

Hadronische Korrelationen in der Quantenchromodynamik auf dem Gitter

von
Constantin Loizides

im Dezember 2000

Diplomarbeit in Physik

angefertigt im
Institut für Theoretische Physik
vorgelegt dem
Fachbereich Physik
der
Johann Wolfgang von Goethe Universität
Frankfurt am Main

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	2
2	Hadronische Korrelationen	4
2.1	Grundlagen der QCD	4
2.1.1	Lagrangedichte	5
2.1.2	Confinement	6
2.1.3	Renormierung	6
2.2	Hadronische Korrelationsfunktionen	8
2.2.1	Berechnung im Ortsraum	11
2.2.2	Modellierung über die spektrale Dichte	13
3	Grundlagen der Gittereichtheorie	17
3.1	Diskretisierung der Raumzeit	17
3.1.1	Fermionen auf dem Gitter	18
3.1.2	Eichbosonen auf dem Gitter	29
3.1.3	Zusammenfassung für die QCD	33
3.2	Monte Carlo Simulation des Pfadintegrals	35
3.2.1	Die Monte Carlo Methode	35
3.2.2	Updating als Markov Prozeß	38
3.2.3	Der Metropolis Algorithmus	39
3.2.4	Die Heat-Bath Methode	40
3.2.5	Der Heat-Bath Algorithmus von Creutz für die SU(2)	42
3.2.6	Der Kennedy-Pendleton Algorithmus für die SU(2)	45
3.2.7	Der Pseudo-Heat-Bath Algorithmus von Cabibbo-Marinari	47
3.2.8	Überrelaxation zur Beschleunigung der Thermalisierung	49
3.3	Observablen auf dem Gitter	52
3.3.1	Die Plaquette	53
3.3.2	Die Stringsannung	53
3.3.3	Die Korrelationsfunktion	57
3.3.4	Die Masse	58
3.4	Der Kontinuumslimit	59
4	Die Rechnung in der Praxis	66
4.1	Details der Programmierung	66
4.2	Zusammenstellung der Parameter	72
4.3	Festlegung indirekter Parameter	74

4.3.1	Thermalisierungsschritte	74
4.3.2	Optimale Wahl des Mischungsverhältnisses	76
4.3.3	Größe des Residuums	77
4.3.4	Bestimmung des Gitterabstands bei $\beta = 5.7$	79
4.4	Berechnung der Korrelationsfunktion	81
4.4.1	Die Korrelationsfunktion	82
4.4.2	Die Ebene-zu-Ebene-Korrelationsfunktion	84
5	Bearbeitung und Diskussion der Korrelationsfunktion	90
5.1	Die freie Korrelationsfunktion	90
5.2	Korrektur der Spiegelbilder	94
5.3	Diskussion der Ergebnisse	98
5.3.1	Der skalare Kanal	100
5.3.2	Der pseudo-skalare Kanal	100
5.3.3	Der Vektor-Kanal	103
5.3.4	Der Pseudo-Vektor-Kanal	105
5.3.5	Der Proton-Kanal	107
5.3.6	Der Delta-Kanal	107
5.3.7	Zusammenfassung	107
6	Ausblick	111
A	Die Pfadintegralquantisierung	112
A.1	Das Pfadintegral für ein Teilchen	112
A.2	Das euklidische Pfadintegral	113
A.3	Das Pfadintegral für Mehrteilchensysteme	116
A.4	Das Pfadintegral in der Feldtheorie	118
B	Matrixinvertierungsmethoden	120
B.1	Das Conjugate Gradient Verfahren	120
B.2	Ein verbessertes Conjugate Gradient Verfahren	125
	Literaturverzeichnis	128

Vorwort

In der vorliegenden Arbeit beschreibe ich ausführlich, wie man hadronische Korrelationsfunktionen numerisch durch Anwendung einiger Methoden aus der Gittereichtheorie berechnet und diskutiere anschließend erste Ergebnisse.

Die Arbeit ist in zwei Hauptteile gegliedert: die Ausarbeitung der theoretischen Grundlagen und die Darstellung und Auswertung der oben genannten Rechnungen. Die theoretischen Themen sind so gewählt, daß ein Leser mit Grundkenntnissen in der Quantenmechanik und Quantenfeldtheorie die Vorgehensweise im Detail verstehen kann. Dies entspricht meinem Kenntnisstand beim Eintritt in das Institut für Theoretische Physik.

Leser, die an technischen Details nicht interessiert sind oder genügend Vorkenntnisse in der Quantenchromodynamik (QCD) und insbesondere in den Methoden der Gittereichtheorie haben, können die Einleitung (Kapitel 1), die Zusammenfassung der QCD (Abschnitt 2.1), die Grundlagen der Gittereichtheorie (Kapitel 3), Details der durchgeführten Rechnung (Kapitel 4 außer Abschnitt 4.4) und den Ausblick (Kapitel 6) auslassen. Zum Verständnis der Arbeit ist es ausreichend, das untersuchte Modell der Korrelationsfunktion (Abschnitt 2.2), die konkrete Berechnung auf dem Gitter (Abschnitt 4.4) und die Auswertung des Ergebnisse (Kapitel 5) zu lesen.

Die Arbeit ist durchgehend in der ersten Person Plural formuliert. Ich möchte so den Leser in die Entwicklung und Ausarbeitung der theoretischen Grundlagen und deren Umsetzung miteinbeziehen¹. In anderen Teilen der Arbeit, insbesondere im Auswertungsteil, ist die erste Person Plural als ein Ausdruck meiner Überlegungen unter Rücksprache mit meinem Betreuer zu verstehen, ähnlich der Ausdrucksweise einer Veröffentlichung. In rein informellen und deskriptiven Abschnitten verwende ich die dritte Person Singular.

Ungewöhnliche englische und auch deutsche Fachbegriffe oder Bezeichnungen setze ich beim ersten Erscheinen in Anführungszeichen². Im folgenden behandle ich sie dann wie Wörter der deutschen Sprache. Schreibweisen für mathematische Größen führe ich –wenn sie nicht gängig sind– an der entsprechenden Stelle ein.

Frankfurt am Main, im Dezember 2000

Constantin Loizides

¹Die erste Person Singular benutze ich nur in diesem Abschnitt und in der Danksagung.

²Englische Fachbegriffe benutze ich nur, wenn ich keine adäquate deutsche Übersetzung gefunden habe.

1 Einleitung

Die Frage nach dem inneren Aufbau der Materie beschäftigt die Menschheit seit vielen Jahrhunderten. Von der ersten, damals noch naturphilosophischen Beschreibung durch die atomistische Lehre von Demokrit um 400 v. Chr. bis in die heutige Zeit prägt die Theorie der Materie die Vorstellung davon, "was die Welt im Innersten zusammenhält".

Ein Höhepunkt wissenschaftlicher Erkenntnisse des letzten Jahrhunderts ist die fundamentale mikroskopische Formulierung von elementaren Prozessen der Natur in Form von wechselwirkenden Quantenfeldern. In der Quantenfeldtheorie wird das alte Konzept des Massenpunktes und der auf ihn wirkenden Kräfte zusammen mit den bereits entwickelten Gesetzen der Quantenmechanik und der speziellen Relativitätstheorie vereinheitlicht. Dabei beschreibt man Teilchen als elementare Anregungen eines Feldes. Sie interagieren durch das Austauschen von Wechselwirkungsteilchen. Die Form des Wechselwirkungsterms ist dabei meistens durch die Forderung nach lokaler Eichinvarianz der Lagrangedichte unter Transformationen bestimmter Gruppen diktiert.

Im Falle der Quantenchromodynamik (QCD), der Quantenfeldtheorie der starken Wechselwirkung, hält man die spezielle unitäre Gruppe in drei Dimensionen für die grundlegende Gruppe. Dadurch erhalten die Freiheitsgrade der Theorie, Quarks als Materieteilchen und Gluonen als Austauscheteilchen, eine Quantenzahl, die als "Farbe" bezeichnet wird. Der wesentliche Unterschied zur früher bekannten Quantenfeldtheorie des elektromagnetischen Feldes (QED) ist die asymptotische Freiheit der QCD, eine Folge der nichtabelschen Eichgruppe. Für kleine Abstände (großer Impulsübertrag) verhalten sich die Quarks fast wie freie Teilchen, was diesen Bereich der Theorie mit perturbativen Mitteln berechenbar macht. Auf großen Distanzen (kleiner Impulsübertrag) scheint die Kopplung dagegen so groß zu werden, daß Störungsmethoden nicht mehr anwendbar sind.

Zu dem nichtperturbativen Bereich gehören insbesondere gebundene Materiezustände, die Hadronen. Sie sind als farbneutrale Zustände observable Größen und daher experimentell zugänglich. Eine nichtperturbative Methode zur Berechnung hadronischer Eigenschaften direkt aus den fundamentalen Feldern der QCD ist die numerische Auswertung von euklidischen Pfadintegralen in diskretisierter Raumzeit. Dazu formuliert man die QCD als Gittereichtheorie, so daß die charakterisierende Invarianz unter Eichtransformationen auch in der diskretisierten Version der Theorie erfüllt ist.

Die Gitter-QCD hat in der Vergangenheit einige Erfolge bei der Berechnung von

Observablen zu verzeichnen. Beispielsweise kann man mit ihren Methoden aus dem asymptotischen Abfall von Korrelationsfunktionen weit entfernter hadronischer Ströme die Massen der leichtesten Hadronen berechnen [Yos98] oder durch weit voneinander entfernte hadronische Quellen und Senken bestimmte Grundzustände filtern, um daraus Wellenfunktionen oder Formfaktoren zu erhalten [Deg89]. Bei diesen Rechnungen für große Abstände wird meist über einen der beiden Ströme integriert, um auf einen bestimmten Impuls zu projizieren. Zusätzlich werden meistens nichtlokale Quellen benutzt, um den Überlapp mit den interessierenden Grundzuständen zu erhöhen.

Im Unterschied zu den oben genannten Rechnungen wollen wir die QCD in der vorliegenden Arbeit bei allen Abständen, für kurze, mittlere und lange Reichweite, testen. Dazu untersuchen wir euklidische Korrelationsfunktionen zwischen lokalen, hadronischen Strömen. Physikalisch entsprechen diese euklidischen Punkt-zu-Punkt-Korrelationen raumartigen Korrelationsfunktionen, die die virtuelle Ausbreitung von Quarks oder Hadronen beschreiben. Wir werden die Punkt-zu-Punkt-Korrelationsfunktion numerisch mit Hilfe von statistischen Methoden der Gittereichtheorie für verschiedene hadronische Ströme berechnen. Gleichzeitig kann sie auch mit anderen Methoden untersucht werden; insbesondere steht sie in einigen Kanälen phänomenologisch durch Dispersionsbeziehungen mit experimentellen Daten aus e^+e^- -Produktion von Hadronen und τ -Zerfallsexperimenten in Beziehung [Shu93].

Im zweiten Kapitel gehen wir nach kurzer Wiederholung der QCD detailliert auf die zu berechnende Korrelationsfunktion ein. Insbesondere leiten wir über die spektrale Dichte einen Ausdruck für die Korrelationsfunktion her, der unsere Ergebnisse mit denen aus anderen Methoden vergleichbar macht. Danach wenden wir uns in Kapitel 3 ausführlich der Gittereichtheorie zu. Wir diskutieren alle relevanten Konzepte und statistischen Methoden, die wir zur numerischen Berechnung der Korrelationsfunktion benötigen. In Kapitel 4 gehen wir dann im Detail auf die konkrete Umsetzung der Gittersimulation in der Praxis ein. In Kapitel 5 untersuchen wir die durch die Art der Rechnung unweigerlich auftretenden Artefakte und diskutieren die Ergebnisse der Gitterrechnung. In Kapitel 6 geben wir einen kurzen Ausblick darauf, welche Verbesserungsmöglichkeiten dieser Rechnung bestehen und welche Berechnungen sich an diese Arbeit anschließen lassen.

2 Hadronische Korrelationen

Nach dem heutigen Wissen ist die Quantenchromodynamik (QCD) die richtige Theorie zur Beschreibung der starken Wechselwirkung. Sie bindet durch einen noch unverstandenen Mechanismus Quarks zu Hadronen zusammen. Die Struktur des Vakuums der QCD und der Hadronen stellt dabei ein unglaublich vielfältiges und äußerst kompliziertes Mehrteilchenproblem dar, daß im Niederenergiesektor nicht perturbativ behandelt werden kann. Es ist wie bei anderen Mehrteilchenproblemen lehrreich, ausgewählte Grundzustandskorrelationsfunktionen quantitativ und qualitativ zu verstehen. Wir betrachten in dieser Arbeit die Korrelationsfunktionen lokaler, hadronischer Ströme, die aus den fundamentalen Feldern der QCD zusammengesetzt sind. Im nächsten Abschnitt fassen wir zunächst wichtige Aspekte der QCD kurz zusammen. In Abschnitt 2.2 untersuchen wir die Korrelationsfunktion und definieren die Ströme, für die wir die Korrelationsfunktion numerisch berechnen wollen.

2.1 Grundlagen der QCD

Die Quantenchromodynamik ist wie alle fundamentalen Theorien eine Eichtheorie. Ihr liegt eine nichtabelsche Eichgruppe, die $SU(3)_c$ Symmetriegruppe ("Colour"), zugrunde. Solche derart nichtabelschen Eichtheorien wurden erstmals von Yang und Mills im Rahmen eines $SU(2)$ Isospinmodells untersucht [YM54], weshalb sie nun auch "Yang-Mills" Theorien genannt werden. Die $SU(3)$ wurde 1961 von Gell-Mann und Ne'eman in die Theorie der Hadronen eingeführt [GMN64], jedoch als globale Symmetrie ("Flavour") der drei leichtesten Quarks ("up", "down", "strange"). Mit der experimentellen Bestätigung dieser näherungsweise geltenden $SU(3)_f$ Flavour-Symmetrie setzte sich mehr und mehr die Erkenntnis durch, daß Hadronen tatsächlich aus fundamentalen Partonen (Quarks) aufgebaut sind, und diese nicht nur ein mathematischer Kunstgriff sind, obwohl sie selbst experimentell nicht isoliert werden konnten ("Confinement", siehe 2.1.2). 1972 ging dann aus dem statischen Quarkmodell die QCD hervor, als Fritzsche und Gell-Mann die lokale $SU(3)_c$ Farbsymmetrie einführen [FGM72]. Mit der Entdeckung der asymptotischen Freiheit (siehe 2.1.3) 1973 durch Politzer, Gross und Wilczek wurde die QCD zur aussichtsreichsten Theorie der starken Wechselwirkung [Pol73], [GW73]. Unter den experimentellen Fakten, die die $SU(3)_c$ als die richtige Symmetrie bestätigen, sind besonders das R-Verhältnis in e^+e^- -Kollisionen¹ und die Lebensdauer des Pions hervorzuheben ([CL84], Kap. 6

¹Das R-Verhältnis ist definiert als $R = \sigma(e^+e^- \rightarrow \text{Hadronen}) / (4\pi\alpha^2/3s) = N_c \sum_{i=1}^{N_f} Q_i^2$ wobei $\alpha = e^2/4\pi$, N_c die Anzahl der Farbfreiheitsgrade, N_f die Anzahl der Flavours, Q_i die Ladung des i . Flavours und \sqrt{s} die Gesamtenergie im Schwerpunktsystem bezeichnen. Durch Vergleich dieses Verhältnisses mit experimentellen Daten kann man $N_c = 3$ bestätigen ([Mut98], Kap. 1

und 7). Inzwischen hat sich das Bild weiter vervollständigt; die Vorhersagen der QCD sind in zahlreichen Experimenten bestätigt. Das gilt insbesondere für die Tests der perturbativen QCD in tief-inelastischen Elektron-Nukleon-Streuungen. Eine ausführliche Darstellung der QCD findet man z.B. in [Ynd92], [Mut98]. Wir benötigen für diese Arbeit vor allem die Lagrangedichte der QCD.

