

25/06/2025

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών Και Φυσικών Επιστημών
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Διπλωματική Εργασία:
Κβαντική Χρωμοδυναμική στο Πλέγμα

Καθηγητής: Κωνσταντίνος Αναγνωστόπουλος
Φοιτητής: Μάγειρος Νικόλας
ΑΜ: ge17040

Contents

1	Εισαγωγή στην Κβαντική Χρωμοδυναμική (QCD) και η Πλεγματική Χρωμοδυναμική	4
1.1	Επισκόπηση της Κβαντικής Χρωμοδυναμικής (QCD)	4
1.2	Προκλήσεις στην QCD και η ανάγκη για το Πλέγμα	4
1.3	Εισαγωγή στην Πλεγματική QCD	4
1.4	Σύντομη ιστορία της Πλεγματικής QCD	5
1.5	Σημασία του Πλέγματος QCD	5
2	Ολοκληρώματα Διαδρομής και Διακριτοποίηση σε Ευκλείδιο Πλέγμα	6
2.1	Ο Χωρος Χίλπερτ και η Ευκλείδια Μετάβαση	6
2.2	Ολοκληρώματα Διαδρομής στη Κβαντομηχανική	6
2.3	Ολοκληρώματα διαδρομής για Βαθμωτά Πεδία	7
2.4	Ο Τελεστής Μετάβασης σε Διακριτό Ευκλείδιο Χρόνο	7
2.5	Διακριτοποίηση και Σφάλματα Διακριτοποίησης	10
2.6	Ολοκληρώματα Διαδρομής ως Μέθοδος Κβάντωσης	13
2.7	Σχέση με Στατιστική Μηχανική	15
2.8	Συνεχές Όριο (Continuum Limit)	17
3	Συνεχής QCD και Θεμελιώδεις Ιδιότητες	20
3.1	Εισαγωγή στη Συνεχή QCD	20
3.2	Λαγκρανζιανή της QCD στο Συνεχές	20
3.2.1	Δομή της Λαγκρανζιανής	20
3.2.2	Συμμετρίες της QCD	21
3.3	Κβάντωση της QCD	21
3.3.1	Ολοκληρώματα διαδρομής με επιλογή βαθμίδας	21
3.3.2	Κανόνες Feynman και Επανακανονικοποίηση	22
3.3.3	Ασυμπτωτική Ελευθερία και Εξέλιξη της Σταθεράς Σύζευξης	23
3.4	Μη Διαταρακτικά Φαινόμενα και Κίνητρο για Διακριτοποίηση σε Πλέγμα	24
3.4.1	Εγκλωβισμός (Confinement)	24
3.4.2	Χειρόμορφη Διάσπαση Συμμετρίας και Συμπύκνωμα	25
3.4.3	Τοπολογικές Δομές, Ανωμαλίες και Ινστατόνια (Instantons)	25
3.4.4	Θερμοδυναμική QCD	26
3.5	Σχέση Συνεχούς QCD και Πλεγματικής QCD	26
3.5.1	Στόχος της Διακριτοποίησης σε Πλέγμα	26
3.5.2	Όριο Συνεχούς και Επανακανονικοποίηση στη Πλεγματική QCD	27
3.5.3	Κατασκευή Διακριτών Τελεστών και Ευκλείδιες Συσχετίσεις	29
3.5.4	Πρακτικά Βήματα	30
4	Διακριτοποίηση Πεδίων Βαθμίδας στο Ευκλείδιο Πλέγμα	30
4.1	Μεταβλητές Σύνδεσης ως Παράγοντες Παράλληλης Μεταφοράς	31
4.1.1	Ορισμός	31
4.1.2	Δράση πάνω σε πεδία	31
4.1.3	Μετασχηματισμοί βαθμίδας	32

4.1.4	Ιδιότητες	32
4.2	Πλακέτα και Δράση Wilson	32
4.2.1	Ορισμός Πλακέτας	32
4.2.2	Δράση Wilson	32
4.3	Το Συνεχές Όριο και Τεχνικές Βελτίωσης	33
4.3.1	Ανάπτυγμα Ισχυρής Σύζευξης	33
4.3.2	Βελτίωση κατά Symanzik	33
4.3.3	Κανονικοποίηση τύπου Tadpole	34
4.4	Καθορισμός της Φυσικής Κλίμακας	34
4.4.1	Μέθοδοι Καθορισμού Κλίμακας	34
4.4.2	Εξάρτηση από το β	35
4.4.3	Θερμοδυναμικά Μεγέθη	35
4.5	Βρόχοι Wilson και το Φαινόμενο του εγκλωβισμού	35
4.5.1	Ορισμός Βρόχου Wilson	35
4.5.2	Δυναμικό Κουάρκ–Αντικουάρκ	35
4.5.3	Area Law και Εγκλωβισμός	36
4.5.4	Σχέση με Θερμοδυναμική και Βρόχο Polyakov	36
5	Αριθμητικές Προσομοιώσεις και Αλγόριθμοι Δειγματοληψίας στο Πλέγμα	36
5.1	Η μέθοδος Metropolis και Θερμική Ισορροπία	37
5.1.1	Θεώρημα του Detailed Balance Condition	37
5.1.2	Υλοποίηση Single-Link	37
5.1.3	Εξισορρόπηση (Thermalization)	37
5.1.4	Αυτοσυσχέτιση	38
5.2	Αλγόριθμος Heat Bath και Overrelaxation	38
5.2.1	Heat Bath για SU(2)	38
5.2.2	Heat Bath για SU(3) (Cabibbo–Marinari)	40
5.3	Overrelaxation	40
5.3.1	Overrelaxation SU(2)	40
5.3.2	Overrelaxation SU(3)	41
5.3.3	Κριτήρια και Παρατηρήσεις	41
5.3.4	Αυτοσυσχέτιση και Σύγκριση με Metropolis	41
5.3.5	Σημειώσεις για Υλοποίηση και Βελτιστοποίηση	41
5.4	Hybrid Monte Carlo (HMC)	42
5.5	Αυτοσυσχετισμοί και Υπολογισμός Σφαλμάτων	42
5.5.1	Συνάρτηση Αυτοσυσχετισμού	42
5.5.2	Ενσωματωμένος Χρόνος Αυτοσυσχετισμού	43
5.5.3	Σφάλμα Μέσου όρου Αυτοσυσχετισμού	43
5.5.4	Blocking	43
5.5.5	Jackknife	44
5.5.6	Bootstrap	44
5.5.7	Επιλογή Μεθόδου και Πρακτικά Βήματα	45

6	Φερμιόνια στο Πλέγμα: Διακριτοποίηση, Διπλασιασμός και Χειρόμορφη Συμμετρία	45
6.1	Διακριτοποίηση του Τελεστή Dirac	46
6.2	Μέθοδοι Αντιμετώπισης του Διπλασιασμού	47
6.2.1	Φερμιόνια Wilson	47
6.2.2	Staggered φερμιόνια	48
6.2.3	Φορμαλισμός Ginsparg–Wilson	49
6.3	Χειρόμορφη Συμμετρία στο Πλέγμα	49
6.3.1	Ginsparg–Wilson Relation και Ακριβής Χειρόμορφη Συμμετρία	49
6.3.2	Θεώρημα δείκτη σε Πλέγμα	50
6.3.3	Ανάλυση Ανωμαλιών και Τοπολογικό Φορτίο	51
6.4	Συγκριτική Αξιολόγηση και Πρακτικές Επιπτώσεις	52
6.4.1	Υπολογιστικές Προκλήσεις και Αποτελεσματικοί Επιλυτές	52
6.4.2	Φερμιονικός Όρος Δράσης και Ορίζουσα	53

1 Εισαγωγή στην Κβαντική Χρωμοδυναμική (QCD) και η Πλεγματική Χρωμοδυναμική

1.1 Επισκόπηση της Κβαντικής Χρωμοδυναμικής (QCD)

Η Κβαντική Χρωμοδυναμική (QCD) είναι η θεμελιώδης θεωρία που περιγράφει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των κουάρκ και των γλουονίων, των στοιχειωδών συστατικών των αδρονίων, όπως τα πρωτόνια και τα νετρόνια. Η QCD είναι μια μη-Αβελιανή θεωρία βαθμίδας, βασισμένη στη συμμετρία $SU(3)$ που εξασφαλίζει ότι τα κουάρκ αλληλεπιδρούν μέσω της ανταλλαγής γλουονίων. Αυτά τα γλουόνια φέρουν το χρωματικό φορτίο, το οποίο είναι το αντίστοιχο του ηλεκτρικού φορτίου στην Κβαντική Ηλεκτροδυναμική (QED).

Η QCD εξηγεί επιτυχώς πολλά φαινόμενα στη φυσική των σωματιδίων, όπως τη συγκράτηση των κουάρκ μέσα στα αδρόνια και την ασυμπτωτική ελευθερία των κουάρκ σε υψηλές ενέργειες, αφού συμπεριφέρονται σαν σχεδόν ελεύθερα σωματίδια. Εντούτοις, η συγκράτηση των κουάρκ είναι ένα από τα σημαντικότερα θέματα που δεν μπορεί να αντιμετωπιστεί με τις μεθόδους της θεωρίας διαταραχών, γι' αυτό καθιστά απαραίτητη τη μελέτη των μη-διαταραχτικών πτυχών.

1.2 Προκλήσεις στην QCD και η ανάγκη για το Πλέγμα

Ενώ η θεωρία διαταραχών της QCD έχει σημειώσει μεγάλη επιτυχία στην υψηλή ενέργεια, η θεωρία γίνεται μη-διαταραχτική σε χαμηλές ενέργειες, κάτι που εμποδίζει τη χρήση των παραδοσιακών τεχνικών με τα διαγράμματα Feynman. Η ισχυρή σταθερά σύζευξης αυξάνεται καθώς η ενέργεια μειώνεται, οδηγώντας στη συγκράτηση των κουάρκ και των γλουονίων μέσα στα αδρόνια. Αυτή η ιδιότητα, γνωστή ως συγκράτηση χρώματος, δεν μπορεί να περιγραφεί μέσω της θεωρίας διαταραχών.

Για να μελετηθεί η QCD σε χαμηλές ενέργειες, απαιτείται μια μη-διαταραχτική προσέγγιση. Εδώ εισέρχεται το Πλέγμα QCD. Το 1974, ο Kenneth Wilson πρότεινε τη διακριτοποίηση του χωροχρόνου σε ένα πλέγμα, επιτρέποντας την QCD να διατυπωθεί με τρόπο που είναι κατάλληλος για υπολογιστικές προσομοιώσεις. Σε αυτή τη διατύπωση, τα κουάρκ τοποθετούνται στις κορυφές του πλέγματος, ενώ τα γλουόνια (που αντιπροσωπεύονται από πλεγματικούς δεσμούς) ζουν στα συνδυαστικά στοιχεία μεταξύ των κορυφών.

1.3 Εισαγωγή στην Πλεγματική QCD

Η πλεγματική QCD είναι μια διακριτοποίηση της QCD σε έναν ευκλείδειο χωροχρόνο. Σε αυτή τη διατύπωση, το συνεχές του χωροχρόνου αντικαθίσταται από ένα πεπερασμένο δίκτυο σημείων. Η δράση της QCD εκφράζεται μέσω των βαθμωτών πεδίων (γλουόνια), που αντιπροσωπεύονται από πλεγματικούς δεσμούς $U_\mu(x)$, και των φερμιονικών πεδίων (κουάρκ), που αντιπροσωπεύονται από μεταβλητές Grassmann. Αυτή η διακριτοποίηση επιτρέπει την αριθμητική αξιολόγηση των ολοκληρωμάτων διαδρομών της QCD μέσω των μεθόδων Monte Carlo.

Η προσέγγιση μέσω του πλέγματος διασφαλίζει ότι η QCD διατηρεί τη βαθμωτή συμμετρία της, αλλά εισάγει επίσης προκλήσεις, όπως το πρόβλημα διπλασιασμού των φερμιονίων και σφάλματα διακριτοποίησης. Για την αντιμετώπιση αυτών των προβλημάτων, έχουν αναπτυχθεί διάφορες διατυπώσεις των φερμιονίων στο πλέγμα, όπως τα Wilson φερμιόνια, τα Kogut-Susskind

(Staggered) φερμιόνια, τα φερμιόνια Kaplan (Domain Wall) και τα φερμιόνια στρεπτής μάζας (Twisted Mass).

1.4 Σύντομη ιστορία της Πλεγματικής QCD

Η ανάπτυξη της πλεγματικής QCD έχει χαρακτηριστεί από σημαντικές θεωρητικές και υπολογιστικές εξελίξεις. Η αρχική διατύπωση του Wilson το 1974 αποτέλεσε το πρώτο βήμα στη διακριτοποίηση της QCD, αλλά χρειάστηκαν πολλά χρόνια για να βελτιωθούν οι μέθοδοι και να επιτευχθούν αξιόπιστα αριθμητικά αποτελέσματα. Σημαντικά ορόσημα στην ανάπτυξη της πλεγματικής QCD περιλαμβάνουν:

- Προσομοιώσεις Monte Carlo: Εισήχθησαν για την αντιμετώπιση των μεγάλων υπολογιστικών απαιτήσεων που χρειάζονται για τους υπολογισμούς στο πλέγμα.
- Wilson φερμιόνια και δράσεις βαθμωτών πεδίων: Αντιμετώπισαν ζητήματα όπως το διπλασιασμό των φερμιονίων και τη διακριτοποίηση των πεδίων βαθμίδας.
- Υβριδικός Monte Carlo (HMC): Επανάσταση στις δυνατότητες προσομοίωσης της QCD με δυναμικά κουάρκ, επιτρέποντας πιο ρεαλιστικές προσομοιώσεις.

Τις τελευταίες δεκαετίες, η προσομοίωση του πλέγματος έχει σημειώσει μεγάλη πρόοδο, με τις προσομοιώσεις να είναι πλέον ικανές να υπολογίζουν τις μάζες των αδρονίων, τα πλάτη σκέδασης και τις θεμελιώδεις παραμέτρους της QCD με ολοένα αυξανόμενη ακρίβεια.

1.5 Σημασία του Πλέγματος QCD

Η πλεγματική QCD έχει εξελιχθεί στο κύριο εργαλείο για τη μελέτη της μη-διαταρακτικής περιοχής της QCD. Επιτρέπει τον υπολογισμό των μαζών των αδρονίων, των σταθερών αποσύνθεσης, και άλλων παρατηρούμενων με βάση τις θεμελιώδεις εξισώσεις της QCD (Λανγκρατζιανή QCD, αναλλοίωτη παράγωγος, συμμετρία βαθμίδας, τανυστής δυναμικού πεδίου γλουονίου). Σημαντικές επιτυχίες της πλεγματικής QCD περιλαμβάνουν:

- Φασματοσκοπία Αδρονίων: Πρόβλεψη και επιβεβαίωση των μαζών των αδρονίων.
- Μάζες Κουάρκ: Ακριβής προσδιορισμός των μαζών των κουάρκ u, d, s, c .
- Ισχυρή Σταθερά Σύζευξης: Προσδιορισμός της εξέλιξης της ισχυρής σταθεράς σύζευξης σε διαφορετικές κλίμακες ενέργειας.
- Δομή Νουκλεονίων: Παροχή πληροφοριών για την εσωτερική δομή των πρωτονίων και των νετρονίων.

Επιπλέον, η πλεγματική QCD παίζει κρίσιμο ρόλο στην κατανόηση της συμπεριφοράς της QCD σε πεπερασμένες θερμοκρασίες, που είναι σημαντική για τη μελέτη του πρώιμου σύμπαντος και των συγκρούσεων βαρέων ιόντων, όπως αυτές που παρατηρούνται στον Μεγάλο Επιταχυντή Αδρονίων (LHC).

2 Ολοκληρώματα Διαδρομής και Διακριτοποίηση σε Ευκλείδιο Πλέγμα

2.1 Ο Χώρος Χίλμπερτ και η Ευκλείδια Μετάβαση

Ο χώρος των καταστάσεων σε κβαντική θεωρία πεδίων περιγράφεται από ένα χώρο Χίλμπερτ $\mathcal{H}$, στο οποίο κάθε φυσική κατάσταση αντιστοιχεί σε διανύσμα με ορισμένη νόρμα. Στην παραδοσιακή Minkowski διατύπωση, η χρονική εξέλιξη καθορίζεται από τον τελεστή εξέλιξης e^{-iHt} , όπου H η Χαμιλτονιανή της θεωρίας. Ως μέσο για τη μελέτη μη-διαταρακτικών φαινομένων, προτιμάται η Ευκλείδια προσέγγιση: με περιστροφή Wick $t \mapsto -i\tau$, ο πίνακας εξέλιξης γίνεται ο πίνακας μεταφοράς $e^{-H\tau}$. Το πλάτος μετάβασης μεταξύ δύο καταστάσεων $|\psi_i\rangle$ και $|\psi_f\rangle$ στον Ευκλείδιο χρόνο $T = \tau_f - \tau_i$ εκφράζεται από τον πίνακα μεταφοράς e^{-HT} . Η σύνδεση με φορμαλισμό του χώρου Χίλμπερτ επιτρέπει την κατασκευή πίνακα μεταφοράς, μέσω του οποίου η διακριτοποιημένη Ευκλείδια δράση αναλύεται σε παράγοντες $e^{-aH_{\text{lattice}}}$, όπου a το διακριτό βήμα. Ο πίνακας μεταφοράς πρέπει να είναι αυτοσυζυγής και να έχει μη αρνητικό φάσμα, ώστε οι Ευκλείδιες συναρτήσεις συσχέτισης να μειώνονται εκθετικά ως $e^{-E_n\tau}$, δίνοντας άμεσα πληροφορίες για τις ενέργειες E_n των φυσικών καταστάσεων.

2.2 Ολοκληρώματα Διαδρομής στη Κβαντομηχανική

Έστω ένα κβαντομηχανικό σύστημα με βαθμωτή συντεταγμένη $q(t)$ και Χαμιλτονιανή $H = \frac{p^2}{2m} + V(q)$. Το πλάτος μετάβασης $\langle q_f, t_f | q_i, t_i | q_f, t_f | q_i, t_i \rangle$ γράφεται ως $\langle q_f | e^{-iH(t_f-t_i)} | q_i \rangle \langle q_f | e^{-iH(t_f-t_i)} | q_i \rangle$. Με περιστροφή Wick $t \rightarrow -i\tau$, προκύπτει $\langle q_f | e^{-H(\tau_f-\tau_i)} | q_i \rangle \langle q_f | e^{-H(\tau_f-\tau_i)} | q_i \rangle$. Η εφαρμογή της φόρμουλας Trotter¹ επιτρέπει τη διακριτοποίηση του Ευκλείδιου χρόνου σε N βήματα μήκους a , με $T = Na$. Συγκεκριμένα,

$$e^{-HT} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-Ha} \right)^N \approx \lim_{N \rightarrow \infty} \left(e^{-T(a)} e^{-V(a)} \right)^N + O(a^2),$$

όπου $T(a)$ και $V(a)$ αντιστοιχούν σε τμηματικές εφαρμογές της κινητικής και της δυναμικής ενέργειας. Αν διακριτοποιήσουμε τις ενδιάμεσες καταστάσεις μέσω $q_n = q(\tau_i + na)$, τότε το πλάτος μετάβασης αναπαριστάται ως πολλαπλό ολοκλήρωμα:

$$\langle q_f, \tau_f | q_i, \tau_i | q_f, \tau_f | q_i, \tau_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^{N-1} dq_n \exp \left[- \sum_{n=0}^{N-1} L_E(q_n, q_{n+1}; a) \right],$$

όπου $q_0 = q_i$, $q_N = q_f$ και $L_E(q_n, q_{n+1}; a)$ η διακριτή Ευκλείδια Λαγκραντζιανή, που για μικρό a προσεγγίζει $L_E \approx \frac{m}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{a} \right)^2 + V\left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2}\right)$. Στον όρο δυναμικού $V(q) = 0$, το

¹Ο τύπος Trotter (Trotter product formula) για δύο αυτοσυζυγής τελεστές A και B ορίζει ότι

$$e^{t(A+B)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{\frac{t}{n}A} e^{\frac{t}{n}B} \right)^n,$$

υπό κατάλληλες συνθήκες (π.χ. αυτοσυζυγής τελεστές σε χώρο Hilbert). Η βελτίωση Strang 2ης τάξης δίνει

$$e^{t(A+B)} = e^{\frac{t}{2}A} e^{tB} e^{\frac{t}{2}A} + O(t^3).$$

Γκαουσιανό ολοκλήρωμα αξιολογείται αναλυτικά, ενώ σε αλληλεπιδρώντα συστήματα διατυπώνεται με ανάπτυξη σε σειρά. Στο όριο $a \rightarrow 0$ προκύπτει η συνεχής Ευκλείδια δράση $S_E[q] = \int d\tau [\frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q)]$.

2.3 Ολοκληρώματα διαδρομής για Βαθμωτά Πεδία

Η γενίκευση σε θεωρία πεδίου εισάγει βαθμωτό πεδίο $\phi(\mathbf{x}, t)$. Στην Ευκλείδια μορφή, η δράση γράφεται

$$S_E[\phi] = \int d\tau \int d^d x \left[\frac{1}{2}(\partial_\tau \phi)^2 + \frac{1}{2}(\nabla \phi)^2 + V(\phi) \right].$$

Η διακριτοποίηση στο πλέγμα αντικαθιστά το συνεχές $(\mathbf{x}, \tau)$ από κόμβους $n = (n_1, \dots, n_{d+1})$ στο Ευκλείδιο $(d+1)$ -διάστατο πλέγμα βήματος a . Οι παραγώγοι προσεγγίζονται με κεντρικές διαφορές:

$$\partial_\mu \phi(x) \rightarrow \frac{\phi(n + \hat{\mu}) - \phi(n - \hat{\mu})}{2a}, \quad x = na,$$

με αποτέλεσμα την διακριτή δράση

$$S_E[\phi] = a^{d+1} \sum_n \left[\frac{1}{2a^2} \sum_{\mu=1}^{d+1} \left(\phi(n + \hat{\mu}) - \phi(n) \right)^2 + V(\phi(n)) \right].$$

Για το δυναμικό $V(\phi) = \frac{1}{2}m^2\phi^2$, η μορφή είναι Γκαουσιανή και οι συσχετίσεις μπορούν να υπολογιστούν αναλυτικά σε διακριτό χώρο. Σε αλληλεπιδρώντα πεδία, το ολοκλήρωμα διαδρομής γίνεται αντικείμενο Monte Carlo δειγματοληψίας. Οι οριακές συνθήκες επιλέγονται ως περι-οδικές στις χωρικές διαστάσεις, ενώ στον Ευκλείδιο χρόνο μπορεί να είναι περιοδικές ή αντιπεριοδικές, ανάλογα με τη φύση των πεδίων (π.χ. βαθμωτά ή φερμιονικά) και την επιθυμητή μελέτη θερμοκρασίας.

2.4 Ο Τελεστής Μετάβασης σε Διακριτό Ευκλείδιο Χρόνο

Η κατασκευή και θεμελίωση του πίνακα μεταφοράς (transfer matrix) σε πλέγμα βασίζεται στην ιδέα ότι η Ευκλείδια δράση μπορεί να διασπαστεί σε στρώματα κατά μήκος της χρονικής διάστασης, καθένα πάχους a . Συγκεκριμένα, θεωρούμε τον Ευκλείδιο χρόνο χωρισμένο σε N_τ βήματα, με συνολική χρονική έκταση $\beta = aN_\tau$. Για κάθε ζεύγος συνεχόμενων στρωμάτων χρονικής θέσης τ και $\tau + a$, εισάγουμε έναν τελεστή μετάβασης T που αναπαριστά την εξέλιξη της κατάστασης κατά διάστημα a . Η βασική απαιτούμενη αναπαράσταση είναι:

$$T = e^{-aH_{\text{lattice}}},$$

όπου H_{lattice} είναι ο διακριτός Χαμιλτονιανός τελεστής, ο οποίος επιλέγεται κατά τρόπο ώστε:

- Ο T να είναι αυτοσυζυγής (self-adjoint) ή, πιο σωστά, θετικά αυτοσυζυγής τελεστής στο κατάλληλο χώρο καταστάσεων, εξασφαλίζοντας ότι οι ιδιοτιμές του T είναι μη αρνητικές και πραγματικές.

- Στο όριο $a \rightarrow 0$, ο H_{lattice} να συγκλίνει προς τη Χαμιλτονιανή της συνεχούς θεωρίας, έτσι ώστε η θεωρία στο πλέγμα να αναπαράγει τη σωστή φασματική δομή της QCD στο συνεχές.
- Ο τελεστής $e^{-aH_{\text{lattice}}}$ να προκύπτει ακριβώς από τη διακριτοποίηση της Ευκλείδιας δράσης κατά στρώματα, διατηρώντας την τοπικότητα και τις απαιτούμενες συμμετρίες.

Η διακριτοποίησης συνήθως έχει τη μορφή:

1. *Διαχωρισμός δράσης σε χρονικά στρώματα:* Η Ευκλείδια δράση $S_E[\Phi]$ γράφεται ως άθροισμα όρων που περιέχονται σε στρώματα χρονικής θέσης $\tau_n = na$. Στο καθένα, η συμβολή εξαρτάται από τις ρυθμίσεις του πεδίου στις χρονικές θέσεις τ_n και τ_{n+1} . Επομένως:

$$S_E[\Phi] = \sum_{n=0}^{N_\tau-1} S_{\text{layer}}[\Phi(\tau_n), \Phi(\tau_{n+1})].$$

Ο όρος S_{layer} ² συνδυάζει χωρικές παραμορφώσεις (π.χ. χωρική δράση gauge ή πεδίου) και όρους που «συνδέουν» τις ρυθμίσεις στα δύο στρώματα (π.χ. χρονικές διαφοροποιήσεις ή hopping terms).

