



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
Posgrado en Ciencias Físicas

**Mediciones numéricas en física cuántica  
con restricciones topológicas**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN CIENCIAS  
(FÍSICA)

P R E S E N T A:

Héctor Miguel Mejía Díaz

TUTOR PRINCIPAL:

DR. WOLFGANG BIETENHOLZ  
(Instituto de Ciencias Nucleares - UNAM)

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR:

DR. JOSÉ ALEJANDRO AYALA MERCADO  
(Instituto de Ciencias Nucleares - UNAM)

DR. CHRISTOPH P. HOFMANN  
(Facultad de Ciencias - UCOL)

Ciudad Universitaria, Cd. Mx., Agosto 2016



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



## Agradecimientos

- Al Dr. Wolfgang Bietenholz, por su enorme apoyo a través del tiempo en que me ha permitido ser parte de su grupo de trabajo. Agradezco todos los consejos y el excelente trato personal que siempre he recibido de él. Asimismo, aprecio mi inclusión al proyecto PAPIIT “Simulaciones numéricas de teorías de campos cuánticos a alta densidad”, con clave IN107915.
- Al Dr. Urs Gerber, por su ayuda y entusiasmo durante los proyectos en los que hemos trabajado, además del tiempo y paciencia que dedicó a fin de mejorar mi trabajo.
- A mis padres, Martha y Miguel, y mis hermanos, Luis Fernando y Giovana Lizzeth, por su incansable apoyo en cada paso de mi vida. Así como a Malinalli, por estar conmigo en las buenas y en las malas.



## Resumen

En mecánica cuántica y teoría cuántica de campos, hay modelos donde las configuraciones se dividen en sectores topológicos, que se caracterizan por una carga topológica  $Q \in \mathbb{Z}$ , con condiciones de frontera periódicas. Esto permite añadir un término extra a la acción del modelo para tener en cuenta esta carga, que se manifiesta a nivel no-perturbativo. En el formalismo de integral funcional es entonces necesario incluir configuraciones con cada carga topológica posible. Sin embargo, esto solo puede ser posible analíticamente; numéricamente, los algoritmos tienen que hacer un muestreo correcto de todas las cargas. Cuando este tipo de modelos es abordado numéricamente, puede ocurrir que los algoritmos eficientes que son disponibles para simularlo hacen actualizaciones locales de las configuraciones. Cuando esto sucede, el tiempo de cómputo necesario para explorar diferentes sectores topológicos se vuelve inaccesible cerca del límite del continuo. Esto ocurre, por ejemplo, en cromodinámica cuántica (QCD). Así, resulta de interés estudiar formulaciones que hagan posible obtener física aún cuando las mediciones numéricas estén restringidas topológicamente.

A través del estudio de modelos  $O(N)$  en  $d = N - 1$  dimensiones, esta tesis explora mediante simulaciones de Monte Carlo dos métodos que harían posible obtener la susceptibilidad topológica  $\chi_t$ , o el valor esperado de una observable,  $\langle \mathcal{O} \rangle$ , aún si solo se dispone de mediciones congeladas topológicamente. En particular, el modelo  $O(3)$  2d comparte con QCD las propiedades de libertad asintótica, una brecha de masa generada no-perturbativamente y la existencia de sectores topológicos.

El primero de los métodos estudiados, propuesto por Aoki, Fukaya, Hashimoto y Onogi, permitiría obtener  $\chi_t$  a partir de la correlación de la densidad de carga topológica en un solo sector. Por otra parte, según un trabajo de Brower, Chandrasekharan, Negele y Wiese, también sería posible medir  $\langle \mathcal{O} \rangle$  si se conocen mediciones de la observable  $\mathcal{O}$  en pocos sectores topológicos y diferentes volúmenes.

Para los modelos estudiados, es posible hacer las simulaciones usando el algoritmo cluster de Wolff, cuyas actualizaciones no son locales. Esto resulta de utilidad porque posibilita comparar los resultados obtenidos a través de los métodos a estudiar con valores medidos directamente considerando diversas cargas topológicas.



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>5</b>
1.1. La integral de trayectoria . . . . .	5
1.2. Modelos de espines $O(N)$ . . . . .	9
1.3. Homotopía y grupos de homotopía . . . . .	10
1.3.1. Homotopía . . . . .	11
1.3.2. El grupo fundamental . . . . .	12
1.3.3. Grupos $\pi_n[S^m]$ . . . . .	13
<b>2. Sectores topológicos en los modelos <math>O(N)</math></b>	<b>15</b>
2.1. Sectores topológicos en teorías de norma . . . . .	15
2.1.1. Instantones en $SU(N)$ . . . . .	16
2.1.2. El vacío $\theta$ y la acción euclidiana . . . . .	18
2.2. El modelo $O(2)$ 1d . . . . .	20
2.2.1. Modelo $O(2)$ 1d en el continuo . . . . .	21
2.2.2. Modelo $O(2)$ 1d en la retícula . . . . .	23
2.3. El modelo $O(3)$ 2d . . . . .	24
2.3.1. Modelo $O(3)$ 2d en el continuo . . . . .	24
2.3.2. Modelo $O(3)$ 2d en la retícula . . . . .	26
<b>3. Susceptibilidad topológica en un sector fijo</b>	<b>30</b>
3.1. Método del punto silla . . . . .	31
3.2. Mediciones restringidas a un sector topológico . . . . .	33
3.2.1. $\chi_t$ en un sector topológico fijo . . . . .	35
<b>4. Observables restringidas topológicamente</b>	<b>41</b>
4.1. Observables con topología restringida . . . . .	42

4.2. Observables a través del método BCNW . . . . .	43
4.2.1. Densidad de acción . . . . .	43
4.2.2. Susceptibilidad magnética . . . . .	47
4.2.3. Longitud de correlación . . . . .	54
<b>5. Conclusiones</b>	<b>61</b>
<b>A. Simulaciones de Monte Carlo</b>	<b>64</b>
<b>B. El algoritmo de Wolff</b>	<b>66</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>69</b>

# Índice de figuras

1.1. Curvas homotópicas en un espacio convexo . . . . .	12
1.2. Índice de una curva con respecto a un punto . . . . .	13
2.1. Carga topológica del rotor cuántico . . . . .	22
2.2. División de la retícula en triángulos . . . . .	27
2.3. División de una plaqueta . . . . .	28
3.1. Susceptibilidad topológica a diferentes volúmenes en el modelo $O(2)$ 1d . . . . .	37
3.2. Plateaux de la correlación de la densidad de carga topológica .	38
3.3. Susceptibilidad topológica a diferentes volúmenes en el modelo $O(3)$ 2d . . . . .	40
4.1. Densidad de acción del modelo $O(2)$ 1d . . . . .	45
4.2. Densidad de acción del modelo $O(3)$ 2d . . . . .	48
4.3. Susceptibilidad magnética del modelo $O(2)$ 1d . . . . .	50
4.4. Susceptibilidad magnética del modelo $O(3)$ 2d . . . . .	53
4.5. Longitud de correlación del modelo $O(2)$ 1d . . . . .	56
4.6. Función de correlación . . . . .	58
4.7. Longitud de correlación del modelo $O(3)$ 2d . . . . .	59
B.1. Reflexión usando el algoritmo de Wolff . . . . .	67

# Capítulo 1

## Introducción

En este capítulo se describe brevemente el formalismo de integral de trayectoria en mecánica cuántica. En este contexto se presenta el tratamiento de modelos de espines con simetría  $O(N)$ . Posteriormente, se introducen algunos conceptos sobre homotopía y grupos de homotopía.

### 1.1. La integral de trayectoria

En mecánica cuántica, el estado de un sistema es descrito enteramente por un vector  $|\psi\rangle$  (*ket*, en la notación de Dirac) en un espacio de Hilbert. Si  $|\psi(t)\rangle$  representa el estado del sistema al tiempo  $t$ , y  $|\psi(t')\rangle$  el estado al tiempo  $t'$  ( $t' \geq t$ ), existe un operador unitario,  $\hat{U}(t', t)$ , que relaciona los estados del sistema a tiempos diferentes; es decir,

$$|\psi(t')\rangle = \hat{U}(t', t)|\psi(t)\rangle. \quad (1.1.1)$$

Este es el llamado operador de evolución temporal, y satisface la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \hat{U}(t', t) = \hat{H} \hat{U}(t', t), \quad (1.1.2)$$

donde  $\hat{H}$  es el hamiltoniano del sistema. Si  $\hat{H}$  no depende explícitamente del tiempo, el operador de evolución temporal es dado por

$$\hat{U}(t', t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right). \quad (1.1.3)$$

En el espacio de coordenadas la función de onda es dada por el producto escalar  $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$ , y al tiempo  $t'$ , usando la ec. (1.1.1), se puede escribir como

$$\langle x' | \psi(t') \rangle = \langle x' | \hat{U}(t', t) | \psi(t) \rangle, \quad (1.1.4)$$

o bien

$$\psi(x', t') = \int dx \langle x' | \hat{U}(t', t) | x \rangle \psi(x, t), \quad (1.1.5)$$

pues

$$\int dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{1}. \quad (1.1.6)$$

El elemento de matriz

$$\langle x' | \hat{U}(t', t) | x \rangle = \langle x' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right) | x \rangle \quad (1.1.7)$$

es el *propagador* de la función de onda, se puede interpretar como la amplitud de transición del estado inicial  $|x(t)\rangle$  al estado final  $|x'(t')\rangle$  [1]. Si se conoce el propagador, se conoce también la evolución de la función de onda (1.1.5); esto se puede verificar usando los eigenestados discretos de energía,  $|n\rangle$ , tales que

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad \text{y} \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1},$$

pues, junto con la ec. (1.1.7), se sigue que

$$\begin{aligned} \langle x | \hat{U}(t', t) | x \rangle &= \langle x | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right) | x \rangle \\ &= \sum_n |\langle x | n \rangle|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n(t' - t)\right). \end{aligned} \quad (1.1.8)$$

Si se considera un tiempo  $t_1$  tal que  $t' \geq t_1 \geq t$ , se puede obtener la evolución del sistema primero del tiempo  $t$  a  $t_1$  y después de  $t_1$  a  $t'$ , por lo que el propagador (1.1.7) se puede escribir como

$$\langle x' | \hat{U}(t', t) | x \rangle = \langle x' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t_1)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_1 - t)\right) | x \rangle. \quad (1.1.9)$$

O bien, usando la ec. (1.1.6) en la posición  $x_1$ ,

$$\langle x' | \hat{U}(t', t) | x \rangle = \int dx_1 \langle x' | \hat{U}(t', t_1) | x_1 \rangle \langle x_1 | \hat{U}(t_1, t) | x \rangle. \quad (1.1.10)$$

Generalizando el procedimiento anterior, es posible dividir el intervalo temporal  $[t, t']$  en  $N$  partes iguales [2],

$$t' - t = N\epsilon$$

e insertando conjuntos completos de eigenkets de posición en cada tiempo intermedio  $t_i$  se obtiene la siguiente expresión,

$$\begin{aligned} \langle x' | \hat{U}(t', t) | x \rangle &= \int dx_1 \int dx_2 \cdots \int dx_{N-1} \langle x' | \hat{U}(t', t_{N-1}) | x_{N-1} \rangle \cdots \\ &\times \langle x_1 | \hat{U}(t_1, t) | x \rangle. \end{aligned} \quad (1.1.11)$$

Si el hamiltoniano del sistema es de la forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}) \quad (1.1.12)$$

se tiene que [1-3]

$$\langle x_{i+1} | \hat{U}(t_{i+1}, t_i) | x_i \rangle = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left[ \frac{i\epsilon}{\hbar} \left( \frac{m}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon} \right)^2 - V(x_i) \right) \right], \quad (1.1.13)$$

por lo que el propagador (1.1.7) es

$$\langle x' | \hat{U}(t', t) | x \rangle = \int \mathcal{D}x \exp \left( \frac{i}{\hbar} S[x] \right), \quad (1.1.14)$$

donde

$$S[x] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \epsilon \sum_i \left[ \frac{m}{2} \left( \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon} \right)^2 - V(x_i) \right) \right] = \int dt \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x) \right], \quad (1.1.15)$$

y

$$\int \mathcal{D}x = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{N/2} \int dx_1 \cdots \int dx_{N-1}. \quad (1.1.16)$$

Se trata de una integral sobre todas las trayectorias posibles. Cada integral  $\int dx$  ocurre en el espacio físico, pero el resultado es una suma sobre configuraciones. Esto no quiere decir que el sistema siguió trayectorias definidas con ciertas probabilidades, con la integral funcional se calculan amplitudes de probabilidad y la suma coherente de éstas.

El formalismo de integral de trayectoria resulta de gran utilidad en teoría cuántica de campos y se puede relacionar con la función de partición que se utiliza en mecánica estadística. Para constatar esta última observación se puede considerar la función de partición

$$Z = \text{Tr} \exp(-\beta \hat{H}), \quad (1.1.17)$$

donde  $\beta = 1/T$  y  $T$  es la temperatura (considerando la constante de Boltzmann  $k_B = 1$ ). Si

$$\beta = \frac{i(t' - t)}{\hbar}, \quad (1.1.18)$$

el operador  $\exp(-\beta \hat{H})$  en la ec. (1.1.17) corresponde justamente al operador de evolución temporal (1.1.3). Así, una temperatura finita se puede identificar con una evolución en un tiempo imaginario, el *tiempo euclidiano*. La rotación de  $t$  en  $\frac{\pi}{2}$  en el plano complejo es la *rotación de Wick*.

Si se hace un procedimiento análogo al que condujo a la ec. (1.1.14), sustituyendo  $\epsilon$  por  $a$  en el espacio euclidiano, dividiendo el tiempo euclidiano en  $N$  partes iguales, con

$$\beta = \frac{Na}{\hbar},$$

e insertando conjuntos completos de eigenvectores de posición, se obtiene la integral de trayectoria euclidiana,

$$Z = \int \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{1}{\hbar} S_E[x]\right). \quad (1.1.19)$$

La acción euclidiana es

$$S_E[x] = \lim_{a \rightarrow 0} a \sum_i \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{a} \right)^2 + V(x) \right] = \int_t^{t'} d\tau \left( \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right), \quad (1.1.20)$$

y la medida de integración,

$$\int \mathcal{D}x = \lim_{a \rightarrow 0} \left( \frac{m}{2\pi\hbar a} \right)^{N/2} \int dx_1 \cdots \int dx_N. \quad (1.1.21)$$

A diferencia del caso con el tiempo real, ahora hay  $N$  y no  $N - 1$  integrales, lo que es consistente con tomar la traza, según la ec. (1.1.17).

En lo sucesivo, las menciones de la integral de trayectoria y a la acción serán con referencia a las ecs. (1.1.19) y (1.1.20), respectivamente, considerando  $\hbar = 1$ .

## 1.2. Modelos de espines $O(N)$

En los modelos de espines en una retícula  $d$ -dimensional, las variables de campo que se consideran son vectores  $\vec{e}_x$  con  $N$  componentes reales, localizados en sitios  $x$  de la retícula. En los modelos  $\sigma$  no-lineales, se impone la condición de normalización sobre los vectores,

$$|\vec{e}_x| = 1 \quad (1.2.1)$$

lo que hace que no sea una teoría libre, aún si la hamiltoniana no contiene términos más que cuadráticos.

Algunos de los modelos de espines con la restricción (1.2.1) y simetría global  $O(N)$  son el modelo de Ising,  $Z(2)$ , el modelo  $XY$ ,  $O(2)$ , y el modelo de Heisenberg,  $O(3)$ . El modelo de Ising puede describir un gas en una retícula, donde en cada sitio el número de moléculas es 0 o 1, el modelo  $XY$  es útil en la descripción de  $^4\text{He}$  superfluido, mientras que el modelo  $O(3)$  se usa en la modelación de ferromagnetos y en física de partículas por ser isomorfo a  $SU(2)$ .

Los modelos  $O(N)$  se caracterizan por una función hamiltoniana  $H$  que especifica la energía de cualquier configuración de espines. Usualmente, los acoplamientos entre espines se limitan a los vecinos más cercanos, denotados por  $\langle xy \rangle$ . En presencia de un campo magnético externo constante  $\vec{B}$ , la hamiltoniana es

$$H[\vec{e}] = J \sum_{\langle xy \rangle} \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y - \vec{B} \cdot \sum_x \vec{e}_x. \quad (1.2.2)$$

Si  $J < 0$ , el acoplamiento es ferromagnético, y antiferromagnético para  $J > 0$ .

Cuando se estudian en el formalismo de integral de trayectoria, la función de partición es<sup>1</sup>

$$Z := \int \mathcal{D}e \exp(-\beta H[\vec{e}]), \quad (1.2.3)$$

donde  $\beta = 1/T$  es el inverso de la temperatura, como en la ec. (1.1.17), y la medida funcional se puede escribir como

$$\mathcal{D}e = \prod_x \int_{-1}^1 de_x^1 \dots \int_{-1}^1 de_x^N \delta(\vec{e}_x^2 - 1). \quad (1.2.4)$$

---

<sup>1</sup>En lo sucesivo, el símbolo  $:=$  se usa para denotar definiciones.

Los valores esperados se calculan insertando las cantidades apropiadas en el integrando funcional. Por ejemplo, la magnetización es

$$\langle \vec{e} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}e \vec{e} \exp(-\beta H[\vec{e}]), \quad (1.2.5)$$

mientras que la función de correlación se define como

$$\langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle := \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}e \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \exp(-\beta H[\vec{e}]), \quad (1.2.6)$$

para cada distancia  $|x - y|$ . Cuando decae exponencialmente en distancias grandes, se cumple que [2]

$$\langle \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y \rangle \propto \exp\left(-\frac{|x - y|}{\xi}\right), \quad (1.2.7)$$

y  $\xi$  es la *longitud de correlación*. Esta es la escala natural del sistema. Todas las cantidades dimensionales se deben medir a través de relaciones con una potencia apropiada de  $\xi$ . A altas temperaturas, la longitud de correlación puede ser unos pocos espaciamientos de retícula; mientras que el ruido térmico destruye correlaciones a distancias grandes.

El inverso de la longitud de correlación define la brecha de masa de la teoría,

$$m = E_1 - E_0 = \frac{1}{\xi}, \quad (1.2.8)$$

que corresponde a la masa de la partícula más ligera. En modelos con libertad asintótica, como el  $O(3)$  2d, el límite al continuo de la teoría en la retícula se toma cuando el acoplamiento,  $g$ , va a cero, con  $\beta = 1/g^2$ . En este límite, la longitud de correlación diverge exponencialmente según  $\xi \propto \exp(2\pi/g^2)$ .

### 1.3. Homotopía y grupos de homotopía

La exposición sobre la integral de trayectoria hecha en la sección anterior es suficiente para resolver diversos problemas físicos. Sin embargo, existen aplicaciones donde es necesario incluir aspectos topológicos de la teoría. Esto no siempre es evidente, pues el espacio euclidiano  $n$ -dimensional  $\mathbb{R}^n$  no tiene una estructura topológica; pero en espacios específicos, la topología aparece de forma natural. En esta sección se esbozan algunos conceptos sobre topología y grupos de homotopía, que serán usados en el marco de los modelos  $\sigma$  no-lineales.