2.1.1 Lagrangedichte

Die fundamentalen Felder der QCD sind die acht Spin-1-Eichfelder als Repräsentanten der gluonischen Freiheitsgrade und die Spin- $\frac{1}{2}$ -Materiefelder als Repräsentanten der Quarkfreiheitsgrade, von denen bisher sechs Flavours bekannt sind. Die Quarkfelder ψ_i ($i = 1 \dots 6$) transformieren sich unter $SU(3)_c$ Transformationen gemäß der fundamentalen Darstellung, die Gluonenfelder A_μ^a ($a = 1 \dots 8$) gemäß der adjungierten Darstellung. Die Lagrangedichte ist (analog zur QED) durch

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}}^0 = \frac{1}{2g_0^2} \text{Sp} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \sum_j \bar{\psi}_j (i\gamma_\mu D^\mu - M_{0j}) \psi_j \quad (2.1)$$

gegeben, wobei die Summe sich im Prinzip über beliebig viele Flavours erstrecken kann (oft 1, 3 oder 6). Die kovariante Ableitung

$$D_\mu \psi(x)_i = (\partial_\mu + A_\mu(x)) \psi(x)_i \quad (2.2)$$

stellt den Paralleltransport der Farbinformation sicher, wobei $A_\mu(x) = ig_0 A_\mu^a(x) \tau^a$ das Eichfeld ist. γ_μ sind die Dirac-Gammamatrizen, die mit der Minkowski Metrik $g_{\mu\nu}$ die Gleichung

$$[\gamma_\mu, \gamma_\nu]_+ = 2g_{\mu\nu}$$

erfüllen. $\frac{\lambda^a}{2} \equiv \tau^a$ sind die acht Generatoren der $SU(3)$ in der fundamentalen Darstellung. Sie sind wie alle Generatoren der $SU(N)$ hermitesch und spurlos und erzeugen mit den Strukturkonstanten f^{abc} die Algebra

$$[\tau^a, \tau^b]_- = if^{abc} \tau^c.$$

Die Komponenten des Feldstärketensors $F_{\mu\nu}(x) = [D_\mu, D_\nu]_- = ig_0 F_{\mu\nu}^a \tau^a$ sind durch

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g_0 f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c \quad (2.3)$$

gegeben. g_0 ist eine dimensionslose (Kopplungs-) Konstante. M_{0i} sind die Quarkmassen. In der Natur gilt $M_{0i} \neq 0$. Es wird aber oft (zumindest für die leichten Quarks) der theoretisch interessante chirale Limes $M_{0i} \rightarrow 0$ betrachtet [Koc97]. Man erwartet in diesem Limes, daß die Dynamik der QCD eine spontane Brechung der chiralen Symmetrie hervorruft. Die Lagrangedichte $\mathcal{L}_{\text{QCD}}^0$ ist invariant unter lokalen Eichtransformationen der Form

$$G(x) = \exp(i\theta^a(x) \tau^a), \quad (2.4)$$

und Referenzen darin).

da sich die Felder gemäß

$$\begin{aligned}\psi_i(x) &\rightarrow G(x) \psi_i(x) \\ \bar{\psi}_i(x) &\rightarrow \bar{\psi}_i(x) G^{-1}(x) \\ A_\mu(x) &\rightarrow (\partial_\mu G^{-1}(x)) G(x) + G(x) A_\mu(x) G^{-1}(x)\end{aligned}\tag{2.5}$$

transformieren. Zur kanonischen Quantisierung einer Eichtheorie ist eine Eichfixierung nötig, die zusätzliche Terme in der Lagrangedichte erfordert. Die vollständige Lagrangedichte ist

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = \mathcal{L}_{\text{QCD}}^0 + \mathcal{L}_{\text{g.f.}} + \mathcal{L}_{\text{ghost}}.\tag{2.6}$$

Dabei fixiert $\mathcal{L}_{\text{g.f.}}$ die Eichung ("gauge fixing") und $\mathcal{L}_{\text{ghost}}$ beschreibt für den Fall von kovarianten Eichungen die zur Wahrung der Unitarität nötigen Fadev-Popov Geistfelder ([Mut98], Kap. 2 und [Ryd97], Kap. 7).

2.1.2 Confinement

Als "Confinement" bezeichnet man die Tatsache, daß als freie Teilchen nur $SU(3)_c$ Farbsingulets auftreten. Teilchen mit Farbladung (z.B. Quarks oder Gluonen) können nicht als freie Teilchen beobachtet werden. Alle physikalischen Zustände sind also Bindungszustände von Quarks, nämlich Mesonen ($q\bar{q}$) oder Baryonen (qqq)². Absolutes Confinement würde bedeuten, daß die Farbfreiheitsgrade prinzipiell unbeobachtbar wären. Damit wären die fundamentalen Felder der QCD letztlich keine empirisch zugänglichen Größen. Möglicherweise gibt es aber einen Phasenübergang der QCD, der bei hohen Temperaturen freie Quarks zuläßt. Viele der mit dieser einzigartigen Situation der QCD zusammenhängenden Fragen sind sowohl theoretisch als auch experimentell noch offen. Bis heute ist es nicht gelungen, das Confinement aus der QCD herzuleiten. Überhaupt ist bisher in keiner 3 + 1-dimensionalen Feldtheorie Confinement bewiesen worden. In niedrigeren Dimensionen gibt es allerdings Theorien, die Confinement aufweisen, z.B. 1 + 1-dimensionale Quantenelektrodynamik. Der Confinement Mechanismus in der QCD ist aber möglicherweise ein völlig anderer als in diesen Fällen. Die Selbstkopplung der Gluonen und die daraus resultierende Impulsabhängigkeit der Kopplungskonstante legen aber nahe, daß die Dynamik der QCD Confinement hervorruft.

2.1.3 Renormierung

Wir wollen kurz auf das Verhalten der Kopplungskonstante in der QCD eingehen. Um die renormierte Kopplungskonstante einer Quantenfeldtheorie zu definieren, muß man Werte für die äußeren Impulse vorgeben, bei denen der Wert der entsprechenden n-Punkt-Funktion (Greensfunktion) festgelegt wird. Im einfachsten Fall (etwa in einer massiven ϕ^4 Theorie) wählt man hierfür verschwindende äußere Impulse oder einen symmetrischen Punkt ($s = t = u$) auf der Massenschale ([Ryd97],

²Es sind auch Farbsingulettzustände aus mehr Quarks denkbar, etwa $qq\bar{q}\bar{q}$ oder $qqqqqq$. Auch Gluebälle, rein gluonische Bindungszustände, sind möglich. Solche Teilchen konnten bisher experimentell nicht nachgewiesen werden, im Falle der Gluebälle gibt es aber Kandidaten.

Kap. 9.3). Dies ist aber keine gute Wahl, wenn es in der Theorie masselose Teilchen und damit an diesen Punkten Singularitäten in den Propagatoren gibt. Daher definiert man die Kopplungskonstante in der QCD an einem Renormierungspunkt mit $q^2 = -\mu^2$ im euklidischen Bereich, wo keine Singularitäten liegen. Der Massenparameter μ ist dabei beliebig. Die Kopplungskonstante g ist allgemein eine Funktion der in der Lagrangedichte auftretenden Kopplung g_0 und des Verhältnisses μ/λ , wobei λ den Cutoff bezeichnet, durch den die Theorie regularisiert ist. Die physikalischen Amplituden müssen von der Wahl des Punktes μ unabhängig sein. Dies bedingt eine Abhängigkeit der Kopplung g von μ , die durch die sogenannte Betafunktion gegeben wird

$$\mu \frac{\partial g}{\partial \mu} = \beta(g) . \quad (2.7)$$

In der Ein-Schleifen-Approximation ("Loop") hat die Entwicklung für β die Form

$$\beta(g) = - \left(11 - \frac{2}{3}n_f \right) \frac{g^3}{16\pi^2} + O(g^5) \quad (2.8)$$

([Ryd97], Kap. 9). In der Natur ist die Anzahl der Flavours $n_f = 6 \leq 16$, damit ist β für kleine Kopplung g negativ. Das bedeutet nach (2.7), daß mit wachsendem Impulsübertrag die Kopplung abnimmt. Integriert man (2.7) mit (2.8) auf, so findet man für die Impulsabhängigkeit der Kopplung

$$\alpha(q^2) \equiv \frac{g^2(q^2)}{4\pi} = \frac{4\pi}{\left(11 - \frac{2}{3}n_f\right) \ln\left(-\frac{q^2}{\Lambda_{\text{QCD}}^2}\right)} . \quad (2.9)$$

Die Konstante Λ_{QCD} ist per Definition nicht impulsabhängig. Sie ist ein wichtiger Parameter der QCD, da durch sie die Skala bestimmt ist. Das Verhalten der Kopplung wird nach (2.9) für große raumartige q^2 , also tief im euklidischen Bereich, beschrieben. Dort wird die Kopplung klein, und die QCD ist asymptotisch frei. Für kleine $Q^2 = -q^2 > 0$ dagegen wird die Kopplung gemäß (2.9) groß. Dies bedeutet aber gleichzeitig, daß diese Formel, die (in zweiter Ordnung) störungstheoretisch hergeleitet wurde, hier nicht mehr gilt. Die Kopplungskonstante kann also nur im Bereich großer Q^2 aus der perturbativen β -Funktion (2.8) berechnet werden. Für kleine Q^2 deutet vieles aber auf eine große Kopplung hin. Das genaue Verhalten ist aber hier wie auch im Bereich zeitartiger q^2 nicht bekannt.

Niederenergieverhalten

Eine Reihe von phänomenologischen Modellen beschreibt recht gut das Niederenergieverhalten der starken Wechselwirkung. Darunter sind verschiedene Potentialmodelle, sowohl in Schrödinger-Form als auch mit relativistischen Erweiterungen. In diesen Modellen wird das Quark-Antiquark-Potential meist mit $V(r) = Ar - B/r$ angesetzt. Aus String-Modellen, in denen das Farbfeld zwischen Quark und Antiquark durch eine schmale Flußröhre repräsentiert wird, resultiert ebenfalls ein für große Abstände linear ansteigendes Potential. Solche Potentiale simulieren natürlich Confinement, denn die Trennung von Quark und Antiquark in einem derartigen Potential erfordert unendlich viel Energie (siehe auch Abschnitt 3.3.2). Ambitionierter sind Versuche, die Niederenergiephänomene direkt aus der QCD herzuleiten.

Ein Ansatz ist zum Beispiel die $1/N_c$ -Entwicklung, in der man die Eichgruppe der QCD $SU(3)_c$ durch $SU(N_c)_c$ ersetzt und um den (nichttrivialen) Limes $N_c \rightarrow \infty$ in $1/N_c$ entwickelt. Ein neuerer Ansatz dagegen versucht, Confinement und spontane chirale Symmetriebrechung aus den Dyson-Schwinger-Gleichungen abzuleiten. Ein völlig anderer (numerischer) Ansatz ist die Gittereichtheorie. Durch Diskretisierung der Raum-Zeit macht man die QCD einer Monte-Carlo-Simulation zugänglich, so daß man im Prinzip jede Observable direkt aus der QCD berechnen kann (siehe Abschnitt 3). Mit dieser Methode wollen wir in dieser Arbeit die Korrelationsfunktionen hadronischer Ströme berechnen, die uns Einblick in die Welt der Hadronen geben werden.

2.2 Hadronische Korrelationsfunktionen

Es ist nach dem letzten Abschnitt klar, daß das Verständnis des Niederenergiebereichs der QCD, des Vakuums und der Bildung gebundener Zustände, ein zentrales Problem beim Verständnis der starken Wechselwirkung darstellt. In diesem Bereich wechselwirken Quarks und Gluonen nichtperturbativ miteinander, so daß Störungsmethoden versagen. Hadronische Korrelationsfunktionen sind aus den fundamentalen Feldern der QCD zusammengesetzt und stellen ein geeignetes Werkzeug dar, die Struktur der Hadronen zu untersuchen. Verschiedenste Vorgehensweisen bei der Analyse der Korrelationsfunktion werden durch sie vergleichbar. Sie sind durch Gittereichtheorie, QCD Summenregeln aus Operatorproduktentwicklung, wechselwirkende Instantonapproximations- und Quarkpotentialmodelle berechenbar, wie wir weiter unten knapp erläutern (siehe auch [CGHN93b] und Referenzen darin). Zudem kann man sie in einigen Kanälen phänomenologisch über Dispersionsbeziehungen zu experimentellen $e^+e^- \rightarrow$ Hadronen und τ -Zerfallsdaten in Beziehung setzen ([Shu93] und Referenzen darin).

In dieser Arbeit beschränken wir uns auf raumartige Punkt-zu-Punkt Korrelationsfunktionen, deren physikalische Relevanz ausgiebig in [Shu93] beleuchtet wird. Wir definieren dazu die Korrelationsfunktion $R(x)$ eines generischen Stroms $\hat{J}(x)$ als den Vakuumerwartungswert des zeitgeordneten Produkts

$$R(x) \equiv R(\vec{x}, t) = \langle 0 | T \left\{ \hat{J}(\vec{x}, t) \hat{J}(0) \right\} | 0 \rangle \quad \text{mit } x \text{ raumartig,} \quad (2.10)$$

wobei wir wegen der Translationsinvarianz des Vakuums $x' = 0$ als Referenz gewählt haben. Zur Vereinfachung werden wir meist annehmen, daß x total raumartig ist, so daß die Ströme in (2.10) zu gleichen Zeiten ($t = 0$) genommen sind. Physikalisch beschreibt $R(x)$ die virtuelle Propagation von Quarks oder Hadronen. Dabei ist $\hat{J}(x)$ als lokaler Operator für Mesonen von der Form

$$\hat{J}^{\text{Mes}}(x) = \hat{\psi}_\alpha^a(x) \hat{\psi}_\beta^b(x) \Gamma_{\alpha\beta} \delta_{ab} \quad (2.11)$$

und für Baryonen von der Form

$$\hat{J}^{\text{Bar}}(x) = \hat{\psi}_\alpha^a(x) \hat{\psi}_\beta^b(x) \hat{\psi}_\gamma^c(x) \chi_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{abc}, \quad (2.12)$$

wobei $\hat{J}(x)$ wegen der impliziten Summation über doppelt vorkommende Indizes in beiden Fällen farbneutral ist und daher auch farbneutrale Zustände erzeugt. Daher und wegen der Lokalität von $\hat{J}(x)$ sind diese Operatoren manifest eichinvariant. Γ ist eine Kombination der Diracmatrizen für den Mesonenstrom, χ ist eine kompakte Schreibweise für die Spin- und Diracstruktur des Baryonenstroms. Wir werden später Γ und χ (und im Prinzip auch den Flavour) der Felder so wählen, daß die Ströme bestimmte (Transformations-) Eigenschaften haben (siehe Tab. 2.1). Im Prinzip kann $\hat{J}(x)$ daher auch einen (resultierenden) Diracindex besitzen, den wir aber in (2.11) bzw. (2.12) nicht explizit angeben. Da aus praktischen Gründen $R(x)$ eine richtungsunabhängige skalare Größe sein soll, werden wir die beiden Ströme in (2.10) kontrahieren bzw. über alle Spinprojektionen mitteln. Die zwei Argumente der Ströme, x und 0 , in (2.10) kann man auf zwei Weisen interpretieren. Entweder es sind zwei räumlich getrennte Punkte im Raum, oder es sind zwei Ereignisse, die durch $\tau = ix_0$ in euklidischer Raumzeit getrennt sind.

Qualitative Untersuchung der Korrelationsfunktion

Wir wollen nun das Verhalten von $R(x)$ für verschiedene Abstände x qualitativ untersuchen und verschiedene Methoden zur Berechnung angeben.

- Bei sehr kleinen Distanzen x sind Quarks und Gluonen wegen der asymptotischen Freiheit (2.9) der QCD quasi frei und interagieren kaum. Man erhält für $R(x)$ mit Hilfe des Wick Theorems (A.18) im Fall von Mesonen- bzw. Baryonkorrelationen die zweite bzw. dritte Potenz des freien Propagators (3.11).
- Bei etwas größeren Distanzen x erlaubt man den Quarks, sich etwas weiter voneinander zu entfernen. Sie beginnen dadurch, mit dem Vakuum zu interagieren. Solange die erforderlichen Korrekturen zum freien Fall nicht zu groß sind, kann man diesen Effekten Rechnung tragen, indem man den Operatorproduktentwicklungsformalismus ("operator expansion", OPE) benutzt (siehe z.B. [Mut98], Kap. 4).
- Bei mittleren Entfernungen x wird die Wechselwirkung mit dem Vakuum kompliziert, und man benutzt entweder numerische Methoden in Form von Gittersimulationen oder Vakuummodelle (wie z.B. das Instantonenflüssigkeitsmodell [Shu88], Kap. 3) zur Berechnung von $R(x)$.
- Bei großen Abständen x betrachtet man nicht mehr die fundamentalen Felder, sondern benutzt die formale Zeitentwicklung für Heisenbergoperatoren in euklidischer Zeit $\hat{J}(\tau) = \exp(\hat{H}\tau) \hat{J}(0) \exp(-\hat{H}\tau)$, indem man einen vollständigen Satz von physikalischen Zuständen $|n\rangle$ einsetzt, die der Strom \hat{J} aus dem Vakuum erzeugen kann. In diesem Fall stellt

$$R(\tau) = \sum_n \left| \langle 0 | \hat{J}(0) | n \rangle \right|^2 \exp(-E_n \tau)$$

eine Summe über exponentiell gewichtete hadronische Zustände dar.

Es ist nun klar, warum die Korrelationsfunktion $R(x)$ interessant ist für das Verständnis nichtperturbativer QCD und hadronischer Physik. Dieselbe Funktion kann

2 Hadronische Korrelationen

Kanal	Strom	Korrelation $R(x)$
Skalar	$\hat{J}^S = \hat{u} \hat{d}$	$\langle 0 T \left\{ \hat{J}^S(x) \hat{J}^S(0) \right\} 0 \rangle$
Pseudo-Skalar	$\hat{J}^{PS} = \hat{u} \gamma_5 \hat{d}$	$\langle 0 T \left\{ \hat{J}^{PS}(x) \hat{J}^{PS}(0) \right\} 0 \rangle$
Vektor	$\hat{J}_\mu^V = \hat{u} \gamma_\mu \hat{d}$	$\langle 0 T \left\{ \hat{J}_\mu^V(x) \hat{J}^{V\mu}(0) \right\} 0 \rangle$
Pseudo-Vektor	$\hat{J}_\mu^{PV} = \hat{u} \gamma_\mu \gamma_5 \hat{d}$	$\langle 0 T \left\{ \hat{J}_\mu^{PV}(x) \hat{J}^{PV\mu}(0) \right\} 0 \rangle$
Proton	$\hat{J}^P = \epsilon_{ijk} [\hat{u}^{i\dagger} C \gamma_5 \hat{d}^j] \hat{u}^k$	$\frac{1}{4} \text{Sp} \left(\langle 0 T \left\{ \hat{J}^P(x) \bar{\hat{J}}^P(0) \right\} 0 \rangle \gamma_\nu x^\nu \right)$
Delta	$\hat{J}_\mu^\Delta = \epsilon_{ijk} [\hat{u}^{i\dagger} C \gamma_\mu \hat{d}^j] \hat{u}^k$	$\frac{1}{4} \text{Sp} \left(\langle 0 T \left\{ \hat{J}_\mu^\Delta(x) \bar{\hat{J}}^{\Delta\mu}(0) \right\} 0 \rangle \gamma_\nu x^\nu \right)$

Tabelle 2.1: Hadronische Ströme und ihre Korrelationsfunktion

man einerseits in Form von fundamentalen Quark- und Gluonenfeldern und andererseits in Form von hadronischen Zuständen mit ihrer Vielfalt an phänomenologischen Modellen ausdrücken.