2. *Ορισμός πίνακα μεταφοράς:* Με βάση τη διακριτοποίηση, ορίζουμε έναν τελεστή T στον χώρο των καταστάσεων τέτοιο ώστε η συμβολή ενός στρώματος να αντιστοιχεί στο στοιχείο μήτρας $\langle \Phi(\tau_{n+1}) | T | \Phi(\tau_n) \rangle$. Δηλαδή:

$$\langle \Phi(\tau_{n+1}) | T | \Phi(\tau_n) \rangle \propto \exp(-S_{\text{layer}}[\Phi(\tau_n), \Phi(\tau_{n+1})]).$$

Συνεπώς, η πλήρης συνεισφορά του Ευκλείδιου ολοκληρώματος διαδρομής είναι:

$$Z = \int \prod_{n=0}^{N_\tau-1} \mathcal{D}\Phi(\tau_n) \prod_{n=0}^{N_\tau-1} \langle \Phi(\tau_{n+1}) | T | \Phi(\tau_n) \rangle,$$

με $\Phi(\tau_{N_\tau}) \equiv \Phi(\tau_0)$ σε θερμοδυναμικές μελέτες (περιοδικές οριακές συνθήκες στον Ευκλείδιο χρόνο για μποζόνια). Από $T = e^{-aH_{\text{lattice}}}$ εξάγεται ότι η πολλαπλή εφαρμογή $T^{N_\tau} = e^{-aN_\tau H_{\text{lattice}}} = e^{-\beta H_{\text{lattice}}}$ αντιστοιχεί στο θερμικό ίχνος:

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H_{\text{lattice}}}]$$

3. *Ιδιότητες του H_{lattice} και η θετική ανακλαστικότητα (Reflection Positivity):* Για να διασφαλιστεί ότι το αντίστοιχο Minkowski φασματικό πρόβλημα είναι καλά ορισμένο, απαιτείται reflection positivity στην Ευκλείδια διατύπωση. Έτσι, ο T πρέπει να είναι θετικά ορισμένος τελεστής, εξασφαλίζοντας ότι οι ιδιοτιμές e^{-aE_n} με $E_n \geq 0$ είναι πραγματικές και ≤ 1 . Στο πλέγμα, αυτό επιτυγχάνεται επιλέγοντας τη διακριτή δράση ώστε να σέβεται συμμετρία ανακλαστικότητας και την τοπικότητα. Το αποτέλεσμα είναι ότι ο H_{lattice} είναι αυτοσυζυγής με φάσμα $E_n \geq 0$, και οι Ευκλείδιες συσχετίσεις φθίνουν εκθετικά με ρυθμό καθοριζόμενο από E_n .

²Το S_{layer} μετράει πόση «δράση» συγκεντρώνεται σε μία μόνο 3-διάστατη τομή του τετραδιάστατου πλέγματος. Χρησιμοποιείται για να δείχνει η κατανομή της ενέργειας στον χρόνο (π.χ. στη μελέτη θερμοδυναμικών μεγεθών ή στην παρακολούθηση τοπικών ταλαντώσεων του πεδίου).

4. *Εξαγωγή φάσματος από Ευκλείδιες Συσχετίσεις*: Θεωρούμε κάποιον διακριτό τελεστή O_{lattice} που δημιουργεί/καταστρέφει την κατάλληλη κατάσταση από το κενό (π.χ. τελεστής δημιουργίας/καταστροφής (interpolating) για αδρόνια). Στο πλαίσιο αυτό ο Ευκλείδιος πίνακα μεταφοράς:

$$C(\tau) = \langle O(\tau) O(0) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[e^{-(\beta-\tau)H_{\text{lattice}}} O e^{-\tau H_{\text{lattice}}} O \right].$$

Για $\beta \gg \tau \gg a$, εκτιμούμε:

$$C(\tau) \approx \sum_n |\langle 0|O|n \rangle|^2 e^{-E_n \tau},$$

όπου $\{|n\rangle\}$ οι ιδιοκαταστάσεις του H_{lattice} με ιδιοτιμές E_n . Σε μεγάλο τ , κυριαρχεί η ελάχιστη μη μηδενική ιδιοτιμή E_1 , η οποία ταυτίζεται με τη μάζα της ελαφρότερης κατάστασης με τους χβαντικούς αριθμούς του O . Έτσι, από την εκθετική πτώση του $C(\tau)$ προσδιορίζουμε τη μάζα:

$$C(\tau) \propto e^{-m\tau} \quad (\text{για } \tau \gg a),$$

όπου $m = E_1$. Αντίστοιχα, με την μέθοδο των μεταβολών (variational method) υπολογίζουμε ανώτερα επίπεδα $E_2, E_3, \dots$.

5. *Σχέση με Συνεχή Θεωρία και $a \rightarrow 0$* : Στο όριο $a \rightarrow 0$, το H_{lattice} πρέπει να προσεγγίζει τον συνεχή Χαμιλτονιανό τελεστή της QCD στο συνεχές, ώστε τα E_n να τείνουν στις πραγματικές μάζες/αδρονιακά επίπεδα ενέργειας της συνεχούς θεωρίας. Στην πράξη, επαναλαμβάνουμε τις μετρήσεις ευκλείδειων συσχετίσεων σε πλέγματα με διαφορετικά a , εκτελούμε εξαγωγή στο συνεχές $m(a) = m_{\text{cont}} + c a^p + \dots$. Η ιδιότητα της «θετικής ανάκλασης» εξασφαλίζει ότι η παραπάνω σύνδεση είναι καλά θεμελιωμένη.

6. *Θερμοδυναμική Εφαρμογή*: Όταν μελετάμε θερμοδυναμικά μεγέθη, κρατάμε σταθερή θερμοκρασία $T = 1/(aN_\tau)$. Ο πίνακας μεταφοράς $T = e^{-aH_{\text{lattice}}}$ εφαρμόζεται σε κύκλο Ευκλείδιου χρόνου συνολικού μήκους $\beta = aN_\tau$. Τα φαινόμενα αποδέσμευσης (deconfinement) και αποκατάστασης χειρόμορφης συμμετρίας αναλύονται με μέτρηση κατανομών Polyakov loop³ και συμπυκνώματος $\langle \psi \psi \rangle$, αξιοποιώντας τη σύνδεση μεταξύ του φορμαλισμού του πίνακα μεταφοράς και της συνάρτησης επιμερισμού $\text{Tr} [e^{-\beta H_{\text{lattice}}}]$.

7. *Πρακτικές Σημειώσεις για Κατασκευή H_{lattice}* :

- Για τη θεωρία βαθμωτών πεδίων: ο H_{lattice} προκύπτει από τη διακριτοποίηση του συνεχούς, κανονικοποιημένου Χαμιλτονιανού τελεστή, αντικαθιστώντας τους χωρικούς και χρονικούς παραγωγούς των πεδίων με πεπερασμένες διαφορές.
- Για βαθμωτή θεωρία: απαιτείται προσοχή στην τελική μορφή του H_{lattice} ώστε να παραμένει αναλλοίωτος υπό μετασχηματισμούς βαθμίδας ή, σε φορμαλισμό επιλεγμένης βαθμίδας,

³ Δίνεται η κατανομή των Polyakov loops $P(L)$ ως

$$P(L) = \langle \delta(L - P(\mathbf{x})) \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{x}} \langle \delta(L - P(\mathbf{x})) \rangle,$$

όπου

$$P(\mathbf{x}) = \frac{1}{N_c} \text{Tr} \prod_{t=0}^{N_t-1} U_0(t, \mathbf{x}),$$

και η μέση τιμή λαμβάνεται πάνω σε όλες τις διαμορφώσεις.

η BRST ⁴ συμμετρία στην διαταραχτική μελέτη. Στις μη-διαταραχτικές Monte Carlo μετρήσεις δεν χρειάζεται ρητή φόρμουλα H_{lattice} , αρκεί να γνωρίζουμε ότι ο αντίστοιχος πίνακας μεταφοράς υπάρχει με τις σωστές ιδιότητες (reflection positivity).

- Σε φερμιονικά συστήματα, ο ορισμός του πίνακα μεταφοράς απαιτεί συχνά επιπλέον τεχνικές (π.χ. staggered ή Wilson fermions), ώστε ο H_{lattice} να είναι ερμιτιανός και να μην εισάγονται ψευδοκαταστάσεις.

Συνοψίζοντας, η λεπτομερής θεμελίωση του πίνακα μεταφοράς στο Ευκλείδιο πλέγμα εξασφαλίζει την αξιόπιστη εξαγωγή φασματικών δεδομένων (μάζες, επίπεδα διεγέρσεων) από τις Ευκλείδειες συσχετίσεις. Η ικανότητα κατασκευής ενός H_{lattice} με θετικές ιδιοτιμές και σωστή συμπεριφορά των $a \rightarrow 0$ είναι θεμελιώδης για τη συνέπεια της πλεγματικής QCD ως μη-διαταραχτική μέθοδο.

2.5 Διακριτοποίηση και Σφάλματα Διακριτοποίησης

Η διακριτοποίηση (lattice discretization) στο χώρο-χρόνο εισάγει αντικαταστάσεις των παραγώγων από διακριτές διαφορές, με αποτέλεσμα να υπάρχουν σφάλματα διακριτοποίησης (lattice artefacts) που εξαρτώνται από το βήμα a του πλέγματος. Παρακάτω αναλύουμε με μεγαλύτερη λεπτομέρεια τις βασικές τεχνικές διακριτοποίησης και τους τρόπους μείωσης των σφαλμάτων διακριτοποίησης μέσω βελτιώσεων (improvement).

Διακριτοποίηση παραγώγων για βαθμωτό πεδίο

Έστω ένα βαθμωτό πεδίο $\phi(x)$ στο συνεχές χώρο-χρόνο. Αντικαθιστούμε τις παραγώγους με κεντρικές διαφορές. Π.χ. για την πρώτη παράγωγο κατά τη διεύθυνση μ :

$$\partial_\mu \phi(x) \longrightarrow \frac{\phi(x + a\hat{\mu}) - \phi(x - a\hat{\mu})}{2a}.$$

Ο δεύτερος διαφορικός τελεστής (Laplacian) προσεγγίζεται από σχήμα 3-σημείων (3-point stencil):

$$\partial_\mu^2 \phi(x) \longrightarrow \frac{\phi(x + a\hat{\mu}) - 2\phi(x) + \phi(x - a\hat{\mu})}{a^2},$$

με τη συνολική Λαπλασιανή $-\partial^2 \phi(x) = \sum_\mu -\partial_\mu^2 \phi(x)$. Η ακρίβεια αυτής της προσέγγισης έχει σφάλματα τάξης $O(a^2)$: όταν $a \rightarrow 0$, το σφάλμα τείνει στο 0 αφού έχει εξάρτηση ως a^2 .

Για ακόμη μεγαλύτερη ακρίβεια, χρησιμοποιούνται ευρύτερα διακριτά σχήματα (extended stencils), π.χ. 5-σημείων ή 7-σημείων για τη δεύτερη παράγωγο, που εμπλέκουν τις τιμές $\phi(x \pm 2a\hat{\mu})$ κ.ά. Τέτοια σχήματα έχουν σφάλματα $O(a^4)$ ή υψηλότερης τάξης, αλλά απαιτούν περισσότερες γειτονικές συνεισφορές στο πλέγμα.

Symanzik βελτίωση και Ενεργώς Θεωρία των σφαλμάτων

Στο πλαίσιο της θεωρίας Symanzik των σφαλμάτων διακριτοποίησης, η διακριτή δράση S_{lattice}

⁴Η BRST είναι η συμμετρία που διασφαλίζει τη συνέπεια και την ανεξαρτησία των προβλέψεων από την επιλογή βαθμίδας στις θεωρίες βαθμίδας, επιτρέποντας τον διαχωρισμό των φυσικών από τις μη φυσικές καταστάσεις.

θεωρείται ότι προκύπτει από τη συνεχή δράση S_{const} συν όρους διόρθωσης υψηλότερης διάστασης, πολλαπλασιασμένους με a^n . Συμβολικά:

$$S_{\text{lattice}} = S_{\text{cont}} + a S_1 + a^2 S_2 + \dots,$$

όπου οι S_i περιέχουν όρους τοπικών τελεστών διάστασης $d + i$. Η τάξη του πρωτεύοντος σφάλματος $O(a)$ ή $O(a^2)$ εξαρτάται από την επιλογή διακριτοποίησης και τις συμμετρίες (π.χ. χειρόμορφη συμμετρία). Μέσω κατάλληλων βελτιώσεων στη δράση (Symanzik improvement) μπορούμε να εξαλείψουμε όρους έως τάξη a ή a^2 , οδηγώντας σε ταχύτερη σύγκλιση στο συνεχές όριο.

Διακριτοποίηση πεδίου βαθμίδας (βαθμωτή δράση Wilson και βελτιωμένες δράσεις) Στην θεωρία βαθμίδας, η δράση βαθμίδας Wilson χρησιμοποιεί τον βρόχο πλακέτας (plaquette) για την προσέγγιση του όρου $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$. Συγκεκριμένα, για ομάδα βαθμίδας SU(3):

$$S_{\text{gauge}} = \frac{\beta}{3} \sum_{n, \mu < \nu} \text{Re Tr} [1 - U_{\mu\nu}(n)],$$

όπου $U_{\mu\nu}(n)$ ο βρόχος πλακέτας στη θέση n . Σε ανάπτυξη γύρω από το όριο $a \rightarrow 0$, η δράση Wilson αναπαράγει

$$\frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu}$$

συν σφάλματα $O(a^2)$.

Για μείωση των σφαλμάτων $O(a^2)$, χρησιμοποιούνται βελτιωμένες δράσεις βαθμίδας (Symanzik-improved), όπως η Lüscher–Weisz δράση⁵, που περιλαμβάνει κλειστές καμπύλες μεγαλύτερου σχήματος (rectangle 1×2 , parallelogram κ.ά.) με κατάλληλους συντελεστές βάρους. Αυτές οι επιπλέον κλειστές καμπύλες σχεδιάζονται ώστε, όταν το $a \rightarrow 0$, να εξαλείφουν τους όρους $O(a^2)$ από το ανάπτυγμα Taylor του $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$. Παρά το γεγονός ότι οι βελτιωμένες δράσεις απαιτούν περισσότερους υπολογισμούς για κάθε βήμα Monte Carlo, διατηρούν την τοπικότητα (locality) επειδή οι συνεισφορές περιορίζονται σε κόμβους μέχρι απόσταση $O(a)$ ή $O(2a)$, και εξασφαλίζουν καλύτερη συμπεριφορά κλιμάκωσης στη εξαγωγή του συνεχούς.

Διακριτοποίηση φερμιονικών πεδίων και σφάλματα $O(a)$

- *Απλοϊκή Διακριτοποίηση (Naive discretization)*: Η κλασική αντικατάσταση της παράγωγου από κεντρική διαφορά σε Dirac Lagrangian οδηγεί σε φερμιονικό διπλασιασμό (fermion doubling): σε d χωρικές διαστάσεις εμφανίζονται 2^d ανεπιθύμητες καταστάσεις.

- *Όρος Wilson*: Προστίθεται ένας Λαπλασιανός όρος $\Delta\phi$ (διακριτό σχήμα δεύτερης παράγωγου) πολλαπλασιασμένος με συντελεστή r/a , ώστε οι φερμιονικοί διπλασιασμοί να αποκτήσουν μάζα $O(1/a)$ και να απομακρυνθούν στο όριο του συνεχούς. Ωστόσο, ο όρος αυτός σπάει τη χειρόμορφη συμμετρία και εισάγει σφάλματα διακριτοποίησης τάξης $O(a)$ στις φερμιονικές

⁵Η βελτιωμένη βαθμωτή δράση Lüscher–Weisz ορίζεται ως

$$S_{LW} = \frac{\beta}{N_c} \sum_{x, \mu < \nu} \left\{ c_0 [1 - \text{Re Tr } U_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x)] + c_1 [1 - \text{Re Tr } U_{\mu\nu}^{1 \times 2}(x)] + c_2 [1 - \text{Re Tr } U_{\mu\nu}^{2 \times 1}(x)] \right\},$$

όπου $U_{\mu\nu}^{m \times n}$ είναι η Wilson κλειστή καμπύλη $m \times n$

παραμέτρους.

- *Clover (Sheikholeslami–Wohlert) βελτίωση*: Προστίθεται στον Wilson Dirac τελεστή όρος αναλογικός στο πεδίο $F_{\mu\nu}$ σε μορφή «clover» loop, με συντελεστή c_{SW} . Ρυθμίζοντας κατάλληλα τον c_{SW} (tree-level ή μη-διαταραχτικά), ακυρώνονται τα σφάλματα $O(a)$ στον φερμιονικό τομέα, με αποτέλεσμα τα πρωτεύοντα σφάλματα να είναι $O(a^2)$.

- Άλλες διακριτοποιήσεις: Κλιμακωτά φερμιόνια μειώνουν τους φερμιονικούς διπλασιασμούς αλλά εισάγουν ζητήματα συμμετρίας γεύσης · φερμιόνια τύπου domain wall και φερμιόνια overlap διατηρούν (μερικώς) την χειρόμορφη συμμετρία αλλά έχουν μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος. Η επιλογή βασίζεται σε επιλογή μεταξύ ακρίβειας (π.χ. μικρότερα σφάλματα, καλή χειρόμορφη συμπεριφορά) και υπολογιστικού κόστους.

Τοπικότητα και Υπολογιστικό Κόστος

Οι βελτιώσεις απαιτούν διακριτά σχήματα που εμπλέκουν περισσότερους γειτονικούς κόμβους (extended stencils ή μεγαλύτερα loops), π.χ. 1×2 loops για βαθμωτά ή clover loops για φερμιονικά πεδία. Παρότι αυξάνεται το κόστος ανά μέτρηση (περισσότερες επαφές μεταξύ κόμβων), διατηρείται η τοπικότητα διότι η ακτίνα επιρροής παραμένει της τάξης $O(a)$ ή $O(2a)$. Επιπλέον, η χρήση βελτιωμένων δράσεων μειώνει την αυτοσυσχέτιση των αλληλουχιών Monte Carlo και επιταχύνει την προσέγγιση στο συνεχές, συμβάλλοντας συνολικά σε πιο αποδοτικούς υπολογισμούς στα μικρότερα a .

Επιλογή Διακριτοποίησης

Η απόφαση για ποια διακριτοποίηση χρησιμοποιείται βασίζεται σε:

- **Επιθυμητή ακρίβεια**: Πόσο γρήγορα επιθυμούμε να μειωθούν τα σφάλματα $O(a)$ ή $O(a^2)$ στην εξαγωγή στο συνεχές.
- **Χειρόμορφες απαιτήσεις**: Αν είναι κρίσιμο να διατηρηθεί η χειρόμορφη συμμετρία (π.χ. για light quark physics), προτιμώνται domain wall ή overlap φερμιόνια, παρότι είναι πιο κοστοβόρα στον υπολογισμό.
- **Υπολογιστικό κόστος**: Wilson + clover είναι λιγότερο κοστοβόρα από τα overlap, αλλά παρουσιάζουν χειρότερη συμπεριφορά όσον αφορά τη χειρόμορφη συμμετρία · τα κλιμακωτά φερμιόνια είναι χαμηλότερου κόστους αλλά απαιτούν rooting⁶ στις πολλαπλές γεύσεις.
- **Φύση Μετρήσιμων Ποσοτήτων**: Ορισμένα παρατηρήσιμα ευνοούν συγκεκριμένες διακριτοποιήσεις (π.χ. τοπολογικό φορτίο με ροή Wilson, χειρόμορφο συμπήκνωμα με Ginsparg–Wilson⁷ φερμιόνια).
- **Διαθέσιμη υποδομή**: Υπολογιστικοί πόροι, βιβλιοθήκες λογισμικού, εμπειρία ομάδας.

⁶Εννοούμε τη διαδικασία λήψης της n -οστής ρίζας (π.χ. τετάρτης ρίζας) της φερμιονικής ορίζουσας (fermion determinant) για να μειώσουμε τον αριθμό των γεύσεων που περιγράφουν τα κλιμακωτά φερμιόνια.

⁷Οι Ginsparg–Wilson φερμιόνια αποτελούν τη «χρυσή τομή» μεταξύ ακριβούς χειρόμορφης συμμετρίας και ελεγχόμενων απειρισμών στο πλέγμα. Οι πιο γνωστές υλοποιήσεις — overlap και domain-wall — έχουν γίνει τα κατ' εξοχήν εργαλεία για μελέτες όπου η χειρόμορφη συμπεριφορά και η τοπολογία παίζουν κρίσιμο ρόλο.

Παράδειγμα: Βελτιωμένη Βαθμωτή Δράση Wilson

Η κλασική βαθμωτή δράση Wilson έχει τη μορφή:

$$S_{\text{Wilson}} = \frac{\beta}{3} \sum_{\text{plaquettes } P} \text{Re Tr}[1 - U_P].$$

Για Symanzik βελτίωση (Lüscher–Weisz), προσθέτουμε ορθογώνιους όρους (1×2) και [παρ-αλληλόγραμμους] loops:

$$S_{\text{LW}} = \frac{\beta}{3} \sum_P c_0 \text{Re Tr}[1 - U_P] + \sum_R c_1 \text{Re Tr}[1 - U_R] + \sum_C c_2 \text{Re Tr}[1 - U_C],$$

με συντελεστές c_i ρυθμισμένους ώστε τα σφάλματα $O(a^2)$ να ακυρώνονται στο ανάπτυγμα. Σε ανάλογο πνεύμα, για φερμιονικά Wilson + clover:

$$D_{\text{SW}} = D_{\text{Wilson}} + c_{\text{SW}} \frac{i}{4} a \sum_{\mu\nu} \sigma_{\mu\nu} \hat{F}_{\mu\nu},$$

όπου $\hat{F}_{\mu\nu}$ κατασκευάζεται από clover loop, και c_{SW} επιλέγεται έτσι ώστε να αφαιρούνται τα πρωτεύοντα σφάλματα $O(a)$.

Symanzik Effective Theory και Εξαγωγή του συνεχούς

Με δεδομένα από υπολογισμούς σε σειρά τιμών του a , η θεωρία Symanzik προβλέπει:

$$O(a) = O_{\text{cont}} + c_1 a^p + c_2 a^{p+1} + \dots,$$

όπου p η τάξη για το προτεύων σφάλμα (π.χ. $p = 1$ για μη-βελτιωμένα Wilson φερμιόνια, $p = 2$ για clover-improved, $p = 2$ για βαθμωτή δράση Wilson). Εκτελώντας σταθμισμένες προσαρμογές (weighted fits) των μετρήσεων $O(a)$ ως συνάρτηση a^p , εκτιμούμε την τιμή O_{const} στο όριο του $a \rightarrow 0$.

Συμπεράσματα

Η διακριτοποίηση και τα σφάλματα διακριτοποίησης είναι κεντρικά στη Πλεγματική QCD. Μέσω της θεωρίας Symanzik και βελτιωμένων δράσεων (Symanzik-improved gauge, clover fermions κ.ά.), επιτυγχάνεται ταχύτερη και πιο ακριβής σύγκλιση στο συνεχές όριο, διατηρώντας την τοπικότητα και ελέγχοντας το υπολογιστικό κόστος. Η επιλογή διακριτοποίησης καθορίζεται από την επιθυμητή ακρίβεια, τις χειρόμορφες απαιτήσεις, τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους και τη φύση των παρατηρητών που μας ενδιαφέρουν.

2.6 Ολοκληρώματα Διαδρομής ως Μέθοδος Κβάντωσης

Η μέθοδος των ολοκληρωμάτων διαδρομής (path integral) παρέχει εναλλακτική προς την κανονική (canonical) κβάντωση, βασισμένη στην υπόθεση ότι η κβαντική θεωρία ορίζεται πλήρως από τον Ευκλείδια ή Minkowski δράση της. Ακολουθώντας παρουσιάζεται αναλυτικά η θεμελίωση και οι βασικές διαδικασίες για βαθμωτά πεδία · η προσέγγιση γενικεύεται με αναλογικό τρόπο σε βαθμωτά και φερμιονικά συστήματα.

Αρχικά θεωρούμε ένα κλασικό πεδίο $\phi(x)$, με x στον Minkowski ή Ευκλείδιο χώρο-χρόνο, και κλασική δράση $S[\phi]$. Στην Ευκλείδια διατύπωση, η δράση $S_E[\phi]$ ορίζεται μέσω περιστροφής Wick $t \mapsto -i\tau$ από την Minkowski δράση $S_M[\phi]$. Η κεντρική υπόθεση της κβάντωσης είναι ότι η γενικευμένη συνάρτηση επιμερισμού (partition function) ορίζεται ως

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

όπου $\mathcal{D}\phi$ το μέτρο ολοκλήρωσης επί όλων των δυνατών $\phi(x)$. Στη συνέχεια, η προσθήκη εξωτερικής πηγής $J(x)$ οδηγεί στον ορισμό του γεννήτορα συναρτήσεων συσχέτισης:

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_E[\phi] + \int d^{d+1}x J(x) \phi(x)\right).$$

Οι Ευκλείδιοι συσχετιστές προκύπτουν ως παραγώγοι του $Z[J]$ ως προς την πηγή J :

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \phi(x_n) \rangle = \frac{1}{Z[0]} \frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(x_1) \delta J(x_2) \cdots \delta J(x_n)} \Big|_{J=0}.$$

Αυτή η κατασκευή εξασφαλίζει ότι κάθε συσχέτιση ορίζεται από ένα Ευκλείδιο ολοκλήρωμα διαδρομής με το κατάλληλο βάρος.