### 1.3.1. Homotopía

Una *trayectoria* en un espacio  $X$  es un mapeo continuo  $f : [a, b] \rightarrow X$ , donde  $X$  es un espacio topológico tal que dos puntos cualesquiera en  $X$  se pueden conectar mediante una curva continua. Se dice que dos de estos mapeos,  $f_0 : [a, b] \rightarrow X$  y  $f_1 : [a, b] \rightarrow X$ , son *homotópicos* si existe una función continua  $F : [a, b] \times I \rightarrow X$  ( $I = [0, 1]$ ) tal que [3, 4]

$$\begin{aligned} F(s, 0) &= f_0(s) \\ F(s, 1) &= f_1(s); \end{aligned} \tag{1.3.1}$$

es decir,  $f_0(s)$  se puede deformar continuamente en  $f_1(s)$ . Si las curvas  $f_0(s)$  y  $f_1(s)$  son cerradas — sus puntos inicial y final coinciden — se cumple también que [5]

$$F(a, t) = F(b, t), \forall t \in I. \tag{1.3.2}$$

La relación de homotopía entre  $f_0(s)$  y  $f_1(s)$  se denota como  $f_0(s) \sim f_1(s)$ . En la Figura 1.1 se ilustran dos curvas,  $f_0$  y  $f_1$ , que son homotópicas.

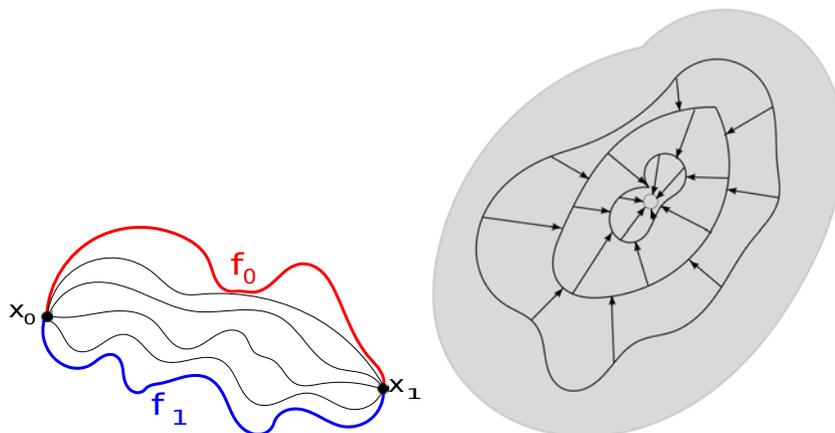
En un espacio convexo, por ejemplo el espacio euclidiano  $n$ -dimensional  $\mathbb{R}^n$ , todas las trayectorias que inician en el punto  $x_0$  y terminan en  $x_1$  son homotópicas. Una homotopía en este caso es

$$F(s, t) = (1 - t)f_0(s) + tf_1(s).$$

Al “tiempo”  $t = 0$ ,  $F(s, 0) = f_0(s)$ , conforme el tiempo avanza, esta curva es deformada hasta convertirse en  $f_1(s)$  al tiempo  $t = 1$ . Como consecuencia de este resultado, y considerando el mapeo constante  $c : [a, b] \rightarrow X$  definido por  $c(s) = x_0$ , para algún  $x_0$  particular, se sigue que en un espacio convexo todas las curvas cerradas son contractibles a un punto. Esto significa que estos espacios no tienen estructura topológica [3]. En la Figura 1.1 se observan ejemplos de dos trayectorias que van del punto  $x_0$  a  $x_1$  y son homotópicas entre sí, además se ilustra un espacio convexo donde una curva cerrada es homotópica a un punto.

La relación de homotopía entre trayectorias es una relación de equivalencia:

- Es reflexiva, puesto que mediante una homotopía constante  $f \sim f$  para cualquier curva  $f$ .
- Es transitiva; es decir, si  $f_0 \sim f_1$  y  $f_1 \sim f_2$ , entonces  $f_0 \sim f_2$ .



**Figura 1.1:** *Izquierda:* las curvas  $f_0$  y  $f_1$  son homotópicas, pues pueden ser deformadas continuamente entre sí. Las líneas entre las curvas muestran la deformación del tiempo  $t = 0$  al tiempo  $t = 1$ . *Derecha:* la región sombreada es convexa, dentro de esta, las curvas cerradas pueden ser deformadas continuamente a un punto.

Esto es porque existen dos homotopías  $F_1$  y  $F_2$  tales que  $F_1(s, 0) = f_0(s)$ ,  $F_1(s, 1) = f_1(s)$ ,  $F_2(s, 0) = f_1(s)$  y  $F_2(s, 1) = f_2(s)$ . Entonces se puede definir la homotopía

$$F(s, t) = \begin{cases} F_1(s, 2t) & \text{si } 0 \leq t \leq 1/2 \\ F_2(s, 2t - 1) & \text{si } 1/2 \leq t \leq 1. \end{cases} \quad (1.3.3)$$

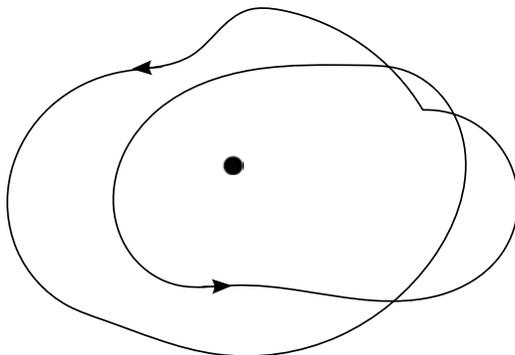
- Es simétrica. Si  $f_0 \sim f_1$  a través de la homotopía  $F(s, t)$ , entonces  $f_1 \sim f_0$  mediante  $F(s, 1 - t)$ .

Este hecho se puede usar para dividir un espacio en clases de equivalencia. En particular,  $[f]$  es la clase de homotopía de  $f$ , referida al conjunto de trayectorias que son deformables continuamente entre sí.

### 1.3.2. El grupo fundamental

Se puede definir un producto de dos trayectorias  $f, g : I \rightarrow X$ , tales que  $f(1) = g(0)$  mediante

$$f \cdot g(s) = \begin{cases} f(2s) & \text{si } 0 \leq s \leq 1/2 \\ g(2s - 1) & \text{si } 1/2 \leq s \leq 1. \end{cases} \quad (1.3.4)$$



**Figura 1.2:** Curva con índice 2 con respecto al punto en el centro de la trayectoria.

Si  $[f]$  y  $[g]$  son clases de equivalencia, el producto de estas clases de equivalencia se define como

$$[f][g] = [f \cdot g]. \quad (1.3.5)$$

Para definir el grupo fundamental, se consideran trayectorias cerradas, con punto inicial y final  $x_0$ . El punto  $x_0$  es el *punto base*. El conjunto de todas las clases de homotopía  $[f]$  de las curvas  $f : I \rightarrow X$  con punto base  $x_0$  es el *grupo fundamental*, denotado por  $\pi_1(X, x_0)$ .  $\pi_1(X, x_0)$  es un grupo con respecto al producto (1.3.5). Si  $X$  es un espacio conexo, el grupo fundamental es independiente del punto base  $x_0$  [4].

Se dice que un espacio es *simplemente conexo* si cualquier curva cerrada es homotópica a un punto [5]. Un ejemplo de este tipo de espacio es la esfera  $S^2$ , pues cualquier curva cerrada sobre su superficie se puede deformar continuamente a un punto; así, su grupo fundamental es trivial. El círculo  $S^1$  por el contrario no es simplemente conexo, pero no tiene un grupo fundamental trivial, esto es porque curvas con índices diferentes no son homotópicas entre sí. Intuitivamente, el *índice* de una curva es el número de veces que una curva rodea a un punto que está fuera de la curva (ver Figura 1.2). En  $S^1$ , además, el producto de dos trayectorias tiene como índice la suma de los índices de las dos trayectorias, por lo que su grupo fundamental es el grupo de los enteros,  $\mathbb{Z}$ .

### 1.3.3. Grupos $\pi_n[S^m]$

El concepto del grupo fundamental se puede generalizar para obtener otros grupos de homotopía. En particular, resultan de interés en este trabajo

los grupos de homotopía  $\pi_n$  de esferas  $S^m$ . En este caso, se consideran mapeos  $f : I^n \rightarrow X$ , donde  $I^n$  es el cubo  $n$ -dimensional  $[0, 1]^n$  — generalización del intervalo  $I$  de la sección anterior —, cuya frontera es  $\partial I^n$ .

En  $S^n$ , se cumple además que  $F(\partial I^n, t) = x_0 \forall t$ , condición equivalente a tener curvas cerradas. Si el espacio  $X$  es conexo por tramos, el grupo  $\pi_n(X, x_0)$  es independiente de la elección del punto base  $x_0$ . Los mapeos  $(I^n, \partial I^n) \rightarrow (X, x_0)$  son iguales que los mapeos de  $S^m \rightarrow X$ ; es decir,  $\pi_n(X, x_0)$  se puede ver como la clase de homotopía de los mapeos  $(S^m, s_0) \rightarrow (X, x_0)$ , denotada por  $\pi_n[S^m]$  [4].

En general,

- $\pi_n[S^m] = \{0\}$  si  $n < m$ , es decir, el grupo de homotopía es trivial,
- $\pi_n[S^n] = \mathbb{Z}$ , y
- $\pi_n[S^m]$  con  $n > m$  no es necesariamente trivial.

# Capítulo 2

## Sectores topológicos en los modelos $O(N)$

Cuando se usa teoría de perturbaciones, la exponencial en la integral de trayectoria se desarrolla en una serie de potencias en los parámetros de interacción alrededor de campos libres; es decir, de los términos de orden cuadrático y los demás términos son tratados como correcciones. En algunos casos existen configuraciones dependientes del espacio-tiempo que pueden resultar de interés en sí mismas por ser configuraciones estacionarias de la acción (instantones) o por ser cuasi-partículas [2, 3, 6, 7]. En particular, estas configuraciones son de interés en cromodinámica cuántica (QCD).

En este capítulo se expone brevemente cómo aparece la topología en las teorías de norma y por qué resulta interesante su estudio desde el punto de vista físico. Posteriormente, se describe a los modelos  $O(2)$  y  $O(3)$  en una y dos dimensiones espaciales, respectivamente, como “modelos juguete” de QCD. En este contexto, se constata que estos modelos juguete tienen sectores topológicos, como los descritos en el Capítulo 1. En el caso de los modelos  $O(N)$ , la descripción se hace en el continuo y en la retícula, que es donde se llevan a cabo las simulaciones numéricas.

### 2.1. Sectores topológicos en teorías de norma

En el capítulo anterior se mencionó que es posible dividir a las trayectorias en un espacio topológico en clases de equivalencia. Si dos curvas pertenecen

al mismo grupo de homotopía, entonces se pueden deformar entre sí continuamente. De manera análoga, las configuraciones posibles en una teoría de campos pueden tener una estructura topológica no-trivial. La topología de estas configuraciones depende de alguna funcional; en el caso presente esta es la acción euclidiana,  $S$ . Se dice que dos configuraciones son topológicamente equivalentes si se pueden deformar entre sí continuamente sin pasar por configuraciones prohibidas con acción infinita ver, por ejemplo, el capítulo 23 en [7]. Si una configuración con una cierta topología minimiza la acción, entonces debe ser al menos un mínimo local de todas las posibles configuraciones con cualquier topología.

### 2.1.1. Instantones en $SU(N)$

Considérese una teoría de norma  $SU(N)$  en el espacio con tiempo euclidiano. En términos del tensor de fuerza,<sup>1</sup>

$$G_{\mu\nu} = \partial_\mu G_\nu - \partial_\nu G_\mu + g[G_\mu, G_\nu], \quad (2.1.1)$$

la carga topológica de la teoría se puede escribir como [2]

$$\begin{aligned} Q &= -\frac{1}{32\pi^2} \int d^4x \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \text{Tr}[G_{\mu\nu}(x)G_{\rho\sigma}(x)] = \int d^4x P(x) \\ &= \int d^4x \partial_\mu \Omega_\mu^{(0)}(x) = \int_{S^3} d^3 \sigma_\mu \Omega_\mu^{(0)}(x), \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

donde la última igualdad resulta de usar el teorema de Gauss y que la frontera del espacio-tiempo euclidiando corresponde topológicamente a la esfera  $S^3$ . En la ec. (2.1.2), la densidad de Chern-Pontryagin,  $P(x) = \partial_\mu \Omega_\mu^{(0)}(x)$ , se ha expresado en términos de la densidad de Chern-Simons

$$\Omega_\mu^{(0)}(x) = -\frac{1}{8\pi^2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \text{Tr} \left[ G_\nu(x) \left( \partial_\rho G_\sigma(x) + \frac{2}{3} G_\rho(x) G_\sigma(x) \right) \right]. \quad (2.1.3)$$

La acción euclidiana es

$$S[G_\mu] = \frac{1}{2g^2} \int d^4x \text{Tr}[G_{\mu\nu}(x)G_{\mu\nu}(x)], \quad (2.1.4)$$

que es invariante bajo transformaciones de norma.

---

<sup>1</sup>Los índices griegos toman los valores 1,2,3,4.

En el formalismo de integral funcional en el espacio euclidiano, solo es necesario tener en cuenta a las configuraciones con acción finita, pues el resto no contribuye a la integral funcional. Así,  $G_\mu(x)$  debe aproximarse a ser de *norma pura* cuando  $|x| \rightarrow \infty$ ; es decir, la configuración debe ser cero o equivalente a cero mediante una transformación de norma. Bajo transformaciones de norma,  $G_\mu$  se convierte en  $G'_\mu$  según la regla

$$G'_\mu(x) = g(x) \left( G_\mu(x) + \partial_\mu \right) g^\dagger(x), \quad \text{con } g(x) \in SU(N), \quad (2.1.5)$$

por lo que, para tener un potencial de norma pura en  $|x| \rightarrow \infty$ , se debe cumplir que

$$G_\mu(x) = g(x) \partial_\mu g^\dagger(x). \quad (2.1.6)$$

En  $SU(2)$ , se puede escribir

$$g(x) = \frac{x_0 \mathbb{1} + i \vec{x} \cdot \vec{\sigma}}{|x|}, \quad (2.1.7)$$

donde  $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  son las matrices de Pauli.

De esta manera, la carga topológica (2.1.2) toma la forma

$$Q = \frac{1}{24\pi^2} \int_{S^3} d^3\sigma_\mu \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \text{Tr} \left[ (g(x) \partial_\nu g^\dagger(x)) (g(x) \partial_\rho g^\dagger(x)) (g(x) \partial_\sigma g^\dagger(x)) \right]. \quad (2.1.8)$$

$g(x)$  define un mapeo de la esfera  $S^3$  al grupo de norma  $SU(N)$ . Este mapeo divide a las configuraciones en clases de equivalencia, dando así una estructura topológica análoga a la presentada en la Sección 1.3. En particular, el grupo de homotopía relevante es

$$\pi_3[SU(2)] = \mathbb{Z}; \quad (2.1.9)$$

es decir, se trata del mapeo  $S^3 \rightarrow S^3$ . Una de las esferas  $S^3$  representa al grupo  $SU(2)$ , la otra esfera  $S^3$  es el espacio físico, la frontera del espacio euclidiano [6].

Ahora, con

$$\tilde{G}_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} G_{\rho\sigma}, \quad (2.1.10)$$

se pueden escribir las siguientes desigualdades (en adelante se omite la dependencia en  $x$  de  $G_{\mu\nu}(x)$ ),

$$\text{Tr}(G_{\mu\nu} \pm \tilde{G}_{\mu\nu})^2 \geq 0, \quad (2.1.11)$$

es decir

$$\text{Tr}(G_{\mu\nu}G_{\mu\nu} + \tilde{G}_{\mu\nu}\tilde{G}_{\mu\nu} \pm 2G_{\mu\nu}\tilde{G}_{\mu\nu}) \geq 0. \quad (2.1.12)$$

Usando que  $\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta} = 2(\delta_{\rho\beta}\delta_{\sigma\alpha} - \delta_{\rho\alpha}\delta_{\sigma\beta})$  y la definición (2.1.10), se sigue que

$$\tilde{G}_{\mu\nu}\tilde{G}_{\mu\nu} = \frac{1}{2}(G_{\alpha\beta}G_{\alpha\beta} - G_{\beta\alpha}G_{\alpha\beta}) = G_{\mu\nu}G_{\mu\nu}, \quad (2.1.13)$$

donde se renombraron los índices en la última igualdad. Insertando este resultado en la ec. (2.1.12), obtenemos

$$\text{Tr}(G_{\mu\nu}G_{\mu\nu}) \geq \mp \text{Tr}(G_{\mu\nu}\tilde{G}_{\mu\nu}). \quad (2.1.14)$$

Si se integran ambos lados de la desigualdad en  $d^4x$ , y al comparar con las ecuaciones (2.1.2) y (2.1.4), se puede concluir que

$$S[G_\mu] \geq \frac{8\pi^2}{g^2} |Q[G_\mu]|. \quad (2.1.15)$$

La igualdad se cumple cuando  $\tilde{G}_{\mu\nu} = G_{\mu\nu}$  y en ese caso la solución es llamada auto-dual. Esta solución auto-dual, cuando no es trivial, fija un mínimo a la acción euclidiana necesaria para que haya una estructura topológica no-trivial. La contribución de estas soluciones a la integral de trayectoria es proporcional a  $\exp(-8\pi^2/g^2)$ . Como todas las derivadas de esta función con respecto a  $g$  se anulan en  $g = 0$ , siempre que  $G_{\mu\nu}$  sea una solución no-trivial, estas contribuciones son no-perturbativas. Estas configuraciones son los llamados *instantones*, que describen procesos de tunelaje entre vacíos clásicos con diferente carga topológica. La forma general de escribirlos es [2,6]

$$G_\mu(x) = \frac{|x|^2}{|x|^2 + \rho^2} g(x) \partial_\mu g^\dagger(x) \quad \forall \rho > 0, \quad (2.1.16)$$

donde  $\rho$  es el *radio del instantón*.

### 2.1.2. El vacío $\theta$ y la acción euclidiana

Como se mencionó en la sección anterior, los instantones conectan sectores en grupos de homotopía diferentes: las soluciones a las ecuaciones de campo pasan de un vacío clásico con índice  $n$  al tiempo  $t = -\infty$  a otro con índice

$m$  en  $t = \infty$ . En particular, en  $t = -\infty$ ,<sup>2</sup>

$$n = \frac{1}{24\pi^2} \int_{S^3} d^3x \epsilon_{ijk} \text{Tr} [(g(x)\partial_i g^\dagger(x)) (g(x)\partial_j g^\dagger(x)) (g(x)\partial_k g^\dagger(x))], \quad (2.1.17)$$

si  $G_4(x) = 0$ , y una expresión análoga para el índice  $m$ . Aún más, los dos vacíos que conecta un instantón solo difieren en una unidad [6]. Usando este último hecho, es útil considerar el operador  $\hat{\Omega}$ , definido por su acción sobre los vacíos clásicos etiquetados por  $n$ ,

$$\hat{\Omega}|n\rangle = |n+1\rangle. \quad (2.1.18)$$

Este operador implementa la transformación de norma

$$\hat{\Omega} : G_i \rightarrow g(G_i + \partial_i)g^\dagger \quad (2.1.19)$$

y su efecto en el vacío cuántico  $|\theta\rangle$  es a lo más un cambio de fase; es decir,

$$\hat{\Omega}|\theta\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle. \quad (2.1.20)$$

Mientras que el vacío  $|\theta\rangle$  se puede escribir como

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-in\theta}|n\rangle; \quad (2.1.21)$$

esto es, el vacío  $|\theta\rangle$  es una superposición de vacíos clásicos con índices diferentes.