Die Ebene-zu-Ebene-Korrelationsfunktion

Es gibt noch eine weitere Korrelationsfunktion, die wir auf dem Gitter berechnen werden. Indem wir für jede Zeitscheibe τ über die räumliche Hyperebene integrieren, erhalten wir in euklidischer Raumzeit aus $R(x)$

$$R_{E2E}(\tau) = \int d^3x R(\vec{x}, \tau) = \sum_n \left| \langle 0 | \hat{J}(0) | n \rangle \right|^2 \exp(-m_n \tau), \quad (2.13)$$

weil wir durch die räumliche Integration auf Zwischenzustände $|n\rangle$ mit Impuls null projizieren. Im Unterschied zu $R(x)$ vermischt $R_{E2E}(\tau)$ verschiedene Distanzen miteinander, so daß verdeckt wird, was bei mittleren räumlichen Abständen physikalisch vorgeht. Allerdings kann man aus ihrem logarithmischen Abfall für große Zeiten τ die Masse des leichtesten Hadrons bestimmen, das in diesem Kanal von $\hat{J}(x)$ erzeugt wird (siehe auch Abschnitt 3.3.4).

Genaue Angabe der in dieser Arbeit zu berechnenden Ströme

Die Ströme $\hat{J}(x)$, für die wir $R(x)$ auf dem Gitter berechnen wollen, sind zusammen mit ihrer Korrelationsfunktion in Tab. 2.1 zusammengestellt. Wir benutzen geladene Mesonen im Isospinkanal $I = 1$, so daß der Mesonenstrom

$$\hat{J}^{\text{Mes}}(x) = \hat{u}_\alpha^a(x) \Gamma_{\alpha\beta} \hat{d}_\beta^a(x), \quad (2.14)$$

aus einem Antiquark-Quark Operator mit verschiedenem Flavour besteht. Er generiert farbneutrale Zustände, weil die Farbe des Antiquarks die des Quarks kompensiert. Γ ist eine Kombination der 16 Diracmatrizen und koppelt die Spins der beiden Quarkfelder. Die Beschränkung auf $I = 1$ durch geladene Mesonen ist rein technischer Natur. Wie wir unten bei Gleichung (2.19) sehen werden, vermeiden wir dadurch eine zusätzliche Kontraktion zweier Operatoren am gleichen Punkt. Die Ströme sind benannt nach ihrem Transformationsverhalten unter Lorentztransformationen. Der pseudo-skalare Strom generiert Zustände mit den Quantenzahlen

eines Pions (π^+), der Vektorstrom Zustände mit den Quantenzahlen eines Rho-Mesons (ρ^+) [D⁺92]. Den Vektor- und Axialvektorstrom kontrahieren wir, um eine skalare Korrelationsfunktion zu erhalten. Ein Baryonenstrom mit den Quantenzahlen eines Protons ist durch

$$\hat{J}_\alpha^P = \epsilon_{ijk} [\hat{u}_\beta^{i\dagger} (C\gamma_5)_{\beta\gamma} \hat{d}_\gamma^j] \hat{u}_\alpha^k \quad (2.15)$$

gegeben und einer mit den Quantenzahlen eines Deltas (Δ^+) durch

$$\hat{J}_\alpha^P = \epsilon_{ijk} [\hat{u}_\beta^{i\dagger} (C\gamma_5)_{\beta\gamma} \hat{d}_\gamma^j] \hat{u}_\alpha^k, \quad (2.16)$$

wobei C den Ladungskonjugationsoperator bezeichnet [B⁺89]. In beiden Fällen besteht der Baryonenstrom aus drei Quarkfeldern, die komplett antisymmetrisch gekoppelt sind, so daß er farbneutrale Zustände erzeugt. Zwei Felder koppeln über γ_5 zu Spin 0, so daß das Baryon insgesamt Spin 1/2 trägt. Die Quarkmassen der beiden Flavours unterscheiden sich in der Natur kaum. Wir werden diesen Unterschied ignorieren, da wir auf dem Gitter ohnehin nur eine Sorte Quarks benutzen werden, so daß $M_u = M_d = M_0$ gilt³. Der eigentliche Korrelator für Baryonen (vom "Typ A" gemäß (2.10))

$$R_A^{\text{Bar}}(x) = \text{Sp } R^{\text{Bar}}(x) = \langle 0 | \text{T} \left\{ \hat{J}_\alpha(x) \bar{\hat{J}}_\alpha(0) \right\} | 0 \rangle \quad (2.17)$$

verschwindet im Limes $M_0 \rightarrow 0$ und wechselt im wechselwirkungsfreien Fall gelegentlich das Vorzeichen. Deshalb berechnen wir den Korrelator (vom "Typ B") gemäß

$$R_B^{\text{Bar}}(x) = \text{Sp} (R_A^{\text{Bar}}(x) \gamma_\nu x^\nu) = \langle 0 | \text{T} \left\{ \hat{J}_\alpha(x) \bar{\hat{J}}_\beta(0) \right\} | 0 \rangle (\gamma_\nu x^\nu)_{\beta\alpha}, \quad (2.18)$$

weil dadurch auf die Komponente des Spins projiziert wird, die im Limes $M_0 \rightarrow 0$ stabil ist [CGHN93b].

2.2.1 Berechnung im Ortsraum

Die Wirkung S_{QCD}^0 aus der Lagrangedichte (2.1) (in Minkowski oder euklidischer Raumzeit) ist wie (A.15) von der Form $S_{\text{QCD}}^0 = S_G(A) + \bar{\psi} M(A) \psi$. Da wir uns auf total raumartige Abstände x beschränken wollen, ist $R(x)$ in beiden Räumen gleich. Wir berechnen $R(x)$ mit Blick auf die bevorstehende Gitterrechnung in euklidischer

³Wie wir sehen werden, ist der Grund, daß die Quarkmassen auf dem Gitter erheblich größer sind als in der Natur, so daß der relative Unterschied vernachlässigbar ist.

Raumzeit⁴ und erhalten unter Benutzung von (A.18) für den Mesonenstrom (2.11)

$$\begin{aligned}
 R^{\text{Mes}}(x) &= \frac{1}{Z} \int DA D\bar{\psi} D\psi \bar{\psi}_\alpha^a(x) \Gamma_{\alpha\beta} \psi_\beta^a(x) \bar{\psi}_\gamma^b(0) \Gamma_{\gamma\delta} \psi_\delta^b(0) \\
 &\quad \times \exp(-S_G(A) - \bar{\psi}M(A)\psi) \\
 &= \frac{1}{Z} \int DA (M^{-1})_{\beta\gamma}^{ab}(x, 0) \Gamma_{\gamma\delta} (M^{-1})_{\delta\alpha}^{ba}(0, x) \Gamma_{\alpha\beta} \\
 &\quad \times \exp(-S_G(A) - \ln \det M) \\
 &= \langle \Omega | \text{Sp} \{ M^{-1}(x, 0) \Gamma M^{-1}(0, x) \Gamma \} | \Omega \rangle, \tag{2.19}
 \end{aligned}$$

wobei wir in der letzten Zeile den Erwartungswert bezüglich der effektiven Wirkung $S_{\text{eff}} = S_G - \ln \det M$ mit $\langle \Omega | \dots | \Omega \rangle$ notieren. Da wir uns auf diagonale Korrelatoren beschränkt haben, gibt es keine Austauschsterme und (2.19) besteht aus der einzig möglichen Weise, die Kontraktion durchzuführen. Für den Baryonenstrom (2.12) gehen wir genauso vor und erhalten analog

$$\begin{aligned}
 R_A^{\text{Bar}}(x) &= \frac{1}{Z} \int DA D\bar{\psi} D\psi \psi_\alpha^a(x) \psi_\beta^b(x) \psi_\gamma^c(x) \chi_{\alpha\beta\gamma} \epsilon_{abc} \bar{\psi}_\delta^d(0) \bar{\psi}_\epsilon^e(0) \bar{\psi}_\iota^f(0) \chi_{\delta\epsilon\iota} \epsilon_{def} \\
 &\quad \times \exp(-S_G(A) - \bar{\psi}M(A)\psi) \\
 &= \frac{1}{Z} \int DA (M^{-1})_{\alpha\delta}^{ad}(x, 0) (M^{-1})_{\beta\epsilon}^{be}(0, x) (M^{-1})_{\gamma\iota}^{cf}(0, x) \chi_{\alpha\beta\gamma} \chi_{\delta\epsilon\iota} \epsilon_{abc} \epsilon_{def} \\
 &\quad \times \exp(-S_G(A) - \ln \det M) \\
 &= \langle \Omega | (M^{-1})_{\alpha\delta}^{ad}(x, 0) (M^{-1})_{\beta\epsilon}^{be}(0, x) (M^{-1})_{\gamma\iota}^{cf}(0, x) \chi_{\alpha\beta\gamma} \chi_{\delta\epsilon\iota} \epsilon_{abc} \epsilon_{def} | \Omega \rangle. \tag{2.20}
 \end{aligned}$$

Im Fall der gewählten Baryonenströme (siehe Tab. 2.1) haben zwei Quarkfelder gleichen Flavour, so daß (2.20) noch durch den entsprechenden Austauschsterm der beiden Quarks ergänzt werden muß. Die beiden Ergebnisse (2.19) und (2.20) sind in dieser Form geeignet, die Korrelation auf dem Gitter numerisch zu berechnen, wie wir in Abschnitt 3.3.3 sehen werden.

Wechselwirkungsfreier Fall

Im wechselwirkungsfreien ($A \equiv 0$) und masselosen ($M_0 \rightarrow 0$) Fall können wir den freien Korrelator $R_0(x)$ explizit berechnen. Im freien Fall reduzieren sich unsere Ergebnisse (2.19) und (2.20) auf die Berechnung des Ausdrucks innerhalb $\langle \Omega | \dots | \Omega \rangle$ mit Hilfe des freien Propagators $M^{-1}(A \equiv 0)$. Dazu benutzen wir den Propagator (3.9) im Ortsraum

$$\langle 0 | \text{T} \left\{ \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(0) \right\} | 0 \rangle = \frac{i}{2\pi} \frac{\gamma_\mu x^\mu}{x^4} \tag{2.21}$$

für $M_0 = 0$ (siehe z.B. [GR95], Kap. Aufgabe 2.5), dessen Proportionalität zu x^{-3} schon aus dimensionalen Gründen klar ist. Demnach verhält sich die freie Mesonenkorrelation wie

$$R_0^{\text{Mes}}(x) \sim x^{-6} \tag{2.22}$$

⁴Die genaue Form der Wirkung im Euklidischen ist am Anfang von Kapitel 3.1 hergeleitet. Wir benötigen hier nur, daß die Wirkung quadratisch in den Grassmann-Variablen ist. Strenggenommen ändert sich dabei auch die Darstellung der Gammamatrizen, was wir hier nicht explizit notieren werden (siehe (3.2)).

und die freie Baryonenkorrelation vom Typ B wie

$$R_0^{\text{Bar}}(x) \sim x^{-8}. \quad (2.23)$$

2.2.2 Modellierung über die spektrale Dichte

Wir wollen im Wechselwirkungsfall ein Verhalten von $R(x)$ vorhersagen bzw. modellieren. Für eine lokale Feldtheorie kann man $R(x)$ im Impulsraum durch

$$R(q) = \int d^4x R(x) \exp(iqx) = K(q) \left(\int ds \frac{f(s)}{q^2 - s + i\epsilon} + P(q^2) \right) \quad (2.24)$$

bis auf ein Vorzeichen eindeutig ausdrücken (siehe z.B. [GR93], Kap. 9.2). Dabei ist $f(s)$ die spektrale Dichte. Sie beschreibt das Quadrat der Matrixelemente von $\hat{J}(0)$ zwischen dem Vakuum und allen hadronischen Zuständen der invarianten Masse $s^{\frac{1}{2}}$ und ist nur für positive s ungleich null. Der Impulsübertrag q zwischen den beiden Strömen ist raumartig, da wir uns in der Definition von $R(x)$ auf virtuelle Prozesse beschränkt haben (x ist raumartig). Somit ist $q^2 < 0$, und wir können $i\epsilon$ im Nenner ignorieren. $K(q)$ ist ein kinematischer Faktor, der nur von den Quantenzahlen des Stroms und der Kontraktion der Lorentzindizes (implizit in der Definition von (2.10)) abhängt. Für den skalaren und pseudo-skalaren Fall ist $K(q) = 1$, für den Vektor- und Axialvektor $K(q) = 3q^2$ und für die Baryonen $K(q) = -iq_\mu \gamma^\mu$. $P(q^2)$ ist ein Polynom endlichen Grades in q^2 und beschreibt im Ortsraum Kontaktterme proportional zu $\delta(x)$ und ihren Ableitungen. Für $x = 0$ ist unsere Korrelationsfunktion $R(x)$ als Produkt von zusammengesetzten Feldoperatoren an demselben Ort nach der Definition (2.10) ohnehin divergent, was durch $P(q^2)$ zum Ausdruck kommt. Wir können demnach im folgenden $P(q^2)$ ignorieren, da wir $R(x)$ nur für $x > 0$ betrachten wollen.

Modell für die Spektraldichte

Phänomenologisch erwarten wir, daß die Spektraldichte $f(s)$ zwei Hauptbeiträge hat: eine Resonanzstelle durch einen gebundenen Zustand und ab einer Schwelle einen Kontinuumsbeitrag (in dem im Prinzip weitere Resonanzstellen sein können). Wir parametrisieren unsere Erwartung durch

$$f(s) = \Lambda^2 \delta(s - M^2) + f_k(s) \theta(s - s_0), \quad (2.25)$$

wobei M die Masse des gebundenen Zustands, Λ die Kopplung des Stroms an diesen Zustand und s_0 die Schwelle zum Kontinuum darstellt, das durch $f_k(s)$ parametrisiert ist. In dieser Form wird eine scharfe isolierte Resonanz als Polstelle und breite überlappende Resonanzen als Kontinuum dargestellt (siehe Abb. 2.1). Die funktionale Form $f_k(s)$ ist im Wechselwirkungsfall mit Sicherheit sehr kompliziert. Für große s erwarten wegen der asymptotischen Freiheit der Theorie, daß $f_k(s)$ sich der freien Dichte $f_0(s)$ annähert. Für etwas kleinere s kann man $f_0(s)$ mit Hilfe von perturbativen Aussagen korrigieren. Doch da die Schwelle $\sqrt{s_0}$ ungefähr bei 1.5 – 2.0 GeV liegt, gibt es keine analytische Methode, die alle Details an der Schwelle zum Kontinuum beschreiben kann. Deswegen werden wir $f_k(s)$ überall im Kontinuumsbereich (und nicht nur für große s) durch die funktionale Form der freien Dichte $f_0(s)$

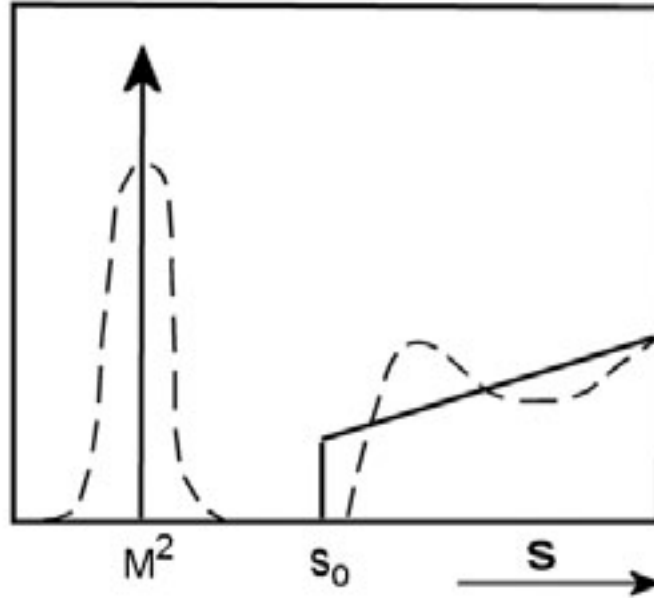


Abbildung 2.1: Typische Spektraldichte als Funktion des Quadrats der invarianten Masse. Man sieht die isolierte Resonanz und weitere überlappende Resonanzen, die mit dem Kontinuum verschmelzen. Die isolierte Resonanz ist durch eine Deltafunktion an der Stelle M^2 mit der Stärke Λ^2 und das Kontinuum ab der Schwelle s_0 durch die freie Dichte $f_0(s)$ (proportional zu s in diesem Fall) parametrisiert.

beschreiben und dafür die Schwelle s_0 als phänomenologischen Parameter betrachten, der so gewählt wird, daß das Integral in beiden Fällen gleich groß ist. Es ist klar, daß s_0 damit nicht mehr dem Wert der Schwelle zum ersten angeregten Zustand entspricht. Im freien masselosen Fall berechnet sich die Spektraldichte $f_0(s)$ aus dem Imaginärteil der Ein-Fermionenschleife für Mesonen bzw. Zwei-Fermionenschleife für die Baryonen. Aus Dimensionsgründen muß im skalaren und pseudo-skalaren Fall $f_0(s) \sim s$, für den Vektor- bzw. Axialvektorstrom $f_0(s) = \text{const}$ und für die Baryonen $f_0(s) \sim s^2$ gelten.