Για την εκτίμηση των συσχετίσεων, διασπάμε τη δράση σε μη-αλληλεπιδρών (free) τμήμα και τμήμα αλληλεπίδρασης:

$$S_E[\phi] = S_0[\phi] + S_{\text{int}}[\phi],$$

όπου S_0 είναι γκαουσιανός όρος, π.χ. για βαθμωτά Klein–Gordon

$$S_0[\phi] = \int dx \left[\frac{1}{2} (\partial_\mu \phi)^2 + \frac{1}{2} m^2 \phi^2 \right]$$

. Η Γκαουσιακή ολοκλήρωση του μη-αλληλεπιδρώντος τμήματος επιτρέπει να ορίσουμε τον ελεύθερο γεννήτορα

$$Z_0[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_0[\phi] + \int J\phi\right) = Z_0[0] \exp\left(\frac{1}{2} \int \int J(x) \Delta(x-y) J(y) dx dy\right),$$

όπου $\Delta(x-y)$ είναι ο ελεύθερος Ευκλείδιος διαδότης: ο αντίστροφος του διακριτού ή συνεχούς Klein–Gordon διαφορικού τελεστή $(-\partial^2 + m^2)$. Η ύπαρξη Γκαουσιανής έκφρασης εξασφαλίζει την ισχύ του θεωρήματος Wick⁸: οποιαδήποτε πολλαπλή συσχέτιση στον μη-αλληλεπιδρώντα όρο γράφεται ως άθροισμα ζευγών διαδότη.

Για την εισαγωγή της αλληλεπίδρασης, γράφουμε τον γεννήτορα $Z[J]$ ως

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-S_0[\phi]\right) \exp\left(-S_{\text{int}}[\phi] + \int J\phi\right) = \exp\left(-S_{\text{int}}\left[\frac{\delta}{\delta J}\right]\right) Z_0[J].$$

⁸Το θεώρημα Wick ορίζει ότι για πεδία (ή τελεστές) $\phi_1, \dots, \phi_n$:

$$T\{\phi_1 \cdots \phi_n\} = :\phi_1 \cdots \phi_n: + \sum_{\text{όλα τα ζευγάρια } (i,j)} :\phi_1 \cdots \hat{\phi}_i \cdots \hat{\phi}_j \cdots \phi_n: + \dots,$$

δηλαδή το χρονο-ταξινομημένο προϊόν ισούται με το κανονικοποιημένο προϊόν συν όλους τους δυνατούς συνδυασμούς (contractions) μεταξύ των πεδίων.

Η μέθοδος των ολοκληρωμάτων διαδρομής επιτρέπει τη διαταραχτική ανάπτυξη: εφαρμόζουμε τον εκθετικό τελεστή του $S_{\text{int}}[\delta/\delta J]$ πάνω στην Γκαουσιανή, και παράγουμε διαγράμματα Feynman όπου κάθε όρος αλληλεπίδρασης αντιστοιχεί σε κορυφή (vertex) με κατάλληλο συντελεστή, και κάθε παράγωγος δίνει τον διαδότη. Με τον τρόπο αυτό προκύπτουν οι κανόνες Feynman στον Ευκλείδιο χώρο, οι οποίες μεταφράζονται εύκολα σε Minkowski, όπου απαιτείται αντιστοίχιση παραμέτρων.

Στο πλέγμα, η μέθοδος των ολοκληρωμάτων διαδρομής $\int \mathcal{D}\phi$ αντικαθίσταται από πεπερασμένο πολλαπλό ολοκλήρωμα $\int \prod_n d\phi(n)$ επί των τιμών $\phi(n)$ σε κάθε κόμβο n . Η Ευκλείδια δράση $S_E[\phi]$ διακριτοποιείται σύμφωνα με τις επιλογές της παραγράφου 2.5, ώστε να διατηρεί την τοπικότητα και σωστό όριο στο συνεχές. Η πεπερασμένη διάσταση του πολλαπλού ολοκληρώματος καθιστά το ολοκλήρωμα διαδρομής καλά ορισμένο, και η Monte Carlo δειγματοληψία με κατανομή $e^{-S_E[\phi]}$ επιτρέπει την πρακτική εκτίμηση των συσχετίσεων. Εκεί όπου απαιτείται διαταραχτική προσέγγιση, ο τελεστής $S_{\text{int}}[\delta/\delta J]$ εφαρμόζεται στον διακριτό μη-αλληλεπιδρώντα γεννήτορα, με διαδότη που είναι ο αντίστροφος του διακριτού τελεστή (π.χ. του διακριτού Laplacian $+ m^2$).

Επιπλέον, η μέθοδος παρέχει μη-διαταραχτική οπτική: χωρίς να διαχωρίζουμε μη-αλληλεπιδρών/αλληλεπιδρών τμήμα, δειγματοληπτούμε άμεσα το πλήρες e^{-S_E} και εκτιμούμε τις συσχετίσεις. Η εξάρτηση των διαδότων από τον Ευκλείδιο χρόνο τ δίνει πληροφορίες για το φάσμα, ενώ οι συσχετιστές στο χώρο επιτρέπουν μελέτη π.χ. δυναμικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ πεδίων. Η μέθοδος των ολοκληρωμάτων διαδρομής στη διατύπωση είναι θεμελιώδης για την κατανόηση φαινομένων όπως η αυθόρμητη θραύση συμμετρίας, τα Ινσταντόνια και μη-διαταραχτικές δομές, δεδομένου ότι επιτρέπει την απευθείας ενσωμάτωση όλων των διαμορφώσεων πεδίου.

Τέλος, η σύνδεση του Ευκλείδιου ολοκληρώματος διαδρομής με το κανονικοποιημένο φορμαλισμό επιτυγχάνεται μέσω του πίνακα μεταφοράς: η διακριτοποίηση του Ευκλείδιου χρόνου σε στρώματα πάχους a αντιστοιχεί στον πίνακα μεταφοράς $e^{-aH_{\text{lattice}}}$. Οι Ευκλείδιοι συσχετιστές, ως μέσοι όροι στο πλέγμα, συνδέονται με τις ιδιοτιμές του H_{lattice} . Η διαδικασία κβάντωσης μέσω ολοκληρωμάτων διαδρομής αντιπαραβάλλει την ιδέα της αρχής της ελάχιστης δράσης με την επιλογή στατιστικής κατανομής e^{-S_E} , θεμελιώνοντας τόσο διαταραχτικά όσο και μη-διαταραχτικά προσεγγίσεις εντός ενός ενιαίου πλαισίου.

2.7 Σχέση με Στατιστική Μηχανική

Το Ευκλείδιο ολοκλήρωμα διαδρομής σε διακριτό πλέγμα μπορεί να ερμηνευθεί ως συνάρτηση επιμερισμού ενός ισοβαρούς στατιστικού συστήματος, όπου η Ευκλείδια δράση S_E λειτουργεί ως συνάρτηση ενέργειας. Συγκεκριμένα, για ένα σύστημα πεδίων Φ (βαθμωτά ή/και φερμιονικά), σε πεπερασμένο όγκο $V = (aN_s)^d$ και με Ευκλείδια χρονική διάσταση μήκους $\beta = aN_\tau$, ο γενικός ορισμός της συνάρτησης επιμερισμού στο πλέγμα είναι

$$Z = \int \prod_{n=(\mathbf{n}, n_\tau)} d\Phi(n) \exp(-S_E^{\text{lattice}}[\Phi]),$$

όπου n αναπαριστά κόμβο με χωρικό δείκτη $\mathbf{n} \in \{0, \dots, N_s - 1\}^d$ και χρονικό δείκτη $n_\tau \in \{0, \dots, N_\tau - 1\}$. Στην θερμοδυναμική επιβάλλονται περιοδικές οριακές συνθήκες στον Ευκλείδιο χρόνο για μποζονικά πεδία και αντιπεριοδικές για φερμιονικά, ώστε να καθορίζεται η

θερμοκρασία

$$T = \frac{1}{\beta} = \frac{1}{aN_\tau}.$$

Με αυτή την ταυτότητα, το Ευκλείδιο ολοκλήρωμα διαδρομής ταυτίζεται με το θερμικό ίχνος

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H_{\text{lattice}}}],$$

όπου H_{lattice} η Χαμιλτονιανή της διακριτής θεωρίας. Η μετατροπή του τελεστή $e^{-\beta H}$ σε πολλαπλά βήματα μήκους a και η εισαγωγή ολοκληρώσεων σε ενδιάμεσες καταστάσεις πεδίου αποδίδουν την αναπαράσταση μέσω Ευκλείδιων ολοκληρωμάτων διαδρομής.

Από την συνάρτηση επιμερισμού προκύπτουν θερμοδυναμικά μεγέθη μέσω παραγώγων του $\ln Z$. Για παράδειγμα, η ελεύθερη πυκνότητα ενέργειας f ορίζεται ως

$$f = -\frac{1}{\beta V} \ln Z = -\frac{1}{aN_\tau (aN_s)^d} \ln Z,$$

ενώ η εσωτερική ενέργεια U δίνεται από την παράγωγο ως προς β :

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{1}{Z} \text{Tr}[H_{\text{lattice}} e^{-\beta H_{\text{lattice}}}].$$

Η ειδική θερμότητα C προκύπτει είτε ως $\partial U / \partial T$ είτε μέσω της διακύμανσης της ενέργειας:

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{1}{T^2} \left(\langle H_{\text{lattice}}^2 \rangle - \langle H_{\text{lattice}} \rangle^2 \right).$$

Παρατηρήσιμα μεγέθη που εξαρτώνται από παραμέτρους της δράσης (π.χ. σταθερές σύζευξης ή μάζες) οδηγούν σε επιδεκτικότητες (susceptibilities) μέσω της δεύτερης παραγώγου του $\ln Z$ ως προς αυτές τις παραμέτρους:

$$\chi_\lambda = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \lambda^2} = \langle (\partial_\lambda S_E^{\text{lattice}})^2 \rangle - \langle \partial_\lambda S_E^{\text{lattice}} \rangle^2.$$

Οι Ευκλείδιες συσχετίσεις κατά μήκος του χρόνου συνδέονται με φασματικές πληροφορίες μέσω του :

$$C(\tau) = \langle \mathcal{O}(\tau) \mathcal{O}(0) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}[e^{-(\beta-\tau)H_{\text{lattice}}} \mathcal{O} e^{-\tau H_{\text{lattice}}} \mathcal{O}].$$

Για $\tau \ll \beta$, η συμπεριφορά $C(\tau) \sim e^{-m_{\text{eff}}\tau}$ επιτρέπει τον προσδιορισμό μαζών ή ενεργειακών επιπέδων. Σε θερμοδυναμικές μελέτες, εξετάζουμε την εξάρτηση των μετρήσιμων μεγεθών από T (ή β), εντοπίζοντας φασικές μεταβάσεις, όπως π.χ. ο απεγκλωβισμός σε βαθμωτές θεωρίες ή αλλαγές συμμετρίας.

Δειγματοληψία Monte Carlo

Η πρακτική εκτίμηση της συνάρτησης επιμερισμού και των μέσων όρων παρατηρήσιμων σε πλέγμα επιτυγχάνεται μέσω δειγματοληψίας Monte Carlo $\{\Phi\}$ με πιθανότητα

$$p[\Phi] = \frac{1}{Z} \exp(-S_E^{\text{lattice}}[\Phi]).$$

Χρησιμοποιούνται αλγόριθμοι όπως ο Metropolis, Heatbath ή Hybrid Monte Carlo (σε φερμιονικά συστήματα), ώστε να παραχθούν στατιστικά ανεξάρτητα ή ασθενώς αυτοσυσχετισμένα δείγματα. Κάθε παρατηρησιμότητα $\mathcal{O}$ υπολογίζεται ως μέσος όρος:

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{1}{N_{\text{cfg}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{cfg}}} \mathcal{O}[\Phi_i],$$

όπου Φ_i η i -στή διαμόρφωση. Η ακρίβεια εκτιμάται μέσω των στατιστικών διακυμάνσεων και αυτοσυσχετίσεων των δειγμάτων.

Για θερμοδυναμικά μεγέθη, μετρούνται παρατηρήσιμα όπως $\langle H_{\text{lattice}} \rangle$ ή $\langle \partial_\lambda S_E \rangle$, αφού

$$\langle \partial_\lambda S_E \rangle = \frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda}, \quad \langle (\partial_\lambda S_E)^2 \rangle - \langle \partial_\lambda S_E \rangle^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \lambda^2}.$$

Η ανάλυση βαθμίδας πεπερασμένου όγκου (finite-size scaling) χρησιμοποιείται για εντοπισμό κρίσιμων συμπεριφορών: μελετώντας τη συμπεριφορά επιδεκτικότητας και του παράγοντα Binder⁹ σε χώρους διαφορετικών μεγεθών N_s , προσεγγίζουμε το θερμοδυναμικό όριο.

Θερμοδυναμικές μέθοδοι

Τεχνικές όπως τα ολοκληρώματα διαδρομής επιτρέπουν τον υπολογισμό διαφοράς ελεύθερης ενέργειας (π.χ. πίεσης) συγκριτικά με άλλη θερμοκρασία. Η σωστή επανακανονικοποίηση απαιτεί συστηματική αφαίρεση UV αποκλίσεων¹⁰ και εξαγωγή των συνεχεί ορίων. Καθώς το $a \rightarrow 0$, πρέπει να διατηρείται το $T = 1/(aN_\tau)$ σταθερό με κατάλληλη επιλογή N_τ . Οι θερμοδυναμικές μετρήσεις σε σειρά πλέγματος με διαφορετικά a επιτρέπουν εξαγωγή στο συνεχές.

Επομένως, τα Ευκλείδια ολοκληρώματα διαδρομής στο πλέγμα παρέχουν ένα πλήρες θερμοδυναμικό πλαίσιο για χβαντικές θεωρίες πεδίων: η συνάρτηση επιμερισμού και οι Ευκλείδιοι συσχετίστες δίνουν τόσο θερμοδυναμικές ποσότητες όσο και φασματικές πληροφορίες, ενώ η Monte Carlo δειγματοληψία επιτρέπει μη-διαταρακτικούς υπολογισμούς και μελέτη φασικών μεταβάσεων.

2.8 Συνεχές Όριο (Continuum Limit)

Η διακριτοποίηση του χώρου-χρόνου σε πλέγμα εισάγει έναν φυσικό UV cutoff της τάξης $1/a$. Ωστόσο, οι φυσικές ποσότητες μιας χβαντικής θεωρίας πεδίων πρέπει να οριστούν στο συνεχές όριο όπου το $a \rightarrow 0$. Η διαδικασία αυτή περιλαμβάνει δύο κύρια στάδια: (α) τον καθορισμό της κλίμακας (scale setting) και (β) τον υπολογισμό των παρατηρήσιμων μεγεθών στο όριο $a \rightarrow 0$ μέσω συστηματικής ανάλυσης αποτελεσμάτων από πολλαπλά πλέγματα με διαφορετικές τιμές του a .

⁹Ο παράγων Binder (ή Binder cumulant) είναι ένα αδιάστατο μέγεθος που χρησιμοποιείται στη θεωρία κρίσιμων φαινομένων για τον προσδιορισμό της τάξης της μετάβασης και τον εντοπισμό του κρίσιμου σημείου σε συστήματα πεπερασμένου μεγέθους.

¹⁰Οι UV αποκλίσεις αντικατοπτρίζουν ότι η θεωρία μας «δεν ξέρει» τι συμβαίνει κάτω από κάποιο όριο (π.χ. το πλέγμα a ή momentum cutoff Λ), και απαιτούν την εισαγωγή φυσικών παραμέτρων εξαρτώμενων από τον ρυθμιστή, ώστε το μηδενικό όριο του ρυθμιστή να είναι ανεξάρτητο από τα παρατηρήσιμα μεγέθη.

Εκτίμηση της κλίμακας

Για να συγκρίνουμε δεδομένα από διαφορετικές τιμές a , χρειάζεται ένα φυσικό μέγεθος (π.χ. παράμετρος Sommer r_0 , σταθερά διάσπασης συμμετρίας, ή μάζα γνωστού αδρονίου) που μετράται σε μονάδες πλέγματος και ταυτίζεται με γνωστή τιμή σε φυσικές μονάδες. Συγκεκριμένα, αν $Q(a)$ είναι η μετρούμενη τιμή ενός παρατηρήσιμου σε πλέγμα με βήμα a , και Q_{phys} η αντίστοιχη φυσική τιμή, ορίζουμε το a μέσω της σχέσης¹¹ :

$$a = \frac{a m_g}{m_{g,\text{phys}}}$$

,όπου $a m_g$ η μάζα σε μονάδες πλέγματος. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται σε διάφορα a .

Θεωρία Symanzik και σφάλματα διακριτοποίησης

Στη θεωρία Symanzik, η δράση πλέγματος θεωρείται ως αποτέλεσμα της συνεχούς δράσης συν όρους διόρθωσης που περιέχουν διακριτοποιημένους συνδυασμούς πεδίων πολλαπλών τάξεων στο a . Τα σφάλματα διακριτοποίησης (lattice artefacts) εμφανίζονται ως όροι της μορφής a^n ή $a^n \ln a$, με $n \geq 1$, ανάλογα με την επιλεγμένη διακριτοποίηση και τη συμμετρία της δράσης. Π.χ.:

- Σε τυπική δράση βαθμίδας Wilson και Wilson φερμιόνια χωρίς clover, τα σφάλματα διακριτοποίησης στα πεδία βαθμίδας είναι $O(a^2)$, ενώ σε φερμιονικά πεδία εμφανίζονται σφάλματα διακριτοποίησης τάξης $O(a)$ λόγω της θραύσης της χείρομορφης συμμετρίας.
- Με την βελτίωση clover (Sheikholeslami–Wohlert) για Wilson φερμιόνια, οι όροι $O(a)$ εξαφανίζονται, και απομένουν μόνο όροι τάξης $O(a^2)$.
- Με ακόμα υψηλότερης τάξης βελτιώσεις (π.χ. Symanzik-βαλτιώσεις βαθμωτής δράσης με loops μεγαλύτερου σχήματος), μειώνονται περαιτέρω τα σφάλματα διακριτοποίησης $O(a^2)$ ή εισάγονται όροι $O(a^4)$.

Η θεωρία προβλέπει ότι, μία παρατηρήσιμη ποσότητα O για την οποία, όταν το a τείνει στο συνεχές όριο μπορεί να γραφεί ως

$$O(a) = O_{\text{cont}} + c_1 a^p + c_2 a^{p+1} + \dots ,$$

όπου O_{const} η τιμή στο συνεχές όριο, p η τάξη του σφάλματος διακριτοποίησης (π.χ. $p = 1$ ή $p = 2$), και c_i αδιάστατοι συντελεστές που εξαρτώνται από την δράση και την μέθοδο μέτρησης. Σε περίπτωση βελτίωσης τάξης p , το σφάλμα διακριτοποίησης ανάγεται σε υψηλότερη τάξη (μεγαλύτερο p).

Υπολογισμός του συνεχούς ορίου

Για την εκτέλεση του υπολογισμού, υπολογίζονται τα ίδια μετρήσιμα μεγέθη $O(a)$ σε πλέγματα με διαφορετικά a , κρατώντας την ίδια φυσική κατάσταση (π.χ. σταθερή σχέση $m_\pi L$ για μελέτη φασμάτων). Στη συνέχεια, εκτελείται προσαρμογή (fitting) των δεδομένων ως συνάρτηση $O(a)$ έναντι a^p (ή συνδυασμού a^p και a^{p+1} , εφόσον επαρκείς τιμές a είναι διαθέσιμες) για να εκτιμηθεί το O_{const} . Συνήθεις πρακτικές:

¹¹Ο τύπος παρουσιάζεται σε F. Knechtli, M. Günther and M. Peardon, *Lattice Quantum Chromodynamics: Practical Essentials* (Springer, 2017), εζ. (4.21).

- Ελάχιστες απαιτήσεις: τουλάχιστον τρεις τιμές a ώστε να εκτιμηθεί O_{const} και ο συντελεστής c_1 .

- Αν υπάρχουν στοιχεία για διαφορετικές διακριτοποιήσεις με διαφορετικούς πρωτεύοντες p , μπορεί να ελεγχθεί η συμβατότητα των εξαγόμενων O_{const} .

- Χρήση σταθμισμένης προσαρμογής με στατιστικά σφάλματα των μετρήσεων και σωστή αντιμετώπιση συστηματικών σφαλμάτων (π.χ. πεπερασμένος όγκος, καθορισμός κλίμακας, επιλογή εύρους ανάλυσης).

Στην πράξη, οι μετρήσεις γίνονται για a εντός περιορισμένου διαστήματος (τυπικά $a \sim 0.04 - 0.12 \text{ fm}$), οπότε πρέπει να εξασφαλίζεται ότι τα a είναι αρκετά μικρά ώστε οι όροι $O(a^p)$ που κυριαρχούν και οι υψηλότερης τάξης όροι να είναι αμελητέοι ή τουλάχιστον εκτιμήσιμοι.

Οριακές συνθήκες και στατιστικά σφάλματα

Κατά την εξαγωγή, οι οριακές συνθήκες επιλέγονται συχνά να είναι περιοδικές στις χωρικές διαστάσεις και περιοδικές/αντιπεριοδικές στην ευκλείδια χρονική διάσταση, ανάλογα με τον τύπο των πεδίων, έτσι ώστε να μειώνονται τα συστηματικά σφάλματα (π.χ. για επίτευξη ορθής ανάκτησης μάζας). Επιπλέον, εξετάζεται η επίδραση του πεπερασμένου όγκου: επιλέγονται μεγέθη $L = aN_s$ ώστε $mL \gg 1$, περιορίζοντας τις επιδράσεις πεπερασμένου όγκου πριν την εξαγωγή στο $a \rightarrow 0$. Στατιστικά σφάλματα εκτιμώνται με μεθόδους bootstrap ή jackknife, και οι αυτοσυσχετίσεις των Monte Carlo αλληλουχιών λαμβάνονται υπ' όψιν στον υπολογισμό σφαλμάτων των $O(a)$ δεδομένων.

Πεπερασμένη Θερμοκρασία και Χημικό Δυναμικό

Σε περιπτώσεις όπου μελετάται θερμοδυναμική συμπεριφορά, πρέπει να εξασφαλίζεται η σταθερή θερμοκρασία $T = 1/(aN_\tau)$ κατά την αλλαγή των a . Αυτό επιτυγχάνεται προσαρμόζοντας το N_τ ανάλογα με το a , ώστε το $\beta = aN_\tau$ να παραμένει σταθερό. Η εξαγωγή στο συνεχές των θερμοδυναμικών ποσοτήτων ακολουθεί παρόμοια ανάλυση, με έλεγχο καθορισμένης κλίμακας και πεπερασμένου όγκου.

Πρακτικά βήματα

1. Επιλογή ενός κατάλληλου μετρήσιμου μεγέθους O για καθορισμό κλίμακας (π.χ. r_0 , t_0 από ροή Wilson, κάποια μάζα αδρονίου).
2. Υπολογισμός $O(a)$ σε διάφορα πλέγματα με διαφορετικές συζεύξεις ώστε να προκύψουν διαφορετικά a .
3. Εξαγωγή του a σε φυσικές μονάδες μέσω $O(a)$ και του γνωστού O_{phys} .
4. Μέτρηση του επιθυμητού μετρήσιμου μεγέθους $P(a)$ στο ίδιο σύνολο πλεγμάτων, με σταθερό $m_\pi L$ ή άλλο κριτήριο για το ίδιο φυσικό σημείο.
5. Προσαρμογή (Fitting) $P(a)$ έναντι a^p (όπου p η τάξη πρωτεύοντος σφάλματος διακριτοποίησης), με εκτίμηση P_{cont} και συντελεστών σφαλμάτων διακριτοποίησης.
6. Έλεγχος συστηματικών σφαλμάτων: αλλαγή εύρους προσαρμογής, συμπερίληψη/αποκλεισμός σημείων με μεγαλύτερα a , επιλογή διαφορετικών βελτιωμένων δράσεων για έλεγχο εγκυρότητας.

7. Αναφορά των τελικών P_{cont} με στατιστικά και συστηματικά σφάλματα.

Με τη συστηματική αυτή διαδικασία επιτυγχάνεται αξιόπιστο υπολογισμό του συνεχούς ορίου, εξασφαλίζοντας ότι τα αποτελέσματα αναχτούν τη συμπεριφορά της θεωρίας όταν $a \rightarrow 0$ και τα σφάλματα διακριτοποίησης πλέγματος γίνονται ασήμαντα.