Finalmente, se puede calcular la amplitud de probabilidad de pasar de un vacío  $|\theta\rangle$  en  $t = -\infty$  a otro vacío  $|\theta'\rangle$  en  $t = \infty$ ,

$$\langle\theta|\hat{U}(t = \infty, t = -\infty)|\theta'\rangle = 2\pi\delta(\theta - \theta') \int \mathcal{D}G_\mu^Q e^{-S[G_\mu]}, \quad (2.1.22)$$

donde  $Q$  es la diferencia entre los índices de los vacíos clásicos entre los que ocurre la transición y se integra sobre las configuraciones  $G_\mu$  con la carga topológica  $Q$ ; es decir, se trata de una integral restringida topológicamente.

---

<sup>2</sup>Los índices latinos toman los valores 1,2,3.

Usando la ec. (2.1.21), se tiene que

$$\begin{aligned}
\langle \theta | \hat{U}(t = \infty, t = -\infty) | \theta' \rangle &= \sum_{m,n} e^{in\theta} \langle n | \hat{U}(t = -\infty, t = \infty) | m \rangle e^{-im\theta'} \\
&= \sum_{n,Q} \exp[in\theta - i(n-Q)\theta'] \int \mathcal{D}G_\mu^Q e^{-S[G_\mu]} \\
&= \sum_n \exp(in(\theta - \theta')) \\
&\times \sum_Q \int \mathcal{D}G_\mu^Q \exp(-S[G_\mu] + i\theta Q[G_\mu]) \\
&= 2\pi\delta(\theta - \theta') \sum_Q \int \mathcal{D}G_\mu^Q \exp(-S[G_\mu] + i\theta Q[G_\mu]) \\
&= 2\pi\delta(\theta - \theta') \int \mathcal{D}G_\mu^Q e^{-S_\theta[G_\mu]}. \tag{2.1.23}
\end{aligned}$$

De esta ecuación, se sigue que no hay transiciones entre vacíos  $\theta$  diferentes. Además, en presencia de un ángulo de vacío  $\theta$ , la acción euclidiana es de la forma

$$S_\theta[G_\mu] = S[G_\mu] - i\theta Q[G_\mu]. \tag{2.1.24}$$

En teoría de perturbaciones, el segundo término en la acción (2.1.24) no aparece porque es una derivada total. Sin embargo, es relevante en cálculos no-perturbativos, y por ende en el mundo real.

## 2.2. El modelo $O(2)$ 1d

Se considera el problema del rotor cuántico descrito por la variable angular  $\phi$ . Una partícula de masa  $M$  está restringida a moverse a lo largo de un círculo de radio  $r$  con condiciones de frontera periódicas en el tiempo euclidiano  $\beta$  tales que  $\phi(0) = \phi(\beta) = \phi_0$ . Este problema será descrito primero en tiempo continuo, posteriormente se menciona cómo el modelo se puede trabajar en una retícula.

El modelo  $O(2)$  1d es un ejemplo sencillo donde el concepto de topología se hace presente. Al tratarse de una partícula que se mueve en un espacio con topología no-trivial, los sectores topológicos aparecen naturalmente. Las posibles trayectorias cerradas de la partícula que pasan por el punto  $\phi_0$  se pueden clasificar de acuerdo a su índice (ver ec. (2.1.17)).

### 2.2.1. Modelo $O(2)$ 1d en el continuo

Dado el momento de inercia,  $I = Mr^2$ , el hamiltoniano del modelo es [8]

$$\hat{H}(\theta) = -\frac{1}{2I} \left( \partial_\phi - i \frac{\theta}{2\pi} \right)^2, \quad (2.2.1)$$

donde  $\theta$  es análogo al ángulo vacío de QCD. Sus eigenfunciones son

$$\langle \phi | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\phi), \quad (2.2.2)$$

con  $m \in \mathbb{Z}$ , y eigenenergías

$$E_m(\theta) = \frac{1}{2I} \left( m - \frac{\theta}{2\pi} \right)^2. \quad (2.2.3)$$

En términos de la temperatura inversa  $\beta = 1/T$ , la acción euclidiana del modelo es dada por

$$S[\phi] = \int_0^\beta dt \frac{I}{2} \dot{\phi}^2 - i\theta Q[\phi], \quad (2.2.4)$$

y la carga topológica es

$$Q[\phi] = \frac{1}{2\pi} \int_0^\beta dt \dot{\phi} \in \pi_1[S^1] = \mathbb{Z}, \quad (2.2.5)$$

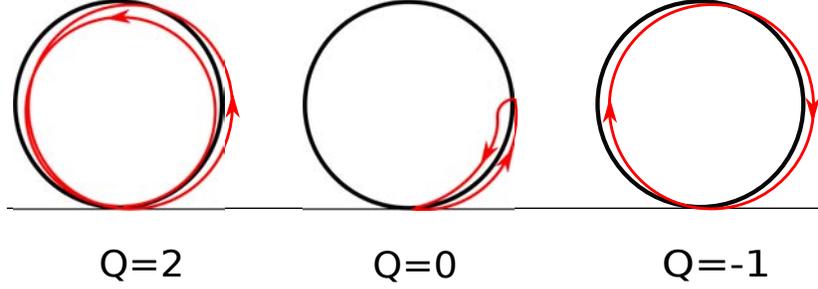
de donde se puede definir la densidad de carga topológica como

$$q(t) = \frac{\dot{\phi}(t)}{2\pi}. \quad (2.2.6)$$

En este caso, la carga topológica se puede interpretar como el número de veces que la partícula recorre el círculo en sentido positivo (contra las manecillas del reloj), menos las veces que lo recorre en sentido negativo (con las manecillas del reloj). Así, en este caso, el grupo fundamental del modelo  $O(2)$  1d corresponde al grupo fundamental del círculo (ver Sección 1.3); es decir, a los números enteros.

Usando la ec. (2.2.3), la función partición se puede escribir como

$$Z(\theta) = \text{Tr} \exp(-\beta \hat{H}) = \sum_m \exp(-\beta E_m), \quad (2.2.7)$$



**Figura 2.1:** Carga topológica del rotor cuántico, se puede interpretar como el número de veces que la partícula recorre el círculo en sentido positivo, menos las veces que lo recorre en sentido negativo.

a partir de donde se puede obtener la distribución de la carga topológica,

$$\begin{aligned}
 p(Q) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta Z(\theta) \exp(-i\theta Q) \\
 &= \frac{1}{2\pi} \sum_m \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \exp\left[-\frac{\beta}{2I} \left(m - \frac{\theta}{2\pi}\right)^2 - i\theta Q\right]. \quad (2.2.8)
 \end{aligned}$$

Usando la fórmula de suma de Poisson,

$$\begin{aligned}
 \sum_m f(m) &= \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \delta(\alpha - m) f(\alpha) \\
 &= \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha f(\alpha) \exp(2\pi i m \alpha), \quad (2.2.9)
 \end{aligned}$$

la distribución (2.2.8) se puede escribir como

$$p(Q) = \frac{1}{2\pi} \sum_m \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \exp\left[-\frac{\beta}{8\pi^2 I} (\theta - 2\pi\alpha)^2 - i\theta Q + 2\pi i m \alpha\right], \quad (2.2.10)$$

e integrando en la variable auxiliar  $\alpha$ ,

$$p(Q) = \sqrt{\frac{2\pi I}{\beta}} \sum_m \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{2\pi^2 I m^2}{\beta} + i(m - Q)\theta\right], \quad (2.2.11)$$

pero

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i\theta(m-Q)} = \delta_{m,Q}, \quad (2.2.12)$$

por lo que

$$\begin{aligned}
p(Q) &= \sqrt{\frac{2\pi I}{\beta}} \sum_m \exp\left(-\frac{2\pi^2 I m^2}{\beta}\right) \delta_{m,Q} \\
&= \sqrt{\frac{2\pi I}{\beta}} \exp\left(-\frac{2\pi^2 I Q^2}{\beta}\right).
\end{aligned} \tag{2.2.13}$$

Usando esta expresión, la susceptibilidad topológica es (con  $\langle Q \rangle = 0$ )

$$\chi_t = \frac{\langle Q^2 \rangle}{\beta} = \frac{1}{\beta} \frac{\sum_{Q \in \mathbb{Z}} Q^2 p(Q)}{\sum_{Q \in \mathbb{Z}} p(Q)}, \tag{2.2.14}$$

y cuando  $\beta \rightarrow \infty$ , se tiene que [8]

$$\chi_t = \frac{1}{4\pi^2 I}. \tag{2.2.15}$$

Esta cantidad mide las excitaciones topológicas en el vacío [10]. En teoría de norma  $SU(3)$  4d,  $\chi_t$  es útil en la relación de Witten-Veneziano [11], que explica lo pesado del mesón  $\eta'$  como un efecto topológico.  $\chi_t$  solo puede determinarse a nivel no-perturbativo.

La longitud de correlación  $\xi$  se relaciona con  $\chi_t$  cuando  $\theta = 0$  como

$$\chi_t \xi = \frac{1}{2\pi^2}; \tag{2.2.16}$$

es decir,

$$\xi = \frac{1}{E_1(0) - E_0(0)} = 2I, \tag{2.2.17}$$

que resulta de la ec. (2.2.3)

### 2.2.2. Modelo $O(2)$ 1d en la retícula

En la retícula, los ángulos  $\phi(t)$  son sustituidos con ángulos  $\phi_x$ ,  $x = 1 \dots L$  que cumplen con las condiciones de frontera periódica,  $\phi_{L+1} = \phi_1$ . La acción estándar del modelo  $O(2)$  1d es

$$S[\phi] = \beta \sum_{x=1}^L (1 - \cos(\Delta\phi_x)), \tag{2.2.18}$$

donde  $\Delta\phi_x$  es la diferencia entre ángulos adyacentes.

En términos de esta diferencia se define también la carga topológica

$$Q[\phi] = \frac{1}{2\pi} \sum_{x=1}^L \Delta\phi_x \in \mathbb{Z}, \quad (2.2.19)$$

con la densidad de carga topológica

$$q_x = \frac{\Delta\phi_x}{2\pi}, \quad (2.2.20)$$

y

$$\Delta\phi_x = (\phi_{x+1} - \phi_x) \text{ mód } 2\pi \in (-\pi, \pi]. \quad (2.2.21)$$

La función mód se define de tal forma que  $|\Delta\phi_x|$  sea mínima.

Con las definiciones de la acción (2.2.18) y la carga topológica (2.2.19) en la retícula, es posible llevar a cabo simulaciones numéricas a fin de estudiar el modelo  $O(2)$  1d con topología restringida. En particular, en esta tesis es de interés probar dos aproximaciones para obtener la susceptibilidad topológica y algunas observables cuando  $Q$  tiene pocas (o ninguna) transiciones. En los capítulos 3 y 4 se presentan los resultados de las simulaciones para evaluar la utilidad de los métodos a verificar.

## 2.3. El modelo $O(3)$ 2d

Este modelo trata de espines unitarios en la esfera  $S^2$ . Mediante una definición geométrica se establece la carga topológica como el número de veces que se cubre la superficie de esta esfera. Nuevamente, se inicia haciendo una descripción del problema en el continuo, para posteriormente presentar la forma en que se trabajó el modelo en una retícula bidimensional.

### 2.3.1. Modelo $O(3)$ 2d en el continuo

En el continuo, la acción euclidiana del modelo  $O(3)$  2d con condiciones de frontera periódicas se define como [12]

$$S[\vec{e}] = \frac{1}{2g^2} \int d^2x \partial_\mu \vec{e} \cdot \partial_\mu \vec{e} - i\theta Q[\vec{e}], \quad (2.3.1)$$

donde  $g$  es el acoplamiento y  $\vec{e}(x) \in S^2$  y  $\mu = 1, 2$ . El modelo  $O(3)$  2d comparte con QCD las propiedades de libertad asintótica y una brecha de

masa creada de manera no-perturbativa [9]. En la ec. (2.3.1),  $Q[\vec{e}]$  es la carga topológica

$$Q[\vec{e}] = \frac{1}{8\pi} \int d^2x \epsilon_{\mu\nu} \vec{e} \cdot (\partial_\mu \vec{e} \times \partial_\nu \vec{e}), \quad (2.3.2)$$

tal que  $Q$  indica el número de veces que la esfera  $S^2$  es cubierta por  $\vec{e}(x)$ .

Se puede demostrar que  $Q \in \mathbb{Z}$ , que representa el número de mapeos no-equivalentes de la esfera  $S^2$  en sí misma. La superficie de  $S^2$  es descrita por las coordenadas cartesianas  $x_i$ , tales que  $\sum_{i=1}^3 x_i^2 = 1$ , y también se puede describir mediante las coordenadas  $\sigma_1, \sigma_2$  — por ejemplo, coordenadas esféricas.

La componente del elemento infinitesimal de área  $dS_i$  que apunta en la dirección  $i$  es [6]

$$dS_i = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu} \epsilon_{ijk} \frac{\partial x_j}{\partial \sigma_\mu} \frac{\partial x_k}{\partial \sigma_\nu} d^2\sigma, \quad (2.3.3)$$

independientemente de la elección de las coordenadas  $\{\sigma\}$ . La superficie de la esfera se puede calcular contrayendo a  $dS_i$  con el vector  $x_i$  e integrando

$$4N\pi = \int dS_i x_i, \quad (2.3.4)$$

donde  $N \in \mathbb{Z}$  aparece porque el mapeo  $x_i(\sigma_1, \sigma_2)$  puede cubrir a la esfera un número entero de veces.

Si se cambia de notación, mediante la sustitución  $x_i \rightarrow e_i$ , la carga topológica se puede escribir como

$$Q = \frac{1}{8\pi} \int \epsilon_{\mu\nu} \epsilon_{ijk} e_i \partial_\mu e_j \partial_\nu e_k = \frac{1}{4\pi} \int dS_i e_i = N. \quad (2.3.5)$$

Por lo tanto, la carga topológica es igual al índice de la esfera; es decir, al número de maneras diferentes en que los puntos en  $S^2$  se pueden mapear suavemente en la misma esfera. Cada vuelta  $N$  representa una clase de homotopía distinta.

La carga topológica  $Q$  aparece también en las soluciones auto-duales del modelo  $\sigma$  no-lineal [13]. Si se considera la desigualdad

$$\int d^2x (\partial_\mu \vec{e} \pm \epsilon_{\mu\nu} \vec{e} \times \partial_\nu \vec{e})^2 \geq 0, \quad (2.3.6)$$

al desarrollar el término en paréntesis se encuentra que

$$\begin{aligned} \int d^2x [\partial_\mu \vec{e} \cdot \partial_\mu \vec{e} + \epsilon_{\mu\nu} (\vec{e} \times \partial_\nu \vec{e}) \cdot \epsilon_{\mu\sigma} (\vec{e} \times \partial_\sigma \vec{e})] \\ \geq \pm 2 \int d^2x (\epsilon_{\mu\nu} \vec{e} \cdot \partial_\mu \vec{e} \times \partial_\nu \vec{e}). \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

Usando que  $\epsilon_{\mu\nu}\epsilon_{\rho\sigma} = \delta_{\mu\rho}\delta_{\nu\sigma}$ , se sigue la desigualdad de Schwartz

$$S \geq \frac{4\pi}{g^2} |Q|. \quad (2.3.8)$$

La igualdad ocurre para soluciones las auto-duales

$$\partial_\mu \vec{e} = \pm \epsilon_{\mu\nu} \vec{e} \times \partial_\nu \vec{e}, \quad (2.3.9)$$

llamados *instantones*. Para estas configuraciones, el lagrangiano es proporcional al valor absoluto de la densidad de carga topológica:

$$\mathcal{L}(\vec{e}) = \frac{1}{2g^2} \partial_\mu \vec{e} \cdot \partial_\mu \vec{e} = \frac{1}{g^2} |\epsilon_{\mu\nu} \vec{e} \cdot (\partial_\mu \vec{e} \times \partial_\nu \vec{e})| = \frac{4\pi}{g^2} |q(\vec{e})|, \quad (2.3.10)$$

donde  $q$  es la densidad de carga topológica.

En el caso que se considera, se cumple la simetría de paridad, por lo que  $\langle Q \rangle = 0$  y la susceptibilidad topológica se puede escribir como

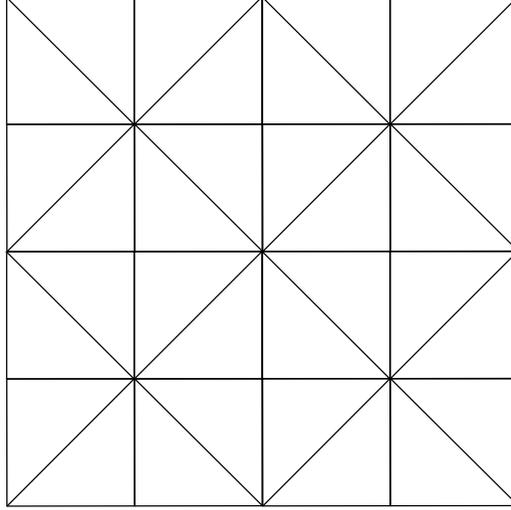
$$\chi_t = \int d^2x \langle q(0)q(x) \rangle = \frac{\langle Q^2 \rangle}{V}. \quad (2.3.11)$$

### 2.3.2. Modelo $O(3)$ 2d en la retícula

En la retícula cuadrada, la acción estándar es

$$S[\vec{e}] = \beta \sum_{x,\mu} (1 - \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x+\hat{\mu}}) = \frac{1}{g^2} \sum_{x,\mu} (1 - \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x+\hat{\mu}}). \quad (2.3.12)$$

Los vectores unitarios  $\vec{e}_x \in S^2$  se localizan en los sitios  $x$  de una retícula con condiciones de frontera periódicas,  $\hat{\mu}$  es un vector de longitud igual al espaciado de la retícula que apunta en la dirección  $\mu$  y  $g$  es el acoplamiento. En el caso que se considera, se trabaja en un volumen cuadrado con  $V = L \times L$  sitios.



**Figura 2.2:** División de la retícula cuadrada en triángulos. Esta división es útil al usar la definición geométrica de la carga topológica.