Berechnung der Fouriertransformation

Mit dem Ansatz von $f_k(s) = f_0(s)$ in (2.25) sind wir in der Lage, mit einer inversen Fouriertransformation aus (2.24)

$$R(x) = \frac{i}{(2\pi)^4} \int d^4q \exp(-iqx) \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 3q^2 \\ -i\gamma_\mu q^\mu \end{array} \right\} \left(\frac{\Lambda^2}{q^2 - M^2} + \int_{s_0}^{\infty} ds \frac{c^2}{q^2 - s} \left\{ \begin{array}{c} s \\ 1 \\ s^2 \end{array} \right\} \right) \quad (2.26)$$

zu berechnen, wobei c eine für jeden Kanal berechenbare Konstante darstellt. In den geschweiften Klammern stehen oben die Formel für den skalaren und pseudo-skalaren Strom, in der Mitte die Formel für den Vektor- und Axialvektorstrom und unten die Formel für den Baryonenstrom. Der Faktor i kommt daher, daß die spektrale Dichte aus dem Imaginärteil von $R(q)$ gebildet wird. Wir benötigen zur

weiteren Berechnung den Wert des Integrals

$$I_a(x) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4q \frac{i}{q^2 - a^2} \exp(-iqx) = \frac{a}{4\pi x} K_1(ax) \quad (2.27)$$

für x raumartig und einer Konstanten a ([GR93], Kap. 4.6 und Referenzen darin). Damit können wir (2.26) in

$$R(x) = \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ -3 \partial_\mu \partial^\mu \\ \gamma_\mu \partial^\mu \end{array} \right\} \left(\Lambda^2 I_M(x) + c^2 \int_{s_0}^{\infty} ds I_{\sqrt{s}}(x) \left\{ \begin{array}{c} s \\ 1 \\ s^2 \end{array} \right\} \right) \quad (2.28)$$

umschreiben. Nun müssen wir die Ableitungen auf (2.27) berechnen. Wir beginnen mit $\partial^\mu I_a(x)$ und setzen $l = ax$ mit $\partial^\mu = \frac{x^\mu a^2}{l} \frac{d}{dl}$. Damit berechnet sich

$$\partial_\mu I_a(x) = \frac{x^\mu a^4}{4\pi^2} \frac{1}{l} \frac{d}{dl} \frac{K_1(l)}{l}$$

nach [AS72], Gleichung 9.6.28 zu

$$\partial^\mu I_a(x) = -\frac{a^2}{4\pi^2} \frac{x^\mu}{x^2} K_2(ax). \quad (2.29)$$

Mit diesem Ergebnis bestimmen wir die andere Ableitung $\partial_\mu \partial^\mu I_a(x)$ unter Benutzung von $\partial_\mu \frac{x^\mu}{x^2} = \frac{2}{x^2}$ und $\frac{d}{dl} K_2(l) = -K_1(l) - \frac{2}{l} K_2(l)$ [AS72], Gleichung 9.6.26 zu

$$\partial_\mu \partial^\mu I_a(x) = \frac{a^3}{4\pi^2} \frac{1}{x} K_1(ax). \quad (2.30)$$

Die Ergebnisse (2.29) und (2.30) setzen wir in (2.28) ein und erhalten

$$R(x) = \frac{\Lambda^2}{4\pi^2} \left\{ \begin{array}{c} \frac{M}{x} \\ -3 \frac{M^3}{x} \\ \gamma_\mu x^\mu \frac{M^2}{x^2} \end{array} \right\} K \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 2 \end{array} \right\} (Mx) + \frac{c^2}{4\pi^2} \int_{s_0}^{\infty} ds \left\{ \begin{array}{c} \frac{s^{\frac{3}{2}}}{x} \\ -3 \frac{s^{\frac{3}{2}}}{x} \\ \gamma_\mu x^\mu \frac{s^{\frac{3}{2}}}{x^2} \end{array} \right\} K \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 2 \end{array} \right\} (\sqrt{s}x). \quad (2.31)$$

Wir teilen dieses Ergebnis durch die freien Korrelatoren (2.22) bzw. (2.23). Wie oben bei Gleichung (2.17) erläutert, multiplizieren wir die Baryonen in (2.31) mit $\gamma_\nu x^\nu$ und bilden anschließend die Spur. Außerdem ziehen wir möglichst viele Faktoren in die Konstanten und erinnern uns auch daran, daß (2.24) nur bis auf ein Vorzeichen eindeutig definiert ist, so daß wir den Betrag bilden. Wir erhalten somit als wichtiges Ergebnis bis auf eine noch wählbare Normierungskonstante

$$\frac{R(x)}{R_0(x)} = \Lambda^2 \left\{ \begin{array}{c} Mx^5 \\ M^3 x^5 \\ M^2 x^8 \end{array} \right\} K \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 2 \end{array} \right\} (Mx) + \int_{\sqrt{s_0}x}^{\infty} d\alpha \left\{ \begin{array}{c} \alpha^4 \\ \alpha^4 \\ \alpha^7 \end{array} \right\} K \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 2 \end{array} \right\} (\alpha), \quad (2.32)$$

wobei wir im Integral noch $\alpha = \sqrt{s}x$ substituiert haben. In Abb. 2.2 ist das Verhalten von $R(x)/R_0(x)$ für den skalaren Fall dargestellt, der zu Abb. 2.1 paßt. Die

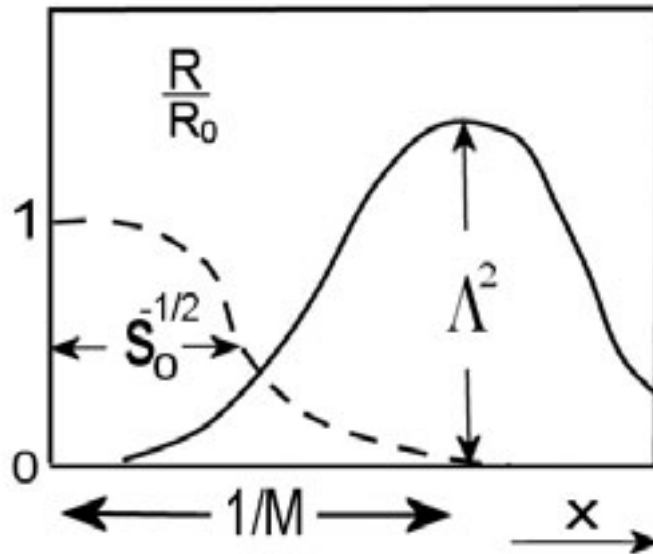


Abbildung 2.2: $R(x)/R_0(x)$ für die parametrisierte Dichte aus Abb. 2.1. Die durchgezogene Linie stellt die Resonanz an der Stelle $1/M$ mit der Höhe proportional zu Λ^2 dar. Die gestrichelte Kurve stellt den Kontinuumsterm mit der Breite proportional zu $1/\sqrt{s_0}$ dar.

durchgezogene Linie an der Stelle $1/M$ mit der Höhe proportional zu Λ^2 stellt die Resonanz aus (2.25) dar, die gestrichelte Kurve den Beitrag des Kontinuums mit der Breite proportional zu $1/\sqrt{s_0}$.

Wir beabsichtigen im folgenden $R(x)/R_0(x)$ numerisch mit den Methoden der Gittereichtheorie durch eine Monte Carlo Simulation berechnen. An das Ergebnis der Berechnung fitten wir dann die Gleichung (2.32), um die Parameter M , Λ und s_0 für das Modell zu erhalten. Dazu machen wir uns zuvor mit den Methoden der Gittereichtheorie vertraut, die wir zur Simulation benötigen werden.

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

Wir wollen in diesem Teil der Arbeit untersuchen, wie man einen Vakuumerwartungswert von der Form (A.18) numerisch berechnet. Dazu werden wir im nächsten Kapitel 3.1 zunächst die Raumzeit diskretisieren, was eine besondere Form der Regularisierung einer Feldtheorie darstellt. Selbst in diskretisierter Form läßt sich die Integration über alle Feldkonfigurationen nicht exakt durchführen, so daß wir im darauffolgenden Kapitel 3.2 Monte Carlo Verfahren erarbeiten, die wir zur näherungsweise Berechnung des Feldintegrals benutzen werden. In Kapitel 3.3 sind wir dann in der Lage, Observablen zu definieren, die wir auf dem Gitter mit der Monte Carlo Methode berechnen können. Im Anschluß erklären wir in Kapitel 3.4, wie wir aus den numerischen Ergebnissen physikalische Ergebnisse produzieren. Da die Methode der Pfadintegralquantisierung die Grundlage für die folgenden Überlegungen darstellt, ist sie im Anhang A für unsere Zwecke dargestellt.

3.1 Diskretisierung der Raumzeit

Nach (A.14) berechnet sich der Vakuumerwartungswert eines Operators \hat{O} in der QCD mittels

$$\langle 0 | \hat{O} | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int DA D\bar{\psi} D\psi O(A, \bar{\psi}, \psi) \exp(-S_{\text{QCD}}^0) \quad (3.1)$$

mit Z gegeben durch (3.1) für $\hat{O} \equiv 1$. A ist reell und repräsentiert das Gluonenfeld A aus (2.1), $\bar{\psi}$ und ψ sind Grassmann-Variablen und repräsentieren die Quarkfelder \bar{q} und q (nur ein Flavour) aus (2.1)¹. S_{QCD}^0 ist die euklidische Wirkung, die man erhält, wenn man $-i \int d^4x \mathcal{L}_{\text{QCD}}^0$ einer Wickrotation $x^0 = -ix_4$ unterzieht (siehe Abschnitt A.2). Dabei gilt $\frac{\partial}{\partial x^0} = i \frac{\partial}{\partial x_4}$ und $A^0 = iA_4$ ². Die Lorentzgruppe wird ersetzt durch die 4-dimensionale Drehgruppe und die Gammamatrizen erfüllen nun

$$[\gamma_\mu^E, \gamma_\nu^E]_+ = \delta_{\mu\nu}. \quad (3.2)$$

Mit der hermiteschen Wahl $\gamma_4^E = \gamma^0$ und $\gamma_i^E = -i\gamma^i$ ergibt sich für S_{QCD}^0

$$S_{\text{QCD}}^0 = \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \bar{\psi} (\gamma_\mu^E D_\mu + M_0) \psi \right\}. \quad (3.3)$$

¹Aus Einfachkeitsgründen lassen wir die Terme, die von der Quantisierung der Theorie stammen, im Pfadintegral weg. Wir werden in Abschnitt 3.1.3 begründen, daß wir für unsere Observablen die Eichung nicht fixieren müssen und somit keine weiteren Terme in der Lagrangedichte benötigen.

²Letzteres sieht man leicht, wenn A eine pure Eichung ist.

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

Wir erinnern uns, daß (3.1) nur symbolisch gemeint ist und wir zur wirklichen Berechnung immer auf den das Pfadintegral definierenden diskreten Ausdruck (siehe Abschnitt A.3) zurückgreifen müssen, um ansonsten unweigerlich auftretende Divergenzen zu vermeiden. Dazu definieren wir ein reguläres 4-dimensionales Gitter mit dem Gitterabstand a und werden unsere Felder nur auf den Gitterpunkten (bzw. dazwischen, wie wir sehen werden) angeben, so daß wir bei endlichem a eine abzählbare Menge von Freiheitsgraden des Systems realisiert haben³. Um dies zu erreichen, wollen wir in Kauf nehmen, im Prinzip jede Symmetrie (insbesondere die Lorentz- bzw. Rotationssymmetrie) verletzen zu dürfen. Einzig die Invarianz der Lagrangedichte unter lokalen Eichtransformationen (2.4) soll wegen ihrer Wichtigkeit im Kontinuum (sie führt in einfacher Weise zur Wechselwirkung) auch auf dem Gitter explizit bei endlichem a erhalten werden. Wir fordern also von der gesuchten Lagrangedichte auf dem Gitter, daß sie lokal eichinvariant ist (ohne zur Zeit die Eichgruppe bzw. Eichtransformation zu kennen). Desweiteren muß die diskretisierte Wirkung die Kontinuumswirkung als Limes $a \rightarrow 0$ haben und aus den auf dem Gitter berechneten Greensfunktionen müssen im Kontinuums-limes die des (euklidischen) Kontinuums werden.

In den nächsten beiden Abschnitten wollen wir die Diskretisierung von (3.3) für die $SU(N)$ sukzessive erarbeiten. Wir beginnen in Abschnitt 3.1.1 zuerst mit freien Fermionen, obwohl wir dabei ein fundamentales Problem bei der Diskretisierung von Fermionen zu umgehen haben. In Abschnitt 3.1.2 wollen wir dann die freie Theorie der Fermionen auf die mit Wechselwirkung erweitern, in dem wir –wie im Kontinuum– Invarianz unter lokalen nichtabelschen Eichtransformationen fordern. Schließlich stellen wir für die QCD ($N = 3$) unsere Ergebnisse in Abschnitt 3.1.3 zusammen.

3.1.1 Fermionen auf dem Gitter

Wir betrachten zunächst den fermionischen Anteil der Wirkung (3.3) ohne Eichbosonen $D_\mu \rightarrow \partial_\mu$

$$S_F = \int d^4x \bar{\psi} (\gamma_\mu^E \partial_\mu + M_0) \psi. \quad (3.4)$$

Die Fermionfelder müssen für das folgende nicht notwendigerweise einen Gruppenindex haben. Ein Punkt auf dem Gitter wird durch vier ganze Zahlen $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$ eindeutig bestimmt. Die Felder ψ und $\bar{\psi}$ sind auf den Gitterpunkten

³In diesem Zusammenhang spricht man von der Regularisierung einer Quantenfeldtheorie. Tatsächlich führen wir durch den Gitterabstand einen Impuls-Cutoff $\sim \pi/a$ ein, der an die Pauli-Villars Regularisierung erinnert.

na definiert. Den Übergang vom Kontinuum zum Gitter führen wir mit

$$\begin{aligned}
 x_\mu &\rightarrow n_\mu a \\
 D(\bar{\psi}, \psi) &\rightarrow \prod_{n,m,\alpha,\beta} d\bar{\psi}_\alpha(n) d\psi_\beta(m) \\
 \int d^4x &\rightarrow a^4 \sum_n \\
 M_0 &\rightarrow a^{-1} \check{M}_0 \\
 \psi_\alpha(x) &\rightarrow a^{-\frac{3}{2}} \check{\psi}_\alpha(n) \\
 \bar{\psi}_\alpha(x) &\rightarrow a^{-\frac{3}{2}} \check{\bar{\psi}}_\alpha(n) \\
 \partial_\mu \psi_\alpha(x) &\rightarrow a^{-\frac{5}{2}} \check{\partial}_\mu \check{\psi}_\alpha(n)
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

durch⁴⁵. Bei der Ableitung $\check{\partial}_\mu \check{\psi}_\alpha(n)$ entscheiden wir uns für die anti-hermitesche Variante

$$\check{\partial}_\mu \check{\psi}_\alpha(n) = \frac{1}{2} (\check{\psi}_\alpha(n + \hat{\mu}) - \check{\psi}_\alpha(n - \hat{\mu})) , \tag{3.6}$$

weil ∂_μ im Kontinuum anti-hermitesch ist. $\hat{\mu} \equiv \hat{e}_\mu$ bezeichnet den Einheitsvektor in Richtung $\mu = 1 \dots 4$. Damit erhalten wir aus der Kontinuumswirkung (3.4) die Gitterwirkung S_F^{Latt}

$$S_F^{\text{Latt}} = \sum_{n,m,\alpha,\beta} \check{\bar{\psi}}_\alpha(n) \check{K}_{\alpha\beta}(n,m) \check{\psi}_\beta(m) \tag{3.7}$$

mit

$$\check{K}_{\alpha\beta}(n,m) = \frac{1}{2} \sum_\mu (\gamma_\mu^E)_{\alpha\beta} [\check{\delta}_{m,n+\hat{\mu}} - \check{\delta}_{m,n-\hat{\mu}}] + \check{M}_0 \check{\delta}_{m,n} \delta_{\alpha,\beta} \tag{3.8}$$

und der Deltafunktion $\check{\delta}_{m,n}$ auf dem Gitter. Es ist klar, daß (3.7) nicht einzigartig ist. Es gibt beliebig viele Wirkungen, die für $a \rightarrow 0$ in (3.4) übergehen, aber es ist die einfachst denkbare. Aus Gründen, die später klar werden, nennt man S_F^{Latt} mit der Form (3.8) auch "naive" Wirkung.

Zwei-Punkt-Greensfunktion (naiv)

Wir wollen nun untersuchen, was mit der Zwei-Punkt-Greensfunktion im Limes $a \rightarrow 0$ passiert. Die Kontinuumswirkung (3.4) wie auch die Gitterwirkung (3.7) sind beide von der Form (A.15), wir können also das Wicktheorem (siehe Abschnitt A.3) und damit das Ergebnis (A.18) anwenden. Wir erhalten für das Kontinuum

$$\langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta(y) | 0 \rangle = (\gamma_\mu^E \partial_\mu + M_0)_{\alpha\beta}^{-1}(x,y) \tag{3.9}$$

⁴ \check{O} steht für eine mit einer Potenz von a dimensionslos skalierte Größe O auf dem Gitter, z.B. $\check{M}_0 = M_0 a$. Einzige Ausnahme ist $n \equiv \check{x}$, da wir für die Position auf dem Gitter einen neuen Buchstaben einführen.