3 Συνεχής QCD και Θεμελιώδεις Ιδιότητες

3.1 Εισαγωγή στη Συνεχή QCD

Η Κβαντική Χρωμοδυναμική (QCD) είναι η τρέχουσα θεωρία που περιγράφει τη δυναμική των κουάρκ και των γλουονίων ως μη-αβελιανή θεωρία βαθμίδας με συμμετρία $SU(3)$. Η QCD εξηγεί την ισχυρή αλληλεπίδραση με χαρακτηριστικά όπως η ασύμπτωτική ελευθερία σε υψηλές ενέργειες και το περιορισμό σε χαμηλές ενέργειες. Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζουμε τη θεμελιώδη συνεχή δράση της QCD, τις κύριες συμμετρίες, το πλαίσιο της κβάντωσης, τις διαδικασίες επανακανονικοποίησης και τη συμπεριφορά της σύζευξης, καθώς και τα βασικά μη-διαταρακτικά φαινόμενα που επιβάλλουν τη χρήση πλέγματος (lattice) ή άλλων μεθόδων.

3.2 Λαγκρανζιανή της QCD στο Συνεχές

3.2.1 Δομή της Λαγκρανζιανής

Η κλασική Λαγκρανζιανή πυκνότητα της QCD σε Minkowski χώρο-χρόνο γράφεται (με μονάδες $\hbar = c = 1$) ως:

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu} + \sum_{f=1}^{N_f} \bar{\psi}_f (i\gamma^\mu D_\mu - m_f) \psi_f,$$

όπου:

- $F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c$ είναι ο *τανιστής πεδίου χρώματος* (field strength tensor) των γλουονίων, με συντελεστές δομής f^{abc} της άλγεβρας $\mathfrak{su}(3)$, $a = 1, \dots, 8$.
- $D_\mu = \partial_\mu + ig A_\mu$ η συναλλοίωτη παράγωγος, όπου $A_\mu = A_\mu^a T^a$, με T^a γεννήτορες της άλγεbras $\mathfrak{su}(3)$, κανονικοποιημένους ως $\text{Tr}(T^a T^b) = \frac{1}{2} \delta^{ab}$.
- ψ_f τα σπινორιακά πεδία κουάρκ για κάθε γεύση $f = 1, \dots, N_f$, με μάζα m_f .
- g : η σταθερά σύζευξης της QCD, η οποία υφίσταται κβαντικές διορθώσεις και εξαρτάται από την ενεργειακή κλίμακα.

Στο Ευκλείδιο πλαίσιο, με την περιστροφή Wick $t \rightarrow -i\tau$, η αντίστοιχη δράση γράφεται:

$$S_E = \int d^4x_E \left[\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \sum_{f=1}^{N_f} \bar{\psi}_f (\gamma_\mu D_\mu + m_f) \psi_f \right].$$

Η μετάβαση στο Ευκλείδιο ολοκλήρωμα διαδρομής γίνεται με βάρος $\exp(-S_E)$.

3.2.2 Συμμετρίες της QCD

Τοπική συμμετρία βαθμίδας SU(3) Η QCD έχει τοπική συμμετρία βαθμίδας

$$\psi(x) \rightarrow U(x) \psi(x), \quad A_\mu(x) \rightarrow U(x) A_\mu(x) U^\dagger(x) + \frac{i}{g} (\partial_\mu U(x)) U^\dagger(x),$$

με $U(x) \in \text{SU}(3)$. Η τοπική αυτή συμμετρία επιβάλλει ότι μόνο βαθμωτά αναλλοίωτα παρατηρήσιμα (π.χ. Wilson loops) είναι φυσικά και καθορίζει τις αλληλεπιδράσεις γλουονίου-γλουονίου μέσω μη-αβελιανών όρων στον τανιστή $F_{\mu\nu}$.

Καθολικές συμμετρίες Γεύσης

- $U(1)_B$: διατήρηση βαρυονικού φορτίου (κουάρκ έχουν βαρυονικό αριθμό 1/3).
- $SU(N_f)_V$: συμμετρία γεύσης όταν οι μάζες γεύσης είναι όμοιες (isospin κ.ά.).
- Χειρόμορφες συμμετρίες $SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$: στο όριο $m_f \rightarrow 0$, η Λαγκρανζιανή χωρίζεται σε ανεξάρτητες αριστερές/δεξιές συνιστώσες. Η συμμετρία $U(1)_A$ σπάει λόγω ανωμαλίας Adler–Bell–Jackiw¹². Η δυναμική θραύση $SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$ σε $SU(N_f)_V$ οδηγεί σε χειρόμορφη συμπύκνωση $\langle \bar{\psi}\psi \rangle \neq 0$ και σε ψεύδο-Goldstone μεσόνια (π.χ. π-μεσόνια).

Διακριτές συμμετρίες

- C, P, T και συνδυασμοί: η QCD σέβεται τις συμμετρίες αυτές, εκτός αν εισάγεται CP-παραβίαση μέσω θ-όρου¹³.
- Ανωμαλία $U(1)_A$: σχετίζεται με τοπολογικό όρο $F\tilde{F}$ και ινσταντόνια.

3.3 Κβάντωση της QCD

3.3.1 Ολοκληρώματα διαδρομής με επιλογή βαθμίδας

Το Minkowski ολοκλήρωμα διαδρομής ορίζεται τυπικά ως:

$$Z = \int [dA][d\psi][d\bar{\psi}] \exp(iS_{\text{QCD}}[A, \psi, \bar{\psi}]).$$

¹²Ως πεδίο βαθμίδας (gauge field) ορίζουμε το πεδίο $A_\mu^a(x)$ που συνδέεται με τους φορείς της τοπικής συμμετρίας βαθμίδας, το οποίο υπό μετασχηματισμούς βαθμίδας μετασχηματίζεται ως

$$A_\mu(x) \rightarrow g(x) A_\mu(x) g^{-1}(x) + \frac{i}{g} (\partial_\mu g(x)) g^{-1}(x),$$

όπου $g(x)$ είναι το στοιχείο της ομάδας βαθμίδας στο σημείο x .

¹³Η CP-παραβίαση μέσω του θ-όρου προκύπτει από την προσθήκη στη λαγκρανζιανή της QCD του όρου

$$\mathcal{L}_\theta = \frac{\theta g^2}{32\pi^2} F_{\mu\nu}^a \tilde{F}^{a\mu\nu},$$

όπου $\tilde{F}^{a\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} F_{\rho\sigma}^a$. Αυτός ο όρος δεν είναι παράγωγος ενός διατηρήσιμου ρεύματος και παραβιάζει τις συμμετρίες P και CP, προσδίδοντας CP-παραβιαστικές αλληλεπιδράσεις στον ισχυρό τομέα.

Για να το χειριστούμε, απαιτείται επιλογή της βαθμίδας, π.χ. βαθμίδα Lorenz $\partial^\mu A_\mu^a = 0$. Με τη διαδικασία Faddeev–Popov¹⁴ παίρνουμε :

1. Προσθήκη όρου επιλογής βαθμίδας:

$$\mathcal{L}_{\text{GF}} = -\frac{1}{2\xi}(\partial^\mu A_\mu^a)^2.$$

2. Εισαγωγή φασματικών πεδίων (Faddeev–Popov ghosts) $c^a, \bar{c}^a$ με δράση:

$$\mathcal{L}_{\text{ghost}} = \bar{c}^a (-\partial^\mu D_\mu^{ab}) c^b, \quad D_\mu^{ab} = \partial_\mu \delta^{ab} + g f^{acb} A_\mu^c.$$

Στο Ευκλείδιο πλαίσιο, το συνολικό βάρος γίνεται $\exp(-S_E[A, \psi, \bar{\psi}, c, \bar{c}])$. Για τον υπολογισμό αναλλοίωτων μετρήσιμων μεγεθών (λ.χ. κλειστές καμπύλες Wilson) στο πλέγμα, δεν απαιτείται ρητά η επιλογή βαθμίδας, αλλά για διαταρακτικούς υπολογισμούς (lattice perturbation theory) εισάγεται ανάλογος όρος επιλογής βαθμίδας στη διακριτή δράση.

3.3.2 Κανόνες Feynman και Επανακανονικοποίηση

Με επιλογή βαθμίδας:

- Γλουονικός διαδότης (βαθμίδα Lorenz):

$$D_{\mu\nu}^{ab}(k) = \frac{-i \delta^{ab}}{k^2 + i0} \left[g_{\mu\nu} - (1 - \xi) \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right].$$

- διαδότης κουάρκ:

$$S(p) = \frac{i(p + m)}{p^2 - m^2 + i0}.$$

- διαδότης φασματικών πεδίων (Faddeev–Popov ghosts) :

$$\frac{i \delta^{ab}}{k^2 + i0}.$$

¹⁴Για την εισαγωγή του Faddeev–Popov παράγοντα στο ολοκλήρωμα διαδρομής, ορίζουμε

$$1 = \int Dg \delta(G[A^g]) \Delta_{\text{FP}}[A], \quad \Delta_{\text{FP}}[A] = \det\left(\frac{\delta G[A^g]}{\delta \alpha}\right)\Big|_{G[A^g]=0},$$

όπου $A_\mu^g = g A_\mu g^{-1} + \frac{i}{g}(\partial_\mu g) g^{-1}$ με $g(x) = e^{i\alpha(x)}$. Το πλήρες ολοκλήρωμα διαδρομής γράφεται

$$Z = \int DA D\bar{c} Dc \exp(-S_{\text{YM}}[A] - S_{\text{GF}}[A] - S_{\text{FP}}[A, \bar{c}, c]),$$

όπου

$$S_{\text{FP}}[A, \bar{c}, c] = \int d^4x \bar{c} \frac{\delta G[A^g]}{\delta \alpha} c \Big|_{G[A^g]=0}$$

είναι η δράση των φασματικών πεδίων (Faddeev–Popov ghosts) που προκύπτει από τον παράγοντα Faddeev–Popov .

- κορυφή κουάρκ-γλουονίου: $ig\gamma^\mu T^a$.
- κορυφή γλουονίου-γλουονίου (τριπλό, τετραπλό) από f^{abc} .

Για την επανακανονικοποίηση χρησιμοποιείται συνήθως διαστατική κανονικοποίηση (συνεχές) ή πλεγματική κανονικοποίηση (lattice perturbation theory). Οι μη κανονικοποιημένες ποσότητες ορίζονται ως:

$$\psi_0 = Z_\psi^{1/2} \psi, \quad A_{0\mu}^a = Z_A^{1/2} A_\mu^a, \quad g_0 = \mu^{\epsilon/2} Z_g g, \quad m_{0,f} = Z_m m_f.$$

Οι σταθερές Z υπολογίζονται από βρόχους Feynman, απορροφούν απειρισμούς.

3.3.3 Ασυμπτωτική Ελευθερία και Εξέλιξη της Σταθεράς Σύζευξης

Στην κβαντική χρωμοδυναμική (QCD), η εξάρτηση της σταθεράς σύζευξης g από την ενεργειακή κλίμακα μ περιγράφεται από τη συνάρτηση βήτα:

$$\beta(g) = \mu \left. \frac{dg}{d\mu} \right|_{g_0 \text{ σταθερή}} = -b_0 g^3 - b_1 g^5 - \dots$$

Ο πρώτος συντελεστής b_0 υπολογίζεται διαταρακτικά και για N_f γεύσεις κουάρκ, δίνεται από

$$b_0 = \frac{1}{16\pi^2} \left(11 - \frac{2}{3} N_f \right),$$

ο οποίος είναι θετικός εφόσον $N_f < 16\frac{1}{2}$. Η θετική τιμή του b_0 συνεπάγεται ότι σε μεγάλες τιμές της κλίμακας ($\mu \gg \Lambda_{\text{QCD}}$) η σταθερά σύζευξης $g(\mu)$ τείνει προς το μηδέν, φαινόμενο γνωστό ως ασυμπτωτική ελευθερία. Αντίθετα, καθώς η κλίμακα μ τείνει προς Λ_{QCD} , η $g(\mu)$ αυξάνεται, οπότε η διαταρακτική θεωρία παύει να είναι αξιόπιστη και αναδεικνύονται μη-διαταρακτικά φαινόμενα, όπως ο εγκλωβισμός χρώματος (confinement).

Σε πρώτη προσέγγιση, η λύση της εξίσωσης $\mu dg/d\mu = -b_0 g^3$ δίνει, για την τρέχουσα $\alpha_s(\mu) = g^2(\mu)/(4\pi)$:

$$\alpha_s(\mu) \simeq \frac{1}{b_0 \ln(\mu^2/\Lambda_{\text{QCD}}^2)}.$$

Η συνάρτηση αυτή εκφράζει την κβαντομηχανική εξάρτησης της σταθεράς σύζευξης από το μ : στο όριο $\mu \rightarrow \infty$ η $\alpha_s(\mu)$ τείνει στο 0, ενώ για $\mu \approx \Lambda_{\text{QCD}}$ η α_s μεγαλώνει σημαντικά. Η κλίμακα Λ_{QCD} εισάγεται ως σταθερά ολοκλήρωσης της εξίσωσης βήτα και χαρακτηρίζει τη μετάβαση από την διαταρακτική στην μη-διαταρακτική περιοχή.

Η πληρέστερη λύση, μέχρι δύο συντελεστές, ικανοποιεί:

$$\mu \frac{dg}{d\mu} = -b_0 g^3 - b_1 g^5,$$

όπου ο b_1 επίσης υπολογίζεται διαταρακτικά. Η ενσωμάτωση του όρου b_1 βελτιώνει την ακρίβεια της περιγραφής στη μέση περιοχή $\mu \gtrsim \Lambda_{\text{QCD}}$. Στην πράξη, η ακριβής τιμή της Λ_{QCD} εξαρτάται από την επανακανονικοποίηση (π.χ. $\overline{\text{MS}}$) και καθορίζεται από μετρήσεις υψηλής ενέργειας.

Η έννοια της ασυμπτωτικής ελευθερίας είναι θεμελιώδης: επιτρέπει χειρισμό της QCD μέσω θεωρίας διατραπεχών σε πολύ μεγάλες ενέργειες (όπου $g(\mu) \ll 1$), γεγονός που εξηγεί επιτυχώς

πειραματικά δεδομένα σε υψηλές ενέργειες. Αντίθετα, καθώς μ μειώνεται, η σταθερά σύζευξης αυξάνεται, οδηγώντας σε ισχυρή σύζευξη και μη-διαταρακτικές συμπεριφορές (π.χ. σχηματισμό δέσμιων καταστάσεων, εγκλωβισμός).

Η κλίμακα Λ_{QCD} ορίζεται μέσω της εξίσωσης:

$$\Lambda_{\text{QCD}} = \mu \exp\left(-\frac{1}{2b_0\alpha_s(\mu)}\right) [b_0\alpha_s(\mu)]^{-b_1/(2b_0^2)} \times (1 + O(\alpha_s)),$$

όταν ληφθούν υπόψη και οι ανώτερες τάξεις στη συνάρτηση βήτα. Στην πράξη, αυτή η σχέση χρησιμοποιείται για την εξαγωγή της τιμής της Λ_{QCD} από μετρήσεις της α_s σε διάφορες κλίμακες μ .

Συνοψίζοντας, η θεμελιώδης συμπεριφορά της συνάρτησης βήτα της QCD οδηγεί σε ασυπτωτική ελευθερία στο υψηλό ενεργειακό όριο και σε ενίσχυση της σταθεράς σύζευξης στη χαμηλή ενέργεια, καθορίζοντας το πεδίο εφαρμογής διαταρακτικών υπολογισμών και την εμφάνιση μη-διαταρακτικών φαινομένων. Η κλίμακα Λ_{QCD} εμφανίζεται ως σταθερά ολοκλήρωσης και ορίζει το σημείο στο οποίο η διαταρακτική περιγραφή παύει να ισχύει.

3.4 Μη Διαταρακτικά Φαινόμενα και Κίνητρο για Διακριτοποίηση σε Πλέγμα

3.4.1 Εγκλωβισμός (Confinement)

Στις χαμηλές ενεργειακές κλίμακες της QCD, τα κουάρκ και τα γλουόνια δεν εμφανίζονται ως ελεύθερα σωματίδια, αλλά παραμένουν δέσμια σε χρωματικά ουδέτερες δομές (μεσόνια, βαρυόνια). Καταρχάς, η ένδειξη του εγκλωβισμού προκύπτει από τη συμπεριφορά του βρόχου Wilson $W(C)$ σε μεγάλες κλειστές καμπύλες C :

$$\langle W(C) \rangle \propto \exp(-\sigma \text{Area}(C)),$$

όπου $\text{Area}(C)$ το εμβαδόν της επιφάνειας που περιβάλλει ο βρόχος και $\sigma > 0$ η τάση χορδής (string tension). Ο νόμος εμβαδού (area law) υποδηλώνει ότι η ενέργεια που απαιτείται για να απομακρύνει ένα ζεύγος κουάρκ-αντικουάρκ αυξάνεται αναλογικά με την απόστασή τους, οδηγώντας σε γραμμικό δυναμικό στις μεγάλες αποστάσεις. Συγκεκριμένα, το δυναμικό κουάρκ-αντικουάρκ για μεγάλο διαχωρισμό r συμπεριφέρεται περίπου ως

$$V(r) \simeq \sigma r + (\text{υπολειμματικοί όροι μικρότερης σημασίας}).$$

Αυτή η γραμμική αύξηση καθιστά αδύνατη την αποδυνάμωση του δεσμού σε άπειρη απόσταση χωρίς να δημιουργηθεί νέο ζεύγος κουάρκ-αντικουάρκ, επιβεβαιώνοντας τον εγκλωβισμό.

Πέρα από αυτά τα παρατηρησιακά (μη-διαταρακτικά) στοιχεία, έχουν προταθεί ποικιλία θεωρητικών μηχανισμών για την εξήγηση του εγκλωβισμού:

- *Δυικός υπεραγωγός (dual superconductor)*: η ιδέα ότι οι διαταρακτικές διαμορφώσεις του κενού δημιουργούν συμπεριφορά ανάλογη με αυτή ενός υπεραγωγού (με συμπύκνωση μαγνητικών μονόπολων), αναγκάζοντας τα πεδία χρώματος σε σωληνοειδείς δομές (flux tubes) ανάμεσα στα κουάρκ.

- *Δίνη κέντρου (center vortices)*: τοπολογικές διαμορφώσεις πεδίου που συνδέονται με στοιχεία του κέντρου της ομάδας βαθμίδας (π.χ. $\mathbb{Z}_3$ για $\text{SU}(3)$), και η διασπορά τους στο κενό θεωρείται

υπεύθυνη για τον νόμο έκτασης.

- *Μονόπολα και τοπολογικές διαμορφώσεις*: μονόπολα χρώματος ή καλοί τρόποι υπολογισμού της μέσης επιλεγμένης βαθμίδας, που σχετίζονται με δυναμική συγχράτηση. - Άλλες προσεγγίσεις, όπως μοντέλα χορδών ή ολογραφικά υποδείγματα, παρέχουν μια συμπληρωματική οπτική.

Η ποσοτική τεκμηρίωση αυτών των φαινομένων απαιτεί μη διαταραχτικούς υπολογισμούς, ιδίως μέσω διακριτοποίησης σε πλέγμα και Monte Carlo δειγματοληψία των Ευκλείδειων ολοκληρωμάτων διαδρομής. Σε πλέγμα διαστάσεων $N_s^3 \times N_\tau$, με κατάλληλες μετρήσεις βρόχων Wilson και δυναμικού κουάρκ–αντικουάρκ, εκτιμάται η τάση χορδής σ και μελετάται η συμπεριφορά σε διαφορετικές απογυμνωμένες συζεύξεις και μάζες κουάρκ.

3.4.2 Χειρόμορφη Διάσπαση Συμμετρίας και Συμπύκνωμα

Η QCD με κουάρκ έχει (μια τύπου) χειρόμορφη συμμετρία $SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$ όταν οι μάζες κουάρκ είναι μικρές σε σχέση με την κλίμακα Λ_{QCD} . Σε κενό με χαμηλές θερμοκρασίες παρατηρείται δυναμικό σπασίμο της χειρόμορφης συμμετρίας προς $SU(N_f)_V$, με μη μηδενική αναμενόμενη τιμή του συμπυκνώματος

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle \neq 0.$$

Αυτό οδηγεί στον σχηματισμό ψευδο-Goldstone μεσονίων (π.χ. τα π-μεσόνια), των οποίων οι μάζες υπακούουν σε σχέσεις τύπου Gell-Mann–Oakes–Renner όταν οι μάζες των κουάρκ είναι μικρές αλλά μη μηδενικές. Ο ακριβής προσδιορισμός του $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ και των ιδιοτήτων των ψευδο-Goldstone μεσονίων απαιτεί μη-διαταραχτικές μεθόδους, καθώς το δυναμικό σπασίμο εμπλέκει μεγάλες διακυμάνσεις πεδίου. Σε πλέγμα, με κατάλληλες μετρήσεις προσδιορίζεται το συμπύκνωμα, εξετάζοντας την εξάρτηση από τη μάζα κουάρκ και την επέκταση στο όριο μηδενικής μάζας (chiral limit). Μεθοδολογικά, απαιτείται έλεγχος πεπερασμένου όγκου (να ισχύει $m_\pi L \gg 1$) και επέκταση στο συνεχές για αξιόπιστα αποτελέσματα.

3.4.3 Τοπολογικές Δομές, Ανωμαλίες και Ινστατόνια (Instantons)

Η Ευκλείδια θεωρία Yang–Mills¹⁵ θεωρία παρουσιάζει τοπολογικές διαμορφώσεις με μη μηδενικό τοπολογικό φορτίο (π.χ. instantons), που συνδέονται με την $U(1)_A$ ανωμαλία και τη δομή του κενού. Το συμπύκνωμα απο ινστατόνια επηρεάζει φαινόμενα όπως το πρόβλημα $U(1)_A$ ¹⁶ της QCD και την κατανομή μαζών μεσονίων (π.χ. η μάζα του η). Σε πλέγμα, εντοπίζουμε και

¹⁵Η Ευκλείδια δράση Yang–Mills για ένα βαθμωτό πεδίο $A_\mu^a(x)$ ορίζεται ως

$$S_{\text{YM}}[A] = \frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}^a(x) F^{a\mu\nu}(x),$$

όπου

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c$$

είναι ο τένσορας πεδίου χρώματος και g η σταθερά σύζευξης.

¹⁶Το «πρόβλημα $U(1)_A$ » της QCD αναφέρεται στην παρατήρηση ότι, παρά την εμφάνιση της κλασικής αξονικής συμμετρίας $U(1)_A$ στην κλασική Λαγκραντζιαν της QCD με μηδενικές μάζες, αυτή η συμμετρία δεν υφίσταται στο κβαντικό επίπεδο εξαιτίας της αξονικής ανωμαλίας Adler–Bell–Jackiw. Ως αποτέλεσμα, δεν παρατηρείται ψευδο-Goldstone μποζόνιο (π.χ. για την πολωμένη $U(1)_A$), και εξηγείται η αυξημένη μάζα του η-μεσονίου σε σχέση με τα υπόλοιπα ψευδοκλιμακωτά.

μελετούμε αυτές τις τοπολογικές διαμορφώσεις με τεχνικές όπως smearing¹⁷ (π.χ. APE, stout) ή Wilson flow, που εξομαλύνουν τα πεδία ώστε να αποκαλύπτονται τοπολογικές σταθερές. Το πλήθος ινσταντονίων και η κατανομή τους μελετώνται σε σχέση με το μέγεθος του πλέγματος, τη θερμοκρασία και άλλες παραμέτρους. Επιπλέον, η μελέτη της ανωμαλίας $U(1)_A$ και των τοπολογικών επιδεκτηχοτήτων βασίζεται σε αυτές τις μετρήσεις. Η εξαγωγή τοπολογικού φορτίου πρέπει να αντιμετωπίσει θορύβους UV και πλεγματικά σφάλματα διακριτοποίησης, γι' αυτό απαιτούνται εξειδικευμένες μέθοδοι και επέκταση στο συνεχές.

3.4.4 Θερμοδυναμική QCD

Η μελέτη της QCD σε υψηλές θερμοκρασίες και/ή πυκνότητες αφορά το σχηματισμό πλάσματος κουάρκ-γλουονίων (quark-gluon plasma) και τις μεταβάσεις φάσεων:

- *Απεγκλωβισμός (deconfinement)*: σε θερμοκρασία T_c , η τάση χορδής εξασθενεί και τα χρωματικά φορτισμένα σωματίδια απελευθερώνονται από τον εγκλωβισμό, σχηματίζοντας πλάσμα.
- *Αποκατάσταση της χειρόμορφης συμμετρίας*: πάνω από T_c , το συμπύκνωμα $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ μειώνεται σημαντικά ή τείνει προς μηδέν, υποδεικνύοντας αποκατάσταση της συμμετρίας $SU(N_f)_L \times SU(N_f)_R$.

Σε Ευκλείδια πλέγμα, οι μελέτες σε πεπερασμένη θερμοκρασία πραγματοποιούνται με σταθερό N_τ και μεταβολή απογυμνωμένων συζευξέων ώστε να αλλάζει a , ή με σταθερό a και αλλαγή N_τ , διατηρώντας $T = 1/(aN_\tau)$. Μετρούνται παράμετροι τάξης, όπως η μέση Polyakov κλειστή καμπύλη (για απεγκλωβισμό) και το συμπύκνωμα $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ (για χειρόμορφη μετάβαση), καθώς και επιδεκτηχότητες ώστε να εντοπιστεί η φύση της μετάβασης (πρώτης τάξης, δεύτερης ή crossover). Επίσης υπολογίζεται η καταστατική εξίσωση (equation of state): πίεση, ενέργεια, πυκνότητα εντροπίας ως συναρτήσεις της θερμοκρασίας. Αν αναπτύξεις διαταραχτικά σε υψηλές θερμοκρασίες με επανα-ομαδοποιήσεις (resummations) δίνουν κάποια εικόνα για πολύ υψηλές T , η ακριβής περιγραφή γύρω από T_c και μέσες θερμοκρασίες απαιτεί υπολογισμούς στο πλέγμα. Οι θερμικοί QCD υπολογισμοί χρειάζονται κλιμάκωση πεπερασμένου όγκου (αρκετά μεγάλα N_s ώστε $m_\pi L \gg 1$), η επέκταση του συνεχούς (επέκταση στο $a \rightarrow 0$ με σταθερό T), και κατάλληλη επιλογή φερμιονικής διακριτοποίησης για αξιόπιστη χειρόμορφη συμπεριφορά.