Para obtener la susceptibilidad topológica usando la definición geométrica [14] de la carga topológica, es útil dividir cada plaqueta de la retícula en dos triángulos como se indica en la Figura 2.2. Los espines  $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ , localizados en las esquinas de un triángulo  $t_{123}$  en la retícula definen las esquinas de un triángulo esférico en  $S^2$ . El área orientada  $A_{123}$  del triángulo esférico es dada por

$$\begin{aligned} \phi &= \arg(X + iY), \quad \text{con} \\ X &= 1 + \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 + \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_3 + \vec{e}_3 \cdot \vec{e}_1, \quad Y = \vec{e}_1 \cdot (\vec{e}_2 \times \vec{e}_3). \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

La suma de las áreas orientadas de los dos triángulos esféricos en cada plaqueta entrega la densidad de carga topológica normalizada por  $4\pi$ ,

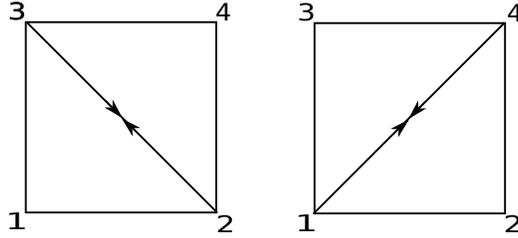
$$q_x = \frac{1}{4\pi} A(\vec{e}_x, \vec{e}_{x+\hat{1}}, \vec{e}_{x+\hat{2}}, \vec{e}_{x+\hat{1}+\hat{2}}).$$

De donde se obtiene la carga topológica en la retícula,

$$Q[\vec{e}] = \sum_x q_x \in \mathbb{Z}. \quad (2.3.14)$$

La descomposición de la retícula cuadrada en triángulos es invariante bajo rotaciones en  $\pi/2$  y bajo traslaciones de un número par de espaciamientos de

la retícula paralelas a un eje. En general, no se cumple que dos descomposiciones diferentes de una plaqueta en dos triángulos,  $(t_{123}, t_{243})$  o  $(t_{124}, t_{143})$  (ver Figura 2.3), den la misma suma de áreas. Sólo si el ángulo entre espines vecinos es menor a  $\pi/2$  es seguro que  $A_{123} + A_{243} = A_{124} + A_{143}$ . Cuando esto ocurre, la carga topológica es independiente de la descomposición elegida y es invariante bajo traslaciones un un espaciamiento de la retícula.



**Figura 2.3:** Dos posibilidades en la división de una plaqueta en dos triángulos. Cuando el ángulo entre espines vecinos es menor a  $\pi/2$  se cumple que  $A_{123} + A_{243} = A_{124} + A_{143}$ .

La carga topológica no está definida para un conjunto excepcional de configuraciones, que forman un conjunto de medida cero en el espacio de configuración. Estas configuraciones contienen a un triángulo esférico que cubre exactamente la mitad de la esfera  $S^2$ , y tienen área orientada  $\pm 2\pi$ . La vecindad de una de estas configuraciones incluye conjuntos de éstas cuyas cargas topológicas difieren en una unidad. Si el ángulo relativo entre espines vecinos es menor que  $\pi/2$ , estas configuraciones excepcionales no pueden aparecer. Si se usa la acción estándar en la retícula, las configuraciones excepcionales tienen una acción euclidiana finita [12].

Además de la divergencia UV presente en la formulación en el continuo, el modelo  $O(3)$  2d en la retícula es afectado por artefactos de distancias cortas. Las dislocaciones son configuraciones de acción mínima con carga topológica diferente de cero. Al usar la acción estándar, junto con la definición geométrica de la carga topológica en la retícula llevan a dislocaciones con acción  $S_d = c/g^2$ , con  $c \approx 6.69$ . Argumentos semi-clásicos [15] sugieren que la susceptibilidad topológica debe escalar según  $\chi_t \propto \exp(-S_d)$ . Debido a la libertad asintótica, la longitud de correlación se escala como  $\xi/a \propto \exp(2\pi/g^2)$ . Entonces, se espera una divergencia a alguna potencia de la

combinación adimensional

$$\chi_t \xi^2 \propto \exp(-S_d) \exp\left(\frac{4\pi}{g^2}\right) = \exp\left(\frac{4\pi - c}{g^2}\right) \propto \left(\frac{\xi}{a}\right)^{2-c/2\pi}. \quad (2.3.15)$$

Estudios posteriores, por ejemplo [12], han presentado evidencia numérica de que efectivamente  $\chi_t \xi^2$  diverge, pero la divergencia es logarítmica.

Con las definiciones en la reícula de la acción (2.3.12) y la carga topológica (2.3.14), además de la retícula presentada, se harán simulaciones numéricas que permitan evaluar la utilidad de las aproximaciones AFHO (ver Capítulo 3) y BCNW (Capítulo 4) en condiciones de topología restringida. Así, los resultados de estudiar los modelos  $O(3)$  2d y  $O(2)$  1d permitirán dar indicios sobre la aplicabilidad de los métodos estudiados en QCD, donde el congelamiento topológico ocurre, y puede empeorar conforme las simulaciones numéricas se acerquen más al continuo. En particular, el modelo  $O(3)$  2d comparte con QCD las propiedades de libertad asintótica, además de tener una brecha de masa creada no-perturbativamente, por lo que resulta un buen modelo juguete de QCD.

# Capítulo 3

## Susceptibilidad topológica en un sector fijo

En las simulaciones de Monte Carlo, se generan configuraciones con probabilidad  $P[\phi] = \frac{1}{Z}e^{-S[\phi]}$ , donde  $[\phi]$  denota una configuración,  $Z$  es la función partición y  $S$  la acción euclidiana [16, 17]. En este tipo de simulaciones, la condición de *ergodicidad* implica que la probabilidad de transición entre dos configuraciones es diferente de cero en un número de pasos finito (ver Apéndice A). En particular, al hacer QCD en la retícula, esto implica que configuraciones con cualquier carga topológica deben ser accesibles a las simulaciones. En la práctica, lograr transiciones hacia sectores con cargas  $|Q| \gg 0$  puede ser difícil. Por ello, resulta de interés estudiar métodos que permitan extraer resultados confiables aún si las simulaciones numéricas capturan pocos sectores. En este capítulo se explora una alternativa para obtener la susceptibilidad topológica cuando las simulaciones se quedan atrapadas en un solo sector.

En el continuo, los sectores topológicos que aparecen en QCD están separados por barreras de acción infinitas. En QCD en una retícula, estas barreras son finitas, así que, en sentido estricto, no hay sectores topológicos. Sin embargo, la altura de estas barreras finitas es proporcional a alguna potencia del inverso del espaciamiento de la retícula, i.e.  $1/a$  [18]. De hecho, en QCD en la retícula el tiempo de autocorrelación de la carga topológica,  $t_Q$  — tiempo necesario para generar configuraciones con cargas topológicas diferentes — crece de forma exponencial con la longitud de correlación  $\xi$  [19], que fija la escala del sistema. Así, conforme se hagan simulaciones en retículas más finas ( $\xi$

más grandes), será más difícil explorar todos los sectores topológicos [15,18]. Las simulaciones pueden quedar atrapadas en un solo sector, quedando la pregunta de si estos resultados realmente tienen relevancia física.

Aoki, Fukaya, Hashimoto y Onogi (AFHO) consideran la posibilidad de extraer la susceptibilidad topológica aun cuando las simulaciones numéricas se queden atrapadas en un solo sector topológico [20]. En este capítulo se muestran los resultados obtenidos en los modelos  $O(2)$  1d y  $O(3)$  2d en la retícula al aplicar el método AFHO para extraer  $\chi_t$  a partir de la correlación de la densidad de carga topológica. Como se usó el algoritmo de Wolff (ver Apéndice B), es posible comparar los resultados obtenidos con topología fija contra mediciones directas hechas sin restricciones topológicas. En el caso del modelo  $O(2)$  1d también hay resultados analíticos [8,12].

### 3.1. Método del punto silla

El método AFHO hace aproximaciones sobre el integrando de la función de partición restringida a un sector con carga  $Q$ ,

$$Z_Q = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta Z(\theta) e^{i\theta Q}, \quad (3.1.1)$$

donde

$$Z(\theta) = \langle \theta | \theta \rangle = \exp(-VE(\theta)), \quad (3.1.2)$$

y  $E(\theta)$  es la energía libre por unidad de volumen espacio-temporal, con la normalización  $Z(0) = 1$ ; es decir,  $E(0) = 0$ .

La técnica empleada para aproximar esta clase de integrales es el llamado método del punto silla, o *saddle point method*<sup>1</sup>, en inglés. Esta aproximación también es usada el calcular funciones de dos (o más) puntos. En esta sección, se explica en qué consiste el método y se menciona brevemente su aplicación en la ref. [20].

El método del punto silla se usa para evaluar integrales de la forma

$$I(\lambda) = \int_{\Gamma} dz f(z) e^{\lambda g(z)}, \quad (3.1.3)$$

---

<sup>1</sup>El título de esta sección sigue la tendencia dominante en la literatura en cuanto al nombre del método. Sin embargo, en la práctica es necesario que el punto donde la derivada se anula sea un mínimo, no un punto silla.

donde  $z \in \mathbb{C}$ ,  $g$  es una función analítica,  $\lambda$  una constante positiva y  $\Gamma$  un contorno del plano complejo. Se espera que para  $\lambda \gg 1$  esta clase de integrales sea dominada por un “punto silla” [21, 22],  $z_0 \in \Gamma$ , que es un punto donde

$$g'(z_0) = 0. \quad (3.1.4)$$

En particular, es necesario que  $z_0$  sea el mínimo global de la función  $g$ .

Cerca de  $z_0$ , se pueden hacer los desarrollos

$$\begin{aligned} \lambda g(z) &= \lambda \left( g(z_0) + \frac{1}{2} g''(z_0) (z - z_0)^2 + \frac{1}{6} g'''(z_0) (z - z_0)^3 + \dots \right) \\ f(z) &= f(z_0) + f'(z_0) (z - z_0) + \frac{1}{2} f''(z_0) (z - z_0)^2 + \frac{1}{6} f'''(z_0) (z - z_0)^3 + \dots, \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

o bien, con

$$z - z_0 = \frac{x}{\sqrt{\lambda}} w, \quad w = e^{i\alpha}, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad x \in \mathbb{R}^+, \quad (3.1.6)$$

se tiene que

$$\begin{aligned} \lambda g(z) &= \lambda g(z_0) + \frac{1}{2} w^2 g''(z_0) x^2 + \frac{1}{6\sqrt{\lambda}} w^3 g'''(z_0) x^3 + \dots \\ f(z) &= f(z_0) \left( 1 + \frac{w f'(z_0) x}{f(z_0) \sqrt{\lambda}} + \frac{w^2 f''(z_0) x^2}{2\lambda f(z_0)} + \dots \right), \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

siempre que  $f(z_0) \neq 0$ .

Usando el primero de los desarrollos (3.1.7) y considerándolo en términos de  $1/\sqrt{\lambda}$ , la exponencial en la integral (3.1.3), se puede escribir como

$$\begin{aligned} e^{\lambda g(z)} &= \exp(\lambda g(z_0)) \exp\left(\frac{w^2 g''(z_0) x^2}{2}\right) \\ &\times \exp\left(\frac{w^3 g'''(z_0) x^3}{6\sqrt{\lambda}} + \frac{w^4 g''''(z_0) x^4}{24\lambda} + O(\lambda^{-3/2})\right) \\ &= \exp(\lambda g(z_0)) \exp\left(\frac{w^2 g''(z_0) x^2}{2}\right) \\ &\times \left( 1 + \frac{w^3 g'''(z_0) x^3}{6\sqrt{\lambda}} + \frac{3w^4 g''''(z_0) x^4 + w^6 g'''(z_0)^2 x^6}{72\lambda} + O(\lambda^{-3/2}) \right), \end{aligned} \quad (3.1.8)$$

donde se omiten términos de orden  $O(\lambda^{-3/2})$  y superiores.

Sustituyendo los resultados (3.1.7) y (3.1.8) en la ec. (3.1.3),

$$I(\lambda) \simeq \frac{wf(z_0)e^{\lambda g(z_0)}}{\sqrt{\lambda}} \int dx e^{w^2 g''(z_0)x^2/2} \cdot \left( 1 + \sum_{n=1}^{\infty} w^n \lambda^{-n/2} P_n(x) \right), \quad (3.1.9)$$

donde  $P_n(x)$  son polinomios en  $x$ ; estos polinomios son pares para  $n$  par e impares para  $n$  impar [21]. Así, cerca del punto  $z_0$  la integral (3.1.3) se puede aproximar por

$$I(\lambda) \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}} e^{\lambda g(z_0)} \frac{wf(z_0)}{\sqrt{-w^2 g''(z_0)}} (1 + O(1/\lambda)). \quad (3.1.10)$$

El rango  $|z - z_0|$  que tiene mayor contribución a la integral está restringido por la condición

$$\frac{\lambda}{2} |g''(z_0)| \cdot |z - z_0|^2 \leq 1.$$

Si  $|g''(z_0)| \simeq 1$ , entonces se tiene que  $|z - z_0| \simeq 1/\sqrt{\lambda}$ , y  $1/\sqrt{\lambda} \ll 1$  debe ser el orden de magnitud del rango de integración [21].

En la referencia [22] se puede encontrar la forma de algunos términos de orden  $O(1/\lambda)$  y superiores.

Usando el método del punto silla, en la ref. [20] se presenta una aproximación para obtener la susceptibilidad topológica aun estando restringidos a usar un solo sector topológico.

## 3.2. Mediciones restringidas a un sector topológico

Si se considera la función de partición con carga topológica fija, ec. (3.1.1),

$$Z_Q = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta Z(\theta) e^{i\theta Q},$$

el método AFHO [20] da una manera de extraer la susceptibilidad topológica,  $\chi_t$ , definida como

$$\chi_t = \frac{\langle Q^2 \rangle}{V} = \left. \frac{d^2 E(\theta)}{d\theta^2} \right|_{\theta=0} \quad (3.2.1)$$

usando la expansión en punto silla.

Como  $\chi_t \geq 0$ , entonces  $\theta = 0$  es un mínimo local de  $E(\theta)$ . Recordando que

$$Z(\theta) = e^{-VE(\theta)}$$

y usando la normalización  $Z(0) = 1$ , dado que  $Z(0) > Z(\theta)$  para  $\theta \in (-\pi, \pi]$  [23], se sigue que  $\theta = 0$  es un mínimo global de  $E$ . Como  $E(\theta) = E(-\theta)$ , la energía por unidad de volumen se puede desarrollar alrededor de  $\theta = 0$  como

$$E(\theta) = \frac{1}{2}\chi_t\theta^2 + O(\theta^4), \quad (3.2.2)$$

por lo que

$$\begin{aligned} Z_Q &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-VE(\theta)} e^{i\theta Q} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \exp \left[ -V \left( \frac{1}{2}\chi_t\theta^2 + O(\theta^4) \right) + i\theta Q \right]. \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

Identificando al término

$$\frac{1}{2}\chi_t\theta^2 + O(\theta^4) - \frac{i\theta Q}{V}$$

como la función  $g$  en la ec. (3.1.3), se encuentra que el punto silla es dado por

$$\theta_c = i \frac{Q}{\chi_t V} (1 + O(\delta^2)), \quad (3.2.4)$$

con  $\delta = Q/(\chi_t V)$ . Entonces, usando la ec. (3.1.10) con  $w = 1$ ,  $\alpha = 0$  pues este es el ángulo en donde está el punto silla, se encuentra que

$$Z_Q = \frac{1}{\sqrt{2\pi\chi_t V}} \exp \left[ -\frac{Q^2}{2\chi_t V} \right] \left[ 1 - \frac{c_4}{8\chi_t^2 V} + O\left(\frac{1}{V^2}\right) \right], \quad (3.2.5)$$

donde

$$c_4 = \frac{1}{V} (3\langle Q^2 \rangle^2 - \langle Q^4 \rangle), \quad (3.2.6)$$

es la *kurtosis*, que mide la desviación de una distribución gaussiana de la carga topológica [25].

Para extraer  $\chi_t$  aun cuando haya mediciones en solo un sector topológico, se considera una función de 2 puntos arbitraria,

$$C(\theta) = \langle \theta | \mathcal{O}(t_1) \mathcal{O}(t_2) | \theta \rangle, \quad (3.2.7)$$

que en un sector con carga  $Q$  es

$$C_Q = \frac{1}{Z_Q} \frac{1}{2\pi} \int d\theta Z(\theta) C(\theta) e^{i\theta Q}. \quad (3.2.8)$$

Haciendo nuevamente un desarrollo alrededor de  $\theta_c$ , se encuentra que si  $C(\theta)$  es una función par,

$$C_Q = C(0) + \frac{C''(0)}{2\chi_t V} \left[ 1 - \frac{Q^2}{\chi_t V} - \frac{c_4}{2\chi_t^2 V} \right] + O\left(\frac{1}{V^3}\right). \quad (3.2.9)$$

Usando el resultado anterior, y escribiendo  $\chi_t$  en términos de la densidad de carga topológica,  $q(x)$ ,

$$\chi_t = \int d^4x \langle q(x)q(0) \rangle, \quad (3.2.10)$$

se encuentra [20] que

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \langle q(x)q(0) \rangle_Q \approx -\frac{\chi_t}{V} + \frac{1}{V^2} \left( Q^2 - \frac{c_4}{2\chi_t} \right). \quad (3.2.11)$$

En la práctica, el término de la kurtosis es  $c_4 \approx 0$ , por lo que ese término puede ser ignorado.

### 3.2.1. $\chi_t$ en un sector topológico fijo

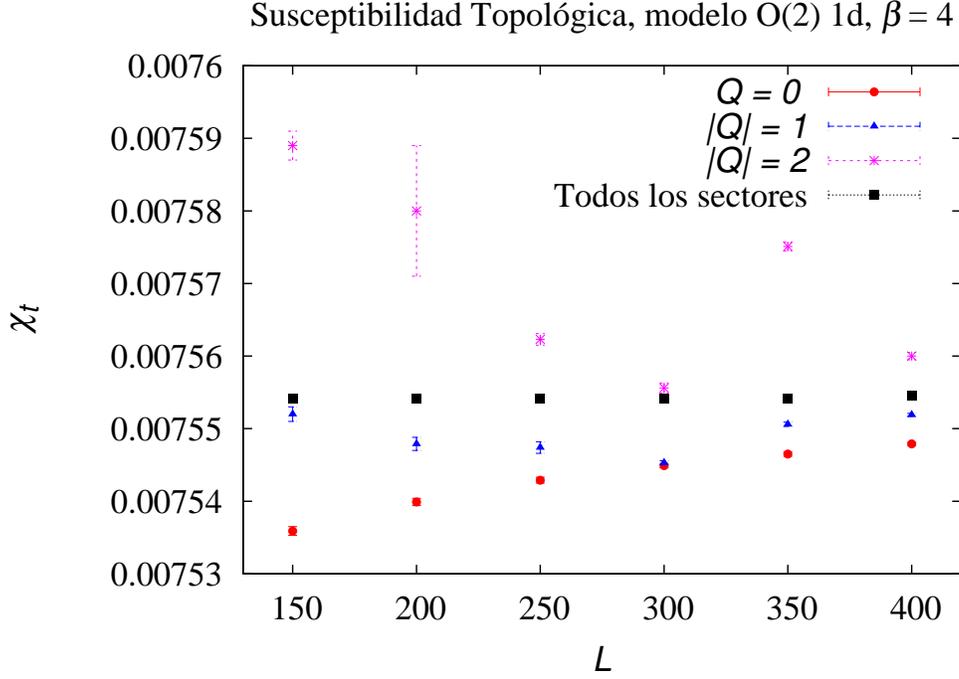
Usando los modelos  $O(2)$  1d y  $O(3)$  2d se explora la aplicabilidad de la fórmula (3.2.11) para obtener la susceptibilidad topológica aún si solo hay mediciones en un sector con  $Q$  fija. Para esto, se mide la correlación de la densidad de carga topológica con  $Q$  y  $V$  fijos, para ajustar  $\chi_t$ .