⁵Wir betrachten ein unendlich großes Gitter, so daß wir uns momentan um Randbedingungen nicht zu kümmern brauchen. Auf einem endlichen Gitter mit periodischen oder antiperiodischen Randbedingungen ist der einzige (formale) Unterschied, daß die Integrale im Fourierraum in Summen übergehen.

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

und für das Gitter

$$\langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(n) \hat{\psi}_\beta(m) | 0 \rangle = \check{K}_{\alpha\beta}^{-1}(n, m) . \quad (3.10)$$

Kontinuum

Für das Kontinuum müssen wir das Inverse des Diracoperators suchen. Wir ziehen dazu aus dem unbekanntem Inversen den Term $(\gamma_\mu^E \partial_\mu - M_0)$ heraus, weil mit

$$(\gamma_\mu^E \partial_\mu + M_0)(\gamma_\mu^E \partial_\mu - M_0) = \partial_\mu \partial_\mu - M_0^2$$

der Spinanteil bereits diagonalisiert ist. Danach suchen wir das Inverse von $(\partial_\mu \partial_\mu - M_0^2)$ im Fourierraum und wenden auf das Ergebnis den herausgezogenen Anteil $(\gamma_\mu^E \partial_\mu - M_0)$ an. Wir erhalten als Ergebnis den Feynman-Propagator $S_F^{(0)}$

$$S_{F\alpha\beta}^{(0)}(x - y) = \langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta(y) | 0 \rangle = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{-i\gamma_\mu^E k_\mu + M_0}{k^2 + M_0^2} \exp(ik(x - y)) \quad (3.11)$$

in euklidischer Raum-Zeit.

Gitter

Auf dem Gitter gehen wir ähnlich vor. Wir benutzen zunächst die Darstellung der Deltafunktion in der Brillouin Zone (BZ)

$$\check{\delta}_{n,m} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 \check{k}}{(2\pi)^4} \exp(i\check{k}(n - m)) \quad (3.12)$$

und erhalten damit für die Matrix (3.8) im Fourierraum

$$\check{K}(\check{k}) = \check{M}_0 + i \sum_{\mu} \gamma_{\mu}^E \sin(\check{k}\hat{\mu}) .$$

Wie im Kontinuum ziehen wir aus der gesuchten Inversen im Fourierraum den Spinanteil $(\check{M}_0 - i \sum_{\mu} \gamma_{\mu}^E \sin(\check{k}\hat{\mu}))$ heraus, weil

$$(\check{M}_0 - i \sum_{\mu} \gamma_{\mu}^E \sin(\check{k}\hat{\mu}))(\check{M}_0 + i \sum_{\mu} \gamma_{\mu}^E \sin(\check{k}\hat{\mu})) = \check{M}_0^2 + \sum_{\mu} \sin^2(\check{k}\hat{\mu})$$

eine Zahl ist und sich trivial invertieren läßt. Das gesuchte Element ist demnach

$$\check{K}_{\alpha\beta}^{-1}(n, m) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^4 \check{k}}{(2\pi)^4} \frac{-i \sum_{\mu} \gamma_{\mu}^E \sin(\check{k}\hat{\mu}) + \check{M}_0}{\sum_{\mu} \sin^2(\check{k}\hat{\mu}) + \check{M}_0^2} \exp(i\check{k}(n - m)) \quad (3.13)$$

und hängt von den dimensionslosen Größen n, m und \check{M}_0 ab, was wir nun explizit als

$$G_{\alpha\beta}(n, m; \check{M}_0) \equiv \check{K}_{\alpha\beta}^{-1}(n, m)$$

kennzeichnen wollen.

Kontinuumsimes

Den Kontinuumsliches bilden wir, indem wir $a \rightarrow 0$ streben lassen und dabei die physikalischen Größen x , y und M_0 , sowie die Felder $\psi_\alpha(x)$ und $\bar{\psi}_\beta(y)$ festhalten. Es ist also mit (3.5)

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta(y) | 0 \rangle &= \lim_{a \rightarrow 0} a^{-3} G_{\alpha\beta} \left(\frac{x}{a}, \frac{y}{a}, M_0 a \right) \\ &= \lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{\left(-i \sum_\mu \gamma_\mu^E p_a(k_\mu) + M_0 \right)_{\alpha\beta}}{\sum_\mu p_a^2(k_\mu) + M_0^2} \exp(ik(x-y)) \end{aligned} \quad (3.14)$$

zu zeigen, wobei wir wegen der Wichtigkeit für die folgende Untersuchung

$$p_a(k_\mu) = \frac{\sin(k_\mu a)}{a} \quad (3.15)$$

gesetzt haben. Könnten wir $p_a(k_\mu)$ mit k_μ abschätzen, so wäre der Kontinuumsliches $a \rightarrow 0$ durchführbar, und wir erhielten das Ergebnis (3.11). Wir betrachten für einen Moment nur das Innere der Brillouin Zone ($-\pi/2$ bis $\pi/2$) in einer Di-

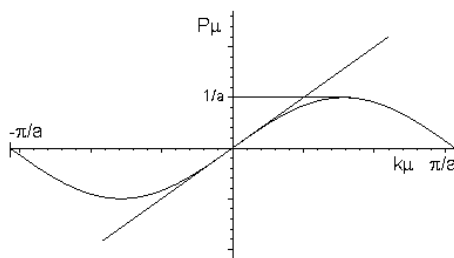


Abbildung 3.1: $p_a(k_\mu) = \sin(k_\mu a) / a$ gegenüber k_μ in der Brillouin Zone

mension (siehe Abb. 3.15). Darin ist $p_a(k_\mu)$ maximal von der Größenordnung $1/a$, und die Integration nur über diesen Bereich würde dominiert werden von Impulsen klein gegenüber dem inversen Gitterabstand⁶. Wenden wir uns nun aber dem ganzen Integrationsbereich zu, ändert sich die Situation gravierend. Der Sinus in (3.15) hat an jedem Intervallende eine Nullstelle (siehe Abb. 3.1). Pro Intervall tragen im Limes $a \rightarrow 0$ also zwei hohe (π/a und $-\pi/a$) Impulsanregungen zu der Greensfunktion (3.14) bei. Diese Beiträge haben kein Analogon im Kontinuum und sind reine Gitterartefakte. Man nennt dieses Problem deswegen auch das "Fermionenverdopplungsproblem". Insgesamt tragen bei 4 Dimensionen $2^4 = 16$ fermionartige Anregungen im Kontinuumsliches zu der Greensfunktion bei.

Umformung des Integrals

Wir schauen uns das Integral (3.14) etwas detaillierter an und integrieren dazu nicht einmal über die gesamte Brillouin Zone, sondern 16 mal über vierdimensionale Bereiche B_i mit dem Volumen $(\pi/2a)^4$. Es ist zunächst $\int_{\text{BZ}} = \sum_i \int_{B_i}$.

⁶Tatsächlich tritt bei der Diskretisierung eines skalaren Feldes eine Funktion proportional (3.15) mit halbem Argument im Sinus auf, so daß in diesem Fall der Kontinuumsliches existiert.

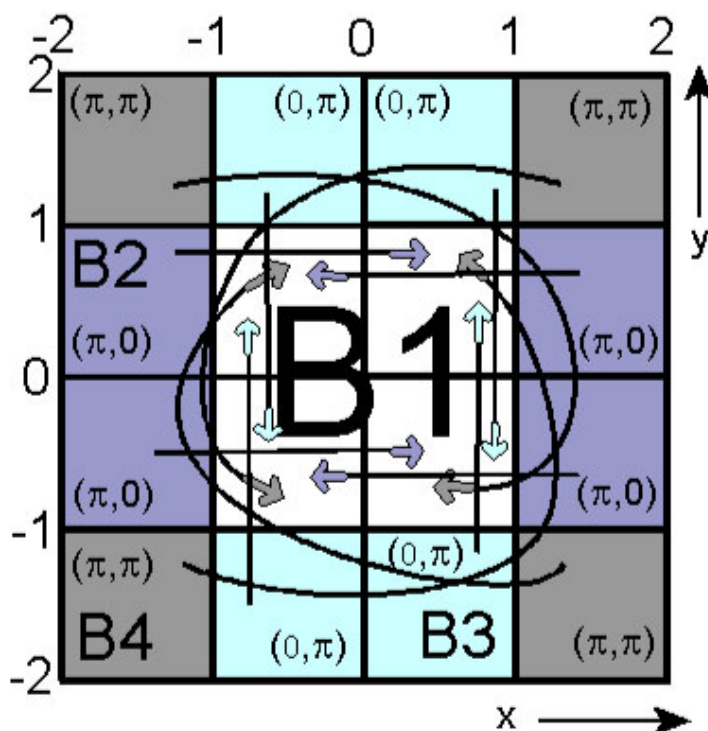


Abbildung 3.2: Der Integrationsbereich von (3.14) in der Ebene in Einheiten von $\pi/2a$. B_1 entspricht dabei dem Innern der BZ und wird nicht verschoben. Die anderen Bereiche setzen sich, wie im Text beschrieben, aus kleinen Flächen zusammen. Dabei gehört jeder Bereich zu einer Permutation von $(0, 0)$, $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$, (π, π) , die angibt, wie die Substitution in diesem Bereich durchzuführen ist. Die Pfeile deuten an, wie der Integrationsbereich der kleinen Flächen sich durch die Substitution verschiebt und zum Schluß für jeden Bereich ein Integral über das Innere der BZ übrigbleibt.

Diese Bereiche seien wiederum aus 16 Würfeln der Kantenlänge $\pi/2a$ aufgebaut (siehe Abb. 3.2). Die Eckpunkte dieser Würfel haben Koordinaten der Form $(\check{n}_1, \check{n}_2, \check{n}_3, \check{n}_4) \times \pi/2a$ für $\check{n}_j \in \{2, 1, 0, -1, 2\}$. Wir definieren eine Menge von Vektoren \check{b}_μ

$$\check{b}_\mu \in \{(0, 0, 0, 0), (\pi, 0, 0, 0), \dots, (\pi, \pi, 0, 0), \dots, (\pi, \pi, \pi, 0), \dots, (\pi, \pi, \pi, \pi)\},$$

die die Ecken eines 4-dimensionalen Würfels der Kantenlänge π beschreiben. Die Pünktchen stehen dabei für die nicht angegebenen fehlenden Permutationen. Mit b_μ bezeichnen wir \check{b}_μ/a . Die Bereiche B_i sind nun so gewählt, daß jeder mit einem \check{b}_μ^i identifiziert werden kann. Die Zuordnung wählen wir dabei so, daß wir nach der Variablensubstitution die Integration in allen Bereichen nur über das Innere der Brillouin Zone (entspricht dem Bereich B_1 mit $\check{b}_\mu^1 = (0, 0, 0, 0)$) durchführen können. Dabei teilen wir pro Bereich i die Integration in die Integration über die kleinen Würfel auf. Bei Würfeln mit oberen Integrationsgrenzen von π/a setzen wir

$k_\mu = b_\mu^i + k'_\mu$, bei solchen mit unteren Grenzen von $-\pi/a$ setzen wir $k_\mu = -b_\mu^i + k'_\mu$. Dadurch rutschen die Integrationsgrenzen in das Innere der Brillouin Zone, also in den Bereich B_1 . Das \check{b}_μ^i muß demnach so gewählt sein, daß die Komponenten mit Nullen genau auf die Grenzen passen, die schon im Innern der Brillouin Zone liegen und deshalb nicht verschoben werden sollen. Nach dem Verschieben der Integrationsgrenzen lassen sich die 16 Integrale zu einem Integral für den gesamten Bereich i zusammenfassen. Dies betrachten wir am besten mit Hilfe von Abb. 3.2 in der Ebene. Es gibt 4 große Bereiche B_i , die jeweils aus 4 kleinen Quadraten bestehen. Die Zuordnung zu den Vektoren $b_\mu^i \in \{(0, 0), (\pi, 0), (0, \pi), (\pi, \pi)\}$ ist angegeben und durch Pfeile ist angedeutet, wohin die kleinen Würfel sich durch die Variablensubstitution bewegen. Der Bereich B_1 liegt (nach Definition) bereits ganz im Innern der Brillouin Zone. Bereich B_2 und B_3 müssen jeweils in einer Richtung verschoben werden, deshalb gehören sie zu $(\pi, 0)$ bzw. $(0, \pi)$. Bereich B_4 schließlich muß in allen Richtungen verschoben werden und gehört somit zu (π, π) . Betrachten wir z.B. die Fläche mit den Eckpunkten $(1, 0), (1, 1), (2, 1), (2, 0)$, die zu B_2 gehört. Die für diese Fläche durchzuführende Integration ist

$$\int_{\pi/2a}^{\pi/a} dk_x \int_0^{\pi/2a} dk_y \dots$$

Das Integral hat in die x -Richtung eine obere Grenze von π/a , muß also in dieser Richtung nach unten (im Bild nach links) rutschen. Gleichzeitig muß es in y -Richtung nicht verschoben werden, da die Fläche bereits die richtige Höhe hat. Wir substituieren also $k_\mu = b_\mu^2 + k'_\mu$. Nach der Substitution sind die Grenzen demnach

$$\int_{-\pi/2a}^0 dk'_x \int_0^{\pi/2a} dk'_y \dots$$

Die Integrationsfläche ist dann durch $(-1, 0), (-1, 1), (0, 1), (0, 0)$ gegeben und liegt damit innerhalb des Innern der Brillouin Zone.

Nach diesen Bemerkungen führen wir die Substitutionen wie oben erläutert in den 16 Bereichen (bzw. in den 256 Integralen) durch. Wir erhalten für (3.14)

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\psi}_\alpha(x) \hat{\psi}_\beta(y) | 0 \rangle &= \lim_{a \rightarrow 0} \sum_{l=1}^{16} \exp\left(i\check{b}^l \frac{x-y}{a}\right) \\ &\times \int_{-\frac{\pi}{2a}}^{\frac{\pi}{2a}} \frac{d^4 k'}{(2\pi)^4} \frac{\left(-i \sum_\mu \delta(b_\mu^l) \gamma_\mu^E p_a(k'_\mu) + M_0\right)_{\alpha\beta}}{\sum_\mu p_a^2(k'_\mu) + M_0^2} \exp(ik'(x-y)) \end{aligned} \quad (3.16)$$

mit

$$\delta(b_\mu^l) = \exp(ib_\mu^l a) = \exp(i\check{b}_\mu^l) . \quad (3.17)$$

Der Phasenfaktor $\exp(i\check{b}^l(n-m))$ kommt dabei direkt von der Substitution. Der Faktor $\delta(b_\mu^l)$ ist 1 für jede 0 und -1 für jedes π in \check{b}_μ^l . Er resultiert aus $\arcsin(\alpha + \pi) = -\arcsin \alpha$ (bzw. $\arcsin(\alpha + 0) = \arcsin \alpha$). Der Term für $i = 0$ liefert im Limes das Kontinuumsergebnis (3.11). Der Phasenfaktor $\exp(i\check{b}^l(n-m))$

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

verhindert, daß der Limes für die restlichen 15 Terme existiert. Die Integrale haben aber im Prinzip dieselbe Struktur. Jeder Term ist der Feynman-Propagator mit einer anderen Darstellung der Gammamatrizen. Tatsächlich wird für jede Komponente $\check{b}_\mu^i = \pi$ das Vorzeichen der entsprechenden Gammamatrix γ_μ^E gewechselt. Die neuen Matrizen müssen aus den alten durch eine Ähnlichkeitstransformation

$$\mathcal{T}_i \gamma_\mu^E \mathcal{T}_i^{-1} = \delta(b_\mu^i) \gamma_\mu^E \quad (3.18)$$

hervorgehen. Die genaue Form der Abbildung \mathcal{T}_i bzw. ihre Zusammensetzung aus verschiedenen Gammamatrizen interessiert uns hier nicht weiter (siehe [Rot98], Kap. 4.2). Wir setzen

$$V_l(z) = \exp\left(i\check{b}^l \frac{z}{a}\right) \mathcal{T}_l = \exp(ib^l z) \mathcal{T}_l, \quad (3.19)$$

was angewandt auf $\psi(z)$ im Impulsraum eine Änderung des Impulses um b^l entspricht. Die Integrale in (3.16) werden für kleine a von endlichen Impulsen

$$\sin(k_\mu a) / a \rightarrow k_\mu \ll 1/a$$

dominiert. Wir erhalten deshalb für den Propagator (3.14) auf dem Gitter aus (3.16) bei kleinen a

$$\begin{aligned} S_F^{\text{Latt}}(x-y) &\approx \sum_{l=1}^{16} \exp\left(i\check{b}^l \frac{x-y}{a}\right) \\ &\times \mathcal{T}_l \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{-i \sum_\mu \gamma_\mu^E k_\mu + M_0}{\sum_\mu (k_\mu^2) + M_0^2} \exp(ik(x-y)) \mathcal{T}_l^{-1} \\ &= \sum_l V_l(x) S_F^{(0)}(x-y) V_l^{-1}(y). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Der naive Gitterpropagator besteht für kleine a demnach ungefähr aus einer Summe von 16 freien Kontinuumspropagatoren in unterschiedlicher Darstellung. Seine Struktur hängt mit einer Symmetrie der Lagrangedichte auf dem Gitter zusammen. Wie wir aus (3.7) und (3.8) ablesen, ist die Lagrangedichte auf dem Gitter durch

$$\frac{1}{2} \bar{\psi}(x) \gamma_\mu^E (\psi(x + \hat{\mu}a) - \psi(x - \hat{\mu}a)) + M_0 \bar{\psi}(x) \psi(x)$$

gegeben und unter $\psi(x) \rightarrow V_i(x) \psi(x)$, $\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x) V_i^{-1}(x)$ invariant, weil

$$V_i(z) \gamma_\mu^E V_i^{-1}(z \pm \hat{\mu}a) = \gamma_\mu^E$$

gilt. Es gibt $i = 1 \dots 16$ derartige Symmetrietransformationen. Das Fermionenverdopplungsproblem ist eine Folge der Invarianz der diskretisierten Lagrangedichte unter diesen Symmetrietransformationen.