3.5 Σχέση Συνεχούς QCD και Πλεγματικής QCD

3.5.1 Στόχος της Διακριτοποίησης σε Πλέγμα

Η χβαντική χρωμοδυναμική (QCD) περιέχει έντονα μη-διαταραχτικά φαινόμενα (π.χ. εγκλωβισμός, δυναμική χειρόμορφη διάσπαση συμμετρίας) που δεν μπορούν να προσεγγιστούν αξιόπιστα

¹⁷Οι τεχνικές *smearing* είναι μέθοδοι ομαλοποίησης (smoothing) των βαθμωτών συνδέσμων ή των πεδίων στην πλέγματική QCD, με στόχο τη μείωση των UV θορύβων και τη βελτίωση της επικάλυψης των τελεστών με τις φυσικές καταστάσεις. Στο πιο γνωστό APE smearing, ένας smeared σύνδεσμος ορίζεται αναδρομικά ως

$$U_\mu^{(n+1)}(x) = \text{Proj}_{SU(3)} \left[(1 - \alpha) U_\mu^{(n)}(x) + \frac{\alpha}{6} \sum_{\nu \neq \mu} U_\nu^{(n)}(x) U_\mu^{(n)}(x + \hat{\nu}) U_\nu^{(n)\dagger}(x + \hat{\mu}) \right],$$

όπου α η παράμετρος smearing και $\text{Proj}_{SU(3)}$ η προβολή στην ομάδα $SU(3)$. Άλλες διαδεδομένες μέθοδοι είναι το stout smearing και το HYP smearing, που διαφοροποιούνται στον τρόπο κατασκευής των «στήριγμα»-όρων (staples) και στις παραμέτρους τους.

με διαταραχτικές μεθόδους. Ο κύριος στόχος της Πλεγματικής QCD είναι η προσφορά μίας ρυθμισμένης (regularized) μη-διαταραχτικής μεθόδου «από πρώτες αρχές» (first-principles) για τον υπολογισμό φυσικών παρατηρητών. Κεντρική ιδέα:

- **UV ρυθμιστής μέσω πλέγματος:** Η διακριτοποίηση του συνεχούς χώρου-χρόνου εισάγει ένα UV cutoff $1/a$, όπου a το βήμα του πλέγματος. Έτσι αποφεύγονται απειρισμοί σε υπολογισμούς για ενέργειες/ορμές πάνω από την κλίμακα $1/a$.
- **Κατάλληλη διατύπωση δράσης:** Επιλέγουμε διακριτές δράσεις για τα πεδία βαθμίδας και τα φερμιονικά πεδία με σκοπό (α) να αναπαράγουν την συνεχή QCD όταν $a \rightarrow 0$, (β) να ελαχιστοποιούν συστηματικά σφάλματα διακριτοποίησης. Παραδείγματα:
 - Δράση Wilson (πλακέτα) και βελτιωμένες δράσεις (Symanzik-improved: Lüscher–Weisz κ.ά.).
 - Φερμιονικοί όροι χωρίς ανεπιθύμητο διπλασιασμό φερμιονίων (doubblers): Φερμιόνια Wilson (με όρο Wilson για απόσβεση διπλασιασμού, επιφέροντας σφάλματα $O(a)$), βελτιωμένα clover (Sheikholeslami–Wohlert) για αφαίρεση $O(a)$, ή φερμιονικές διακριτοποιήσεις με καλή χειρόμορφη συμπεριφορά (domain wall, overlap, staggered fermions κ.ά.).
- **Όριο συνεχούς $a \rightarrow 0$:** Καθώς a μειώνεται, η διακριτή θεωρία πρέπει να συγκλίνει στη συνεχή QCD: οι φυσικές μάζες και οι διάφορες παρατηρήσιμες ποσότητες σε μονάδες a τείνουν στις αντίστοιχες του συνεχούς. Η κατάλληλη ρύθμιση της ακανονικοποίησης σταθεράς σύζευξης $g_0(a)$ (ή της απογυμνωμένης σταθεράς σύζευξης $\beta = 6/g_0^2$ για SU(3)) εξασφαλίζει ότι $a\Lambda_{\text{QCD}} \rightarrow 0$.
- **Αρχή παγκοσμιότητας (universality):** Διαφορετικές επιλογές διακριτής δράσης που σέβονται τις συμμετρίες της QCD και έχουν το σωστό όριο συνεχούς ανήκουν στην ίδια κατηγορία παγκοσμιότητας. Οι διαφορές εμφανίζονται ως συστηματικά σφάλματα διακριτοποίησης (σφάλματα τάξης $O(a)$, $O(a^2)$ κ.ά.) αλλά εξαλείφονται στο $a \rightarrow 0$.
- **Μεθοδολογία Monte Carlo:** Το Ευκλείδιο ολοκλήρωμα διαδρομής δειγματοληπτείται με κατανομή $\exp(-S_E^{\text{lattice}})$ για γνωστές τιμές απογυμνωμένης σύζευξης και μαζών κουάρκ, αποδίδοντας μη-διαταραχτικούς υπολογισμούς παρατηρήσιμων.

3.5.2 Όριο Συνεχούς και Επανακανονικοποίηση στη Πλεγματική QCD

Για την επίτευξη όριου συνεχούς, απαιτείται:

Τρέχουσα ακανονικοποίητη σταθερά σύζευξη και ασυμπτωτική κλίμακα

Η ακανονικοποίητη σταθερά $g_0(a)$ (ή $\beta = 6/g_0^2$) πρέπει να εξαρτάται από το a με τον ίδιο τρόπο που στη συνεχή θεωρία το $g(\mu)$ τρέχει με την κλίμακα μ . Στη πλεγματική QCD, η σχέση μεταξύ a και g_0 καθορίζεται μέσω της συμπεριφοράς των παρατηρησίμων ποσοτήτων (π.χ. string tension, μάζες αδρονίων) που μετρώνται σε πλεγματικές μονάδες και συνδέονται με φυσικές μονάδες:

$$a(g_0) \propto \frac{1}{\Lambda_{\text{QCD}}} \exp\left(-\frac{1}{2b_0g_0^2}\right) (b_0g_0^2)^{-b_1/(2b_0^2)} \times [1 + O(g_0^2)].$$

Έτσι, καθώς $g_0 \rightarrow 0$ (μικρή απογυμνωμένη σύζευξη), $a \rightarrow 0$. Στην πράξη, προσδιορίζουμε a με επιλογή κλίμακας: μετρούμε έναν παρατηρήσιμο μέγεθος $Q(a)$ που έχει γνωστή τιμή Q_{phys} (π.χ. παράμετρο Sommer r_0 ¹⁸, mass splittings), και ορίζουμε:

$$a = \frac{a m_g}{m_{g,\text{phys}}}$$

,όπου $a m_g$ η μάζα σε μονάδες πλέγματος.

Ρύθμιση απογυμνωμένων παραμέτρων

Στη πλεγματική QCD, οι απογυμνωμένοι παραμέτροι (g_0 , μάζες κουάρκ $m_{0,f}$) επιλέγονται ώστε σε ένα σύνολο πλεγμάτων με διαφορετικά g_0 (άρα διαφορετικά a) να διατηρούμε σταθερά κάποια συνθήκη φυσικού σημείου, π.χ. σταθερό λόγο m_π/m_ρ ή σταθερό $m_\pi L$ για πεπερασμένο όγκο. Έτσι παρακολουθούμε παρατήρηση ενώ προσεγγίζουμε $a \rightarrow 0$.

Επέκταση στο Όριο του Συνεχούς

Για κάθε παρατηρήσιμο μέγεθος O , υπολογίζουμε $O(a)$ σε σειρά πλέγματος με διαφορετικά a . Σύμφωνα με τη θεωρία Symanzik, η εξάρτηση πλησίον του συνεχούς ορίου γράφεται ως

$$O(a) = O_{\text{cont}} + c_1 a^p + c_2 a^{p+1} + \dots,$$

όπου p η τάξη του κύριου σφάλματος διακριτοποίησης (π.χ. $p = 1$ για μη-βελτιωμένα Wilson φερμιόνια, $p = 2$ για βελτιωμένους όρους χωρίς $O(a)$). Εκτελούμε σταθμισμένη προσαρμογή («σταθμισμένο fitting») των δεδομένων $O(a)$ έναντι a^p (ή και υψηλότερων όρων εφόσον διαθέτουμε αρκετά σημεία) για να εκτιμήσουμε O_{const} . Λαμβάνονται υπ' όψιν:

- **Στατιστικά σφάλματα:** υπολογίζονται μέσω bootstrap/jackknife, λαμβάνοντας υπόψη αυτοσυσχετίσεις των Monte Carlo δειγμάτων.
- **Συστηματικά σφάλματα:**
 - Επιδράσεις πεπερασμένου όγκου: επιλέγουμε N_s ώστε $m_\pi L \gg 1$.
 - Καθορισμός κλίμακας (scale setting): διαφορετικές επιλογές παρατηρήσιμων μεγεθών για καθορισμό κλίμακας οδηγούν σε μικρές συστηματικές διαφορές που αξιολογούνται.
 - Επιλογή εύρους προσαρμογής (fit range): συμπερίληψη ή παράβλεψη σημείων με σχετικά μεγάλα a για να ελεγχθεί η σταθερότητα του προέκτασης στο συνεχές.
 - Διακριτές δράσεις: σύγκριση μη-βελτιωμένων έναντι βελτιωμένων δράσεων ως έλεγχος παγκοσμιότητας (universality).

¹⁸Στο C. Gattringer C. B. Lang, *Quantum Chromodynamics on the Lattice* (Springer, 2010), Ενότητα 3.5 (“Sommer scale”), ορίζεται το Sommer parameter r_0 από

$$r_0^2 F(r_0) = 1.65$$

και το βήμα πλέγματος ως

$$a = \frac{r_0^{\text{phys}}}{(r_0/a)}.$$

Επανακανονικοποίηση Παρατηρήσιμων Μεγεθών

Οι διακριτοί τελεστές $O^{\text{lattice}}(x)$ που μετρούνται πρέπει να αντιστοιχούν σε τελεστές του συνεχούς $O^{\text{const}}(\mu)$ σε συγκεκριμένη επανακανονικοποίηση. Αυτό απαιτεί:

1. **Μη-διαταρακτική επανακανονικοποίηση** (π.χ. σχήμα RI/MOM): υπολογίζουμε μη-διαταρακτικά στο πλέγμα τις σταθερές επανακανονικοποίησης $Z_O(a, \mu)$ σε ενδιάμεση κλίμακα μ , ώστε

$$O^{\overline{\text{MS}}}(\mu) = Z_O^{\overline{\text{MS}} \leftarrow \text{RI/MOM}}(\mu) Z_O^{\text{lattice} \leftarrow \text{RI/MOM}}(a, \mu) O^{\text{lattice}}(a).$$

Η πρώτη συνιστώσα επιτυγχάνεται διαταρακτικά (matching RI/MOM $\rightarrow \overline{\text{MS}}$), η δεύτερη μη-διαταρακτικά στο πλέγμα.

2. **διαταρακτική σύνδεση**: για σχήματα επανακανονικοποίησης όπως $\overline{\text{MS}}$, υπολογίζουμε διαταρακτικά (στο συνεχές) τους συντελεστές μετατροπής από το ενδιάμεσο σχήμα (RI/MOM) στο $\overline{\text{MS}}$.
3. **Αντιμετώπιση ανάμειξης τελεστών** (operator mixing): σε φερμιονικούς τελεστές υψηλής διάστασης ή με ειδικές συμμετρίες, πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν πιθανές αναμίξεις υπό επανακανονικοποίηση, τόσο μη-διαταρακτικά όσο και διαταρακτικά.
4. **Βελτίωση των τελεστών**: προσθήκη όρων $O(a)$ ή $O(a^2)$ ώστε οι διακριτοί τελεστές να προσεγγίζουν καλύτερα τα ανάλογα του συνεχούς, μειώνοντας συστηματικά σφάλματα πριν την εξαγωγή.

3.5.3 Κατασκευή Διακριτών Τελεστών και Ευκλείδιες Συσχετίσεις

Για κάθε παρατηρήσιμο μέγεθος στο συνεχές (π.χ. στοιχείο πίνακα ρεύματος, πυκνώματα, ενέργεια-πίεση κ.ά.), πρέπει να κατασκευαστεί αντίστοιχος διακριτός τελεστής $O^{\text{lattice}}(n)$ που:

- **Να σέβεται τις συμμετρίες του πλέγματος**: π.χ. υποομάδες περιστροφών του πλέγματος, χειρόμορφες συμμετρίες κατά περίπτωση.
- **Όριο συνεχούς**: όταν $a \rightarrow 0$, $O^{\text{lattice}}(n)$ τείνει στον τελεστή του συνεχούς $O^{\text{const}}(x)$ συν κατάλληλους παράγοντες Z_O .
- **Τοπικότητα**: οι τελεστές διακριτοποίησης είναι τοπικοί ή σχεδόν τοπικοί (παράγοντες έως μερικές αποστάσεις $O(a)$).
- **Βελτίωση**: προστίθενται διακριτοί όροι υψηλότερης τάξης σε a για μείωση συστηματικών σφαλμάτων.

Στη συνέχεια, υπολογίζουμε Ευκλείδιες συσχετίσεις

$$C(t) = \sum_{\mathbf{x}} \langle O^\dagger(\mathbf{x}, t) O(\mathbf{0}, 0) \rangle,$$

όπου το άθροισμα σε χωρικές θέσεις εξασφαλίζει μηδενική ορμή. Η εκθετική συμπεριφορά $C(t) \sim e^{-mt}$ για μεγάλο t δίνει τη μάζα m της ανάλογης κατάστασης. Επαναλαμβάνουμε για διάφορα a και εξάγουμε στο όριου συνεχούς όπως παραπάνω.

3.5.4 Πρακτικά Βήματα

1. **Επιλογή απογυμνωμένων παραμέτρων:** Για κάθε πλέγμα, επιλέγουμε απογυμνωμένες συζεύξεις g_0 και απογυμνωμένες μάζες κουάρκ $m_{0,f}$ ώστε να βρισκόμαστε κοντά στο επιθυμητό φυσικό σημείο (π.χ. σωστή μάζα πιονίου).
2. **Καθορισμός κλίμακας:** Μετρούμε ένα σταθερό παρατηρήσιμο μέγεθος Q (π.χ. Sommer parameter r_0 , Wilson flow κλίμακα t_0) για να καθορίσουμε a σε φυσικές μονάδες.
3. **Υπολογισμός Ευκλείδιων συσχετιστών:** Δειγματοληψία Monte Carlo για πλήθος διαμορφώσεων, μέτρηση των τελεστών συσχέτισης O^{lattice} .
4. **Επέκταση μάζας ή άλλου παρατηρητού:** Από την εκθετική πτώση των συσχετιστών, εκτιμούμε μάζες και στοιχεία πίνακα.
5. **Επανακανονικοποίηση:** Υπολογίζουμε $Z_O(a, \mu)$ μη-διαταρακτικά (RI/MOM κ.ά.) ή διαταρακτικά, και αντιστοιχούμε στο επιθυμητό σχήμα στο συνεχές (π.χ. $\overline{\text{MS}}$).
6. **Επέκταση στο συνεχές:** Για τον παρατηρήσιμο μέγεθος $O(a)$ (π.χ. μάζα, σταθερά διάσπασης, στοιχείο πίνακα), εκτελούμε fitting έναντι a^p ώστε να λάβουμε O_{const} .
7. **Έλεγχος συστηματικών σφαλμάτων:** Επιδράσεις πεπερασμένου όγκου, επιλογή διαφορετικών δράσεων (βελτιωμένων), επιλογή fit ranges, έλεγχος συμπεριφορά κλιμάκωσης (ασυμπτωτική κλιμάκωση vs. μη-διαταρακτικές διωρθώσεις).
8. **Αξιολόγηση τελικών αποτελεσμάτων:** Παρουσίαση O_{const} με στατιστικά και συστηματικά σφάλματα, σύγκριση με πειραματικά ή θεωρητικά δεδομένα.

Με την παραπάνω διαδικασία, η πλεγματική QCD παρέχει αξιόπιστη γέφυρα μεταξύ της μη-διαταρακτικής φυσικής της QCD σε χαμηλές ενέργειες και της συνεχούς θεωρίας, επιτυγχάνοντας τον καθορισμό της μάζας αδρονίων, της σταθεράς διάσπασης, του πλάτους σκέδασης (μέσω Lüscher μεθόδου), τα θερμοδυναμικά μεγέθη κ.ά., παίρνοντας το όριο του συνεχούς $a \rightarrow 0$ εντός ελεγχόμενων σφαλμάτων.

4 Διακριτοποίηση Πεδίων Βαθμίδας στο Ευκλείδιο Πλέγμα

Η ποσοτικοποίηση θεωριών βαθμίδας στο πλέγμα απαιτεί την προσεκτική διακριτοποίηση τόσο των βαθμωτών πεδίων όσο και των πεδίων βαθμίδας, ώστε να διατηρείται η τοπική συμμετρία της θεωρίας και να επιτρέπεται η προσέγγιση στο όριο του συνεχούς. Ειδικά στη Πλεγματική Κβαντική Χρωμοδυναμική (Lattice QCD), η περιγραφή των πεδίων βαθμίδας απαιτεί την εισαγωγή μεταβλητών που αντιστοιχούν σε τελεστές παράλληλης μεταφοράς μεταξύ των κόμβων του πλέγματος. Η βασική έννοια της πλακέτας και η δράση Wilson παίζουν κεντρικό ρόλο στη διαμόρφωση της δυναμικής του συστήματος στο διακριτό υπόβαθρο.

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζεται η διακριτοποίηση των πεδίων βαθμίδας στο Ευκλείδιο πλέγμα, με έμφαση στη γεωμετρική σημασία των μεταβλητών σύνδεσης, στην κατασκευή της πλακέτας, καθώς και στη διακριτοποιημένη μορφή της δράσης. Εξετάζονται επίσης τεχνικές

βελτίωσης όπως η προσέγγιση του Symanzik και η κανονικοποίηση τύπου Tadpole, καθώς και μέθοδοι καθορισμού της φυσικής κλίμακας.

4.1 Μεταβλητές Σύνδεσης ως Παράγοντες Παράλληλης Μεταφοράς

Στο συνεχές, η παραλληλία ενός πεδίου (π.χ. του κυματικού πεδίου $\psi(x)$) καθορίζεται από τη συναλλοίωτη παράγωγο ∂_μ , και για να διατηρηθεί η αναλλοιωτήτητα βαθμίδας εισάγεται η συναλλοίωτη παράγωγος $D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu(x)$, με το $A_\mu(x)$ να είναι το πεδίο βαθμίδας και g η σταθερά σύζευξης.

Στο πλέγμα, όμως, η έννοια της παραγωγού αντικαθίσταται από πεπερασμένες διαφορές και δεν υφίσταται πεδίο $A_\mu(x)$ σε κάθε σημείο. Για να διατηρήσουμε τη συμμετρία βαθμίδας, εισάγουμε τους **τελεστές παράλληλης μεταφοράς** ανάμεσα σε σημεία του πλέγματος: τις **μεταβλητές σύνδεσης** $U_\mu(x)$.

4.1.1 Ορισμός

Η μεταβλητή σύνδεσης $U_\mu(x)$ είναι στοιχείο της ομάδας βαθμίδας (π.χ. $SU(3)$ για την QCD) και αντιστοιχεί στη **μεταφορά** ενός πεδίου από το σημείο x στο $x + \hat{\mu}$. Συγκεκριμένα:

$$U_\mu(x) \approx \exp(igaA_\mu(x)), \quad (4.1)$$

όπου:

- a είναι η απόσταση πλέγματος,
- g η σταθερά σύζευξης,
- $A_\mu(x)$ το συνεχές πεδίο βαθμίδας.

Η παραπάνω εξίσωση αποτελεί την διακριτοποιημένη μορφή του τελεστή παράλληλης μεταφοράς στον συνεχή χώρο.

4.1.2 Δράση πάνω σε πεδία

Αν $\psi(x)$ είναι ένα πεδίο στον κόμβο x , τότε η παράλληλη μεταφορά του στο $x + \hat{\mu}$ δίνεται από:

$$\psi(x + \hat{\mu}) = U_\mu(x) \psi(x). \quad (4.2)$$

Αντίστοιχα, η μεταφορά προς τα πίσω (από $x + \hat{\mu}$ στο x) υλοποιείται μέσω του ερμιτιανού συζυγούς:

$$\psi(x) = U_\mu^\dagger(x) \psi(x + \hat{\mu}). \quad (4.3)$$

Αυτό διασφαλίζει ότι η **κανονικότητα** και η **συνοχή** της θεωρίας διατηρούνται κατά τη μεταφορά των πεδίων στο πλέγμα.

4.1.3 Μετασχηματισμοί βαθμίδας

Οι μεταβλητές $U_\mu(x)$ μετασχηματίζονται κατά τρόπο που εξασφαλίζει την **τοπική συμμετρία** βαθμίδας στο πλέγμα:

$$U_\mu(x) \rightarrow \Lambda(x)U_\mu(x)\Lambda^\dagger(x + \hat{\mu}), \quad (4.4)$$

όπου $\Lambda(x)$ είναι στοιχείο της ομάδας βαθμίδας στο σημείο x . Ο ορισμός αυτός διασφαλίζει ότι το παραγόμενο μέγεθος από τις μεταβλητές σύνδεσης παραμένει **αναλλοίωτο** υπο μετασχηματισμούς βαθμίδας.

4.1.4 Ιδιότητες

- Οι μεταβλητές σύνδεσης είναι **αντίστροφες** μεταξύ τους:

$$U_{-\mu}(x + \hat{\mu}) = U_\mu^\dagger(x),$$

δηλαδή η αντίστροφη μεταφορά υλοποιείται μέσω του ερμιτιανού συζυγούς.

- Εισάγοντας αυτές τις μεταβλητές, μπορούμε να ορίσουμε παρατηρήσιμα μεγέθη όπως ο **βρόχος Wilson** και η **πλεγματική δράση** των θεωριών βαθμίδας.

4.2 Πλακέτα και Δράση Wilson

Στις θεωρίες βαθμίδας στο πλέγμα, η θεμελιώδης κατασκευή για την περιγραφή της καμπυλότητας του πεδίου βαθμίδας είναι η **πλακέτα**. Αυτή αντιστοιχεί σε ένα ελάχιστο τετραγωνικό βρόχο στο πλέγμα, κατασκευασμένο από τις μεταβλητές σύνδεσης $U_\mu(x)$, και παίζει ρόλο ανάλογο του τανυστή πεδίου $F_{\mu\nu}$ στο συνεχές.

4.2.1 Ορισμός Πλακέτας

Η πλακέτα στο επίπεδο (μ, ν) με αρχικό σημείο το x ορίζεται ως:

$$U_{\mu\nu}(x) = U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x). \quad (4.5)$$

Πρόκειται για ένα βρόχο τεσσάρων βημάτων γύρω από το μικρότερο τετράγωνο στο πλέγμα, και το ίχνος της αποτελεί **βαθμωτό αναλλοίωτο** μέγεθος. Η πλακέτα εμπεριέχει την πληροφορία για την τοπική καμπυλότητα του πεδίου βαθμίδας, και σε κατάλληλο όριο ($a \rightarrow 0$) προσεγγίζει:

$$\text{Tr}[U_{\mu\nu}(x)] \approx \text{Tr} \left[\exp \left(ia^2 g F_{\mu\nu}(x) \right) \right]. \quad (4.6)$$

4.2.2 Δράση Wilson

Η πιο απλή δράση που μπορεί να κατασκευαστεί με βαθμωτά αναλλοίωτο τρόπο είναι η λεγόμενη **δράση Wilson**, η οποία προκύπτει από το άθροισμα του ίχνους των πλακετών σε όλο το πλέγμα:

$$S_W[U] = \frac{\beta}{N} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \text{Re Tr} [\mathbb{I} - U_{\mu\nu}(x)], \quad (4.7)$$

όπου:

- $\beta = \frac{2N}{g^2}$ για $\text{SU}(N)$,
- g η σταθερά σύζευξης,
- η $\text{Re Tr} [\mathbb{I} - U_{\mu\nu}(x)]$ είναι θετικά ορισμένη.

Η δράση Wilson είναι μία διακριτή μορφή της συνεχούς δράσης Yang–Mills:

$$S_{\text{YM}} = \frac{1}{2} \int d^4x \text{Tr}[F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)], \quad (4.8)$$

και μπορεί να αποδειχθεί ότι σε κατάλληλο όριο πλέγματος ($a \rightarrow 0$) αναπαράγει την παραπάνω έκφραση με ακρίβεια $O(a^2)$. Η παρουσία του ίχνους εξασφαλίζει τη αναλλοιωτήτητα βαθμίδας, ενώ η χρήση της πραγματικής τιμής περιορίζει τη δράση σε αριθμητικά θετικές τιμές, ευνοώντας τη χρήση σε προσομοιώσεις.