### Modelo $O(2)$ 1d

$L$	$Q = 0$	$ Q  = 1$	$ Q  = 2$	Todos los sectores
150	0.0075359(6)	0.007552(1)	0.007589(2)	0.0075542(3)
200	0.0075399(5)	0.0075479(9)	0.007580(1)	0.0075542(4)
250	0.0075429(4)	0.0075474(8)	0.0075623(8)	0.0075542(3)
300	0.0075449(3)	0.0075453(3)	0.0075556(7)	0.0075541(2)
350	0.0075465(3)	0.0075506(3)	0.0075751(6)	0.0075542(3)
400	0.0075479(2)	0.0075519(2)	0.0075600(5)	0.0075545(3)

**Cuadro 3.1:** Susceptibilidad topológica medida en sectores con carga  $|Q| \leq 2$  y directamente en el modelo  $O(2)$  1d, con  $\beta = 4$ . Estos valores permiten la buena aplicación del método AFHO.

Para investigar la utilidad de la fórmula (3.2.11) en la determinación de  $\chi_t$  cuando se tienen mediciones en un solo sector topológico, en el modelo  $O(2)$  1d se hicieron simulaciones para retículas de longitud entre  $L = 150$  y  $L = 400$ , con  $\beta = 4$  usando la acción estándar (2.2.18). Con este valor de  $\beta$ , la longitud de correlación encontrada es  $\xi = 6.8$ , así que la retícula se puede considerar fina, en un volúmenes grandes comparados con  $\xi$ . En este modelo, el algoritmo de Wolff permitió hacer hasta  $10^9$  mediciones.

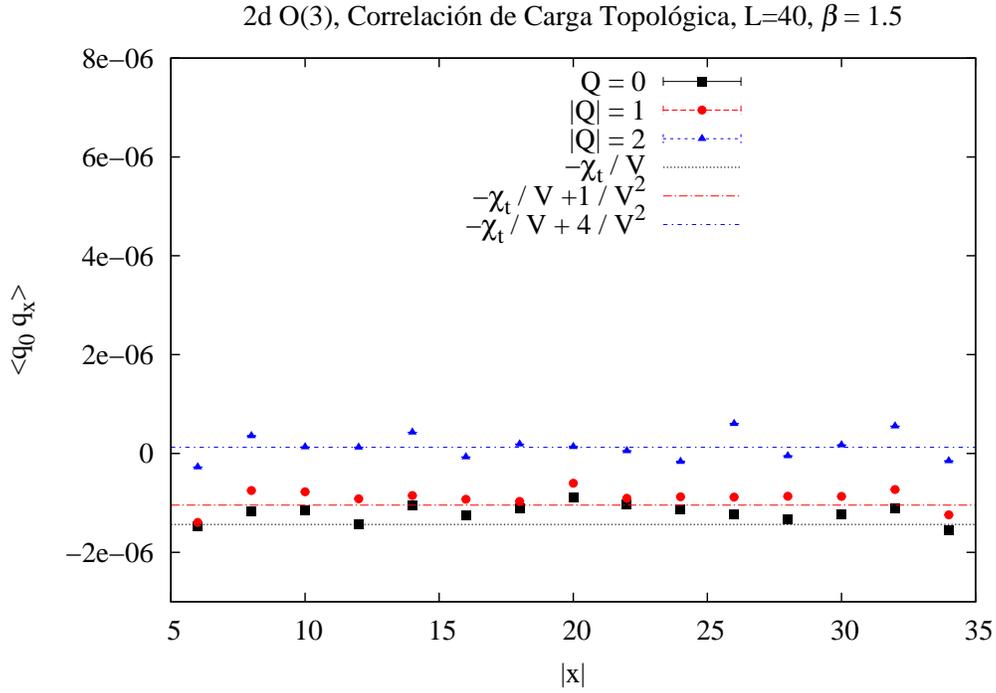


**Figura 3.1:** Las mediciones de la susceptibilidad topológica con diferentes cargas se comparan con la medición directa en diversos volúmenes, con  $\beta = 4$ . Conforme el tamaño de la retícula aumenta, las mediciones en los sectores se acercan al valor directo de  $\chi_t$ .

En la Figura 3.1 se muestra el valor de la susceptibilidad topológica medido directamente en  $L = 400$ ,  $\chi_t = 0.0075542(3)$ . Esta medición coincide justamente con el valor en el límite de volumen infinito ( $\chi_t = 0.0075542$ ) [8, 12, 24] y se compara con los resultados de aplicar el método AFHO en los sectores con carga  $|Q| = 0, 1, 2$ . Incluso para volúmenes relativamente chicos, el método da resultados que solo se desvían de del resultado teórico por una parte en mil. Cuando el volumen es lo suficientemente grande, el método AFHO entrega resultados que son compatibles con el valor teórico. Así, en el modelo  $O(2)$  1d es factible obtener la susceptibilidad topológica a partir de mediciones restringidas a un solo sector, con  $|Q| \leq 2$ .

### Modelo $O(3)$ 2d

El método para explorar la utilidad de la ec. (3.2.11) es análogo al empleado en la Sección 3.2.1. En la Figura 3.2 se ilustra el caso para el modelo  $O(3)$  2d para  $L = 40$  y  $\beta = 1.5$ ; se observa que la correlación de la densidad de carga topológica cae en un *plateau*, donde es posible aplicar el método AFHO para obtener  $\chi_t$ .



**Figura 3.2:** La correlación de densidad de carga topológica establece un plateau al ser medida en cada sector considerado. Con volúmenes moderados, los plateaux son claramente distinguibles. Cuando la retícula es grande, esta distinción se pierde. Esto se puede reparar midiendo la correlación entre todos los sitios, o bien haciendo mediciones en sub-volúmenes.

En el Cuadro 3.2 se muestran los resultados obtenidos. La columna marcada “Todos los sectores” hace referencia al valor que se mide de la susceptibilidad topológica usando todos los sectores topológicos. El resto de las columnas indican el valor de  $\chi_t$  que se obtiene a través del método AFHO aplicado a los resultados numéricos de  $\langle q(x)q(0) \rangle_{|Q|}$  en cada sector de carga

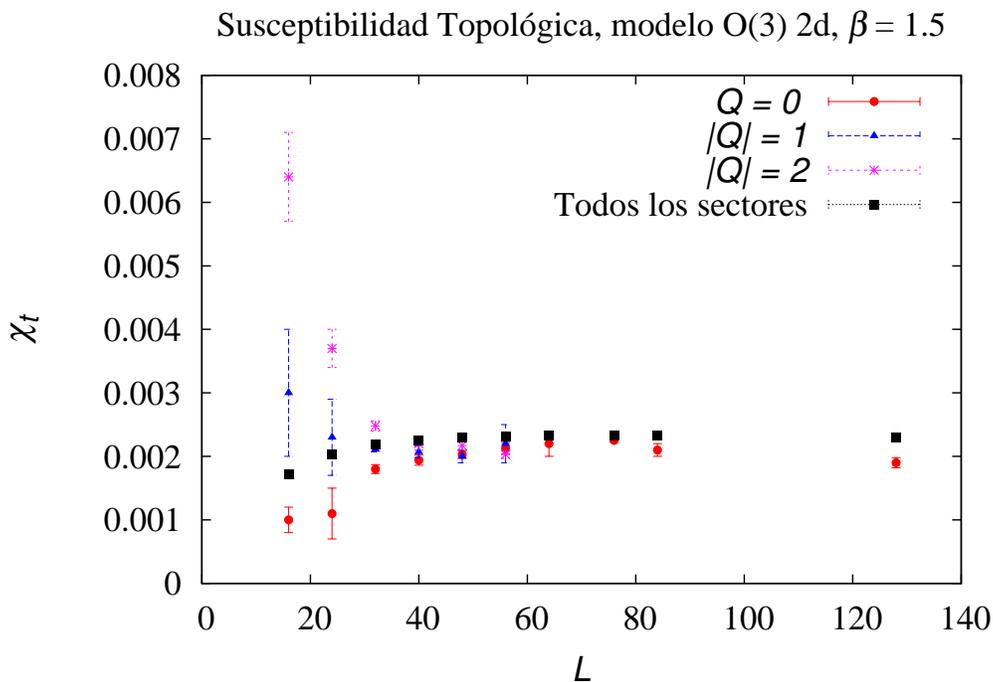
$|Q|$ . Los ajustes se hicieron omitiendo de dos a seis puntos en la frontera.

Una vez que  $\chi_t$  obtiene su valor en  $V \rightarrow \infty$  ( $\chi_t \approx 0.0023$ , ver Cuadro 3.2), la aplicación de la fórmula ec. (3.2.11) genera resultados comparables con el valor medido directamente, dentro de los rangos de error. Sin embargo, como se observa en la Figura 3.2, la aproximación AFHO enfrenta un problema, puesto que los plateaux de correlación de la densidad de carga topológica se vuelven difíciles de distinguir entre sí y de cero conforme el tamaño de la retícula aumenta. Esta situación se puede remediar si la función de correlación de carga topológica es medida usando todos los sitios “all-to-all correlations” [25]; o bien mediante mediciones en sub-volúmenes, tales que  $L > \xi$  [26]. Para  $L > 56$  los sectores con  $|Q| = 1, 2$  ya no son útiles para los propósitos de esta tesis; en este caso, solo las mediciones con  $Q = 0$  resultan de interés, aún así el método es interesante puesto que un solo sector es suficiente. La Figura 3.3 muestra cómo  $\chi_t$  medida en los diferentes sectores tiende hacia el valor en  $V \rightarrow \infty$ .

Así, el método AFHO resulta de interés puesto que permite obtener  $\chi_t$  a partir de mediciones en solo un sector. Para que la aproximación funcione, es necesario que el volumen sea lo suficientemente grande y que la carga  $|Q|$  sea chica; en la aplicación numérica también es necesario que el volumen no sea muy grande. Como  $|Q|$  se puede elegir, al aplicar el método es necesario explorar los volúmenes disponibles en los que las simulaciones entreguen resultados satisfactorios.

$L$	$Q = 0$	$ Q  = 1$	$ Q  = 2$	Todos los sectores
16	0.0010(2)	0.003(1)	0.0064(7)	0.001725(1)
24	0.0011(4)	0.0023(6)	0.0037(3)	0.002031(3)
32	0.00180(7)	0.00211(4)	0.00248(8)	0.002192(2)
40	0.00194(8)	0.00201(9)	0.0022(1)	0.002258(3)
48	0.00203(6)	0.0020(1)	0.00217(7)	0.002301(1)
56	0.00213(9)	0.0022(3)	0.00203(6)	0.002318(4)
64	0.0022(2)	-	-	0.002325(2)
76	0.00225(2)	-	-	0.002329(3)
84	0.0021(1)	-	-	0.002323(3)
128	0.0019(8)	-	-	0.002292(9)

**Cuadro 3.2:** Mediciones numéricas de la susceptibilidad topológica en el modelo  $O(3)$  2d con  $\beta = 1.5$ . En las retículas más chicas,  $\chi_t$  no alcanza su valor de  $V \rightarrow \infty$ . Las retículas con volúmenes intermedios hacen más útil el método AFHO. Cuando  $L \geq 64$ , las mediciones con  $|Q| = 0, 1, 2$  no se distinguen de cero, así, no es factible medir  $\chi_t$  según el método AFHO.



**Figura 3.3:** En el modelo  $O(3)$  2d, la susceptibilidad topológica medida en sectores individuales a través del método AFHO da valores confiables con  $L \leq 56$  y  $\beta = 1.5$ . Cuando la retícula es de mayor volumen, los plateaux con  $|Q| = 0, 1, 2$  se hacen difíciles de distinguir entre sí, y de cero.

# Capítulo 4

## Observables restringidas topológicamente

La ref. [20] está inspirada por la aproximación hecha por Brower, Chandrasekharan, Negele y Wiese (BCNW) en [27], donde se explora la posibilidad de obtener no solo  $\chi_t$ , sino otras observables a través de simulaciones que exploren solo algunos sectores topológicos. En este capítulo, usando las mismas retículas que para el método AFHO, se explora la aplicabilidad del método BCNW para obtener observables y la susceptibilidad topológica. Las observables que se consideraron en los modelos  $\sigma$  son la densidad de acción, la susceptibilidad magnética y la longitud de correlación, medidas en sectores con carga topológica  $|Q| \leq 2$ . Esta última restricción sobre la carga topológica que se toma en cuenta viene porque en la derivación de la aproximación BCNW se usa que

$$\begin{aligned} \langle Q^2 \rangle &= V \chi_t \gg 1 \\ \frac{|Q|}{\langle Q^2 \rangle} &\ll 1. \end{aligned} \tag{4.0.1}$$

En la práctica  $|Q| \leq 2$  resulta un rango adecuado para hacer los ajustes necesarios en esta tesis. En general, resulta de mayor interés la condición sobre el valor de  $\langle Q^2 \rangle$ , que debe obtenerse para cada modelo.

## 4.1. Observables con topología restringida

En la ref. [27], los autores utilizan también un desarrollo en punto silla (ver Sección 3.1) de la función de partición restringida a un sector topológico (3.1.1), para posteriormente calcular observables cuando se dispone de mediciones en sectores topológicos restringidos. Su cálculo es hecho para obtener la masa de un hadrón,  $M(\theta)$ , a partir de la función de dos puntos en los niveles energéticos  $E_0$  y  $E_1$  en dos tiempos  $t_1$  y  $t_2$ , con  $t_1 > t_2$ ,

$$\langle \mathcal{O}(t_1)\mathcal{O}(t_2) \rangle_Q = \frac{1}{Z_Q} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i\theta Q - VE(\theta)} |\langle 0, \theta | \mathcal{O} | 1, \theta \rangle|^2 e^{-M(\theta)(t_1 - t_2)}, \quad (4.1.1)$$

donde  $M(\theta)$  es la masa del hadrón apropiado a  $\mathcal{O}$ . La masa efectiva  $M_Q^{\text{eff}}$  se obtiene del desarrollo en punto silla como

$$M_Q^{\text{eff}} \approx M(0) + \frac{M''(0)}{2V\chi_t} \left[ 1 - \frac{Q^2}{V\chi_t} \right], \quad (4.1.2)$$

o bien, para una observable  $\mathcal{O}$ ,

$$\langle \mathcal{O} \rangle_Q \approx \langle \mathcal{O} \rangle + \frac{c}{2V\chi_t} \left( 1 - \frac{Q^2}{V\chi_t} \right), \quad (4.1.3)$$

donde  $c$  es una constante sin interpretación física obvia.

Aunque la ref. [27] hace una aproximación para obtener la masa efectiva a partir de mediciones restringidas topológicamente, su resultado es válido para calcular otras observables. El método a seguir es medir la observable en al menos tres sectores y dos volúmenes diferentes, después hacer ajustes para obtener de forma aproximada la observable  $\langle \mathcal{O} \rangle$  y la susceptibilidad topológica  $\chi_t$ .

Al igual que en el caso de la fórmula (3.2.11), para el modelo  $O(2)$  1d se usaron retículas con volúmenes entre  $L = 150$  y  $L = 400$ , con  $\beta = 4$ , mientras que en el modelo  $O(3)$  2d los resultados se obtuvieron para  $16 \leq L \leq 128$  y  $\beta = 1.5$ .

## 4.2. Observables a través del método BCNW

Con el propósito de explorar la física del modelo cerca del continuo, en el modelo  $O(2)$  1d se trabajó con  $\beta = 4$  y la acción estándar, pues esto conduce a una longitud de correlación  $\xi \approx 6.8$ ; mientras que en el modelo  $O(3)$  2d se usó  $\beta = 1.5$  y la acción estándar, que conduce a una longitud de correlación  $\xi \approx 9.5$ . Se obtuvieron ajustes a los valores esperados de la densidad de acción, susceptibilidad magnética y longitud de correlación.

### 4.2.1. Densidad de acción

Se define la densidad de acción como

$$s = \frac{\langle S \rangle}{V}, \quad (4.2.1)$$

donde  $S$  es la acción correspondiente al modelo en cuestión y  $V$  el tamaño de la retícula. Esta es la primera observable a considerar a fin de probar la utilidad del método BCNW en la extracción de observables y  $\chi_t$  con restricciones topológicas.

#### Modelo $O(2)$ 1d

$L$	$Q = 0$	$ Q  = 1$	$ Q  = 2$	Todos los sectores
150	0.541703(3)	0.545417(3)	0.556554(6)	0.545909(2)
200	0.542753(3)	0.544841(3)	0.551108(4)	0.545910(2)
250	0.543382(3)	0.544722(2)	0.555421(7)	0.545909(2)
300	0.543805(3)	0.544736(2)	0.547521(3)	0.545909(1)
350	0.544107(3)	0.544790(2)	0.546833(3)	0.545911(1)
400	0.544331(3)	0.544854(2)	0.546422(3)	0.545910(1)

**Cuadro 4.1:** Densidad de acción en el modelo  $O(2)$  1d, con  $\beta = 4$ ,  $\xi \approx 9.5$  y acción estándar. Las mediciones con topología fija crecen conforme aumenta la carga topológica. Aún cuando se cuenta con una enorme estadística ( $O(10^9)$  configuraciones), los resultados restringidos topológicamente no coinciden con el resultado de medir en todos los sectores.

En el modelo  $O(2)$  1d, la acción estándar es dada por la ec. (2.2.18)

$$S[\phi] = \beta \sum_x (1 - \cos(\Delta\phi_x)),$$

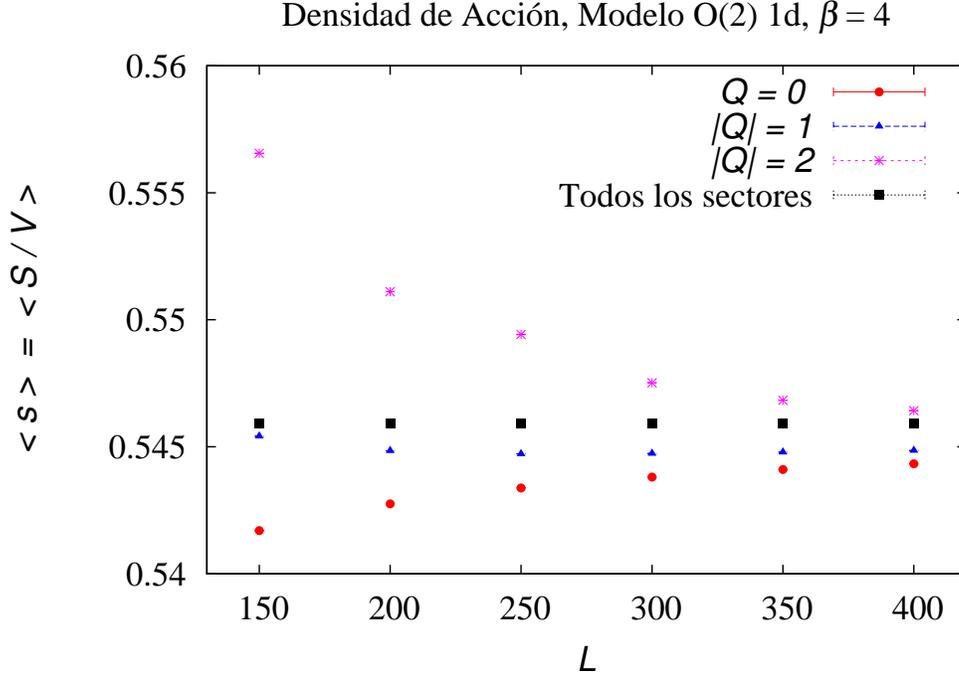
de donde se obtuvieron los resultados de la densidad de acción mostrados en el Cuadro 4.1. Aún con la gran cantidad de estadística usada, los resultados de hacer las mediciones en sectores individuales se pueden distinguir entre sí más allá de los errores. Esto es consistente con que la fórmula (4.1.3) es una aproximación para volúmenes grandes, puesto que las mediciones restringidas topológicamente no coinciden con las mediciones directas. Conforme la carga topológica  $|Q|$  aumenta, el valor de la densidad de acción crece. La medición directa aparece como un “promedio” de las mediciones restringidas si se incluyen sectores con  $|Q| > 2$ .