Wilsonfermionen

Die Wirkung (3.4) haben wir gewählt, weil sie der Kontinuumswirkung (3.4) sehr ähnlich ist. Sie ist deshalb nicht einzigartig, sondern wir können im Prinzip beliebig viele Wirkungen konstruieren, die (3.4) als Limes haben. Wir wollen nun untersuchen, wodurch wir die Verdopplung verursacht haben.

Beispiel für Verdopplung durch Wahl der Ableitung

Dazu betrachten wir die (Eigenwert-) Gleichung

$$-i \frac{\partial}{\partial x} f(x) = \lambda f(x), \quad (3.21)$$

deren Lösung $f_\lambda(x) = f(0) \exp(i\lambda x)$ wir natürlich sofort angeben können. Wir diskretisieren (3.21) unter Benutzung der symmetrischen Ableitung (3.6), weil $i \frac{\partial}{\partial x}$ hermitesch ist. Wir erhalten mit $\check{\lambda} = \lambda a$

$$-\frac{i}{2} [f(n+1) - f(n-1)] = \check{\lambda} f(n). \quad (3.22)$$

Die diskretisierte Form (3.22) lösen wir mit dem Ansatz $f_{\check{\lambda}}(n) = C \exp(i\check{k}_\lambda n)$. Die Lösung muß die Bedingung

$$\sin(\check{k}_\lambda) = \check{\lambda}$$

erfüllen. Für jeden Wert von $-1 < \check{\lambda} \neq 0 < 1$ gibt es für $-\pi/2 < \check{k} < \pi/2$ demnach zwei Lösungen

$$f_{\check{\lambda}}^{(1)} = A \exp(i\check{k}n) \quad (3.23)$$

$$f_{\check{\lambda}}^{(2)} = B (-1)^n \exp(-i\check{k}n). \quad (3.24)$$

Es kann nur eine von beiden Lösungen einen Kontinuums-limes besitzen, denn die Kontinuums-eigenfunktionen sind nicht entartet. Tatsächlich besitzt Gleichung (3.23) nach der Regel von l'Hospital die richtige Lösung als Kontinuums-limes, wenn wir $a \rightarrow 0$ streben lassen und dabei $x = na$ und $\lambda = \check{\lambda}/a$ festhalten. Gleichung (3.24) hingegen hat wegen $(-1)^n$ keinen derartigen Grenzwert, weil die Gittereigenfunktionen von Gitterpunkt zu Gitterpunkt im Vorzeichen alternieren⁷. Die zweite Lösung (3.24) kommt anscheinend durch die symmetrische bzw. hermitesche Wahl der Ableitung auf dem Gitter zustande. Sie skaliert mit $2a$, alle anderen Größen hingegen mit a . Wir haben sie gewählt, um die Hermitezität von (3.21) auch in der diskreten Form (3.22) sicherzustellen. Nehmen wir als diskrete Ableitung nun die Rechts-Ableitung $\check{\partial}_R$ auf dem Gitter $-i[f(n+1) - f(n)] = \check{\lambda} f(n)$, so skaliert diese wie alle Größen mit a . Dafür ist sie aber nicht mehr hermitesch, sondern es gilt $\check{\partial}_R^\dagger = \check{\partial}_L$. Durch Iteration finden wir die Lösung $f_{\check{\lambda}}(n) = \exp(n \ln(1 + i\check{\lambda})) f_{\check{\lambda}}(0)$. Diese hat den richtigen Kontinuums-limes, wenn wir den Limes wie oben durchführen.

Energieeigenwerte für freie Fermionen

⁷Man mag in Versuchung geraten, diese Lösungen einfach zu ignorieren, doch dann würden die Eigenfunktionen nicht mehr ein vollständiges System bilden.

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

Betrachten wir noch einmal unsere freien Fermionen. Die Diracgleichung für ein Fermion mit Spin $\frac{1}{2}$ ist in euklidischer Form

$$-\partial_4\psi = (M_0\beta - i \sum_j \alpha_j \partial_j)\psi = \hat{\mathcal{H}}\psi.$$

In zweiter Quantisierung lautet der Hamiltonoperator $\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\mathcal{H}} \hat{\psi}(x)$. Wir diskretisieren wiederum mit der symmetrischen Ableitung und erhalten

$$\hat{H} = \sum_{n,m} \hat{\psi}^\dagger(m) \check{H}^{\text{Latt}}(n,m) \hat{\psi}(m)$$

mit

$$\check{H}^{\text{Latt}}(n,m) = (\check{M}_0 \beta \check{\delta}_{n,m} - \frac{i}{2} \sum_j \alpha_j (\check{\delta}_{n+\hat{j},m} - \check{\delta}_{n-\hat{j},m})).$$

Wir berechnen die Matrix $\check{H}^{\text{Latt}}(n,m)$ genauso, wie wir (3.8) berechnet haben (mit Hilfe von (3.12)) und erhalten für ihre Fouriertransformierte

$$\check{H}^{\text{Latt}}(\check{k}) = \check{M}_0 \beta - \sum_j \alpha_j \sin(\check{k}_j).$$

Ihre Eigenwerte ergeben sich, wenn man benutzt, daß β mit α_j kommutiert und die α_j untereinander anti-kommutieren. Damit sieht man, daß $\check{H}^{\text{Latt}}(\check{k})^2$ ein Vielfaches der Einheitsmatrix ist. Die gesuchten Eigenwerte sind daher

$$E^{\text{Latt}}(k) = \pm \left(M_0^2 + a^{-2} \sum_{j=1}^3 \sin^2(k_j a) \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (3.25)$$

Wir sehen also, daß zum Spektrum (wieder ungewollt) die Ecken der (räumlichen) Brillouin Zone beitragen. Es ist nun klar, daß die Verdopplung von der symmetrischen Wahl der Gitterableitung herrührt.

Wir könnten also versuchen, mit der Rechts- oder Linksableitung zu diskretisieren. Es ist offensichtlich, daß wir damit die Lehrbuch-Quantenmechanik verlassen. Beispielsweise würden unsere Observablen komplexe Eigenwerte bekommen. Es gibt jedoch Untersuchungen anhand der QED, die gezeigt haben, daß selbst bei Überwindung dieser Schwierigkeiten für nichtwechselwirkende Fermionen die Theorie im Fall von Wechselwirkung nicht renormierbar ist [SR96].

Chiraler Limes

Wir betrachten nun den chiralen Fall $M_0 = 0$, so daß (3.4) u.a. unter

$$\psi \rightarrow \exp(i\alpha\gamma_5)\psi$$

invariant ist. ψ ist in diesem Fall für ein linkshändiges Teilchen (z.B. ein Neutrino) in einem Eigenzustand von $P_L = \frac{1}{2}(1 - \gamma_5)$. Der Propagator im Kontinuum ist damit unter Benutzung von (3.11) für $M_0 \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} S_F^{(0)}(x-y; M_0 \equiv 0) &= \langle 0 | \hat{\psi}_L(x) \hat{\psi}_L(y) | 0 \rangle \\ &= P_L \langle 0 | \hat{\psi}(x) \hat{\psi}(y) | 0 \rangle P_R \\ &= P_L \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{-i\gamma_\mu^E k_\mu}{k^2} \exp(ik(x-y)), \end{aligned} \quad (3.26)$$

wobei wir $\hat{\psi}_L(x) = P_L \hat{\psi}(x)$, $P_L^2 = P_L$ und $P_L^\dagger = P_R = \frac{1}{2}(1 + \gamma_5)$ benutzt haben. Für das Gitter rechnen wir genauso, benutzen

$$(1 - \gamma_5)\mathcal{T}_i = \mathcal{T}_i(1 - \prod_{\mu} \delta(b_{\mu}^i))\gamma_5$$

und erhalten aus Gleichung (3.20) mit (3.26)

$$S_F^{\text{Latt}}(x-y; M_0 \equiv 0) \approx \sum_l V_l(x) \frac{1}{2} (1 - \prod_{\mu} \delta(b_{\mu}^l) \gamma_5) S_F^{(0)}(x-y; M_0 \equiv 0) V_l^{-1}(y). \quad (3.27)$$

Der Faktor $\prod_{\mu} \delta(b_{\mu}^i)$ ist für alle b_{μ}^i mit geradem Vorkommen von π als Komponente 1, für den Rest -1 . Damit tragen im chiralen Limes –wie nach Gleichung (3.25) erwartet– 8 rechtshändige und 8 linkshändige Korrelatoren zum Kontinuumslikes bei.

No-Go Theorem

Wir wollen nun ermitteln, unter welchen Bedingungen wir die Diskretisierung der Wirkung (3.4) überhaupt vornehmen können. Dazu betrachten wir eine allgemeine diskretisierte hermitesche Wirkung, die für $M_0 = 0$ chiral invariant ist. Sie ist im Impulsraum von der Form

$$S = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} d^4 k \bar{\phi}(k) \tilde{P}(k) \phi(k), \quad (3.28)$$

wobei wir folgendes fordern:

- Die chirale Invarianz unter $\exp(i\alpha\gamma_5)$ bedingt die Form $\tilde{P}(k) = \sum_{\mu} \gamma_{\mu}^E P_{\mu}(k)$, damit sich die beiden Vorzeichen von γ_0^E und γ_{μ}^E beim Vertauschen mit γ_5 aufheben.
- Im richtigen Kontinuumslikes $a \rightarrow 0$ soll $P_{\mu}(k) \rightarrow k_{\mu}$ für $k \rightarrow 0$ gelten.
- $P_{\mu}(k)$ ist reell, damit die Hermitezität gewährleistet ist.
- $P_{\mu}(k)$ ist periodisch mit der Periode $2\pi/a$ und für lokale Differenzen auf dem Gitter stetig (Lokalität).

Da P_{μ} reell, stetig und periodisch mit $2\pi/a$ ist, muß es nach diesen Forderungen an bestimmten Zwischenstellen die Achsen schneiden, so daß auch in der allgemeinen Form (3.28) die Fermionenverdopplung in jeder euklidischen Richtung auftritt. Wir müssen anscheinend unsere Anforderungen an die diskretisierte Wirkung lockern, um die Fermionenverdopplung zu vermeiden. Genau dies ist die Aussage des "No-Go" Theorems von Nielson und Ninomiya [NN81]. Es besagt, daß bei Regularisierung unter den üblichen Hermitezitäts-, Lokalitäts- und Translationsbedingungen des Hamiltonoperators notwendigerweise im Fermionen-Propagator eine gleiche Anzahl von links- und rechtshändigen Teilchen für jeden Satz von erhaltenen Quantenzahlen auftritt, wenn man annimmt, daß diese von (verallgemeinerten)

Ladungen herrühren, die lokal (aus einer Summe über eine Dichte) definiert sind, diskrete Eigenwerte haben und bilinear in den Fermionenfeldern sind. Genau dies ist bei unserem Ergebnis für den Propagator (3.27) der Fall. Darüberhinaus gibt es bei der naiven Diskretisierung von Eichtheorien ein weiteres Problem. Die axiale Anomalie, die normalerweise bei diesen Theorien auftritt, ist nicht vorhanden. Ursache sind wieder die unphysikalischen Moden, die mit einem externen axialen Strom der umgekehrten chiralen Ladung koppeln, und die axiale Anomalie der physikalischen Fermionen aufheben ([MM97], Kap. 4.4 und Referenzen darin).

Modifikation der naiven Wirkung

Wir modifizieren (3.7) also mit einem Term, der die chirale Symmetrie bei $M_0 = 0$ für endliches a bricht, indem wir

$$S_F^{\text{Wilson}} = S_F^{\text{Latt}} - \frac{r}{2} \sum_n \bar{\psi}(n) \square \psi(n) \quad (3.29)$$

setzen⁸. Dabei definieren wir den dimensionslosen, diskretisierten Laplace Operator $\square \psi(n) = a^2 \square \psi(n)$ auf dem Gitter durch

$$\square \psi(n) = \sum_{\mu} \{ \psi(n + \hat{\mu}) + \psi(n - \hat{\mu}) - 2\psi(n) \} .$$

Im naiven Kontinuumslimites $a \rightarrow 0$ verschwindet der zusätzliche Beitrag in (3.29) linear mit a , so daß sie weiterhin (3.4) als Kontinuumslimites besitzt. Für die Wirkung in Form von (3.7) bedeutet das, daß (3.8) durch

$$\check{K}_{\alpha\beta}^{\text{Wilson}}(n, m) = (\check{M}_0 + 4r) \check{\delta}_{m,n} \delta_{\alpha,\beta} - \frac{1}{2} \sum_{\mu} \left[(r - \gamma_{\mu}^E)_{\alpha\beta} \check{\delta}_{m,n+\hat{\mu}} + (r + \gamma_{\mu}^E)_{\alpha\beta} \check{\delta}_{m,n-\hat{\mu}} \right] \quad (3.30)$$

ersetzt wird. In dieser Form erkennt man, daß für $r \neq 0$ die chirale Symmetrie und auch die im Anschluß an Gleichung (3.20) erwähnte Invarianz der naiven Wirkung unter Transformationen der Form (3.19) auf dem Gitter gebrochen ist. Eine Rechnung ähnlich der, die uns von (3.7) zu (3.14) geführt hat, führt nun mit $\cos 2x = 1 - 2 \sin^2 x$ auf

$$\langle 0 | \hat{\psi}_{\alpha}(x) \hat{\psi}_{\beta}(y) | 0 \rangle = \lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{\left(-i \sum_{\mu} \gamma_{\mu}^E p_a(k_{\mu}) + M_a(k) \right)_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu} p_a^2(k_{\mu}) + M_a^2(k)} \exp(ik(x-y)) \quad (3.31)$$

wobei $p_a(k_{\mu})$ weiterhin durch (3.15) gegeben ist und

$$M_a(k) = M_0 + \frac{2r}{a} \sum_{\mu} \sin^2 \left(\frac{k_{\mu} a}{2} \right) \quad (3.32)$$

⁸Es gibt natürlich auch andere Möglichkeiten, das Verdopplungsproblem zu umgehen. Eine häufig benutzte Methode sind "gestaffelte" ("staggered") Fermionen. Die Idee dabei ist, die fermionischen Freiheitsgrade auf unterschiedliche Gitterplätze so zu verteilen, daß dadurch die Gitterbreite für jeden Flavour effektiv $2a$ ist und somit keine zusätzlichen Moden entstehen ([Rot98], Kap. 4). Allerdings benötigt man für 4 Dimensionen auch 4 Flavours, so daß diese Beschreibung für uns nicht in Frage kommt.

eine effektive Masse ist. Für festes k strebt $M_a(k) \rightarrow M_0$ für $a \rightarrow 0$. In den Ecken der Brillouin Zone jedoch divergiert $M_a(k)$ für $a \rightarrow 0$ und unterdrückt somit die unerwünschten Beiträge zum Propagator. Im Limes wird demnach aus (3.31) der Kontinuumspropagator (3.11). Man kann auch zeigen, daß die oben erwähnte axiale Anomalie im Kontinuumsimes erfüllt ist [KS81]. Die Wirkung (3.29) wird "Wilsonwirkung" genannt und $r \neq 0$ heißt "Wilsonparameter", weil Wilson 1975 die Wirkung (3.29) eingeführt hat [Wil75]. $r = 1$ hat einige technische Vorteile gegenüber den anderen möglichen Werten für r ([MM97], Kap. 4.2.3), deshalb verwenden wir in unserer konkreten Rechnung auf dem Computer $r = 1$, auch wenn wir in den Formeln meist r allgemein schreiben.

3.1.2 Eichbosonen auf dem Gitter

In diesem Abschnitt wollen wir den Wechselwirkungsteil für Wilsonfermionen in die Theorie einführen und den rein bosonischen Teil der Wirkung (3.3) diskretisieren. Wir müssen dabei beachten, daß wir die Invarianz unter Eichtransformationen auf dem Gitter explizit für endliches a fordern wollen. Wir wissen bereits nach dem letzten Abschnitt 3.1.1, wie wir die Fermionen in (3.3) mittels des Wilsonterms zur Brechung der chiralen Symmetrie auf dem Gitter (3.29) zu diskretisieren haben.