Η δράση Wilson χρησιμοποιείται ευρέως σε Monte Carlo προσομοιώσεις, καθώς επιτρέπει την δειγματοληψία των διαμορφώσεων πλέγματος με πιθανότητα ανάλογη προς e^{-S_W} , σύμφωνα με την Ευκλείδεια εκδοχή της αρχής δράσης.

4.3 Το Συνεχές Όριο και Τεχνικές Βελτίωσης

Η δράση Wilson περιλαμβάνει σφάλματα τάξης $O(a^2)$, τα οποία προκύπτουν από την κατά προσέγγιση αναπαράσταση του συνεχούς τανυστή πεδίου μέσω των πλακετών. Προκειμένου να προσεγγίσουμε πιο γρήγορα και με μεγαλύτερη ακρίβεια το όριο συνεχούς (δηλαδή $a \rightarrow 0$), εισάγονται **τεχνικές βελτίωσης** που στοχεύουν στη μείωση των σφαλμάτων διακριτοποίησης.

4.3.1 Ανάπτυγμα Ισχυρής Σύζευξης

Στο όριο ισχυρής σύζευξης (δηλαδή για μικρές τιμές του β), η θεωρία μπορεί να προσεγγιστεί μέσω αναπτύγματος σε δυνάμεις του β . Αυτό είναι χρήσιμο για την αναλυτική μελέτη ποιοτικών χαρακτηριστικών του μοντέλου, όπως η συγκράτηση (confinement). Ωστόσο, για την ακριβή σύνδεση με το όριο του συνεχούς, χρειάζεται βελτίωση της δράσης ώστε να περιοριστούν τα σφάλματα από την πλεγματική προσέγγιση.

4.3.2 Βελτίωση κατά Symanzik

Η προσέγγιση Symanzik βασίζεται στην ιδέα της συστηματικής εξάλειψης όρων διακριτοποίησης μέσω της προσθήκης συμπληρωματικών όρων στη δράση. Συγκεκριμένα, εισάγονται πρόσθετες συνεισφορές από μεγαλύτερους βρόχους (όπως ορθογώνιες διαδρομές 1×2) που αντισταθμίζουν τα σφάλματα $O(a^2)$. Η γενική μορφή μιας τέτοιας δράσης είναι:

$$S = \sum_i c_i S_i[U], \quad (4.9)$$

όπου οι S_i είναι όροι που περιλαμβάνουν διαφορετικά γεωμετρικά σχήματα στο πλέγμα και τα c_i είναι συντελεστές που επιλέγονται ώστε να ακυρώνουν συστηματικά τους όρους διακριτοποίησης.

4.3.3 Κανονικοποίηση τύπου Tadpole

Η κανονικοποίηση τύπου tadpole διορθώνει τις μεταβλητές σύνδεσης $U_\mu(x)$ που αποκλίνουν από την μονάδα λόγω χβαντικών διορθώσεων, ιδίως σε προσομοιώσεις ισχυρής σύζευξης. Η μέθοδος προτείνει την επανακανονικοποίηση των μεταβλητών με χρήση του μέσου όρου του ίχνους της πλακέτας:

$$u_0 = \left\langle \frac{1}{N} \text{Re Tr } U_{\mu\nu}(x) \right\rangle^{1/4}. \quad (4.10)$$

Στη συνέχεια, οι μεταβλητές επανακανονικοποιούνται μέσω της αντικατάστασης $U_\mu(x) \rightarrow \frac{U_\mu(x)}{u_0}$, επιταχύνοντας την προσέγγιση του συνεχούς ορίου.

4.4 Καθορισμός της Φυσικής Κλίμακας

Οι υπολογισμοί σε θεωρίες πεδίου στο πλέγμα είναι κατ' αρχήν **χρησιμοποιώντας αδιάστατες ποσότητες**: τα αποτελέσματα εκφράζονται σε μονάδες του πλέγματος, δηλαδή ως καθαρές αριθμητικές τιμές συναρτήσει της πλεγματικής απόστασης a . Για να μεταφραστούν αυτά τα αποτελέσματα σε **φυσικές μονάδες** (όπως GeV ή fm), πρέπει να προσδιοριστεί η τιμή του a σε σχέση με κάποια φυσική ποσότητα.

4.4.1 Μέθοδοι Καθορισμού Κλίμακας

Μία από τις πιο συνηθισμένες τεχνικές είναι η χρήση μιας **παρατηρήσιμης** φυσικής ποσότητας —π.χ. της μάζας ενός μεσονίου ή της κλίμακας απεγκλωβισμού— η οποία υπολογίζεται τόσο θεωρητικά στο πλέγμα όσο και έχει γνωστή πειραματική τιμή. Τότε το πλεγματικό βήμα προκύπτει ως

$$a = \frac{a m_g}{m_{g,\text{phys}}}$$

,όπου $a m_g$ η μάζα σε μονάδες πλέγματος.

Συχνά χρησιμοποιούνται ποσότητες που σχετίζονται με το δυναμικό μεταξύ στατικών κουάρκ, όπως η απόσταση Sommer r_0 , που ορίζεται από:

$$r^2 \frac{dV(r)}{dr} \Big|_{r=r_0} = 1.65, \quad (4.11)$$

και επιτρέπει τον προσδιορισμό του a μέσω της γραφικής συμπεριφοράς του πλεγματικού δυναμικού.

4.4.2 Εξάρτηση από το β

Η πλεγματική σταθερά a εξαρτάται από την παράμετρο σύζευξης β μέσω της κλίμακας Λ της QCD. Για τιμές β μεγάλες (ασθενής σύζευξη), ισχύει προσεγγιστικά:

$$a(\beta)\Lambda_L = f(\beta) = \left(\frac{6b_0}{\beta}\right)^{b_1/2b_0^2} \exp\left(-\frac{\beta}{12b_0}\right), \quad (4.12)$$

όπου b_0 και b_1 είναι οι συντελεστές της βήτα-συνάρτησης για την ομάδα $SU(N)$. Αυτό επιτρέπει την εύρεση του φυσικού a για δεδομένο β , είτε αναλυτικά είτε μέσω προσομοιώσεων.

4.4.3 Θερμοδυναμικά Μεγέθη

Η φυσική κλίμακα είναι ιδιαίτερα κρίσιμη για τον υπολογισμό θερμοδυναμικών μεγεθών, όπως η θερμοκρασία:

$$T = \frac{1}{N_t a}, \quad (4.13)$$

όπου N_t είναι ο αριθμός των χρονικών επιπέδων του πλέγματος. Συνεπώς, για να προσδιορίσουμε φυσικά μεγέθη που εξαρτώνται από τη θερμοκρασία, απαιτείται ακριβής γνώση της σχέσης μεταξύ a και β .

4.5 Βρόχοι Wilson και το Φαινόμενο του εγκλωβισμού

Ο εγκλωβισμός του χρώματος (confinement) αποτελεί ένα από τα πιο θεμελιώδη και μυστηριώδη χαρακτηριστικά της QCD. Δεν έχει ακόμα αποδειχθεί αναλυτικά στο συνεχές, ωστόσο, το πλέγμα παρέχει ένα φυσικό περιβάλλον για τη μελέτη του μέσω των **βρόχων Wilson**. Πρόκειται για παρατηρήσιμα μεγέθη που κατασκευάζονται με το ίχνος του παράγοντα παράλληλης μεταφοράς κατά μήκος ενός κλειστού βρόχου.

4.5.1 Ορισμός Βρόχου Wilson

Έστω ότι έχουμε μια κλειστή διαδρομή C στο πλέγμα. Ο αντίστοιχος βρόχος Wilson ορίζεται ως:

$$W(C) = \left\langle \text{Tr} \left(\prod_{l \in C} U_l \right) \right\rangle, \quad (4.14)$$

όπου το γινόμενο λαμβάνεται κατά μήκος των $U_\mu(x)$ που αντιστοιχούν στα άκρα της διαδρομής C και η μέση τιμή λαμβάνεται στο σύνολο. Το ίχνος εξασφαλίζει την αναλλοιώτητα βαθμίδας.

4.5.2 Δυναμικό Κουάρκ–Αντικουάρκ

Στο χρονικό όριο $T \rightarrow \infty$, ορθογώνιοι Wilson βρόχοι $R \times T$ ικανοποιούν:

$$\langle W(R, T) \rangle \sim e^{-V(R)T}, \quad (4.15)$$

όπου $V(R)$ είναι το δυναμικό κουάρκ-αντικουάρκ. Εμπειρικά παρατηρείται:

$$V(R) \approx -\frac{\alpha}{R} + \sigma R, \quad (4.16)$$

με α τύπου Coulomb και σ την τάση της χορδής, υπεύθυνη για τον εγκλωβισμό.

4.5.3 Area Law και Εγκλωβισμός

Στο πλέγμα, ο εγκλωβισμός εκδηλώνεται μέσω του λεγόμενου area law:

$$\langle W(R, T) \rangle \propto e^{-\sigma A}, \quad A = R \cdot T, \quad (4.17)$$

σε αντιδιαστολή με το perimeter law:

$$\langle W(R, T) \rangle \propto e^{-\mu(R+T)}, \quad (4.18)$$

που αντιστοιχεί σε αποσυνδεδεμένα χρωμοφορτία. Το area law επιβεβαιώνεται στο όριο ισχυρής σύζευξης.

4.5.4 Σχέση με Θερμοδυναμική και Βρόχο Polyakov

Ο βρόχος Polyakov ορίζεται από διαδρομή στη χρονική διεύθυνση με περιοδικότητα T και μετρά την ελεύθερη ενέργεια ενός στατικού κουάρκ. Η αναμενόμενη τιμή του:

$$\langle P \rangle = 0 \Rightarrow \text{Confinement}, \quad \langle P \rangle \neq 0 \Rightarrow \text{Deconfinement}. \quad (4.19)$$

Η μελέτη του συνδέεται άμεσα με φαινόμενα μετάβασης φάσης σε θεωρίες με θερμική QCD.

5 Αριθμητικές Προσομοιώσεις και Αλγόριθμοι Δειγματοληψίας στο Πλέγμα

Η αναλυτική επίλυση της Κβαντικής Χρωμοδυναμικής (QCD) στο πλέγμα παραμένει αδύνατη λόγω της μη γραμμικής φύσης της θεωρίας και του μεγάλου αριθμού βαθμών ελευθερίας. Γι' αυτό, η μελέτη της Πλεγματοποιημένης QCD βασίζεται σε **αριθμητικές προσομοιώσεις**, οι οποίες επιτρέπουν την υπολογιστική προσέγγιση φυσικών μεγεθών με μεγάλη ακρίβεια.

Η βασική ιδέα είναι η δειγματοληψία του **στατιστικού συνόλου** των διαμορφώσεων πεδίου μέσω της Ευκλείδειας διατύπωσης της θεωρίας, στην οποία το ολοκλήρωμα διαδρομής (path integral) μετατρέπεται σε **στατιστικό μέσο όρο**:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U \mathcal{O}[U] e^{-S[U]}, \quad (5.1)$$

όπου $\mathcal{O}[U]$ είναι ένα φυσικό παρατηρήσιμο, $S[U]$ η Ευκλείδεια δράση (π.χ. η δράση Wilson) και Z η συνάρτηση επιμερισμού. Το ολοκλήρωμα υλοποιείται αριθμητικά μέσω **αλγορίθμων Monte Carlo**, οι οποίοι παράγουν κατάλληλες διαμορφώσεις U με πιθανότητα $\propto e^{-S[U]}$.

Το παρόν κεφάλαιο παρουσιάζει τους βασικούς αλγορίθμους δειγματοληψίας διαμορφώσεων, όπως ο *Metropolis* και ο *Heat Bath*, και εξηγεί τη διαδικασία εξισορρόπησης (thermalization), την ανάγκη για στατιστικά ανεξάρτητες μετρήσεις και τον υπολογισμό σφαλμάτων με χρήση του bootstrap ή jackknife.

5.1 Η μέθοδος Metropolis και Θερμική Ισορροπία

Στις προσομοιώσεις πλεγματικής QCD, ο αλγόριθμος Metropolis παρέχει ένα απλό αλλά γενικό πλαίσιο για τη δειγματοληψία διαμορφώσεων U με κατανομή Boltzmann $\propto e^{-S[U]}$. Η βασική ιδέα είναι να προτείνουμε μικρές μεταβολές σε κάθε σύνδεση και να τις αποδεχόμαστε ή απορρίπτουμε με κριτήριο που εξασφαλίζει το detailed balance condition.

5.1.1 Θεώρημα του Detailed Balance Condition

Έστω $P(U \rightarrow U')$ η πιθανότητα μετάβασης από διαμόρφωση U σε U' . Το detailed balance condition απαιτεί:

$$P(U \rightarrow U') e^{-S[U]} = P(U' \rightarrow U) e^{-S[U']}.$$

Διασφαλίζοντας $P_0(U \rightarrow U') = P_0(U' \rightarrow U)$ (συμμετρική πρόταση), αρκεί να διαλέξουμε την πιθανότητα αποδοχής

$$A(U \rightarrow U') = \min(1, e^{-[S[U'] - S[U]}),$$

οπότε

$$P(U \rightarrow U') = P_0(U \rightarrow U') A(U \rightarrow U').$$

5.1.2 Υλοποίηση Single-Link

Για κάθε βήμα “sweep” επισκεπτόμαστε διαδοχικά όλες τις συνδέσεις $U_\mu(x)$:

1. **Πρόταση:** $U'_\mu(x) = X U_\mu(x)$, με X κοντά στην ταυτότητα, ώστε $P_0(U \rightarrow U') = P_0(U' \rightarrow U)$.

2. **Υπολογισμός ΔS :** Ορίζουμε τοπικούς *συνδετήρες* (staples)

$$A_\mu(x) = \sum_{\nu \neq \mu} \left[U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) + U_\nu^\dagger(x + \hat{\mu} - \hat{\nu}) U_\mu^\dagger(x - \hat{\nu}) U_\nu(x - \hat{\nu}) \right],$$

και

$$\Delta S = -\frac{\beta}{N} \text{Re Tr} \left[(U'_\mu(x) - U_\mu(x)) A_\mu(x) \right].$$

3. **Απόφαση:** Γεννάμε $r \in [0, 1)$. Αν $r < e^{-\Delta S}$, $U_\mu(x) \leftarrow U'_\mu(x)$, αλλιώς διατηρούμε το παλιό.

5.1.3 Εξισορρόπηση (Thermalization)

Cold start: $U_\mu(x) = \mathbb{I}$ για κάθε σύνδεση.

Hot start: $U_\mu(x)$ τυχαία στο $SU(N)$.

Εκτελούμε επαναληπτικά sweeps χωρίς μετρήσεις, έως ότου τα παρατηρήσιμα μεγέθη (π.χ. μέσος όρος πλακέτας) σταθεροποιηθούν ανεξάρτητα από την αρχική κατάσταση.

5.1.4 Αυτοσυσχέτιση

Ορίζουμε τον χρόνο αυτοσυσχέτισης

$$\rho(t) = \frac{\langle O(0)O(t) \rangle - \langle O \rangle^2}{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}, \quad \tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \rho(t).$$

Για αξιόπιστη στατιστική, κρατάμε μετρήσεις ανά $\gtrsim 2\tau_{\text{int}}$ sweeps.

5.2 Αλγόριθμος Heat Bath και Overrelaxation

Ο συνδυασμός Heat Bath + Overrelaxation χρησιμοποιείται ευρύτατα στις προσομοιώσεις καθαρής βαθμίδας QCD, καθώς επιτυγχάνει μικρότερη αυτοσυσχέτιση και ταχύτερη σύγκλιση.

5.2.1 Heat Bath για SU(2)

Η ομάδα SU(2) μπορεί να παρασταθεί με παραμέτρους τετραδικών αριθμών: κάθε $U \in SU(2)$ γράφεται ως

$$U = x_0 \mathbb{I} + i \sum_{k=1}^3 x_k \sigma_k,$$

με $\{x_0, x_1, x_2, x_3\} \in \mathbb{R}$ και

$$x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1.$$

Το μέτρο Haar είναι

$$dU = \delta(x_0^2 + |\mathbf{x}|^2 - 1) d^4x \propto dx_0 d\Omega_2 \sqrt{1 - x_0^2},$$

όπου $d\Omega_2$ η μέτρηση γωνιακής κατανομής στην τρισιδιάστατη σφαίρα $|\mathbf{x}| = \sqrt{1 - x_0^2}$.

Τοπικό Staple και Τοπική Κατανομή Για κάθε σύνδεσμο $U_\mu(x)$, ορίζουμε τον τοπικό πίνακα σύνδεσης (*staple matrix*) $A \equiv A_\mu(x)$ ως το άθροισμα των συνεισφορών από τις γειτονικές πλακέτες:

$$A_\mu(x) = \sum_{\nu \neq \mu} \left[U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) + U_\nu^\dagger(x + \hat{\mu} - \hat{\nu}) U_\mu^\dagger(x - \hat{\nu}) U_\nu(x - \hat{\nu}) \right].$$

Με τη δράση Wilson, η τοπική συνεισφορά στη δράση από το $U_\mu(x)$ είναι

$$S_{\text{loc}}(U_\mu(x)) = -\frac{\beta}{N} \text{Re Tr} [U_\mu(x) A_\mu(x)] + (\text{όροι ανεξάρτητοι από } U_\mu(x)).$$

Επομένως, η τοπική κατανομή Boltzmann είναι

$$dP(U) \propto dU \exp \left\{ \frac{\beta}{N} \text{Re Tr} [U A] \right\}.$$

Για SU(2) ($N = 2$), επειδή A προκύπτει συνήθως ως άθροισμα στοιχείων SU(2), ισχύει $\det A \geq 0$. Γράφουμε

$$A = a V, \quad a = \sqrt{\det A}, \quad V \in SU(2).$$

Τότε

$$\operatorname{Re} \operatorname{Tr}[U A] = a \operatorname{Re} \operatorname{Tr}[U V],$$

και επομένως η τοπική κατανομή παίρνει τη μορφή

$$dP(U) \propto dU \exp\left\{\frac{\beta a}{2} \operatorname{Re} \operatorname{Tr}[U V]\right\}.$$

Μεταβλητή $X = U V$ και Κατανομή σε $\operatorname{Re} \operatorname{Tr}[X]$

Θέτουμε $X = U V$. Δεδομένου ότι το μέτρο Haar είναι αμετάβλητο υπό πολλαπλασιασμό $U \mapsto U V$, έχουμε $dX = dU$. Επίσης,

$$\operatorname{Re} \operatorname{Tr}[X] = \operatorname{Re} \operatorname{Tr}[U V].$$

Παρασταίνουμε $X = x_0 \mathbb{I} + i \sum_{k=1}^3 x_k \sigma_k$, με $\operatorname{Tr}[X] = 2x_0$. Συνεπώς:

$$dP(X) \propto dX \exp\left\{\frac{\beta a}{2} 2x_0\right\} = dX \exp\left\{\beta a x_0\right\}.$$

Το μέτρο Haar επιφέρει τον παράγοντα $\sqrt{1 - x_0^2}$ στην κατανομή σε x_0 . Συγκεκριμένα:

$$p(x_0) dx_0 \propto \sqrt{1 - x_0^2} \exp(\beta a x_0) dx_0, \quad x_0 \in [-1, 1].$$

Ο παράγοντας κανονικοποίησης C ικανοποιεί

$$1 = \int_{-1}^1 C \sqrt{1 - x_0^2} e^{\beta a x_0} dx_0,$$

οπότε

$$dP(X) = C \sqrt{1 - x_0^2} e^{\beta a x_0} dx_0 d\Omega_2.$$

Η παραγωγή του x_0 γίνεται συνήθως με rejection sampling ή αλγορίθμους invert-CDF (π.χ. Kennedy–Pendleton) για αποδοτικότητα. Μετά, παράγονται οι γωνιακές συνιστώσες $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ ώστε $|\mathbf{x}| = \sqrt{1 - x_0^2}$. Τελικά, ορίζουμε

$$X = x_0 \mathbb{I} + i \sum_{k=1}^3 x_k \sigma_k, \quad U_\mu(x) = X V^\dagger.$$

Αυτό παράγει κατ' ευθείαν νέα $U_\mu(x)$ από την τοπική κατανομή, χωρίς απόρριψη.

Υπολογισμός Παράγοντα Κανονικοποίησης και Rejection Sampling

Η συνάρτηση

$$I(c) = \int_{-1}^1 \sqrt{1 - x_0^2} e^{c x_0} dx_0$$

δίνεται απο τις σχέση με τροποποιημένες συναρτήσεις Bessel, αλλά στην πράξη χρησιμοποιούνται rejection sampling ή πινάκες. Σε rejection sampling:

- Προτείνεται x_0 από την κατανομή $p_0(x_0) \propto \sqrt{1 - x_0^2}$ (Haar $SU(2)$).
- Υπολογίζεται βάρος $w = e^{cx_0}/M$ με $M \geq \max_{x_0} e^{cx_0} = e^{|c|}$.
- Γεννάται $r \in [0, 1)$. Αν $r < w$, αποδεχόμαστε x_0 , αλλιώς προτείνουμε νέο.

Υπάρχουν βελτιστοποιημένοι αλγόριθμοι invert-CDF που αποφεύγουν επαναλήψεις, αλλά εξαρτάται από την υλοποίηση.

5.2.2 Heat Bath για $SU(3)$ (Cabibbo–Marinari)

Για $SU(3)$ δεν υπάρχει άμεσος αναλυτικός τύπος. Χρησιμοποιείται η μέθοδος Cabibbo–Marinari με $SU(2)$ υποομάδες:

1. Επιλογή $SU(2)$ υποομάδων στις θέσεις $(1, 2)$, $(2, 3)$, $(1, 3)$ του 3×3 πίνακα.
2. Για κάθε υποομάδα ij :
 - Εξάγουμε 2×2 sub-block W_{ij} από το staple A και το link U .
 - Υπολογίζουμε $a_{ij} = \sqrt{\det W_{ij}}$ και $V_{ij} = W_{ij}/a_{ij} \in SU(2)$.
 - Ορίζουμε παράμετρο $c_{ij} = (\beta/N) a_{ij}$ (με $N = 3$).
 - Δειγματοληπτούμε $X_{ij} \in SU(2)$ χρησιμοποιώντας την $SU(2)$ Heat Bath διαδικασία με παράμετρο c_{ij} .
 - Ενσωματώνουμε X_{ij} σε 3×3 μήτρα A_{ij} που ενεργεί στις γραμμές/στήλες i, j .
 - Ενημερώνουμε $U \leftarrow A_{ij} U$.
3. Επαναλαμβάνουμε για τις τρεις (ή περισσότερες) υποομάδες, ώστε το τελικό U να δειγματοληπτεί από την τοπική Boltzmann κατανομή $SU(3)$.

Το staple $A_\mu(x)$ είναι 3×3 πίνακας, και σε κάθε υποομάδα εξάγουμε το αντίστοιχο sub-block. Εάν το sub-block έχει πολύ μικρό $\det$, χρησιμοποιείται κάποια τυχαία $SU(2)$ ενημέρωση για εργοδικότητα.

5.3 Overrelaxation

Η Overrelaxation προτείνει “αντανάκλαση” του link γύρω από το staple ώστε η δράση να παραμένει αμετάβλητη ($\Delta S = 0$). Αυτό επιταχύνει την εξερεύνηση και μειώνει την αυτο-συσχέτιση, αλλά δεν αρκεί μόνο του για δειγματοληψία—συνδυάζεται με Heat Bath.

5.3.1 Overrelaxation $SU(2)$

Για $SU(2)$, με $A = aV$ όπως παραπάνω, ορίζουμε:

$$U' = V U^\dagger V.$$

Έλεγχος:

$$\text{Re Tr}[U' A] = \text{Re Tr}[V U^\dagger V aV] = a \text{Re Tr}[V U^\dagger V^2] = a \text{Re Tr}[V U^\dagger] = a \text{Re Tr}[U V] = \text{Re Tr}[U A].$$

Άρα $\Delta S = 0$ και το update γίνεται πάντα αποδεκτό.

5.3.2 Overrelaxation SU(3)

Για SU(3), χρησιμοποιούνται SU(2) υποομάδες:

1. Για κάθε υποομάδα ij , εξάγουμε 2×2 sub-block W_{ij} από U και staple.
2. Υπολογίζουμε $V_{ij} = W_{ij} / \sqrt{\det W_{ij}} \in SU(2)$.
3. Ορίζουμε Overrelaxation update στην υποομάδα: $u'_{sub} = V_{ij} u_{sub}^\dagger V_{ij}$.
4. Ενσωματώνουμε u'_{sub} σε 3×3 μήτρα $\tilde{A}_{ij}$ που ενεργεί στις γραμμές/στήλες i, j .
5. Ενημερώνουμε $U \leftarrow \tilde{A}_{ij} U$.

Κάθε βήμα κρατά $\Delta S = 0$. Για εργοδικότητα, εναλλάσσουμε Heat Bath και Overrelaxation sweeps (π.χ. 1 Heat Bath sweep ακολουθούμενο από n_{or} Overrelaxation sweeps).