En el Cuadro 4.2 se muestran los ajustes de los datos a la fórmula (4.1.3) considerando todos los sectores topológicos y retículas de diferentes volúmenes. Se observa que el valor de  $s$  obtenido a partir de aplicar el método BCNW es justamente el medido directamente en las simulaciones, teniendo en cuenta los errores asociados a estos valores. Por otra parte, la susceptibilidad topológica obtenida, también es enteramente compatible con su valor analítico en  $V \rightarrow \infty$ ,  $\chi_t = 0.007554$ , aunque en este caso los errores son mayores.

Rango del ajuste	$s$	$\chi_t$	$\chi^2/\text{d.o.f.}$
150-400	0.545910(1)	0.007555(3)	2.93
250-400	0.545912(2)	0.007563(9)	2.40
300-400	0.545908(4)	0.00754(1)	0.52

**Cuadro 4.2:** Este cuadro muestra los ajustes obtenidos para la densidad de acción en el modelo  $O(2)$  1d considerando las cargas topológicas  $|Q| \leq 2$  y diferentes volúmenes, con  $\beta = 4$ . Estos resultados son consistentes con las mediciones directas de  $s$  (Cuadro 4.1).

En la Figura 4.1 se muestra el comportamiento de la densidad de acción medida en los sectores topológicos y su valor sin considerar la topología en retículas de diferentes volúmenes. Como se observa, la desviación de las mediciones restringidas con respecto a la medición directa es pequeña, pero las mediciones restringidas son claramente diferentes entre sí. Conforme el tamaño de la retícula aumenta, los efectos de la topología congelada se hacen menos visibles, como se espera de las ecs. (4.1.2) y (4.1.3).



**Figura 4.1:** La densidad de acción del modelo  $O(2)$  1d medida con topología restringida y  $\beta = 4$  presenta desviaciones pequeñas con respecto a la medición directa de la observable. Las mediciones en los sectores individuales están separadas entre sí mucho más allá de los errores, permitiendo la aplicación del método BCNW.

### Modelo $O(3)$ 2d

La acción estándar del modelo  $O(3)$  2d es — ec. (2.3.12) —

$$S[\vec{e}] = \beta \sum_{x,\mu} (1 - \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x+\hat{\mu}}) \quad (4.2.2)$$

y  $V = L \times L$  es el tamaño de las retículas. En el Cuadro 4.3 se muestran los resultados de  $s$  en los sectores topológicos con  $|Q| \leq 2$  y considerando todos los sectores, con  $\beta = 1.5$ . Se aprecia que la observable toma, aproximadamente, su valor en  $V \rightarrow \infty$  cuando la retícula es de tamaño  $V \approx 40 \times 40$ ; para  $V$  menor, el valor de la densidad de acción no es estable, sino que crece con  $L$ . Hasta  $L \leq 84$  aún es posible distinguir entre sí las mediciones de los

$L$	$Q = 0$	$ Q  = 1$	$ Q  = 2$	Todos los sectores
16	1.15868(1)	1.19923(2)	1.2394(2)	1.173243(7)
24	1.17414(1)	1.18821(1)	1.20453(3)	1.185087(7)
32	1.18441(1)	1.188599(8)	1.19587(2)	1.190474(6)
40	1.18944(2)	1.19084(2)	1.19384(3)	1.192954(7)
48	1.19193(1)	1.192462(7)	1.193867(8)	1.194157(3)
56	1.19326(2)	1.19348(2)	1.19432(5)	1.194813(7)
64	1.19377(2)	1.193949(7)	1.194276(7)	1.194937(4)
76	1.19426(2)	1.19429(1)	1.19451(1)	1.195039(5)
84	1.19439(2)	1.19448(2)	1.19465(2)	1.195089(5)
128	1.1950(2)	1.1951(3)	1.1949(4)	1.19468(6)

**Cuadro 4.3:** Densidad de acción del modelo  $O(3)$  con la acción estándar,  $\beta = 1.5$  y  $\xi \approx 9.5$ . Las mediciones congeladas topológicamente toman valores más grandes conforme  $|Q|$  aumenta. Cuando  $L \geq 84$ , no hay distinción entre las mediciones en cada sector, ni el valor medido directamente para una muestra estadística de  $10^7$  configuraciones.

sectores topológicos más allá de los errores. Aplicando la fórmula (4.1.3) a estos datos se obtiene el Cuadro 4.4.

Rango del ajuste	$s$	$\chi_t$	$\chi^2/\text{d.o.f.}$
32-40	1.197(2)	0.0040(9)	6.18
32-48	1.1971(4)	0.0041(3)	5.86
32-56	1.1971(3)	0.0041(3)	5.20
32-64	1.1967(2)	0.0039(2)	5.17
32-76	1.1965(2)	0.0038(2)	5.10
32-84	1.1964(2)	0.0038(2)	4.95
40-48	1.1971(3)	0.0045(3)	3.59
40-56	1.1970(2)	0.0044(2)	3.57
40-64	1.1962(1)	0.0038(3)	3.28
40-76	1.1960(1)	0.0036(3)	3.23
40-84	1.1959(1)	0.0036(3)	3.12
48-56	1.1967(2)	0.0043(2)	2.79
48-64	1.19603(9)	0.0037(3)	2.78
48-76	1.19585(8)	0.0035(3)	2.73

48-84	1.19580(8)	0.0035(3)	2.77
56-64	1.1955(2)	0.0035(5)	2.66
56-76	1.19538(6)	0.0031(3)	2.66
56-84	1.19536(5)	0.0030(3)	2.63
64-76	1.19532(7)	0.0031(3)	2.65
64-84	1.19531(5)	0.0031(3)	2.58
76-84	1.1953(1)	0.0026(3)	2.60

**Cuadro 4.4:** Ajustes de la densidad de acción en el modelo  $O(3)$  2d,  $\beta = 1.5$  y  $\xi \approx 9.5$ . Los valores obtenidos de  $s$  mediante el método BCNW son compatibles con las mediciones directas de la observable en  $V \rightarrow \infty$ .  $\chi_t$  no se puede determinar con gran precisión, el valor del ajuste cae en el orden de magnitud esperado, pero solo algunos rangos de volumen dan resultados completamente consistentes con las mediciones directas (Cuadro 3.2).

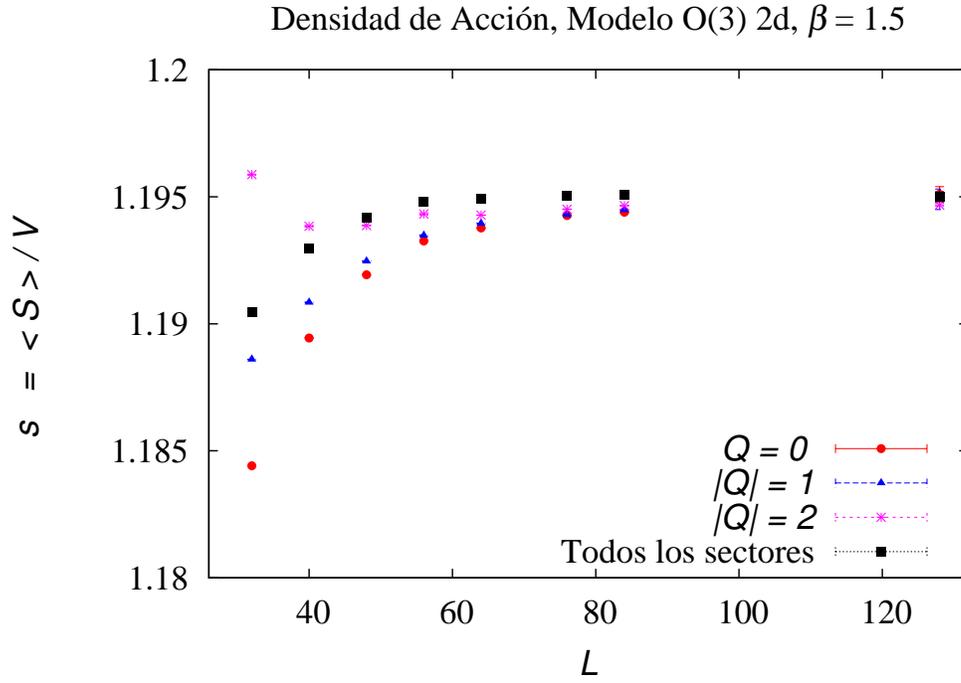
En el Cuadro 4.4 se observa que la fórmula (4.1.3) da aproximaciones de buena calidad para  $s$  cuando se hacen ajustes en volúmenes moderadamente grandes ( $56 \leq L \leq 84$ ), como lo indica la prueba de  $\chi^2/\text{d.o.f.}$  en la última columna. Esto no es sorprendente en vista de que para valores de  $L$  menores a 56 la observable misma no se ha estabilizado. No se incluyen ajustes para  $L = 128$  porque para entonces la observable ya ha alcanzado su valor en  $V \rightarrow \infty$ , por lo que las mediciones con diferente  $Q$  ya no son diferenciables entre sí, como se observa en el último renglón del Cuadro 4.3. En la Figura 4.2, se muestra cómo el valor de las mediciones restringidas topológicamente se acerca al de la medición en todos los sectores conforme el volumen de la retícula aumenta.

En cuanto a la susceptibilidad topológica, el ajuste da en general valores de  $\chi_t$  mayores al medido directamente (Cuadro 3.2). La calidad del ajuste mejora conforme se omiten volúmenes pequeños en favor de retículas más grandes.

#### 4.2.2. Susceptibilidad magnética

La segunda observable que se consideró es la susceptibilidad magnética,

$$\chi_m = \frac{\langle \vec{M}^2 \rangle}{V}, \quad (4.2.3)$$



**Figura 4.2:** A diferencia del modelo  $O(2)$  1d, la densidad de acción del modelo  $O(3)$  2d medida directamente no alcanza su valor en  $V \rightarrow \infty$  en volúmenes chicos. Es necesario usar retículas con  $L \geq 56$  para que se alcance el valor de en el límite termodinámico. Cuando esto ocurre, la distinción de las mediciones en los sectores no es tan clara como en el  $O(2)$  1d.

donde

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_x \vec{e}_x$$

es la magnetización del sistema.

### Modelo $O(2)$ 1d

$L$	$Q = 0$	$ Q  = 1$	$ Q  = 2$	Todos los sectores
150	15.4854(8)	13.3155(6)	10.2700(8)	13.6546(4)
200	14.8741(8)	13.8243(6)	11.7822(8)	13.6542(4)
250	14.5550(8)	13.9684(6)	12.5904(8)	13.6543(4)
300	14.3701(9)	13.9974(7)	13.0336(8)	13.6543(4)
350	14.2487(9)	13.9917(7)	13.2904(8)	13.6543(4)
400	14.1645(9)	13.9745(7)	13.4446(9)	13.6545(4)

**Cuadro 4.5:** Susceptibilidad magnética del modelo  $O(2)$  1d con  $\beta = 4$  y  $\xi \approx 6.8$ . Las mediciones con topología fija muestran una clara distinción entre sí. La medición directa adquiere su valor en  $V \rightarrow \infty$  para todas las retículas simuladas.

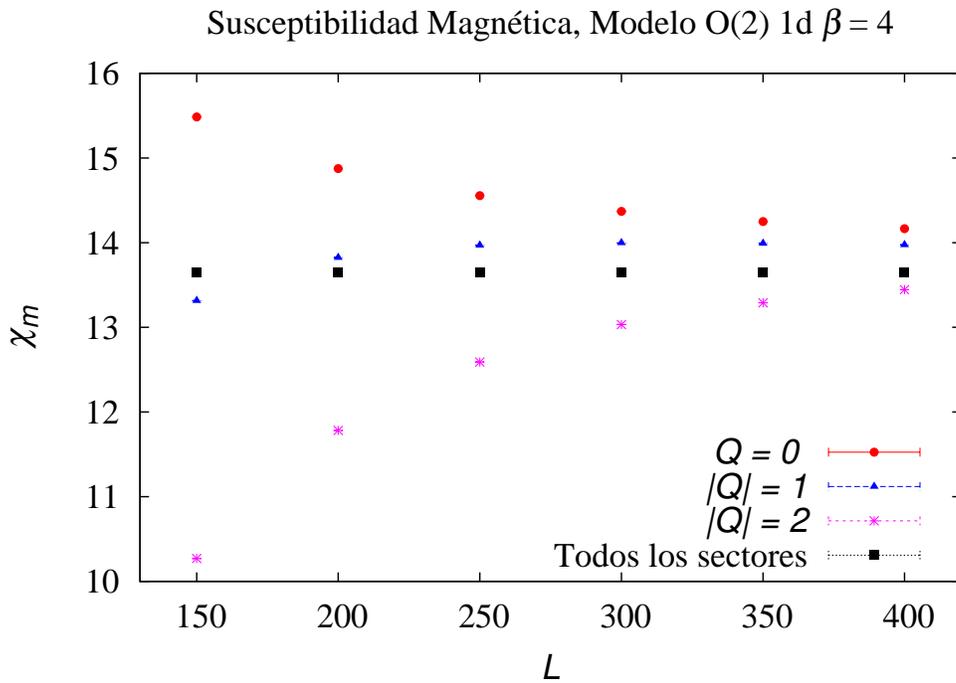
El Cuadro 4.5 muestra el comportamiento de la susceptibilidad magnética para el modelo  $O(2)$  1d. Esta observable, a diferencia de la densidad de acción, presenta valores claramente diferentes entre sí en sectores con diferente carga topológica. Como se espera de la ec. (4.1.3), la diferencia entre los valores con diferente  $|Q|$  se vuelve más pequeña conforme el volumen de la retícula aumenta. Las mediciones hechas directamente en la observable presentan su valor en  $V \rightarrow \infty$  sin importar el volumen en el que se hace la simulación; esto es porque en las retículas usadas se cumple que  $L(\geq 150) \gg \xi(\approx 6.8)$ .

Rango del ajuste	$\chi_m$	$\chi_t$	$\chi^2/\text{d.o.f.}$
150-400	13.6(2)	0.007(1)	278
250-400	13.64(5)	0.0071(5)	41
300-400	13.64(5)	0.0071(5)	19

**Cuadro 4.6:** Ajustes de la susceptibilidad magnética del modelo  $O(2)$  1d. Aunque los errores asociados al ajuste de  $\chi_m$  y  $\chi_t$  son relativamente grandes, ambos valores son consistentes con las mediciones directas de las observables.

En el Cuadro 4.6 se muestra el resultado de aplicar el método BCNW para obtener  $\chi_m$  y la susceptibilidad topológica. La Figura 4.3 compara las mediciones restringidas topológicamente con la medición directa en diferentes volúmenes. La susceptibilidad magnética  $\chi_m$  que es dada por los ajustes a la fórmula (4.1.3) reproduce con gran precisión la medición directa de

la misma, aunque con un error relativo mayor al encontrado al ajustar la densidad de acción. Este mismo efecto ocurre con  $\chi_t$ , donde los ajustes dan resultados compatibles con los mostrados en el Cuadro 4.5, sin embargo, la precisión de los mismos no es tan buena como cuando se considera a  $s$  como la observable explorada. De la Figura 4.3 resulta interesante que aun cuando los resultados en sectores individuales son muy diferentes entre sí, su combinación es muy útil al aproximar las mediciones hechas directamente para obtener las observables relevantes.



**Figura 4.3:** Las mediciones de la susceptibilidad magnética del modelo  $O(2)$  1d en sectores fijos presenta valores claramente separados entre sí. Estas mediciones convergen lentamente al valor medido directamente.

### Modelo $O(3)$ 2d

$L$	$Q = 0$	$ Q  = 1$	$ Q  = 2$	Todos los sectores
16	77.775(2)	66.608(5)	56.33(4)	73.798(2)
24	123.550(8)	112.160(7)	99.99(3)	114.933(4)
32	152.88(2)	146.06(1)	135.51(2)	143.734(6)
40	167.83(4)	164.72(2)	158.03(4)	160.30(2)
48	174.72(4)	173.28(2)	169.66(2)	168.874(6)
56	177.18(8)	176.72(4)	174.24(5)	172.71(1)
64	177.87(4)	177.53(2)	175.80(3)	174.259(8)
76	178.45(8)	178.24(4)	177.62(5)	175.99(1)
84	178.64(9)	178.36(5)	177.89(5)	176.35(1)
128	176.3(1)	177.7(7)	177.6(7)	176.2(1)

**Cuadro 4.7:** Susceptibilidad magnética del modelo  $O(3)$  2d. La medición directa de  $\chi_m$  no alcanza su valor en  $V \rightarrow \infty$  en retículas chicas. Para usar el método BCNW resultan de interés los volúmenes donde esta medición se estabiliza y las mediciones restringidas se distinguen unas de otras. Cuando  $L = 128$ , el error es mayor porque se usaron  $O(10^6)$  mediciones, en contraste con las  $O(10^7)$  del resto de las retículas.

En el Cuadro 4.7 se muestran las mediciones de  $\chi_m$  en los sectores topológicos con  $|Q| \leq 2$  y en todos los sectores. En este caso, los valores medidos de la observable no son cercanos al valor en  $V \rightarrow \infty$  hasta que se alcanza  $L = 56$ . Adicionalmente, el valor medido en todos los sectores no corresponde a un “promedio” de las mediciones en los sectores individuales hasta  $|Q| \leq 2$ . Esto indica que la contribución de cargas topológicas mayores es relevante para la observable. Dada la inestabilidad de  $\chi_m$  para  $L \leq 56$ , se hacen aproximaciones mediante la ec. (4.1.3) sin considerar volúmenes chicos. En el Cuadro 4.8 se muestran los resultados al aplicar el método BCNW.