Einführung der Linkvariablen über das Eichprinzip

Wir beginnen mit dem freien Anteil der Wirkung (3.3) in der Wilsonform $r \neq 0$ gegeben durch (3.7) mit (3.30). Nach einer Indexverschiebung der Summationsvariablen ergibt sich

$$S_F^{\text{Wilson}} = (\check{M}_0 + 4r) \sum_n \sum_{a=1}^N \bar{\check{\psi}}^a(n) \check{\psi}^a(n) - \frac{1}{2} \sum_{n,\mu} \sum_{a=1}^N \left[\bar{\check{\psi}}^a(n) (r - \gamma_\mu^E) \check{\psi}^a(n + \hat{\mu}) + \bar{\check{\psi}}^a(n + \hat{\mu}) (r + \gamma_\mu^E) \check{\psi}^a(n) \right]. \quad (3.33)$$

Wir notieren dabei explizit den (Farb-) Index der Felder, die sich gemäß der fundamentalen Darstellung der $SU(N)$ transformieren. Es ist $N = 3$ für die QCD (siehe Abschnitt 2.1.1). Gleichung (3.33) ist invariant unter globalen Transformationen der Felder der Form

$$\begin{aligned} \check{\psi}(n) &= G \check{\psi}(n) \\ \bar{\check{\psi}}(n) &= \bar{\check{\psi}}(n) G^{-1}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

wobei G ein Element der $SU(N)$ in der fundamentalen Darstellung ist. Wie im Kontinuum wollen wir nun (3.34) auf lokale Transformationen $G(n)$ erweitern. Im Kontinuum führt diese Erweiterung durch die Forderung der Invarianz unter lokalen Transformationen auf neue Freiheitsgrade des Systems, die Eichbosonen, die letztendlich den Paralleltransport der lokalen (Farb-) Information sicherstellen. Der nichtdiagonale Term in (3.30) wird auch im diskreten Fall dazu führen, daß wir neue

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

Freiheitsgrade zulassen müssen, damit wir die Invarianz unter lokalen Transformationen

$$\begin{aligned}\check{\psi}(n) &= G(n) \check{\psi}(n) \\ \bar{\check{\psi}}(n) &= \bar{\check{\psi}}(n) G^{-1}(n)\end{aligned}\tag{3.35}$$

erreichen. Im Kontinuum ist eine eichinvariante, nichtdiagonale bilineare Form der Felder durch $\bar{\psi}(x)U(x, y)\psi(y)$ mit

$$U(x, y) = \text{P exp} \left(\int_x^y dz_\mu A_\mu(z) \right)\tag{3.36}$$

gegeben, wobei P den Pfadordnungsoperator bezeichnet, der (ähnlich wie der Zeitordnungsoperator) die Integrationswege anhand ihrer Parametrisierung von links nach rechts abwärts anordnet und $A_\mu(z) = ig_0 A_\mu^a(z) \tau^a$ das Eichfeld bezeichnet. Wenn der Abstand zwischen x und y beliebig klein ist, $y = x + \epsilon$ für ein infinitesimales $\epsilon > 0$ gilt, dann ist $U(x, x + \epsilon) = \exp(\epsilon A(x))$. Auf dem Gitter ist ϵ nicht beliebig klein wählbar, sondern durch den Gitterabstand sind benachbarte Punkte mindestens $a\hat{\mu}$ entfernt. Wir definieren daher die sogenannte "Linkvariable"

$$U_\mu(n) = \exp(ia\Phi_\mu(n)) = \exp(i\check{\Phi}_\mu(n)) ,\tag{3.37}$$

die durch $\check{\Phi}_\mu(n)$ parametrisiert wird. Sie wird so genannt, weil sie für jeden Gitterpunkt n die Verbindung in Richtung $\hat{\mu}$ zu dem Nachbar-Gitterpunkt $n + \hat{\mu}$ eichinvariant herstellt, wie wir nach (3.40) sehen werden. Dabei ist $U_\mu(n)$ ein Element der $SU(N)$ in der fundamentalen Darstellung. Es gilt

$$U_\mu^\dagger(n) = U_{-\mu}(n + \hat{\mu}) ,\tag{3.38}$$

wie man an dem analogen Term im Kontinuum (3.36) sehen kann. Die lokale Eichtransformation $G(n)$ wählen wir ähnlich wie beim Kontinuum zu

$$G(n) = \exp(i\Lambda(n)) ,\tag{3.39}$$

wobei $G(n)$ ebenfalls zur fundamentalen Darstellung von $SU(N)$ gehört. Damit ist auf dem Gitter $\bar{\check{\psi}}(n)U_\mu(n)\check{\psi}(n + \hat{\mu})$ invariant unter Eichtransformationen (3.35), wenn sich die Linkvariablen gemäß $G(n)U_\mu(n)G^{-1}(n + \hat{\mu})$ transformieren, was wir vorläufig wegen des Transformationsverhaltens von (3.36) im Kontinuum annehmen. Somit ist klar, wie wir die Wilsonwirkung (3.33) modifizieren, damit sie unter (3.34) mit (3.39) invariant ist. Die nichtdiagonalen Elemente müssen mit Linkvariablen verbunden werden, um die Eichinvarianz zu sichern. Es ergibt sich demnach aus Gleichung (3.33)

$$\begin{aligned}S_F^{\text{Wilson}} &= (\check{M}_0 + 4r) \sum_n \bar{\check{\psi}}(n)\check{\psi}(n) - \frac{1}{2} \sum_{n, \mu} \left[\bar{\check{\psi}}(n) (r - \gamma_\mu^E) U_\mu(n)\check{\psi}(n + \hat{\mu}) \right. \\ &\quad \left. + \bar{\check{\psi}}(n + \hat{\mu}) (r + \gamma_\mu^E) U_\mu^\dagger(n)\check{\psi}(n) \right] .\end{aligned}\tag{3.40}$$

Zwischen den Linkvariablen $U_\mu(n)$ und dem Eichfeld $A_\mu(x)$ besteht ein fundamentaler Unterschied wegen ihres unterschiedlichen Transformationsverhaltens. Das Eichfeld $A_\mu(x)$ bzw. seine Komponenten $A_\mu^a(x)$ sind reelle Zahlen und damit im Prinzip unbeschränkt. Die Linkvariablen parametrisiert durch $\check{\Phi}_\mu(n)$ sind Gruppenelemente der $SU(N)$. Damit ist $\check{\Phi}_\mu(n)$ beschränkt (z.B. in der QED auf Werte in $[0, 2\pi]$). Um den Kontinuumsliches $a \rightarrow 0$ zu bilden, erinnern wir uns, daß $A_\mu(x)$ inverse Länge als Einheit hat (siehe (3.37) oder (2.2)). Wir schreiben deshalb für die Linkvariable (3.37)

$$U_\mu(n) = \exp(ica\Phi_\mu(n)) , \quad (3.41)$$

wobei wir c noch bestimmen werden. Damit hat Φ die gleiche Dimension wie das Eichfeld A_μ und ist im Limes ebenfalls unbeschränkt. Für kleine a entwickeln wir die Linkvariable (3.41) in $U_\mu(n) \approx 1 + ica\Phi_\mu(n)$. Damit läßt sich der Kontinuumsliches $a \rightarrow 0$ von (3.33) mit den üblichen Ersetzungen (3.5) durchführen und hat durch die Identifikation von $\Phi_\mu(x/a)$ mit dem Eichfeld $A_\mu(x)$ und der Wahl $c = -i$ den freien Fermionenteil (3.3) als Limes. Mit diesem Ergebnis ist es nun auch leicht, das bisher geforderte Transformationsverhalten von (3.41) zu verifizieren. Im Kontinuum geht $U(x, x + \epsilon)$ bei einer Eichtransformation in

$$G(x) U(x, x + \epsilon) G^{-1}(x + \epsilon) = \exp(\epsilon A'_\mu(x))$$

über, was gemäß der Identifikation (3.41) auf dem Gitter zu

$$U'_\mu(n) = G(n) U_\mu(n) G^{-1}(n + \mu) = \exp(\check{\Phi}'_\mu(n)) \quad (3.42)$$

wird. Dabei ist A'_μ durch (2.5) gegeben und $\check{\Phi}'_\mu$ eine diskretisierte Form davon.

Feldstärke der Linkvariablen

Die eichinvariante Formulierung der Wirkung (3.33) hat die Linkvariablen in das Fermionen-System eingeführt. Im Kontinuumsliches entsprechen sie dem Eichfeld, wie wir gesehen haben. Ihr kinetischer Anteil in (3.3) ist durch

$$S_G = -\frac{1}{2g_0^2} \int d^4x \text{Sp} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a \quad (3.43)$$

gegeben und ein eichinvariantes Funktional der Eichfelder. Wir suchen demnach auf dem Gitter ein eichinvariantes Funktional der Linkvariablen, das im Limes in S_G übergeht. Da in S_G über eine lokal eichinvariante Größe summiert wird, untersuchen wir zunächst die kleinste geschlossene Schleife (siehe Abb. 3.3) auf dem Gitter, die sogenannte "Plaquette"

$$U_{\mu\nu}(n) = U_\mu(n) U_\nu(n + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(n + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(n) . \quad (3.44)$$

Wir vermuten im Kontinuumsliches einen Zusammenhang der Plaquette und dem Feldstärketensor und entwickeln den Realteil von der $SU(N)$ -Spur über die Plaquette $\text{ReSp} U_{\mu\nu}(n)$, also eine reelle und eichinvariante Größe, in vierter Ordnung von

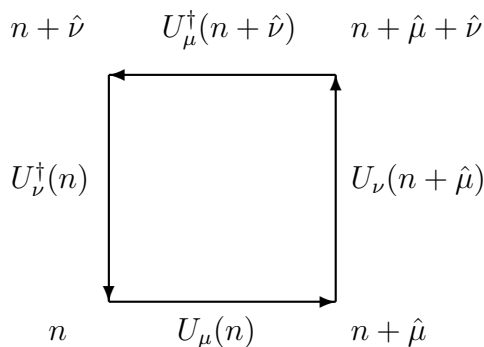


Abbildung 3.3: Elementare Plaquette $U_{\mu\nu}(n)$ mit Beiträgen in der μ - ν Ebene

a. Unter Benutzung der Baker-Campbell-Hausdorff Formel ([GR93], Kap. 1 und Referenzen dort)

$$\exp(\hat{A}) \exp(\hat{B}) = \exp\left(\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2!}[\hat{A}, \hat{B}]_- + \dots\right)$$

erhalten wir zunächst

$$\begin{aligned} \text{Re Sp } U_{\mu\nu} &= \text{Re Sp} \exp \left\{ a (\Phi_\mu(n) + \Phi_\nu(n + \hat{\mu}) - \Phi_\mu(n + \hat{\nu}) - \Phi_\nu(n)) \right. \\ &\quad + \frac{1}{2} a^2 ([\Phi_\mu(n), \Phi_\nu(n + \hat{\mu})]_- - [\Phi_\mu(n), \Phi_\mu(n + \hat{\nu})]_- \\ &\quad - [\Phi_\nu(n + \hat{\mu}), \Phi_\mu(n + \hat{\nu})]_- - [\Phi_\nu(n + \hat{\mu}), \Phi_\nu(n)]_- \\ &\quad \left. - [\Phi_\mu(n), \Phi_\nu(n)]_- + [\Phi_\mu(n + \hat{\nu}), \Phi_\nu(n)]_- \right\} + O(a^3). \end{aligned}$$

Wir setzen darin beispielsweise $a \partial_\nu \Phi_\mu(n) = \Phi_\mu(n + \hat{\nu}) - \Phi_\mu(n)$, entwickeln Terme der Form $\Phi_\mu(n + \hat{\nu}) = \Phi_\mu(n) + O(a)$ und erhalten damit für unsere Spur

$$\text{Re Sp } U_{\mu\nu}(n) = \text{Re Sp} \exp \left\{ a^2 [(\partial_\mu \Phi_\nu(n) - \partial_\nu \Phi_\mu(n)) - [\Phi_\mu(n), \Phi_\nu(n)]_-] + O(a^3) \right\}.$$

Den Term in der eckigen Klammer nennen wir den Feldstärketensor $\Phi_{\mu\nu}^G(n)$ auf dem Gitter, weil $\Phi_{\mu\nu}^G(x/a)$ für $a \rightarrow 0$ gegen $F_{\mu\nu}(x)$ mit der Gleichung (2.3) für die Komponenten strebt, wenn man die Vertauschungsrelation $[\tau^a, \tau^b]_- = i f^{abc} \tau^c$ der Generatoren der $SU(N)$ -Algebra benutzt. Wir entwickeln die Exponentialfunktion für kleine a und erhalten

$$\text{Re Sp } U_{\mu\nu}(n) = \text{Re Sp} \left\{ 1 + a^2 \Phi_{\mu\nu}^G(n) + \frac{1}{2} a^4 \Phi_{\mu\nu}^G(n) \Phi_{\mu\nu}^G(n) + O(a^5) \right\}. \quad (3.45)$$

Die Spur über die Einheitsmatrix in fundamentaler Darstellung liefert N . Die Spur über den zweiten Teil ergibt null, da $\Phi_{\mu\mu}^G(n) = 0$. Wir stellen die Gleichung nach der verbleibenden Spur um und erhalten

$$\text{Re Sp } U_{\mu\nu}(n) - N = \frac{1}{2} a^4 \text{Re Sp} \left\{ \Phi_{\mu\nu}^G(n) \Phi_{\mu\nu}^G(n) \right\} + O(a^5).$$

Die rechte Seite ist der Wirkung (3.43) schon sehr ähnlich, wir müssen nur noch über alle Gitterpunkte \sum_n und alle Plaquetten $\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \equiv \sum_{\square}$ summieren, die Definition

des Feldstärketensors $\Phi_{\mu\nu}^G = ig_0 \Phi_{\mu\nu}^{G^a} \tau^a$ mit der Normalisierung der Generatoren $\text{Sp}(\tau^a \tau^b) = \frac{1}{2} \delta_{ab}$ benutzen und erhalten

$$\beta \sum_{\square} \left(1 - \frac{1}{2N} \text{Sp} \left(U_{\square} + U_{\square}^{\dagger} \right) \right) = a^4 \frac{1}{4} \text{Re} \sum_{n, \mu\nu} \Phi_{\mu\nu}^{G^a}(n) \Phi_{\mu\nu}^{G^a}(n) + O(a^5), \quad (3.46)$$

wobei wie –wie in der Literatur üblich–

$$\beta = \frac{2N}{g_0^2} \quad (3.47)$$

setzen. Die rechte Seite ist im Kontinuumslimites mit den Ersetzungen aus (3.5) gerade S_G , so daß wir eine eichinvariante Beschreibung von (3.43) gefunden haben, die in erster Ordnung von a gegen die Kontinuumsform strebt.

3.1.3 Zusammenfassung für die QCD

In den letzten beiden Abschnitten haben wir eine konsistente Formulierung der Wirkung auf dem Gitter für Wilsonfermionen gefunden und diese lokal $SU(N)$ eichinvariant formuliert, wodurch die Linkvariablen als Eichbosonen eingeführt wurden. Wir stellen das Ergebnis der letzten beiden Abschnitte in der Form zusammen, in der sie üblicherweise benutzt werden. Die diskretisierte Wilsonform von (3.3) ist gegeben durch

$$S_{\text{QCD}}^{\text{Latt}}(\bar{\psi}, \psi, U) = S_G(U) + S_F^{\text{Wilson}}(\bar{\psi}, \psi, U) \quad (3.48a)$$

$$S_G(U) = \beta \sum_{\square} \left(1 - \frac{1}{2N} \text{Sp} \left(U_{\square} + U_{\square}^{\dagger} \right) \right) \quad (3.48b)$$

$$S_F^{\text{Wilson}}(\bar{\psi}, \psi, U) = \sum_{n, m} \bar{\psi}(n) M(U)_{n, m} \psi(m). \quad (3.48c)$$

Dabei ist

$$\beta = \frac{2N}{g_0^2}$$

die Kopplung und

$$M(U)_{nm} = \delta_{n, m} - \kappa \sum_{\mu} \left\{ (r - \gamma_{\mu}^E) U_{\mu}(n) \delta_{m, n+\mu} + (r + \gamma_{\mu}^E) U_{\mu}^{\dagger}(n) \delta_{n, m+\mu} \right\} \quad (3.49)$$

die Fermionenmatrix, die man aus (3.33) erhält, wenn man

$$\kappa = \frac{1}{2M_0 a + 8r} \quad \text{mit } r = 1 \quad (3.50)$$

setzt und die Felder mit $(2\kappa)^{-\frac{1}{2}}$ skaliert⁹. κ wird in der Literatur "Hoppingparameter" genannt. β und κ sind die Parameter, die wir am Anfang einer Rechnung frei

⁹Wir unterscheiden nun nicht mehr zwischen dimensionslosen Größen auf dem Gitter und dimensionsbehafteten, denn es ist im Zusammenhang immer eindeutig, was gemeint ist.

wählen können¹⁰. Durch die Wahl von β legen wir die Kopplung fest und durch die Wahl von κ die Masse der Quarks. Im Prinzip könnten wir beliebig viele Flavours benutzen, es gäbe lediglich für jeden Flavour eine Fermionenmatrix mit einem eigenen Wert von κ . In dieser Arbeit verzichten wir darauf, da unsere Quarkmassen aus technischen Gründen¹¹ ohnehin unphysikalisch hoch sind, so daß wir zwei entartete Flavours mit identischer Masse (gleichem Hoppingparameter) benutzen. Für die QCD gelten die obigen Formeln, indem man $N = 3$ einsetzt.

Erwartungswert eines Operators

Der fermionische Teil der Wirkung (3.48c) ist quadratisch, so daß wir das Wicktheorem und unser Ergebnis (A.18) benutzen können, um den Vakuumerwartungswert eines Operators \hat{O} auf dem Gitter zu berechnen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{O} | 0 \rangle &= \frac{1}{Z} \int DU \det M(U) O((U), M^{-1}(U)) \exp(-S_G(U)) \\ &= \frac{1}{Z} \int DU O((U), M^{-1}(U)) \exp(-S_{\text{eff}}(U)) , \end{aligned} \quad (3.51)$$

wobei Z durch (3.51) für $\hat{O} = 1$ und die effektive Wirkung durch

$$S_{\text{eff}} = S_G - \ln \det M$$

gegeben sind. M^{-1} ist das Inverse der Fermionenmatrix und wir werden sehen, daß es einiges Rechenaufwands bedarf, diese Matrix zu invertieren¹².