5.3.3 Κριτήρια και Παρατηρήσεις

- Ένα sweep Overrelaxation μειώνει την αυτοσυσχέτιση, αλλά μόνο σε συνδυασμό με Heat Bath επιτυγχάνεται πλήρης δειγματοληψία.
- Ο αριθμός Overrelaxation βημάτων μεταξύ Heat Bath ρυθμίζεται βάσει της μελέτης αυτοσυσχέτισης.
- Για SU(3), η επιλογή και σειρά των SU(2) υποομάδων μπορεί να βελτιστοποιηθεί.
- Παρακολουθούμε την αποδοτικότητα μέσω του χρόνου αυτοσυσχέτισης, ρυθμού αποδοχής (Heat Bath πάντα αποδεκτό), και χρονικό κόστος υπολογισμού staples.

5.3.4 Αυτοσυσχέτιση και Σύγκριση με Metropolis

Σε σύγκριση με Metropolis single-link, η χρήση Heat Bath + Overrelaxation μειώνει σημαντικά τον χρόνο αυτοσυσχέτισης τ_{int} για κύρια παρατηρήσιμα (π.χ. πλακέτα, βρόχους Wilson). Στην SU(2) καθαρή βαθμίδα, οι μέθοδοι αυτές είναι καθιερωμένες, ενώ για SU(3) απαιτείται η Cabibbo–Marinari διαδικασία.

5.3.5 Σημειώσεις για Υλοποίηση και Βελτιστοποίηση

- Ο ακριβής αλγόριθμος sampling x_0 μπορεί να βελτιωθεί με προυπολογισμένους πίνακες ή invert-CDF αλγόριθμους.
- Για SU(3), μπορεί να χρησιμοποιηθούν επιπλέον SU(2) υποομάδες πέραν των κλασικών τριών για καλύτερη κάλυψη του χώρου ομάδας.
- Η αποδοτική αναπαράσταση τετραεδρικών αριθμών $(x_0, \mathbf{x})$ και ο ταχύς υπολογισμός staples είναι κρίσιμη για επιδόσεις.
- Η παρακολούθηση του χρόνου αυτοσυσχέτισης για βασικά παρατηρήσιμα καθοδηγεί την επιλογή αριθμού Overrelaxation βημάτων.

5.4 Hybrid Monte Carlo (HMC)

Σε συστήματα με δυναμικά φερμιόνια, ο HMC επιτρέπει ακριβείς δειγματοληψία μέσω εισαγωγής τεχνητών ροπών και σύμπλεκτων ολοκληρωμάτων. Τα βασικά βήματα είναι:

1. *Εισαγωγή ροπών*: σε κάθε σύνδεσμο $U_\mu(x)$ αντιστοιχούμε ροπή $P_\mu(x)$ από κανονική κατανομή.
2. *Ολοκλήρωση με την μέθοδο Leapfrog*¹⁹ :

$$P\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = P(t) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial S}{\partial U}, \quad U(t + \Delta t) = \exp\left[i \Delta t P\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\right] U(t),$$

που επαναλαμβάνεται N_{MD} φορές.

3. *Metropolis κρίσιμο*: αποδοχή ή απόρριψη όλης της τροχιάς με κριτήριο $\min\{1, \exp[-\Delta H]\}$.

5.5 Αυτοσυσχετισμοί και Υπολογισμός Σφαλμάτων

Στις προσομοιώσεις πλεγματικής QCD, οι διαδοχικές μετρήσεις ενός παρατηρήσιμου O παρουσιάζουν αυτοσυσχέτιση, καθώς οι διαμορφώσεις που παράγονται από τους αλγορίθμους ενημέρωσης δεν είναι ανεξάρτητες. Η αυτοσυσχέτιση μειώνει τον ενεργό αριθμό ανεξάρτητων δειγμάτων και επηρεάζει την εκτίμηση της τυπικής απόκλισης του μέσου όρου. Συνεπώς, απαιτείται εκτίμηση της αυτοσυσχέτισης και εφαρμογή κατάλληλων μεθόδων υπολογισμού σφαλμάτων που λαμβάνουν υπόψη τα συσχετιζόμενα δείγματα.

5.5.1 Συνάρτηση Αυτοσυσχετισμού

Έστω N διαδοχικές μετρήσεις O_i ($i=1, \dots, N$) του παρατηρήσιμου O . Ο μέσος όρος είναι:

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i.$$

Ο εκτιμητής της συνάρτησης αυτοσυσχετισμού ορίζεται ως:

$$\hat{C}_O(t) = \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} (O_i - \bar{O}) (O_{i+t} - \bar{O}), \quad t = 0, 1, 2, \dots$$

και η κανονικοποιημένη συνάρτηση αυτοσυσχετισμού:

$$\hat{\rho}_O(t) = \frac{\hat{C}_O(t)}{\hat{C}_O(0)}.$$

¹⁹H μέθοδος ολοκλήρωσης Leapfrog για Hamiltonian $H = T(P) + V(U)$ δίνεται ως εξής:

1. $P\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = P(t) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial V}{\partial U}(U(t)),$
2. $U(t + \Delta t) = \exp[i \Delta t P(t + \frac{\Delta t}{2})] U(t),$
3. $P(t + \Delta t) = P\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial V}{\partial U}(U(t + \Delta t)).$

Αυτή η ακολουθία είναι time-reversible και volume-preserving, με σφάλμα $O(\Delta t^3)$ ανά βήμα και $O(\Delta t^2)$ σε όλη την τροχιά.

5.5.2 Ενσωματωμένος Χρόνος Αυτοσυσχετισμού

Ο ορισμός του ενσωματωμένου χρόνου αυτοσυσχετισμού είναι:

$$\tau_{\text{int},O} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \rho_O(t).$$

Πρακτικά, χρησιμοποιούμε:

$$\tau_{\text{int},O}(W) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^W \hat{\rho}_O(t),$$

με παράθυρο W που επιλέγεται ώστε $\hat{\rho}_O(t)$ να έχει φθάσει σε επίπεδα στατιστικού θορύβου ή ικανοποιεί $W \gtrsim c \tau_{\text{int}}(W)$.

5.5.3 Σφάλμα Μέσου όρου Αυτοσυσχετισμού

Αν η αυτοσυσχέτιση αγνοηθεί, το τυπικό σφάλμα θα ήταν $\sigma_0 = \sqrt{\hat{C}_O(0)/N}$. Με αυτοσυσχέτιση, το σωστό σφάλμα του μέσου $\bar{O}$ δίνεται από:

$$\sigma_{\bar{O}} = \sqrt{\frac{2 \tau_{\text{int},O} \hat{C}_O(0)}{N}} = \sqrt{\frac{2 \tau_{\text{int},O}}{N}} \sigma_0.$$

5.5.4 Blocking

Διαχωρίζουμε τις N μετρήσεις σε N_b μπλοκ μεγέθους b ($N = N_b b$). Για κάθε μπλοκ j :

$$\bar{O}^{(j)} = \frac{1}{b} \sum_{i=(j-1)b+1}^{jb} O_i.$$

Ο μέσος όρος:

$$\bar{O} = \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} \bar{O}^{(j)},$$

και η εκτιμώμενη διακύμανση των block-means:

$$\widehat{\text{Var}}(\bar{O}^{(j)}) = \frac{1}{N_b - 1} \sum_{j=1}^{N_b} (\bar{O}^{(j)} - \bar{O})^2.$$

Το σφάλμα:

$$\sigma_{\bar{O}} = \sqrt{\frac{\widehat{\text{Var}}(\bar{O}^{(j)})}{N_b}}.$$

Αυξάνουμε b έως ότου το σφάλμα σταθεροποιηθεί, υποδηλώνοντας $b \gtrsim \tau_{\text{int},O}$.

5.5.5 Jackknife

Χωρίζουμε σε N_b μπλοκ μεγέθους $b \gtrsim \tau_{\text{int},O}$. Για κάθε μπλοκ j , αφαιρούμε το μπλοκ και υπολογίζουμε $f^{(j)}$ από τα υπόλοιπα δεδομένα:

$$f^{(j)} = f(\{O_i\}_{i \notin \text{μπλοκ } j}).$$

Ο jackknife μέσος:

$$\bar{f}_{\text{jk}} = \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} f^{(j)},$$

και η διακύμανση:

$$\text{Var}_{\text{jk}}(f) = \frac{N_b - 1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} (f^{(j)} - \bar{f}_{\text{jk}})^2.$$

Το σφάλμα $\sigma(f) = \sqrt{\text{Var}_{\text{jk}}(f)}$.

5.5.6 Bootstrap

Η μέθοδος bootstrap στοχεύει στην εκτίμηση της κατανομής ενός εκτιμητή f που εξαρτάται από τις μετρήσεις O_i , λαμβάνοντας υπόψη ότι τα δεδομένα μπορεί να είναι αυτοσυσχετισμένα. Για να προσαρμοστεί σε αυτοσυσχετιζόμενα δείγματα, πρώτα χωρίζουμε τις N αρχικές μετρήσεις σε N_b μπλοκ μεγέθους b , δηλαδή $N = N_b \times b$, με επιλογή b τέτοια ώστε $b \gtrsim \tau_{\text{int}}$ για το αντίστοιχο παρατηρήσιμο. Στη συνέχεια, η τυπική διαδικασία έχει ως εξής: κατασκευάζουμε ένα μεγάλο αριθμό (N_{bs}) bootstrap δειγμάτων επιλέγοντας μπλοκ με αντικατάσταση. Σε κάθε bootstrap δείγμα, οι block-means που επιλέγονται χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό του εκτιμητή f . Έτσι, για κάθε bootstrap δείγμα k υπολογίζουμε

$$f^{(k)} = f(\{\bar{O}^{(j_k)}\}),$$

όπου $\{\bar{O}^{(j_k)}\}$ είναι η συλλογή των block-means που έχουν επιλεγεί στο δείγμα k . Η κατανομή των τιμών $\{f^{(k)}\}_{k=1}^{N_{\text{bs}}}$ προσεγγίζει την κατανομή του f σε ανεξάρτητα δείγματα, δεδομένου ότι τα μπλοκ θεωρούνται περίπου ανεξάρτητα. Από αυτά υπολογίζουμε τον μέσο bootstrap

$$\bar{f}_{\text{bs}} = \frac{1}{N_{\text{bs}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{bs}}} f^{(k)},$$

και το αντίστοιχο σφάλμα ως την τυπική απόκλιση:

$$\sigma_{\text{bs}}(f) = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{bs}} - 1} \sum_{k=1}^{N_{\text{bs}}} (f^{(k)} - \bar{f}_{\text{bs}})^2}.$$

Με αυτόν τον τρόπο, η αυτοσυσχέτιση εντός των μπλοκ δεν υποεκτιμά το σφάλμα, καθώς κάθε μπλοκ θεωρείται μονάδα δειγματοληψίας. Η επιλογή του μεγέθους μπλοκ b επιβεβαιώνεται εκ των προτέρων από την εκτίμηση του ενσωματωμένου χρόνου αυτοσυσχέτισης: το b πρέπει να είναι αρκετά μεγάλο ώστε τα block-means να προσεγγίζουν ανεξάρτητα δείγματα. Επίσης, ο αριθμός bootstrap δειγμάτων N_{bs} επιλέγεται μεγάλος (π.χ. 1000 ή περισσότερα) ώστε η εκτίμηση της κατανομής να έχει χαμηλό στατιστικό θόρυβο. Η μέθοδος αυτή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη όταν ο εκτιμητής f είναι μη-γραμμική συνάρτηση παρατηρήσιμων, όπως λόγοι ή σύνθετα φασματικά μεγέθη.

5.5.7 Επιλογή Μεθόδου και Πρακτικά Βήματα

Η επιλογή της κατάλληλης μεθόδου εκτίμησης σφάλματος σε αυτοσυσχετιζόμενα δεδομένα καθορίζεται από τη συμπεριφορά του χρόνου αυτοσυσχετισμού καθώς και από τη φύση του παρατηρήσιμου μεγέθους. Αρχικά, υπολογίζουμε την εκτιμημένη κανονικοποιημένη συνάρτηση αυτοσυσχετισμού $\hat{\rho}(t)$ για t έως κάποιο μέγιστο, χρησιμοποιώντας τον εκτιμητή

$$\hat{\rho}(t) = \frac{\hat{C}(t)}{\hat{C}(0)}, \quad \hat{C}(t) = \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} (O_i - \bar{O})(O_{i+t} - \bar{O}).$$

Έπειτα επιλέγουμε παράθυρο W ώστε η άθροιση

$$\tau_{\text{int}}(W) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^W \hat{\rho}(t)$$

να ικανοποιεί κριτήριο αυτοσυνέπειας, π.χ. $W \gtrsim c \tau_{\text{int}}(W)$. Αυτή η εκτίμηση καθορίζει το block size $b \approx k \tau_{\text{int}}$ για τις μετέπειτα μεθόδους. Στη συνέχεια, μπορούμε να εφαρμόσουμε είτε blocking είτε jackknife είτε blocked bootstrap, με βάση τις παρακάτω οδηγίες: αρχικά επιλέγουμε b από το τ_{int} και σχηματίζουμε block-means. Αν το παρατηρούμενο σφάλμα από blocking σταθεροποιείται καθώς αυξάνουμε b , θεωρούμε ότι b είναι αρκετό. Για παρατηρήσιμα μεγέθη που είναι μέσοι όροι, το blocking αρκεί · για σύνθετες μη-γραμμικές συναρτήσεις εφαρμόζουμε jackknife με τα ίδια μπλοκ, ώστε η διαδικασία αφαίρεσης κάθε μπλοκ να δίνει εκτιμήσεις $f^{(j)}$. Εάν επιθυμούμε εκτίμηση της πλήρους κατανομής του εκτιμητή, ή επαλήθευση, εφαρμόζουμε blocked bootstrap πάνω σε block-means. Κατά την αναφορά των αποτελεσμάτων, αναφέρουμε τον μέσο όρο $\bar{O}$, το σφάλμα $\sigma_{\bar{O}}$ μαζί με τον τρόπο εκτίμησης (blocking/jackknife/bootstrap), την εκτιμώμενη τ_{int} , τον αριθμό μπλοκ N_b και το μέγεθος μπλοκ b . Εφόσον τα σφάλματα από διαφορετικές μεθόδους συμφωνούν εντός στατιστικού θορύβου, θεωρούμε το αποτέλεσμα αξιόπιστο. Σε περιπτώσεις όπου ο αυτοσυσχετισμός είναι πολύ μεγάλος, μπορεί να απαιτηθεί αύξηση της απόστασης μεταξύ μετρήσεων (sweeps μεταξύ αποδεδειγμένων μετρήσεων) ή καλύτεροι αλγόριθμοι ενημέρωσης (π.χ. overrelaxation, HMC) για μείωση του τ_{int} . Με αυτόν τον τρόπο εξασφαλίζουμε ότι η εκτίμηση του σφάλματος αντανακλά σωστά την αυτοσυσχέτιση και παρέχει αξιόπιστη αξιολόγηση της αβεβαιότητας.

6 Φερμιόνια στο Πλέγμα: Διακριτοποίηση, Διπλασιασμός και Χειρόμορφη Συμμετρία

Η διακριτοποίηση φερμιονικών πεδίων στο Ευκλείδιο πλέγμα αποτελεί θεμελιώδες ζήτημα στις προσεγγίσεις της πλεγματοτικής QCD, καθώς προσκρούει στο γνωστό πρόβλημα του διπλασιασμού φερμιονίων (fermion doubling) και ταυτόχρονα στη διατήρηση ή παραβίαση της χειρόμορφης συμμετρίας. Η απλή (naive) αντικατάσταση της παράγωγου από συμμετρικές διαφορές οδηγεί σε ένα διακριτό Dirac τελεστή που στο όριο του συνεχούς εμφανίζει πολλαπλούς πόλους (doublers), με συνέπεια την ανεπιθύμητη ύπαρξη 2^d modes αντί ενός σε d διαστάσεις. Το θεώρημα Nielsen–Ninomiya²⁰ αποδεικνύει ότι, υπό τις βασικές φυσικές προϋποθέσεις τοπικότητας, σω-

²⁰ *Θεώρημα Nielsen–Ninomiya*: Σε ένα τετραγωνικό πλέγμα με διακριτοποίηση που ικανοποιεί τις ιδιότητες 1. τοπικότητα, 2. αναλλοίωτη μεταθετότητα, 3. ερμιτιανότητα (Hermiticity), 4. ακριβή χειρόμορφη συμμετρία,

στής συνέχειας στο όριο $a \rightarrow 0$ και ακριβούς χειρόμορφης συμμετρίας στο πλέγμα, δεν είναι δυνατόν να αποφευχθεί ο διπλασιασμός χωρίς θυσία κάποιας εκ των προϋποθέσεων αυτών.

Ως εκ τούτου, έχουν αναπτυχθεί διάφορες διατυπώσεις για φερμιονία στο πλέγμα, που θυσιάζουν ή τροποποιούν μέρος των παραπάνω ιδιοτήτων, με στόχο την εξάλειψη ή τον περιορισμό των διπλασιασμών ενώ επιτυγχάνουν αποδεκτή συμπεριφορά στο συνεχές. Στη συνέχεια παρουσιάζονται συνοπτικά οι κύριες προσεγγίσεις:

- Στη διατύπωση Wilson, προστίθεται ένας όρος δεύτερης διαφοράς (Wilson term) που ανυψώνει τη μάζα των διπλασιαστών στο $O(1/a)$ έτσι ώστε να αποκλείονται από το φυσικό φάσμα στο όριο του συνεχούς, θυσιάζοντας όμως τη ρητή χειρόμορφη συμμετρία στη φερμιονική δράση.
- Στα staggered (Kogut–Susskind) φερμιονία, μέσω κατάλληλης ανακατανομής των σπινωρι-ακών συνιστωσών σε σημεία του πλέγματος και χρήσης φάσεων Kawamoto–Smit, μειώνεται ο αριθμός των διπλασιαστών από 16 σε 4 (γεύσεις), διατηρώντας όμως υπόλειμμα χειρόμορφης συμμετρίας για μηδενική απογυμνωμένη μάζα και αποφεύγοντας λεπτή ρύθμιση της μάζας.
- Στη διατύπωση Ginsparg–Wilson, τροποποιείται η χειρόμορφη συμμετρία ώστε να ικανοποιεί τη σχέση $\{\gamma_5, D\} = aD\gamma_5D$. Ο Overlap Dirac τελεστής και τα Domain Wall φερμιονία υλοποιούν ακριβή χειρόμορφη συμμετρία σε πεπερασμένο a , επιτρέποντας σωστή ανάκτηση της ανωμαλίας και του θεωρήματος δείκτη, με κόστος υπολογιστικής πολυπλοκότητας στην εφαρμογή της συνάρτησης $\text{sgn}(H_W)$ ή εισαγωγή πέμπτης διάστασης αντίστοιχα.

6.1 Διακριτοποίηση του Τελεστή Dirac

Στη πλεγματική διατύπωση, η απλούστερη (naive) προσέγγιση για τον τελεστή Dirac βασίζεται στην αντικατάσταση της συνεχούς παράγωγου με συμμετρική διαφορά στο Ευκλείδειο πλέγμα. Συγκεκριμένα, για φερμιονικό πεδίο $\psi(x)$ το οποίο τοποθετείται σε κόμβους $x = an$ (με $n \in \mathbb{Z}^4$ και βήμα πλέγματος a), ο συμμετρικός διακριτός τελεστής παράγωγου ορίζεται ως

$$\nabla_\mu \psi(n) = \frac{1}{2a} [\psi(n + \hat{\mu}) - \psi(n - \hat{\mu})],$$

όπου $\hat{\mu}$ είναι η μονάδα κατά τη διεύθυνση μ . Έτσι, η απλοποιημένη (naive) δράση Dirac σε Ευκλείδειο πλέγμα γράφεται

$$S_{\text{naive}} = a^4 \sum_n \bar{\psi}(n) (\gamma_\mu \nabla_\mu + m) \psi(n),$$

έτσι ώστε ότι στο όριο του συνεχούς ($a \rightarrow 0$) να παίρνουμε τη συνηθισμένη δράση $\int d^4x \bar{\psi}(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi$.

δεν είναι δυνατή η ύπαρξη μοναδικής χειρόμορφης κατάστασης φερμιονίου χωρίς τη συνοδεία φερμιονικών διπλασιασμών (doubblers). Πιο συγκεκριμένα, ο αριθμός των μηδενικών ιδιοτιμών του διακριτού Dirac τελεστή δεξιάς χειρομορφίας ισούται με τον αριθμό των μηδενικών ιδιοτιμών αριστερής χειρομορφίας.

Για να κατανοήσουμε τη φασματική συμπεριφορά και το πρόβλημα του διπλασιασμού, περνάμε στο μετασχηματισμό Fourier σε περιοδικό πλέγμα. Στο πλαίσιο αυτό, οι επιτρεπτοί κυματικοί αριθμοί p_μ είναι διακριτοί λόγω της πεπερασμένης περιόδου του πλέγματος, και παίρνουν τιμές στο διάστημα

$$\widetilde{D}(p) = i\gamma_\mu \frac{\sin(p_\mu a)}{a} + m,$$

όπως προκύπτει από τη μετατροπή Fourier του συμμετρικού διαφορικού τελεστή. Η συνάρτηση $\sin(p_\mu a)/a$ τείνει στο p_μ όταν $a \rightarrow 0$ για μικρές τιμές $p_\mu a \ll 1$, αλλά παρουσιάζει μηδενισμούς σε κάθε σημείο όπου $p_\mu a = 0$ ή $p_\mu a = \pi$, οδηγώντας σε πολλαπλά σημεία όπου το $\widetilde{D}(p)$ μηδενίζεται. Στη φασματική ανάλυση, αυτά τα μηδενικά αντιστοιχούν σε επιπλέον “poles” του διαδότη στα σημεία $p_\mu = 0$ ή π/a , με αποτέλεσμα την ύπαρξη $2^4 = 16$ modes στο όριο του συνεχούς αντί του ενός επιθυμητού.

Το φαινόμενο αυτό, γνωστό ως φερμιονικός διπλασιασμός, εξηγείται μέσω του θεωρήματος Nielsen–Ninomiya. Για να αποφύγει κανείς αυτό το πλήθος επιπλέον modes, πρέπει να τροποποιήσει τον τελεστή Dirac θυσιάζοντας τουλάχιστον μία από τις προϋποθέσεις αυτές.

Συνοψίζοντας, η naive διακριτοποίηση Dirac τελεστή:

- Ορίζει τη συμμετρική παράγωγο ∇_μ με αντικατάσταση $\partial_\mu \rightarrow [\psi(n + \hat{\mu}) - \psi(n - \hat{\mu})]/(2a)$.
- Οδηγεί σε δράση $S_{\text{naive}} = a^4 \sum_n \bar{\psi}(n)(\gamma_\mu \nabla_\mu + m)\psi(n)$, με σωστό όριο στο συνεχές.
- Στο επίπεδο ορμής, παράγει τον διαδότη $\widetilde{D}(p) = i\gamma_\mu \sin(p_\mu a)/a + m$, ο οποίος μηδενίζεται σε πολλαπλά σημεία $p_\mu = 0$ ή π/a , φέρνοντας 16 φανταστικές καταστάσεις (doubblers) στη 4-διάστατη περίπτωση.
- Υποδεικνύει την ανάγκη τροποποίησης του τελεστή Dirac για να αποφευχθεί ο διπλασιασμός, όπως στις Wilson, staggered ή Ginsparg–Wilson διατυπώσεις.

6.2 Μέθοδοι Αντιμετώπισης του Διπλασιασμού

Οι κύριες προσεγγίσεις για την αντιμετώπιση του φαινομένου του φερμιονικού διπλασιασμού στη διακριτοποίηση του τελεστή Dirac στο πλέγμα βασίζονται σε τροποποιήσεις που θυσιάζουν ή προσαρμόζουν ορισμένες από τις προϋποθέσεις του θεωρήματος Nielsen–Ninomiya. Στο εξής περιγράφονται τρεις κλασικές κατηγορίες: φερμιόνια Wilson, staggered (Kogut–Susskind) φερμιόνια και Ginsparg–Wilson διατυπώσεις (όπως Overlap και Domain Wall).