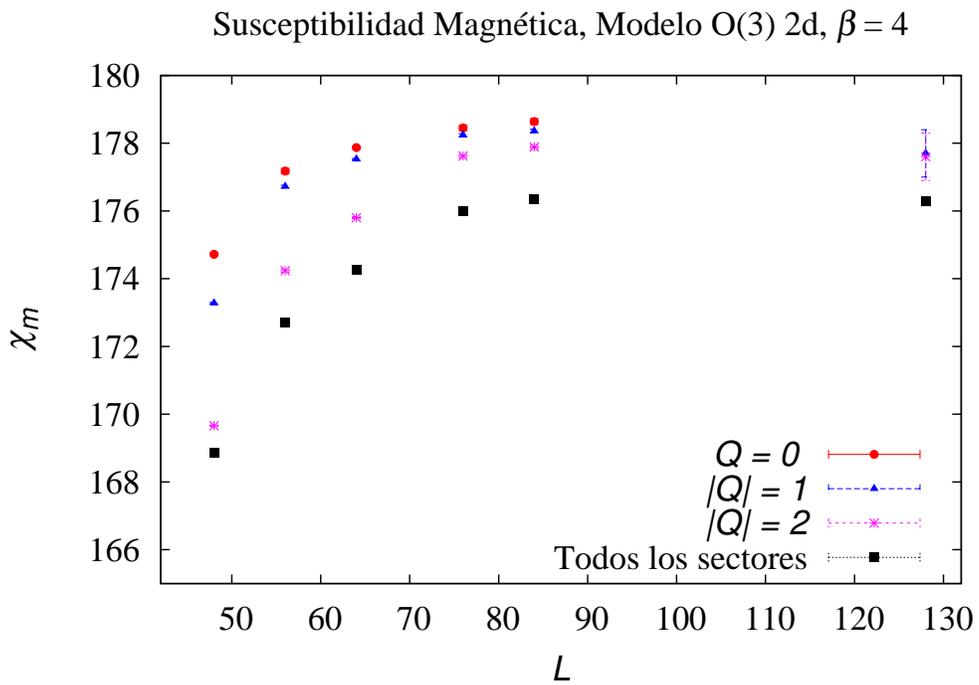
Rango del ajuste	$\chi_m$	$\chi_t$	$\chi^2/\text{d.o.f.}$
40-48	167(13)	0.001(4)	5.54
40-56	169(8)	0.0008(22)	5.65
40-64	172(3)	0.003(16)	5.73
40-76	176(3)	0.005(4)	5.62
40-84	177(2)	0.005(3)	5.77

48-56	168.8(8)	0.0021(4)	5.62
48-64	170(1)	0.0017(4)	5.73
48-76	171(1)	0.0017(3)	5.77
48-84	171.4(9)	0.0017(3)	5.68
56-64	173.4(5)	0.0019(3)	5.58
56-76	173.9(7)	0.0020(5)	5.66
56-84	174.7(8)	0.0025(9)	5.42
64-76	174.3(8)	0.0021(6)	5.37
64-84	177(2)	0.0009(1)	5.36
76-84	177.2(1)	0.0010(1)	5.23

**Cuadro 4.8:** Ajustes de la susceptibilidad magnética. Al considerar  $L < 56$ , los ajustes no son de buena calidad; para  $56 \leq L \leq 76$ , tanto  $\chi_m$  como  $\chi_t$  toman valores compatibles con los medidos directamente:  $\chi_m \approx 177$  y  $\chi_t \approx 0.0023$ .

En el caso de  $\chi_m$ , el método BCNW tiene algunas dificultades en su aplicación. Primero, es necesario alcanzar volúmenes grandes comparados con  $\xi \approx 9.5$  para tener a la observable estabilizada al medirse en todos los sectores. Además, parece ser insuficiente considerar solo los sectores con  $|Q| \leq 2$ . De hecho, únicamente se obtienen ajustes de buena calidad de la susceptibilidad magnética par  $L \geq 64$ . Por otra parte, los ajustes de  $\chi_t$  son de buena calidad para volúmenes con  $48 \leq L \leq 76$ . Para volúmenes mayores, la susceptibilidad topológica del ajuste se aleja de su valor medido directamente,  $\chi_t \approx 0.0023$  (Cuadro 3.2).

En este caso, la aplicabilidad del método puede ser limitada, pues es necesario explorar retículas cuyos volúmenes pueden ser inaccesibles a algunos modelos, además de requerir la inclusión de sectores topológicos con cargas topológicas mayores.



**Figura 4.4:** En el modelo  $O(3)$  2d, la susceptibilidad magnética requiere de retículas grandes para estabilizarse en su valor en  $V \rightarrow \infty$ . La aplicación del método BCNW se dificulta porque en volúmenes grandes, la distinción de las mediciones restringidas se hace poco clara.

### 4.2.3. Longitud de correlación

La longitud de correlación  $\xi$  se obtiene a partir de estudiar a función de correlación espín-espín que tiene un decaimiento exponencial en  $L \rightarrow \infty$ . Con condiciones de frontera periódicas adquiere el comportamiento

$$C(t) = A \cosh\left(\frac{t - \frac{L}{2}}{\xi}\right). \quad (4.2.4)$$

A partir de ajustar los datos a esta función, es posible obtener los parámetros  $A$  (no-físico) y  $\xi$ , cuyo inverso corresponde a la brecha de masa de la teoría.

#### Modelo $O(2)$ 1d

$L$	$Q = 0$	$ Q  = 1$	$ Q  = 2$	Todos los sectores
150	7.02(3)	6.84(3)	6.33(6)	6.81497(4)
200	6.97(2)	6.87(6)	6.57(3)	6.81505(3)
250	6.94(2)	6.87(7)	6.68(2)	6.81495(4)
300	6.92(1)	6.87(7)	6.73(9)	6.81499(4)
350	6.90(1)	6.87(7)	6.77(6)	6.81491(4)
400	6.89(9)	6.87(6)	6.79(3)	6.81495(4)

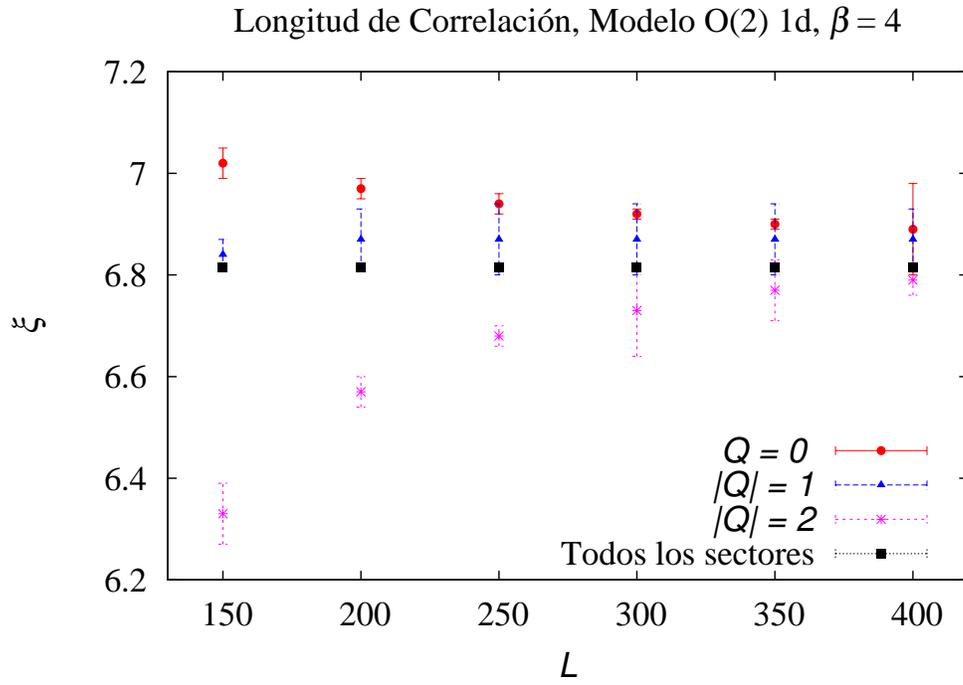
**Cuadro 4.9:** Longitud de correlación del modelo  $O(2)$  1d. Las retículas de menor volumen considerado son de gran utilidad para probar el método BCNW. Las mediciones se distinguen entre sí, más allá de los errores estadísticos.

En el modelo  $O(2)$  1d, con la acción estándar (2.2.18), la longitud de correlación toma los valores indicados en el Cuadro 4.9. Cuando  $L < 400$ , los valores de  $\xi$  calculados con topología fija son claramente distinguibles entre sí más allá de los errores. Cuando  $L = 400$ , la distinción entre el valor de la longitud de correlación en cada sector y la medición directa se pierde, pues  $\xi_Q$  para  $|Q| \leq 2$  caen dentro del mismo rango. Los errores de los resultados mostrados en el Cuadro 4.9 son grandes en las mediciones en sectores individuales, esto es porque en sentido estricto la ec. (4.2.4) solo es válida cuando se usan todos los sectores. Para  $Q$  fija, la longitud de correlación no está bien definida.

Rango del ajuste	$\xi$	$\chi_t$	$\chi^2/\text{d.o.f.}$
150-400	6.8159(6)	0.00748(3)	0.14
250-400	6.8148(8)	0.00757(6)	0.10
300-400	6.8137(3)	0.00759(9)	0.10

**Cuadro 4.10:** Ajustes de la longitud de correlación. Tanto  $\xi$  como  $\chi_t$  obtenidos mediante ajustes a la fórmula (4.1.3) son consistentes con las mediciones directas de las observables.

El Cuadro 4.10 muestra que el método BCNW ofrece resultados de la longitud de correlación que son claramente compatibles con los valores reportados en el Cuadro 4.9. El método BCNW coincide hasta los primeros dos dígitos con los valores presentados en el Cuadro 4.10 en el caso de la  $\xi$ . La susceptibilidad topológica mostrada también es consistente con los resultados medidos directamente (Cuadro 3.1). En la Figura 4.5 se observa la tendencia de las mediciones con restricción topológica hacia el valor de las mediciones hechas directamente de  $\xi$ .

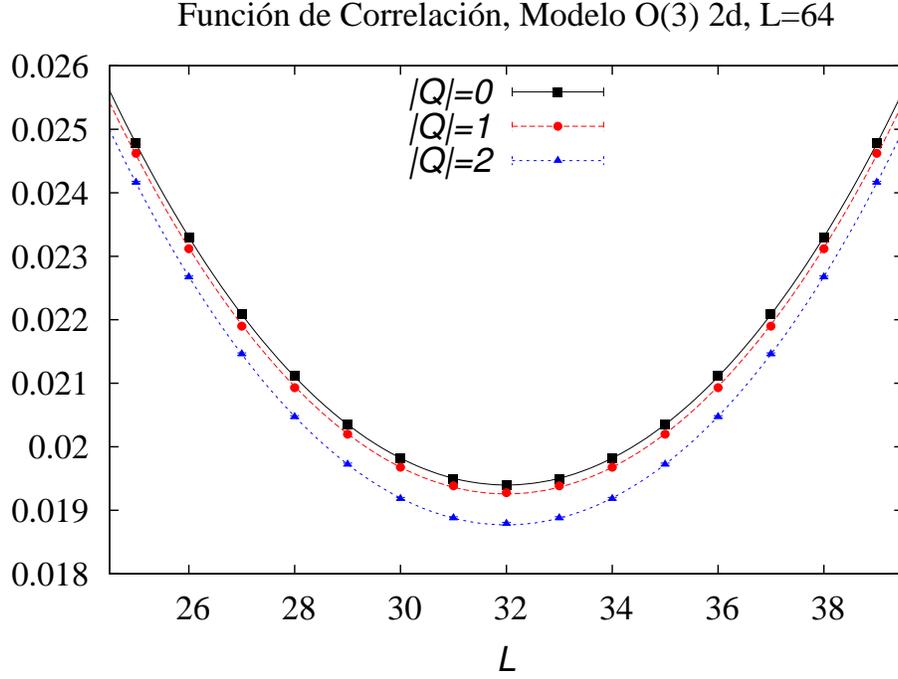


**Figura 4.5:** En retículas con  $L \leq 250$ , las mediciones con topología fija están bien separadas entre sí, facilitando de la aplicación del método BCNW. En retículas más grandes, la medición directa es compatible, dentro de los errores, con las mediciones en sectores.

**Modelo  $O(3)$  2d**

$L$	$Q = 0$	$ Q  = 1$	$ Q  = 2$	Todos los sectores
16	5.68(6)	4.91(5)	4.28(4)	5.40(6)
24	7.72(3)	7.07(2)	6.41(2)	7.23(3)
32	8.63(1)	8.32(2)	7.85(1)	8.22(2)
40	9.06(3)	8.95(2)	8.595(6)	8.75(1)
48	9.294(5)	9.259(5)	9.08(2)	9.078(6)
56	9.408(5)	9.314(5)	9.30(2)	9.304(9)
64	9.497(6)	9.474(4)	9.445(5)	9.385(3)
76	9.52(1)	9.48(2)	9.404(9)	9.42(2)
84	9.53(2)	9.53(3)	9.44(2)	9.42(2)
128	9.47(3)	9.47(2)	9.45(1)	9.46(3)

**Cuadro 4.11:** Longitud de correlación del modelo  $O(3)$  2d. De forma similar a la susceptibilidad magnética, cuando las simulaciones usan retículas chicas la observable no se estabiliza. Además, para  $L > 84$  se pierde la distinción de las mediciones en sectores individuales.

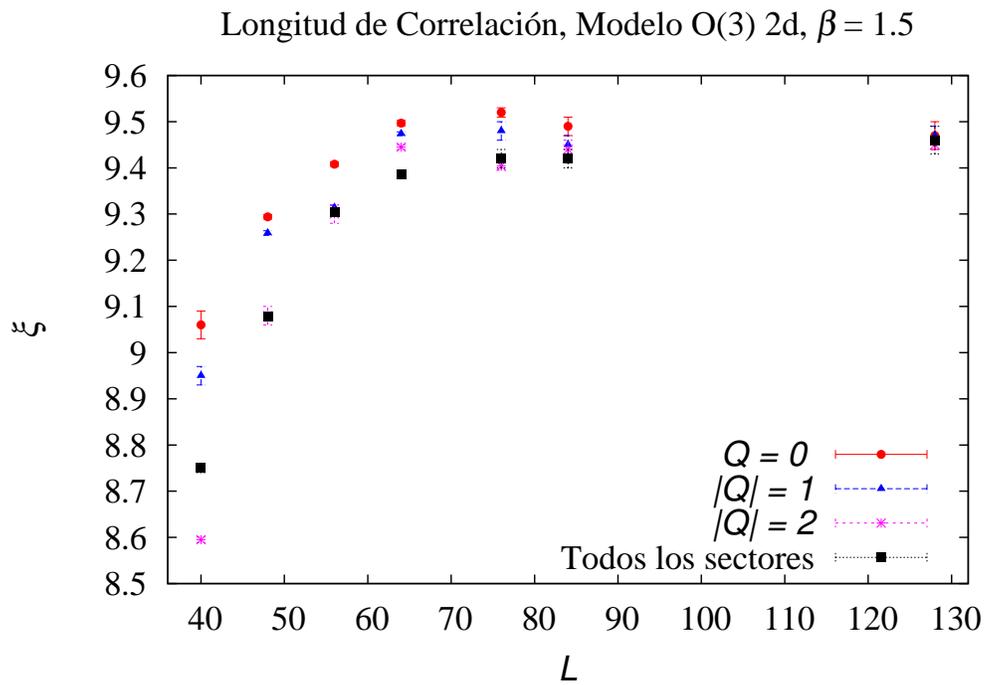


**Figura 4.6:** La función de correlación en sectores fijos se ajusta a la función cosh, ec. (4.2.4), para extraer la longitud de correlación  $\xi$ .

En la Figura 4.6 se muestran ajustes al coseno hiperbólico, según la ec. (4.2.4) de datos tomados en diferentes sectores.

El Cuadro 4.11 muestra las mediciones de  $\xi$  hechas directamente. Se aprecia nuevamente que la observable no toma su valor en  $V \rightarrow \infty$  para volúmenes chicos. Como en el caso de la susceptibilidad magnética, es necesario excluir los datos donde  $\xi$  aún está lejos de su valor estable ( $\xi \approx 9.5$ ). Como es de esperarse, cuando  $L = 128$  las mediciones en los diferentes sectores ya no se distinguen entre sí, por lo que tampoco son de utilidad para probar el método BCNW.

En el Cuadro 4.12, el ajuste a la longitud de correlación obtenido mediante la fórmula (4.1.3) se estabiliza rápidamente en  $\xi = 9.6(1)$ , que es compatible con los resultados del Cuadro 4.11 como valor de  $\xi$  en  $V \rightarrow \infty$ . Esta observable ofrece una estabilización rápida para volúmenes medianos y las mediciones restringidas topológicamente se pueden diferenciar entre sí para un rango amplio de  $L$ . Sin embargo, los ajustes para  $\chi_t$  no son confi-



**Figura 4.7:** En el modelo  $O(3)$  2d, para aplicar el método BCNW se necesitan simulaciones en retículas lo suficientemente grande para alcanzar el valor de la longitud de correlación en  $V \rightarrow \infty$ . La aplicación óptima del método ocurre para  $56 \leq L \leq 84$ .

Rango del ajuste	$\xi$	$\chi_t$	$\chi^2/\text{d.o.f.}$
48-56	9.20(9)	0.0007(8)	8.67
48-64	9.6(1)	0.0036(18)	8.28
48-76	9.6(1)	0.0037(17)	6.55
48-84	9.61(9)	0.0038(15)	6.11
56-64	9.6(2)	0.0031(26)	5.78
56-76	9.6(1)	0.0034(25)	5.46
56-84	9.6(1)	0.0035(22)	5.35
64-76	9.6(1)	0.0028(12)	3.97
64-84	9.6(1)	0.0029(11)	2.86
76-84	9.6(1)	0.0024(12)	2.73

**Cuadro 4.12:** Ajustes de la longitud de correlación. La longitud de correlación  $\xi$  obtenida mediante el método BCNW es consistente con las mediciones directas. La susceptibilidad topológica es, en general, una buena aproximación a los valores del Cuadro 3.2. Los errores asociados al ajuste son muy grandes.

ables por su error asociado; aunque caen dentro del rango de las mediciones mostradas en el Cuadro 3.2, los errores son demasiado grandes para suponer que los datos mostrados corresponden a la susceptibilidad topológica que se mide sin restricciones topológicas.

En general, el método BCNW permite extraer con buena precisión el valor esperado  $\langle \mathcal{O} \rangle$  de alguna observable, junto con la susceptibilidad topológica  $\chi_t$ . En la práctica es necesario contar con una ventana de volúmenes lo suficientemente grandes para que la observable tome su valor en el límite termodinámico, sin perder la señal de la susceptibilidad topológica.

# Capítulo 5

## Conclusiones

En esta tesis se ha explorado numéricamente la posibilidad de extraer valores esperados de observables en mecánica cuántica y teoría cuántica de campos cuando hay restricciones topológicas. Para esto, se han usado los modelos  $O(2)$  1d y  $O(3)$  2d como modelos de prueba. Estos modelos comparten con QCD la existencia de sectores topológicos. En particular, se estudiaron dos propuestas: el método AFHO [20], para obtener la susceptibilidad topológica a partir de mediciones en un solo sector, y el método BCNW [27], que además hace posible obtener otras observables si se dispone de mediciones en pocos sectores. De acuerdo con los resultados de esta tesis, ambos métodos ofrecen resultados consistentes con los que se midieron directamente. Esto fue posible gracias al algoritmo de Wolff.

Al considerar el modelo  $O(2)$  1d, los resultados obtenidos a través del método AFHO para la susceptibilidad topológica son compatibles con gran precisión con las mediciones de  $\chi_t$  hechas directamente. Esto ocurre en todo el rango de volúmenes considerados,  $150 \leq L \leq 400$ , con una longitud de correlación aproximada  $\xi \approx 6.81$ . De la misma manera, el método BCNW da como resultado observables cuyos valores son consistentes con las mediciones directas. La precisión de los datos obtenidos del método muestran cierta dependencia de la observable que se considere.

