] M.Creuz. ‘Microcanonical Monte Carlo simulation’. στο: *Physical Review* 50.19 (1983).
- [14] M.Creuz. ‘Monte Carlo study of quantized  $SU(2)$  gauge theory’. στο: *Physical Review* 21.8 (1980).
- [15] F. Knechtli M. Günther και M.Peadron. *Lattice Quantum Chromodynamics Practical Essentials*. 2017.
- [16] Yuri Makeenko. ‘A Brief Introduction to Wilson Loops and Large  $N$ ’. στο: *Institute of Theoretical and Experimental Physics, Moscow* (2009).

- [17] Silvia Necco. ‘The static quark potential and scaling behavior of  $SU(3)$  lattice Yang-Mills theory’. Humboldt Universit“at zu Berlin. Διδακτορική διατρ. 2003.
- [18] P.de Forcrand και O.Jahn. *Monte Carlo Overrelaxation for  $SU(N)$  Gauge Theories*. url: <https://arxiv.org/pdf/hep-lat/0503041.pdf>. 2005.
- [19] M. Lüscher και P. Weisz. ‘Computation of the action for on-shell improved lattice gauge theories at weak coupling’. στο: *Physics Letters* (1985).
- [20] M. Lüscher και P. Weisz. ‘On-shell Improved Lattice Gauge Theories’. στο: *Springer* (1985). Commun. Math. Phys.
- [21] R. Rosenfelder. *Path Integrals in Quantum Physics*. Lectures given at ETH Zurich. Paul Scherrer Institute.
- [22] S.L.Adler. ‘Over-relaxation method for Monte Carlo evaluation of the partition function for multiquadratic actions’. στο: *Physics Review 23 D* (1981), σ. 2901.
- [23] S. Solbrig. *Topology in  $SU(2)$  lattice gauge theory and parallelization of functional magnetic resonance imaging*. Διδακτορική διατριβή στις φυσικές επιστήμες από τη Σχολή Φυσικής του Πανεπιστημίου του Regensburg. 2008.
- [24] F.R.Brown και T.J.Woch. ‘Overrelaxed heat bath and Metropolis algorithms for accelerating pure gauge Monte Carlo calculations’. στο: *Physics Review 58* (1987), σ. 2394.
- [25] W.J.Negele. *Monte Carlo Methods for Hadronic Physics*. lectures presented at the International Spring School on Medium and High Energy,Nuclear Physics, Taiwan. 1988.
- [26] G.Parisi και Wu Yongshi. ‘Peturbation theory without gauge fixing’. στο: *Scientia Sinica XXIV.4* (1981).