6.2.1 Φερμιόνια Wilson

Στη διατύπωση Wilson, στον naive Dirac τελεστή προστίθεται ένας επιπλέον όρος δεύτερης διαφοράς (Wilson term) που λειτουργεί ως διακριτός Λαπλασιανός όρος και σκοπό έχει να ανυψώσει τη μάζα των διπλασιασμών στη κλίμακα $O(1/a)$, απομακρύνοντας τα έτσι από το φάσμα χαμηλής ενέργειας. Συγκεκριμένα, για φερμιονικό πεδίο $\psi(n)$ ο Wilson Dirac τελεστής D_W ορίζεται μέσω της δράσης:

$$S_W = a^4 \sum_n \bar{\psi}(n) \left[\gamma_\mu \nabla_\mu \psi(n) + m\psi(n) + \frac{r}{2} a \Delta \psi(n) \right],$$

όπου $\nabla_\mu \psi(n) = [\psi(n + \hat{\mu}) - \psi(n - \hat{\mu})]/(2a)$ η συμμετρική διαφορά, $\Delta\psi(n) = \sum_\mu [\psi(n + \hat{\mu}) - 2\psi(n) + \psi(n - \hat{\mu})]/a^2$ η διακριτή δευτεροβάθμια διαφορά, και r ο παράγων Wilson (συνήθως $r = 1$). Στην αναπαράσταση ορμής, η συμπεριφορά του τελεστή Wilson δίνει για μικρά p :

$$\widetilde{D}_W(p) \approx i\gamma_\mu p_\mu + m + \frac{ra}{2}p^2,$$

ενώ στα σημεία διπλασιασμών $p_\mu \approx \pi/a$ το $\sin(p_\mu a)/a$ όρος μηδενίζεται όπως στον naïve τελεστή, αλλά ο όρος Wilson $\propto \sum_\mu (1 - \cos(p_\mu a))/a$ γίνεται $O(1/a)$, παρέχοντας έτσι συμβολή στη μάζας τάξης $O(1/a)$ στους διπλασιασμούς. Ωστόσο, ο όρος Wilson δεν αντιμετωπίζεται με τον γ_5 , δηλαδή παραβιάζει ρητά τη χειρόμορφη συμμετρία σε πεπερασμένο a . Στο όριο του συνεχούς $a \rightarrow 0$, η παραβίαση αυτή εξαφανίζεται εφόσον επιτρέψουμε λεπτή ρύθμιση (fine tuning) της απογυμνωμένης μάζας m : η ρύθμιση της m ώστε να επιτευχθεί άμαζο φερμιόνιο στον συνεχές απαιτεί την εύρεση της κρίσιμης τιμής $m_c(a)$ όπου ο όρος μάζας εξαφανίζεται. Στην πράξη, αυτή η ρύθμιση επιτυγχάνεται με μέτρηση παρατηρήσιμων μεγεθών (π.χ. σημεία όπου το πόνιο γίνεται άμαζο) και προοδευτική προσέγγιση του m_c καθώς το a μειώνεται. Η διακριτοποίηση Wilson είναι χρησιμοποιείται λόγω του απλού σχήματος και επειδή ικανοποιεί την τοπικότητα, αλλά το κόστος του ρύθμισης και η απώλεια της χειρόμορφης συμμετρίας καθιστούν σημαντικά τη μελέτη των σφαλμάτων διακριτοποίησης $O(a)$ και απαιτούν βελτιώσεις (π.χ. Clover term).

6.2.2 Staggered φερμιόνια

Η τεχνική των staggered φερμιονίων επιδιώκει να μειώσει αριθμητικά τον αριθμό των διπλασιασμών από 2^d σε $2^{d/2}$ (στη 4-διάσταση από 16 σε 4) θυσιάζοντας μέρος της σπινωριακής δομής διασπώντας τις συνιστώσες του σπινωριακού πεδίου σε διαφορετικά σημεία του πλέγματος και εισάγοντας φάσεις. Μετασχηματίζοντας το Dirac πεδίο $\psi(n)$ σε πεδίο $\chi(n)$ με μία συνιστώσα πολλαπλών γεύσεων, η δράση γράφεται:

$$S_{\text{stag}} = a^4 \sum_n \left[\frac{1}{2a} \sum_\mu \eta_\mu(n) \bar{\chi}(n) (\chi(n + \hat{\mu}) - \chi(n - \hat{\mu})) + m \bar{\chi}(n) \chi(n) \right],$$

όπου $\eta_\mu(n) = (-1)^{\sum_{\nu < \mu} n_\nu}$ είναι σταθερές φάσεις Kawamoto–Smit που επιτρέπουν την αντιστοίχιση της σπινωριακής δομής στα offsets του πλέγματος. Στη φασματική ανάλυση, το staggered πεδίο περιέχει 4 φερμιονικές γεύσεις στο συνεχές, αντί 16 για τη naïve περίπτωση. Ένα σημαντικό πλεονέκτημα είναι η ύπαρξη υπολείμματος χειρόμορφης συμμετρίας (U(1) chiral) ακόμη και σε πεπερασμένο a όταν $m = 0$, αποφεύγοντας το πλήρες fine tuning της μάζας. Ωστόσο, σε πεπερασμένο a , αλληλεπιδράσεις που σπάνε τη συμμετρία γεύσης μεταξύ των 4 γεύσεων, που οδηγούν σε διάσπαση στις μάζες των αντιστοιχών μεσονίων. Πρακτικά, έχουν αναπτυχθεί βελτιωμένες staggered δράσεις (Asqtad, HISQ κ.ά.) για μείωση των όρων που σπάνε την συμμετρία γεύσης μέσω προσθήκης εκτενέστερων συνδέσεων. Επιπλέον, όταν θέλουμε διαφορετικό αριθμό γεύσεων από 4, χρησιμοποιείται διαδικασία ρίζας (π.χ. τετραγωνική ρίζα του determinant για 2 flavors), μέθοδος που συζητείται εκτενώς σχετικά με τη θεμελιώδη εγυρότητά της αλλά χρησιμοποιείται συχνά λόγω αποδοτικότητας.

6.2.3 Φορμαλισμός Ginsparg–Wilson

Τα Ginsparg–Wilson φερμιόνια στοχεύουν στην ακριβή διατήρηση τροποποιημένης χειρόμορφης συμμετρίας στο πλέγμα, ικανοποιώντας τη σχέση

$$\{\gamma_5, D\} = a D \gamma_5 D,$$

όπου D είναι ο πλεγματικός τελεστής Dirac. Αυτή η τροποποιημένη σχέση εξασφαλίζει ότι, παρά το πεπερασμένο a , η δράση $\bar{\psi} D \psi$ παραμένει συμμετρική υπό κατάλληλο χειρόμορφο μετασχηματισμό, και εξασφαλίζει σωστή ανάκτηση της ανωμαλίας και του θεωρήματος δείκτη στο όριο του συνεχούς. Κλασική υλοποίηση είναι ο τελεστής Overlap Dirac:

$$D_{\text{ov}} = \frac{1}{a} \left[1 + \gamma_5 \text{sgn}(H_W) \right], \quad H_W = \gamma_5 (D_W - m_0),$$

όπου D_W ο τελεστής Wilson Dirac με κατάλληλη παράμετρο m_0 μέσα σε συγκεκριμένο εύρος για να εξασφαλίζει σωστό το φασματικό κενό. Ο υπολογισμός της συνάρτησης $\text{sgn}(H_W)$ απαιτεί επεξεργασία προβλημάτων ιδιοτιμής ή πολυωνυμικές / rational προσεγγίσεις, καθιστώντας την υλοποίηση υπολογιστικά απαιτητική. Εναλλακτικά, στα Domain Wall φερμιόνια εισάγουμε πέμπτη διάσταση μεγάλου μήκους L_s , όπου τα χειρόμορφα modes τοποθετούνται σε αντίθετα άκρα της πέμπτης διάστασης, και στην πεπερασμένη L_s υπάρχει μικρή παραβίαση Ginsparg–Wilson σχέσης την οποία μειώνουμε μεγαλώνοντας το L_s . Οι Ginsparg–Wilson τελεστές παρέχουν ακριβή χειρόμορφη συμμετρία σε πεπερασμένο a , επιτρέποντας την απευθείας εφαρμογή του θεωρήματος δείκτη: ο αριθμός μηδενικών ιδιοτιμών με θετική/αρνητική χειρομορφία ισούται με το τοπολογικό φορτίο της βαθμίδας. Αυτό επιτρέπει ακριβείς μελέτες τοπολογικών φαινομένων και ανωμαλιών χωρίς προσθετές υποθέσεις.

Συνολικά, η επιλογή μεταξύ των παραπάνω μεθόδων καθορίζεται από το επιθυμητό επίπεδο χειρόμορφης συμμετρίας, το αποδεκτό υπολογιστικό κόστος και τις απαιτήσεις διακριτοποίησης. Τα φερμιόνια Wilson είναι σχετικά απλά στην υλοποίηση αλλά απαιτούν λεπτή ρύθμιση και αντιμετωπίζουν θραύση της χειρόμορφης συμμετρίας, τα staggered φερμιόνια μειώνουν τον αριθμό των διπλασιασμών και διατηρούν υπόλειμμα της χειρόμορφης συμμετρίας με όρους που σπάνε την συμμετρία γεύσης, ενώ οι Ginsparg–Wilson διατυπώσεις προσφέρουν ακριβείς χειρόμορφες ιδιότητες σε πεπερασμένο a με υψηλό υπολογιστικό κόστος. Κάθε προσέγγιση συνοδεύεται από συγκεκριμένες βελτιώσεις (π.χ. Clover όρος, βελτιωμένες staggered δράσεις, πολυωνυμικές προσεγγίσεις για Overlap), που στοχεύουν στη μείωση σφαλμάτων διακριτοποίησης και βελτίωση της αποδοτικότητας.

6.3 Χειρόμορφη Συμμετρία στο Πλέγμα

6.3.1 Ginsparg–Wilson Relation και Ακριβής Χειρόμορφη Συμμετρία

Η πρόκληση της διατήρησης της χειρόμορφης συμμετρίας στο πλέγμα έγκειται στο θεώρημα Nielsen–Ninomiya, που αποδεικνύει ότι ακριβής τοπική χειρόμορφη αντιστροφή ($\{\gamma_5, D\} = 0$) σε διακριτό Dirac τελεστή οδηγεί αναπόφευκτα σε διπλασιασμό. Η καινοτομία των Ginsparg–Wilson φερμιονίων είναι ότι υιοθετούν μια τροποποιημένη έκφραση της χειρόμορφης συμμετρίας, η οποία ταυτόχρονα αποτρέπει το φερμιονικό διπλασιασμό και εξασφαλίζει ακριβείς χειρόμορφες

ιδιότητες σε πεπερασμένο βήμα πλέγματος a . Η κεντρική σχέση είναι η σχέση Ginsparg–Wilson (GW):

$$\{\gamma_5, D\} = a D \gamma_5 D,$$

όπου D ο πλεγματικός Dirac τελεστής. Σε αντίθεση με τη συνεχή περίπτωση ($\{\gamma_5, D\} = 0$), εδώ η αριστερή μεριά δεν μηδενίζεται αυστηρά αλλά ισούται με $a D \gamma_5 D$. Αυτή η τροποποιημένη σχέση εξασφαλίζει ότι, με τον κατάλληλο ορισμό του μετασχηματισμού της χειρόμορφης συμμετρίας, η δράση $\bar{\psi} D \psi$ παραμένει αμετάβλητη ακόμη και σε πεπερασμένο a , και ταυτόχρονα η φασματική δομή δεν περιέχει διπλασιασμούς με μηδενική μάζα. Μια επιπλέον συνέπεια είναι ότι η ανωμαλία αναπαράγεται σωστά στο πλέγμα, όπως θα δούμε παρακάτω.

Διατύπωση της σχέσης Ginsparg–Wilson

Η GW σχέση διατυπώνεται για τον πλεγματικό Dirac τελεστή D ως:

$$\gamma_5 D + D \gamma_5 = a D \gamma_5 D.$$

Αν πολλαπλασιάσουμε από αριστερά με γ_5 , προκύπτει

$$D + \gamma_5 D \gamma_5 = a \gamma_5 D \gamma_5 D,$$

οι οποίες μορφές δείχνουν ότι ο τελεστής D δεν αντιμετωπίζεται απλώς με γ_5 . Αντίθετα, η δεξιά πλευρά τροποποιεί τη συμβατική αντιμετάθεση. Στην πράξη, γνωστοί τελεστές Dirac που ικανοποιούν την GW σχέση είναι ο Overlap τελεστής και, σε όριο μεγάλης πέμπτης διάστασης, ο Domain Wall τελεστής. Για παράδειγμα, ο τελεστής Overlap ορίζεται ως

$$D_{\text{ov}} = \frac{1}{a} \left[1 + \gamma_5 \text{sgn}(H_W) \right], \quad H_W = \gamma_5 (D_W - m_0),$$

όπου D_W ο Wilson Dirac τελεστής με παράμετρο μάζας m_0 επιλεγμένο κατάλληλα ώστε το φασματικό κενό να επιτρέπει τη σωστή λειτουργία της $\text{sgn}(H_W)$.

Αναπαράσταση μετασχηματισμού χειρόμορφης συμμετρίας

Η GW σχέση επιτρέπει τον ορισμό ενός τροποποιημένης μετασχηματισμού της χειρόμορφης συμμετρίας υπό την οποία η δράση παραμένει αμετάβλητη. Συγκεκριμένα, ορίζουμε:

$$\delta\psi = \gamma_5 \left(1 - \frac{a}{2} D \right) \psi, \quad \delta\bar{\psi} = \bar{\psi} \left(1 - \frac{a}{2} D \right) \gamma_5.$$

Με αυτή τη μετάβαση, η μεταβολή της δράσης $\delta(\bar{\psi} D \psi) = (\delta\bar{\psi}) D \psi + \bar{\psi} D (\delta\psi)$ μπορεί να γραφεί, χρησιμοποιώντας GW relation, ώστε να μηδενίζεται ακριβώς σε πεπερασμένο a . Έτσι, η τροποποιημένη χειρόμορφη συμμετρία υφίσταται ακριβώς στο πλέγμα, διασφαλίζοντας ότι οι διαδικασίες που βασίζονται στην χειρόμορφη συμμετρία (π.χ. άμαζο πiónιο, αναπαραγωγή ανωμαλίας) δουλεύουν σωστά.

6.3.2 Θεώρημα δείκτη σε Πλέγμα

Μέσω της χειρόμορφης συμμετρίας που παρέχει η σχέση GW, είναι δυνατή η εφαρμογή του θεωρήματος δείκτη στον πλεγματικό τελεστή Dirac, συνδέοντας τις τοπολογικές ιδιότητες των διαμορφώσεων βαθμίδας με τον αριθμό ιδιοτιμών μηδενικής ενέργειας του τελεστή Dirac.

Ορισμός τοπολογικού φορτίου και δείκτης φερμιονίου

Στη συνεχή QCD, το τοπικό τοπολογικό φορτίο Q ορίζεται μέσω του όρου $F_{\mu\nu}\tilde{F}_{\mu\nu}$ και είναι ακέραιος. Στο πλέγμα, ο προσδιορισμός του τοπολογικού φορτίου μπορεί να γίνει μέσω ορισμού του δείκτη φερμιονίου: με GW Dirac τελεστή D , ο δείκτης ορίζεται ως

$$\text{index}(D) = n_- - n_+,$$

όπου $n_{\pm}$ είναι οι μηδενικές ιδιοτιμές του D με χειρομορφία $\pm$, δηλαδή λύσεις $D\phi = 0$ με $\gamma_5\phi = \pm\phi$. Ο δείκτης ισούται με το διακριτό τοπολογικό φορτίο Q της διαμόρφωσης βαθμίδας, επιτρέποντας ακριβή μέτρηση τοπολογικών χαρακτηριστικών χωρίς επιπλέον επεξήγηση.

Σχέση με μηδενικές ιδιοτιμές του Dirac τελεστή

Για τον Overlap τελεστή, οι zero modes ικανοποιούν την $\gamma_5\phi = \pm\phi$, και η διαφορά $n_- - n_+$ ταυτίζεται με το τοπολογικό φορτίο Q . Αυτή η ακριβής ταύτιση προκύπτει από τη GW σχέση και τις φασματικές ιδιότητες του Overlap Dirac τελεστή, επιτρέποντας αξιόπιστο υπολογισμό τοπολογικών ιδιοτήτων και ανωμαλιών μέσα από φερμιονικές μεθόδους.

6.3.3 Ανάλυση Ανωμαλιών και Τοπολογικό Φορτίο

Το θεμελιώδες τεστ για τη χειρόμορφη ανωμαλία (π.χ. ABJ anomaly) είναι η μεταβολή του μέτρου του ολοκληρώματος διαδρομής του φερμιονίου υπό χειρόμορφη μετασχηματισμό. Σε GW διατύπωση, η τροποποιημένη χειρόμορφη συμμετρία παράγει ακριβώς τη σωστή ανωμαλία.

Ανάλυση ABJ ανωμαλίας στο πλέγμα

Υπό τη GW χειρόμορφη μετάβαση, το μέτρο της ιακωβιανής του ολοκληρώματος διαδρομής δεν είναι μονάδα αλλά δίνει όρο ίσο με $a \text{Tr}(\gamma_5 D)$. Με ανάλυση ιδιοκαταστάσεων του D , αποδεικνύεται ότι

$$\text{Tr}\left(\gamma_5(1 - \frac{a}{2}D)\right) = n_- - n_+ = Q,$$

επαληθεύοντας τη σωστή τοπολογική ανωμαλία και τη σχέση $\partial_\mu J_5^\mu = 2mP + 2Q_{\text{top}}$ στο πλέγμα. Αυτή η απόδειξη απαιτεί χρήση του φάσματος του D που ικανοποιεί την σχέση GW.

Ρόλος τοπολογικών δομών Οι τοπολογικές δομές (instantons, calorons κ.ά.) εμφανίζονται μέσω των zero modes του Dirac τελεστή. Με χρήση του θεωρήματος δείκτη, η μελέτη των τοπολογικών ιδιοτήτων ομάδων βαθμίδας γίνεται μέσω φερμιονικών μεθόδων (zero-mode counting), καθοδηγώντας την ανάλυση ανωμαλιών και χειρόμορφων ιδιοτήτων σε πραγματικές προσομοιώσεις.

Συνοψίζοντας, η χειρόμορφη συμμετρία στο πλέγμα υλοποιείται ακριβώς μέσω των σχέσεων GW, επιτρέποντας καθαρές θεωρητικές και υπολογιστικές αναλύσεις: ορισμό τοπολογικού φορτίου μέσω δεικτών, σωστή ανάλυση ανωμαλίας, και ακριβή μελέτη των χειρόμορφων ιδιοτήτων ακόμη και σε πεπερασμένο a , παρά το αυξημένο υπολογιστικό κόστος των GW τελεστών (Overlap, Domain Wall).

6.4 Συγκριτική Αξιολόγηση και Πρακτικές Επιπτώσεις

Στην πράξη, η επιλογή του φερμιονικού φορμαλισμού στο πλέγμα εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τις υπολογιστικές απαιτήσεις και την επιθυμητή ακρίβεια στο όριο του συνεχούς. Κάθε προσέγγιση (Wilson, staggered, Ginsparg–Wilson κ.ά.) συνοδεύεται από συγκεκριμένες προκλήσεις στην επίλυση του τελεστή Dirac, τον υπολογισμό της φερμιονικής ορίζουσας και τη διαχείριση σφαλμάτων διακριτοποίησης. Στην υποενοότητα αυτή εξετάζονται συνοπτικά οι κύριες υπολογιστικές προκλήσεις, οι τεχνικές επιτάχυνσης επιλυτών και προκανονικοποίησης, η αντιμετώπιση της φερμιονικής ορίζουσας μέσω ψευδοφερμιονίων και Hybrid Monte Carlo (HMC), καθώς και οι συνήθεις βελτιώσεις όπως Clover, Twisted Mass και minimally doubled φερμιόνια.

6.4.1 Υπολογιστικές Προκλήσεις και Αποτελεσματικοί Επιλυτές

Ο πυρήνας πολλών πλεγματικών προσομοιώσεων με φερμιόνια είναι η ανάγκη επίλυσης γραμμικών συστημάτων της μορφής

$$D\psi = \eta,$$

όπου D είναι ο πλεγματικός τελεστής Dirac του επιλεγμένου φορμαλισμού και η ένα γνωστό πεδίο (source). Η δυσκολία έγκειται στο ότι D είναι sparse αλλά μεγάλης διάστασης, ενώ ο δείκτης κατάστασης κ (condition number) του $D^\dagger D$ αυξάνεται όταν πλησιάζουμε το χειρομορφικό όριο ή χρησιμοποιούμε τελεστές Ginsparg–Wilson. Σε φερμιόνια Wilson, κοντά στη κρίσιμη απογυμνωμένη μάζα $m_c(a)$ η σύγκλιση της μεθόδου Conjugate Gradient (CG) ή BiCGStab επιβραδύνεται, ενώ σε Overlap απαιτούνται πολλαπλές εφαρμογές της $\text{sgn}(H_W)$. Στα staggered φερμιόνια ο αριθμητικός όρος είναι μικρότερος, αλλά υπάρχουν όροι θραύσης της γεύσης. Πιο σύγχρονες τεχνικές όπως η προσαρμοστική πολυεπίπεδη μέθοδος και μέθοδος αποπληθωρισμού έχουν επιτύχει σημαντικές επιταχύνσεις, μειώνοντας την εξάρτηση του κόστους από το μάζα του πιονίου και καθιστώντας δυνατές προσομοιώσεις κοντά στο φυσικό σημείο.

Δείκτης Dirac και ευσταθείς αλγόριθμοι αναστροφής

Οι επαναληπτικές μέθοδοι υποχώρων Krylov (CG, BiCGStab, GMRES) χρειάζονται αριθμό επαναλήψεων ανάλογο του $\sqrt{\kappa}$. Σε φασματικά δυσμενείς περιοχές χρησιμοποιούνται τεχνικές inflation (αφαίρεση χαμηλών ιδιοτιμών) και επιλυτές μικτής ακρίβειας για μείωση κόστους χωρίς απώλεια ακρίβειας.

Προκανονικοποίηση και επιτάχυνση επιλυτών

Κλασικές προκανονικοποιήσεις όπως προεπεξεργασία ζυγών–μονών, συμπληρωματικός πίνακας Schur, προεπεξεργασία μάζας κατά Hasenbusch, καθώς και ρητή προσέγγιση στον τελεστή Overlap, μειώνουν το αριθμητικό όρο (residual). Mixed-precision, deflation και adaptive multi-grid αποτελούν σύγχρονες λύσεις για επιτάχυνση.

6.4.2 Φερμιονικός Όρος Δράσης και Ορίζουσα

Στο ολοκλήρωμα διαδρομής της QCD με φερμιονία, ο φερμιονικός όρος εμφανίζεται μέσω της ορίζουσας του τελεστή Dirac:

$$\int D\bar{\psi} D\psi e^{-\bar{\psi} D \psi} = \det D.$$

Στις προσομοιώσεις HMC, η ορίζουσα ενσωματώνεται μέσω ψευδοφερμιονίων.

Υπολογισμός φερμιονικής ορίζουσας

Δεν υπολογίζεται απευθείας αλλά με ψευδοφερμιονικά πεδία: $\det D \propto \int D\phi^\dagger D\phi e^{-\phi^\dagger (D^\dagger D)^{-1} \phi}$. Χρήση Hasenbusch splitting σε Wilson, rational approximations σε Overlap, και πολλαπλές αναστροφές Dirac κατά τη HMC καθορίζουν το κόστος.

Ψευδοφερμιονικές Μέθοδοι και HMC

Στο HMC, ο φερμιονικός όρος γίνεται $\phi^\dagger (D^\dagger D)^{-1} \phi$ στην ενέργεια, με μοριακά δυναμικά βήματα που απαιτούν λύσεις $D^\dagger D x = \psi$. πολλαπλές χρονικές ολοκληρώσεις, προκαθορισμός μάζας και προσεγγίσεις δύναμης βελτιώνουν τη σταθερότητα και την αποδοτικότητα.

Συμπεράσματα και Επόμενα Βήματα

Στην παρούσα βιβλιογραφική μελέτη παρουσιάστηκε πρώτα η θεμελίωση της πλέγματικής προσέγγισης στην QCD μέσω της διακριτοποίησης της δράσης (πλακέτα Wilson και βελτιώσεις Symanzik). Στη συνέχεια αναλύθηκαν οι βασικές αλγοριθμικές μέθοδοι Monte Carlo (Metropolis, Heat Bath, HMC) και οι τεχνικές ελέγχου σφαλμάτων (jackknife, bootstrap) που εξασφαλίζουν αξιόπιστα στατιστικά αποτελέσματα. Ακολούθησε επισκόπηση των διακριτοποιήσεων φερμιονίων (Wilson, staggered, overlap, domain-wall), με έμφαση στις θεωρητικές τους ιδιότητες και στα τοπολογικά φορτία, καθώς και εξέταση σύγχρονων επιταχυντικών τεχνικών όπως deflation και adaptive multigrid solvers για την αποτελεσματική επίλυση του τελεστή Dirac. Τέλος, παρουσιάστηκαν μέθοδοι καθορισμού της φυσικής κλίμακας (Wilson/Polyakov loops).

Ως επόμενα βήματα προτείνονται τα εξής:

1. Εμβάθυνση σε twisted-mass φερμιονία για περαιτέρω μείωση των σφαλμάτων διακριτοποίησης στο πλέγμα.
2. Υλοποίηση Ginsparg–Wilson/domain-wall δράσεων για αυστηρότερο έλεγχο της χειρόμορφης συμμετρίας.
3. Εφαρμογή της μεθόδου Wilson flow για ακριβείς επιλογή κλίμακας και μείωση διακυμάνσεων.
4. Χρήση πολυεπίπεδων αλγορίθμων και επιτάχυνση με GPU για βελτιστοποίηση του υπολογιστικού κόστους.

Με την ολοκλήρωση αυτών των βημάτων, η βιβλιογραφική βάση που θέσαμε θα εμπλουτιστεί σημαντικά, προσφέροντας μια πιο ολοκληρωμένη και ενημερωμένη εικόνα των αριθμητικών και θεωρητικών μεθόδων στη lattice QCD.

References

- [1] C. Gattringer και C. B. Lang, *Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation*, Lecture Notes in Physics 788, Springer, 2010.
- [2] F. Knechtli, M. Günther και M. Peardon, *Lattice Quantum Chromodynamics: Practical Essentials*, SpringerBriefs in Physics, 2017.
- [3] H. J. Rothe, *Lattice Gauge Theories: An Introduction*, 4η έκδοση, World Scientific Lecture Notes in Physics 82, 2012.