En el modelo  $O(3)$  2d, los métodos AFHO y BCNW tienen rangos de aplicabilidad no tan extensos en  $V (= L \times L)$  como el caso del modelo  $O(2)$  1d. Cuando las retículas consideradas no son lo suficientemente grandes, algunas de las observables no alcanzan su valor en  $V \rightarrow \infty$  en las mediciones directas. Esto causa que al aplicar las fórmulas (3.2.11) y (4.1.3) los resultados no sean consistentes con las mediciones directas. La susceptibilidad topológica a

través del método AFHO tiene la complicación adicional de que los volúmenes empleados tampoco pueden ser muy grandes, pues la señal de la correlación de densidad de carga se hace muy pequeña. Así, es necesario contar con retículas lo suficientemente grandes a fin de que la observable que se desea conocer alcance su valor en  $V \rightarrow \infty$ , sin suprimir la señal de la correlación de carga, para que los métodos funcionen de la mejor manera. Otra alternativa es hacer mediciones en sub-volúmenes [26] o medir correlaciones entre todos los sitios, para aumentar la estadística disponible.

En la práctica, en los modelos estudiados, las condiciones

$$\begin{aligned} \langle Q^2 \rangle &\gg 1 \\ \frac{|Q|}{\langle Q^2 \rangle} &\ll 1 \end{aligned}$$

se cumplen si se consideran los sectores con carga  $|Q| \leq 2$  y retículas de longitud  $L \leq 400$  para el modelo  $O(2)$  1d y  $L \leq 128$  para el  $O(3)$  2d. Además la condición del método AFHO de tener separación grande al calcular la correlación de densidad de carga no resulta en un impedimento para obtener  $\chi_t$  con mediciones congeladas topológicamente. En los modelos  $O(2)$  1d y  $O(3)$  2d existen alternativas para obtener  $\chi_t$  con topología restringida, por ejemplo, ésta puede ser extraída dividiendo el volumen en placas y obtener la susceptibilidad topológica a través de las fluctuaciones de carga entre las placas [28].

El método AFHO también ha sido probado en teorías de norma  $U(2)$  en dos dimensiones y en teoría de Yang-Mills  $SU(2)$  4d [25]; en el segundo caso, resulta relevante la condición  $|x| \gg 1$  para observar un plateau en la correlación de la densidad de carga topológica. Además, es necesario hacer una minimización local de la acción — minimizar con respecto a cada unión en una plaqueta — que requiere pasos adicionales de Monte Carlo. Aún así, es posible obtener  $\chi_t$  con precisión de hasta 10 % con mediciones restringidas topológicamente; por esta razón, es razonable pensar que el método funcionaría también en QCD.

En los modelos estudiados, la condición  $\langle Q^2 \rangle \gg 1$  para que la aplicación de las aproximaciones AFHO y BCNW sea adecuada se traduce en

$$\langle Q^2 \rangle \gtrsim 1.5 \quad \text{en el modelo } O(2) \text{ 1d, y} \quad (5.0.1)$$

$$\langle Q^2 \rangle \gtrsim 4.5 \quad \text{para el modelo } O(3) \text{ 2d.} \quad (5.0.2)$$

Esta es la condición más relevante en la aplicación de los métodos. Simulaciones en Teoría de Yang-Mills  $SU(3)$  en cuatro dimensiones, donde se

explora la masa del mesón  $\eta'$  como efecto topológico [29] obtienen valores de  $\langle Q^2 \rangle \gtrsim 2$ ; mientras que simulaciones de QCD con dos sabores [30] indican que  $\langle Q^2 \rangle \sim O(10)$ . En vista de estas condiciones, parece plausible aplicar los métodos AFHO y BCNW en QCD.

# Apéndice A

## Simulaciones de Monte Carlo

Mediante simulaciones de Monte Carlo, se calculan numéricamente las integrales de trayectoria que aparecen en mecánica cuántica y teoría de campo en la regularización de la retícula.

Se define una *configuración*  $[\phi]$  como el conjunto de valores que toma un campo en cada punto de la retícula. El valor esperado de la observable  $\mathcal{O}[\phi]$ , en el formalismo de integral de trayectoria corresponde a (considerando  $\hbar = 1$ )

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

donde  $S$  es la acción euclidiana y  $Z$  la función de partición,

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]}. \quad (\text{A.2})$$

En las simulaciones de Monte Carlo, se busca generar tantas configuraciones como sea posible, cumpliendo el *muestreo de importancia*; es decir, las configuraciones se generan con probabilidad

$$\mathcal{Q}[\phi] = \frac{1}{Z} e^{-S[\phi]}. \quad (\text{A.3})$$

Una simulación, donde el sistema pasa de una configuración dada a otra generada por algún algoritmo (cadena de Markov), debe satisfacer las condiciones de *ergodicidad* y *balance detallado*. La condición de ergodicidad se cumple si para dos configuraciones cualesquiera la probabilidad de transición de una configuración a otra, en un número finito de actualizaciones no es

cero. El balance detallado requiere que

$$\frac{P([\phi_i] \longrightarrow [\phi_j])}{P([\phi_j] \longrightarrow [\phi_i])} = \frac{P[\phi_j]}{P[\phi_i]}, \quad (\text{A.4})$$

donde  $P([\phi_i] \longrightarrow [\phi_j])$  es la probabilidad de pasar de la configuración  $[\phi_i]$  a  $[\phi_j]$ .

Una simulación de Monte Carlo consiste generalmente de los siguientes pasos:

- Elegir una configuración inicial. Esta puede ser aleatoria (*hot start*) o con el campo tomando valores constantes (*cold start*) en la retícula.
- Termalización. Se llevan a cabo actualizaciones en las configuraciones del sistema antes de hacer mediciones, para que el sistema alcance el equilibrio.
- Cuando se alcanza el equilibrio, se realizan las mediciones de interés, descorrelacionándolas de la medición anterior.

En cada configuración en el equilibrio e independiente de la medición anterior, se mide una observable  $\mathcal{O}[\phi]$ . Una aproximación del valor esperado de esta observable es

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \bar{\mathcal{O}}, \quad (\text{A.5})$$

donde  $\bar{\mathcal{O}}$  es el promedio de las mediciones de la observable.

# Apéndice B

## El algoritmo de Wolff

En el caso estudiado, es posible comparar la aplicación de las fórmulas (3.2.11) y (4.1.3) con resultados medidos directamente de la susceptibilidad topológica,  $\chi_t$ , y los valores esperados de las demás observables estudiadas. Esto es porque se ha usado el algoritmo cluster de Wolff [31]. Este algoritmo es capaz de medir con acceso a todos los sectores topológicos, al hacer actualizaciones no-locales de las configuraciones.

A continuación se describe el algoritmo cluster de Wolff para un modelo  $O(N)$  en una retícula cúbica de  $V$  sitios y condiciones de frontera periódicas.

Para  $N \geq 2$ , y  $\vec{r} \in S^{N-1}$ , se define la reflexión con respecto al hiperplano ortogonal a  $\vec{r}$ ,

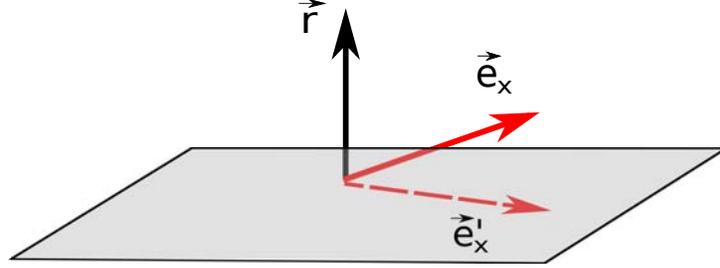
$$R(\vec{r})\vec{e}_x = \vec{e}_x - 2(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{r}, \quad (\text{B.1})$$

la Figura B.1 ilustra esta operación sobre un vector  $\vec{e}_x$ . Con esta definición, se cumple que  $R^2(\vec{r}) = \mathbb{1}$ ,

$$\begin{aligned} R(\vec{r})R(\vec{r})\vec{e}_x &= R(\vec{r})[\vec{e}_x - 2(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{r}] \\ &= \vec{e}_x - 2(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{r} - 2[(\vec{e}_x - 2(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{r}) \cdot \vec{r}]\vec{r} \\ &= \vec{e}_x - 4(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{r} + 4(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{r}^2\vec{r} \\ &= \vec{e}_x, \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

pues  $\vec{r}^2 = 1$ . Además, la acción de los modelos  $O(N)$  estudiados — ecs. (2.2.18) y (2.3.12) — es invariante bajo transformaciones globales  $R$ ,

$$\begin{aligned} [R(\vec{r})\vec{e}_x] \cdot [R(\vec{r})\vec{e}_y] &= [\vec{e}_x - 2(\vec{e}_x \cdot \vec{r})\vec{r}] \cdot [\vec{e}_y - 2(\vec{e}_y \cdot \vec{r})\vec{r}] \\ &= \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y - 4(\vec{e}_x \cdot \vec{r})(\vec{e}_y \cdot \vec{r}) + 4(\vec{e}_x \cdot \vec{r})(\vec{e}_y \cdot \vec{r})\vec{r}^2 \\ &= \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$



**Figura B.1:** Ilustración de la reflexión del vector  $\vec{e}_x$  usando el algoritmo de Wolff. El vector  $\vec{e}_x$  es transformado en  $\vec{e}'_x$  usando el plano ortogonal a  $\vec{r}$ .

Usando la operación (B.1), una actualización del cluster se obtiene de la siguiente manera:

1. Elegir una dirección aleatoria  $\vec{r} \in S^{N-1}$  y un sitio aleatorio  $x \in V$  como el primer punto de un cluster  $c \in V$ .
2. Rotar  $\vec{e}_x \rightarrow R(\vec{r})\vec{e}_x$  y marcar  $x$ .
3. Visitar todas las ligas que conectan a  $x \in c$  con sus vecinos más cercanos  $y$ . Un “bond”  $\langle xy \rangle$  es activado con probabilidad

$$\begin{aligned} P(\vec{e}_x, \vec{e}_y) &= 1 - \exp(\text{mín}\{0, \beta\vec{e}_x \cdot [1 - R(\vec{r})\vec{e}_y]\}) \\ &= 1 - \exp\{\text{mín}[0, 2\beta(\vec{r} \cdot \vec{e}_x)(\vec{r} \cdot \vec{e}_y)]\}. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Es decir, el nuevo bond es aceptado con probabilidad 1 si la acción disminuye, y es aceptado con probabilidad  $1 - \exp[2\beta(\vec{r} \cdot \vec{e}_x)(\vec{r} \cdot \vec{e}_y)]$  si la acción crece. Si esto ocurre,  $y$  es marcado y agregado a  $c$ .

4. Continuar iterativamente del mismo modo con todos los bonds que llevan a vecinos no marcados de nuevos sitios agregados, hasta terminar el proceso. Hecho esto, los espines en  $c$  son reflejados con respecto al plano ortogonal a  $\vec{r}$ , como lo ilustra la Figura B.1.

La ergodicidad es garantizada porque siempre hay una probabilidad distinta de cero de que  $c$  consista de solo un sitio, y siempre hay una reflexión que conecta dos espines cualesquiera. Cada configuración puede ser alcanzada, en principio, en cuando más  $V$  actualizaciones.

El balance detallado también se cumple. Si se consideran dos configuraciones  $[\vec{e}_x]$  y  $[\vec{e}'_x]$  que difieren en una rotación  $R(\vec{r})$  en un cluster  $c$ , las

probabilidades de transición  $W$  obedecen

$$\begin{aligned}
\frac{W([\vec{e}_x] \rightarrow [\vec{e}'_x])}{W([\vec{e}'_x] \rightarrow [\vec{e}_x])} &= \prod_{\langle xy \rangle \in \partial_c} \frac{1 - P(R(\vec{r})\vec{e}_x, \vec{e}_y)}{1 - P(R(\vec{r})\vec{e}'_x, \vec{e}'_y)} \\
&= \exp \left[ \beta \sum_{\langle xy \rangle \in \partial_c} \vec{e}_x \cdot [R(\vec{r}) - 1] \vec{e}_y \right] \\
&= \exp \left[ \beta \sum_{\langle xy \rangle} (\vec{e}'_x \cdot \vec{e}'_y - \vec{e}_x \cdot \vec{e}_y) \right], \tag{B.5}
\end{aligned}$$

donde la superficie  $\partial_c$  de  $c$  consiste de todas las ligas  $\langle xy \rangle$  con  $x \in c$  y  $y \notin c$ . La ec. (B.5) es justamente la condición de balance detallado (A.4).

# Bibliografía

- [1] J. J. Sakurai, “Modern Quantum Mechanics ”, Addison Wesley Publishing Company: New York, 1994.
- [2] W. Bietenholz y U.-J. Wiese, Notas de Clase “Introduction to Particle Physics and Quantum Field Theory” (sin publicar).
- [3] L. S. Schulman, “Techniques and Applications of Path Integration”, Wiley: New York, 1981.
- [4] A. Hatcher, “Algebraic Topology”, Cambridge University Press, 2001.
- [5] A. Lascurain, “Curso Básico de Variable Compleja”, Las Prensas de Ciencias: México, 2007.
- [6] M. Kaku, “Quantum Field Theory, a Modern Introduction”, Oxford University Press: New York, 1993.
- [7] S. Weinberg, “The Quantum Theory of Fields Vol. II”, Cambridge University Press: New York, 1996.
- [8] W. Bietenholz, R. Brower, S. Chandrasekharan y U.-J. Wiese, “Perfect Lattice Topology: The Quantum Rotor as a Test Case”, *Phys. Lett. B* **407** (1997) 283 [hep-lat/9704015].
- [9] A. M. Polyakov, “Gauge Fields and Strings”, Harwood Academic Publishers: New York, 1987.
- [10] A. Di Giacomo, F. Farchioni, A. Papa y E. Vicari, “Topological Susceptibility on the Lattice: the Two-Dimensional  $O(3)$   $\sigma$  model”, *Phys. Rev. D* **46** (1992) 4630.

- [11] E. Witten, “Current Algebra Theorems for the  $U(1)$  Goldstone Boson”, *Nucl. Phys.* **B 156** (1979) 269.  
G. Veneziano, “ $U(1)$  Without Instantons”, *Nucl. Phys.* **B 159** (1979) 213.
- [12] W. Bietenholz, U. Gerber, M. Pepe y U.-J. Wiese, “Topological Lattice Actions”, *JHEP* **1012** (2010) 020 [arXiv:1009.2146[hep-lat]].
- [13] K. Huang, “Quantum Field Theory: From Operators to Path Integrals”, 2a edición, Wiley: New York, 2010.
- [14] B. Berg y M. Lüscher, “Definition and Statistical Distributions of a Topological Number in the Lattice  $O(3)$   $\sigma$ -model”, *Nucl. Phys.* **B 190** (1981) 412.
- [15] M. Lüscher, “Does the Topological Susceptibility in Lattice Sigma Models Scale According to the Perturbative Renormalization Group?”, *Nucl. Phys.* **B 200** (1982) 61.
- [16] M. Creutz, “Quarks, Gluons and Lattices”, Cambridge University Press: New York, 1983.
- [17] M. E. J. Newman y G. T. Barkema, “Monte Carlo Methods in Statistical Physics”, Oxford: New York, 1999.
- [18] M. Lüscher, “Properties and Uses of the Wilson Flow in Lattice QCD”, *JHEP* **1008** (2010) 071 [arXiv:1006.4518 [hep-lat]].  
M. Lüscher y S. Schaefer, “Lattice QCD without Topological Barriers”, *JHEP* **1107** (2011) 036 [arXiv:1105.4749 [hep-lat]].
- [19] A. Laio, G. Martinelli y F. Sanfilippo, “Metadynamics Surfing on Topology Barriers: the  $CP^{N-1}$  Case”, arXiv:1508.07270 [hep-lat].
- [20] S. Aoki, H. Fukaya, S. Hashimoto y T. Onogi, “Finite Volume QCD at Fixed Topological Charge”, *Phys. Rev.* **D 76** (2007) 054508 [arXiv:0707.0396[hep-lat]].
- [21] V. Kaplunovsky, ”Saddle Point Method of Asymptotic Expansion”, visto en <http://bolvan.ph.utexas.edu/~vadim/Classes/2011f/saddle.pdf>

- [22] J. L. López y P. J. Pagola, “Fórmulas Explícitas Para los Coeficientes de los Métodos de Laplace y Saddle Point”, XI Congreso de Matemática Aplicada, Ciudad Real, 2009.
- [23] C. Vafa y E. Witten, “Parity Conservation in Quantum Chromodynamics”, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 535.
- [24] A. Dromard y M. Wagner, “Extracting Hadron Masses from Fixed Topology Simulations”, *Phys. Rev. D* **90** (2014) 074505 [arXiv:1404.0247[hep-lat]].
- [25] I. Bautista, W. Bietenholz, A. Dromard, U. Gerber, L. Gonglach, C. P. Hofmann, H. Mejía-Díaz y M. Wagner, “Measuring the Topological Susceptibility in a Fixed Sector”, *Phys. Rev. D* **92** (2015) 114510 [arXiv:1503.06853 [hep-lat]].
- U. Gerber et al., “Extracting Physics from Topologically Frozen Markov Chains”, PoS LATTICE 2014 (2014) [arXiv:1410.0426 [hep-lat]].
- [26] H. Fukaya, S. Aoki, G. Cossu, S. Hashimoto, T. Kaneko y J. Noaki, “Topology Density Correlator on Dynamical Domain-Wall Ensembles with Nearly Frozen Topological Charge”.
- [27] R. Brower, S. Chandrasekharan, J.W. Negele y U.-J. Wiese, “Physical Observables from Lattice QCD at Fixed Topology”, *Phys. Lett. B* **560** (2003) 64 [hep-lat/0302005].
- [28] W. Bietenholz, P. de Forcrand y U. Gerber, “Topological Susceptibility from Slabs”, *JHEP* **1007** (2015) 070 [ arXiv:1509.0633 [hep-lat]].
- [29] L. Del Debbio, L. Giusti y C. Pica, “Topological Susceptibility in the  $SU(3)$  Gauge Theory”, *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 032003 [arXiv:0407052v2 [hep-lat]].
- K. Cichy, E. Garcia-Ramos, K. Jansen, K. Ottnad y C. Urbach, “Non-Perturbative Test of the Witten-Veneziano Formula from Lattice QCD”, *JHEP* **1509** (2015) 020 [arXiv:1504.07954v2 [hep-lat]].
- S. Dürr, Z. Fodor, C. Hoelbling y T. Kurth, “Precision Study of the  $SU(3)$  Topological Susceptibility in the Continuum”, *JHEP* **0704** (2007) 055 [arXiv:0612021 [hep-lat]].

- [30] T. Chiu, T. Hsieh y Y. Mao, “Topological Susceptibility in Two Flavors Lattice QCD with the Optimal Domain-Wall Fermion”, *Phys. Lett. B* **671** (2009) 135 [arXiv:1105.4414 [hep-lat]].
- M. Bruno, S. Schaefer y R. Sommer, “Topological Susceptibility and the Sampling of Field Space in  $N_f = 2$  Lattice QCD Simulations”, *JHEP* **1408** (2014) 150 [arXiv:1406.5363 [hep-lat]].
- [31] U. Wolff, “Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems”, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 361.