Haar Maß

Das Maß $DU = \prod_l dU_l$ erstreckt sich über abzählbar viele (in der Praxis endlich viele) Integrationsvariablen U_l . Dabei bezeichnet dU_l das invariante "Haar" Maß der Gruppe. Es hängt für jede Linkvariable U_l von 8 (für $N = 3$) reellen Parametern ab und ist auf der Gruppe invariant formuliert, so daß

$$\int dU_l f(U_l) = \int dU_l f(U_0 U_l) \quad (3.52)$$

mit $\int dU_l = 1$ für ein beliebiges Gruppenelement $U_0 \in SU(3)$ gilt (siehe z.B. [MM97], Kap. 3.2). Wegen der Kompaktheit der Gruppe und der (auf einem endlichen Gitter) endlichen Anzahl von Linkvariablen ist das Funktionalintegral (3.51) ordentlich definiert, und die Notwendigkeit zur Eichfixierung entfällt¹³. Durch die Invarianz

¹⁰Natürlich können wir auch die Größe des Gitters, also die Anzahl der Gitterpunkte festlegen, was einen Einfluß auf die physikalische Aussagekraft der Rechnung hat, wie wir in Abschnitt 3.4 sehen werden.

¹¹Für kleine Quarkmassen ist das numerische Invertieren der Fermionenmatrix zum Berechnen eines Propagators sehr aufwendig (siehe Abschnitt 4.3.3 und Anhang B).

¹²Natürlich stellt uns auch die Berechnung der Determinante $\det M$ vor ein immenses rechentechnisches Problem, das wir im Rahmen dieser Arbeit aus Mangel an Rechenzeit nicht optimal lösen werden. Wir werden nämlich die Determinante ignorieren und $\det M \equiv 1$ setzen (siehe 3.2.3).

¹³Die Eichfixierung wird notwendig, wenn man das Funktionalintegral durch die Sattelpunktmethode (z.B. im Sinne der Störungstheorie) nähert, weil man da keine Nullmoden im quadratischen Teil der Wirkung haben darf.

der Wirkung und des Haar Maßes unter lokalen Eichtransformationen haben (ohne Eichfixierung) nur eichinvariante Funktionen der Linkvariablen einen Erwartungswert ungleich null. Nach dem Theorem von Elitzur kann auf dem Gitter die lokale Eichinvarianz wegen der Kompaktheit der Eichgruppe auch nicht spontan gebrochen werden [Eli75]. Wir können also für eichinvariante Funktionen der Linkvariablen auf die Eichfixierung verzichten.

3.2 Monte Carlo Simulation des Pfadintegrals

In diesem Kapitel wollen wir untersuchen, wie wir das Integral über alle Konfigurationen (3.51) in der Praxis auswerten können. Es ist klar, daß eine explizite Evaluation wegen der Laufzeit inakzeptabel ist. Pro Gitterpunkt gibt es 32 Integrationsvariablen. Bei einer Gittergröße von 16^4 Gitterpunkten müßten wir ein $d = 2097152$ dimensionales Integral lösen. Wendet wir numerische Quadraturformeln an, so müßte wir für m Stützstellen den Integranden m^d mal ausrechnen ([SH82], Kap. 4). Zudem ist der Fehler dabei von der Größenordnung $O(m^{-\frac{4}{d}})$, so daß die Anzahl der Stützstellen $m \sim \text{const}^d$ sein sollte, um den Fehler zu fixieren. Es ist deshalb klar, daß wir statistische Methoden benutzen müssen, um (3.51) zu berechnen. Dazu führen wir in Abschnitt 3.2.1 die Monte Carlo Methode ein, die uns in die Lage versetzt wird, das Integral durch eine Summe über speziell ausgewählte Konfigurationen zu nähern. Die Auswahl der Konfigurationen erfolgt durch einen Markov Prozeß, den wir in Abschnitt 3.2.2 beschreiben. Die restlichen Abschnitte widmen wir speziellen Verfahren, wie dem Metropolis Verfahren in Abschnitt 3.2.3 und dem Heat-Bath Verfahren in Abschnitt 3.2.4. Wir werden zwei wichtige Vertreter von Heat-Bath Algorithmen für die SU(2) genau untersuchen, den Algorithmus von Creutz in Abschnitt 3.2.5 und die Verbesserung von Kennedy und Pendleton in Abschnitt 3.2.6. In Abschnitt 3.2.7 beschreiben wir den Cabibbo-Marinari Pseudo-Heat-Bath Algorithmus für die SU(N), der es ermöglicht, die bekannten Verfahren für die SU(2) auf SU(2)-Untergruppen der SU(N) durchzuführen. Schließlich wenden wir uns im letzten Abschnitt 3.2.8 dieses Kapitels Überrelaxationsverfahren zu, die die durch den Markov Prozeß bedingte (Auto-) Korrelationslänge zwischen verschiedenen Konfigurationen verringern.

3.2.1 Die Monte Carlo Methode

Bei einer Monte Carlo Simulation von (3.51) stellen wir das Integral $I = \langle 0 | \hat{O} | 0 \rangle$ als Erwartungswert

$$I = \langle f \rangle_P = \int DU f(U) P(U) \quad (3.53)$$

einer Funktion $f(U)$ bezüglich einer normalisierten Wahrscheinlichkeitsdichte $P(U)$ dar¹⁴, für die

$$P(U) \geq 0 \quad \text{und} \quad \int DU P(U) = 1$$

¹⁴Im Prinzip gibt es unendlich viele Möglichkeiten, I derart darzustellen. Wir werden aber ein Kriterium kennenlernen, das uns die Wahl von $P(U)$ sehr erleichtert.

gilt. Der Zweck der Einführung von $P(U)$ ist es, daß Integral I bzw. den Erwartungswert $\langle f \rangle_P$ durch den Mittelwert über N unabhängige Stichproben $\{U\}_i \in P(U)$ gemäß

$$X = \frac{1}{N} \sum_{\substack{i=1 \\ \{U\}_i \in P(U)}}^N f(\{U\}_i) \quad (3.54)$$

zu nähern¹⁵. Um diese Approximation zu kontrollieren, ist es nötig, die Verteilungsdichte

$$P(X) = \int \prod_{i=1}^N D\{U\}_i P(\{U\}_i) \delta\left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\{U\}_j) - X\right)$$

zu berechnen. Für große N geht sie gemäß des "Zentralen Grenzwertsatzes" ([Kre79], Kap. 76 und Referenzen darin) unabhängig von $P(U)$ in eine Normalverteilung

$$P(X) \rightarrow \frac{1}{2\pi\sigma} \exp\left(-\frac{(X - \langle f \rangle_P)^2}{2\sigma}\right) \quad (3.55)$$

mit Erwartungswert $\langle f \rangle_P$ und Standardabweichung $\sigma = \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle_P - \langle f \rangle_P^2}{N}}$ über ([NO88], Kap. 8.1). Damit berechnet sich (3.53) mit den unabhängigen Stichproben $\{U\}_i \in P(U)$ näherungsweise gemäß

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\{U\}_i) \pm \frac{1}{\sqrt{N-1}} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\{U\}_i)^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\{U\}_i) \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (3.56)$$

wobei der zweite Term die Abschätzung für die Unsicherheit des Stichprobenmittelwerts darstellt. Der Fehler nimmt also für große N proportional zu $N^{-\frac{1}{2}}$ ab, was nicht zu verbessern ist, wenn man eine Monte Carlo Simulation durchführt. Dafür ist er aber im Gegensatz zu anderen numerischen Integrationsmethoden unabhängig von der Anzahl der Integrationsvariablen. Das macht die Monte Carlo Methode für uns zur einzig durchführbaren Methode, um (3.53) bzw. (3.51) näherungsweise zu berechnen.

Importance Sampling

Wie oben bereits angedeutet, gibt es beliebig viele Möglichkeiten, $P(\{U\})$ zu wählen. Wichtig für uns ist, daß wir mit möglichst wenigen Stichproben eine gute Näherung des Integral (3.51) erhalten, was bedeutet, daß der Fehler des Stichprobenmittelwerts klein sein soll. In unserem Fall (3.51) ist der Integrand proportional

$$O(\{U\}, M^{-1}(\{U\})) \exp(-S_{\text{eff}}(\{U\}))$$

und ändert sich durch den Boltzmann Faktor $\exp(-S_{\text{eff}}(\{U\}))$ rapide. Eine Gleichverteilungsdichte $P(\{U\}) = \text{const}$ der Konfigurationen ist demnach nicht besonders

¹⁵Die Notation $\{U\}$ beschreibt explizit die Menge aller Linkvariablen im System. Die Unterscheidung zur Notation U , die wir bisher dafür benutzt haben, wird notwendig, um verschiedene Mengen $\{U\}_i$ von einer Linkvariablen $U_i \equiv U_\mu(n)$ mit bestimmtem Ort n und Richtung μ unterscheiden zu können.

sinnvoll, weil die meisten davon irrelevant für den Wert des Integral wären¹⁶. Stattdessen sollten die relevanten Konfigurationen mit höherer Wahrscheinlichkeit gewählt werden, was in der Literatur "Importance Sampling" genannt wird. Es bietet sich also an, die Konfigurationen gemäß des Boltzmann Faktors

$$P_{eq}(\{U\}) = \frac{1}{Z} \exp(-S_{\text{eff}}(\{U\})) \quad (3.57)$$

zu wählen, so daß wir für diese Gleichgewichtsverteilungsdichte gemäß (3.56) für (3.51) näherungsweise

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{i=1 \\ \{U\}_i \in P_{eq}(U)}}^N O(\{U\}_i, M^{-1}(\{U\}_i)) \quad (3.58)$$

mit der Streuung des Mittelwerts

$$\sigma^2 = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{\substack{i=1 \\ \{U\}_i \in P_{eq}(U)}}^N [O(\{U\}_i, M^{-1}(\{U\}_i)) - \bar{O}]^2 \quad (3.59)$$

erhalten¹⁷. Es ist klar, daß $P_{eq}(\{U\})$ eine korrekt normalisierte Dichte darstellt. Eine wichtige Voraussetzung für die Gültigkeit der Approximation (3.56) ist die statistische Unabhängigkeit der Stichproben. In der Praxis wird eine Konfiguration $\{U\}(t)$ sukzessive –beginnend mit einer frei oder zufällig wählbaren Anfangskonfiguration $\{U\}(0)$ – in Abhängigkeit der jeweils vorangegangenen $\{U\}(t-1)$ erzeugt. Ein solcher (zeitlicher) Schritt heißt für einen Link "Update" und für eine Konfiguration "Sweep". Man benutzt nur solche Verfahren, die im Limes $t \rightarrow \infty$ eine "thermalisierte" (gemäß $P_{eq}(\{U\})$ verteilte) Konfiguration $\{U\}$ erzeugen¹⁸. Diese trägt dann als eine Stichprobe zum Mittelwert (3.58) bei, was man anschaulich in diesem Zusammenhang als "Messung der Observablen" bezeichnet. Auf diese Weise kann man beliebig viele Stichproben erzeugen. Es ist aber natürlich klar, daß wir nicht für eine jede Stichprobe unendlich lange rechnen können. Stattdessen gehen wir in zwei Schritten vor: Zunächst stellen wir sicher, daß wir solange rechnen, bis wir die Gleichgewichtsverteilungsdichte $P_{eq}(U)$ (näherungsweise) erreicht haben. Danach wählen wir in so großen zeitlichen Abständen jeweils eine Stichprobe, daß sie, soweit es der Erzeugungsprozeß zuläßt, statistisch unabhängig voneinander sind. Die Anzahl der Schritte bzw. die Laufzeit, die man zwischen den Messungen benötigt, um das zu erreichen, hängt i.a. von dem gewählten Algorithmus, der

¹⁶Eine Konfiguration ist dabei eine Bezeichnung für die Menge aller Linkvariablen, die jede für sich einen bestimmten Wert hat, und entspricht somit einem Punkt im Konfigurationsraum (aufgespannt durch die Linkvariablen).

¹⁷In [NO88], Kap. 8.1 wird gezeigt, daß $P(U)$ möglichst viel Überlapp mit dem zu berechnenden Integranden haben sollte, um die Abweichung bei festem N zu minimieren. Es werden auch eindrucksvolle numerische Beispiele vorgestellt, die belegen, wie "mächtig" Importance Sampling in höheren Dimensionen wird.

¹⁸Wir betrachten anschließend Kriterien für Verfahren, die sicherstellen, daß man das Gleichgewicht im Limes erreicht. Solch ein Verfahren bzw. Algorithmus wird häufig auch "Thermalisierungsalgorithmus" genannt.

betrachteten Observablen und den gewählten Parametern (z.B. Kopplungskonstante, Hoppingparameter) ab. Wir werden im folgenden Verfahren zum Erzeugen von Stichproben kennenlernen und untersuchen.

3.2.2 Updating als Markov Prozeß

Mathematisch beschreiben wir den Erzeugungsvorgang einer Konfiguration $\{U\}$, die zum Stichprobenmittelwert (3.58) beiträgt, durch einen Markov Prozeß. Die einzelnen Konfigurationen $\{U\}(0), \{U\}(1), \dots, \{U\}(t), \dots$ sind Elemente einer irreduziblen, aperiodischen und positiven Markov Kette mit der Dichte $P_t(\{U\})$ zum Zeitpunkt t . Das bedeutet, daß der Übergang zwischen zwei Konfigurationen ein stochastischer Prozeß ist, der für $\{U\}(t)$ nur von $\{U\}(t-1)$ abhängt und durch eine Übergangswahrscheinlichkeitsdichte $W(\{U\} \rightarrow \{U\}')$ beschrieben wird, die normiert ist

$$\int DU W(\{U\} \rightarrow \{U\}') = 1$$

und Ergozität sicherstellt

$$W(\{U\} \rightarrow \{U\}') > 0.$$

Bei einem Übergang ändert sich die Dichte von $P(\{U\})$ auf

$$P(\{U\}') = \int DU P(\{U\}) W(\{U\} \rightarrow \{U\}').$$

Für eine solche Kette kann man zeigen, daß das System unabhängig von der Startkonfiguration $\{U\}(0)$ nach unendlich vielen Übergängen $t \rightarrow \infty$ im Gleichgewicht ist (mit einer Gleichgewichtswahrscheinlichkeitsdichte $P_{eq}(\{U\})$ als Fixpunkt der Übergangswahrscheinlichkeitsdichte) und daß der zeitliche Mittelwert der Kette zum Mittelwert der Gesamtheit wird ([Rot98], Kap. 16.2 und Referenzen dort).

Detailed Balance

Im Limes möchten wir, daß $\{U\}$ gemäß einer bestimmten Dichte, nämlich $P_{eq}(\{U\})$, verteilt ist. Eine hinreichende Bedingung an die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte für einen Markov Prozeß, wie er oben beschrieben ist, ist die Forderung nach Reversibilität im Gleichgewicht

$$P_{eq}(\{U\}_i) W(\{U\}_i \rightarrow \{U\}_j) = P_{eq}(\{U\}_j) W(\{U\}_j \rightarrow \{U\}_i), \quad (3.60)$$

die oft auch als "Detailed Balance" bezeichnet wird. Summiert man (3.60) z.B. über i , so erhält man

$$P_{eq}(\{U\}_j) = \int DU_i P_{eq}(\{U\}_i) W(\{U\}_i \rightarrow \{U\}_j),$$

was bedeutet, daß, wenn das System im Gleichgewicht ist, es darin bleibt. Weiter kann man zeigen, daß mit einer Übergangswahrscheinlichkeitsdichte, die (3.60) erfüllt, das System mit jedem Update der Gleichgewichtsverteilung näher kommt ([Cre83], Kap. 18). Die Bedingung (3.60) für die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte bestimmt diese nicht eindeutig, so daß man diese Freiheit dazu nutzen kann, effektive Algorithmen zu implementieren, die den Updating Prozeß durchführen.

3.2.3 Der Metropolis Algorithmus

Ein sehr einfacher und oft verwendeter Algorithmus ist der Metropolis Algorithmus [MRR⁺53]. Bei dieser Methode berechnet sich Übergangswahrscheinlichkeitsdichte gemäß

$$W(\{U\}_i \rightarrow \{U\}_j) = \text{const}^{-1} \min \left\{ 1, \frac{P_{eq}(\{U\}_j)}{P_{eq}(\{U\}_i)} \right\}, \quad (3.61)$$

wobei eine Konstante die Normalisierung sicherstellt. Man sieht sofort, daß sie die Bedingungen für die Generierung einer irreduziblen, aperiodischen und positiven Markov Kette und auch die Reversibilitätsbedingung (3.60) erfüllt. Mit einem Computer läßt sich diese Übergangswahrscheinlichkeitsdichte leicht simulieren. Zunächst wählt man (zufällig) eine Startkonfiguration. Anschließend führt man Änderungen an den Gittervariablen durch (z.B. weist man den Linkvariablen einen neuen zufälligen Wert zu). Die dadurch neu entstandene Konfiguration akzeptiert man immer, wenn ihre Wirkung kleiner ist als die der Vorgängerkonfiguration. Wenn ihre Wirkung größer ist, akzeptiert man sie dennoch mit einer Wahrscheinlichkeit, die gleich dem Verhältnis der Boltzmann Faktoren ist. In der Praxis kann man nur lokale Änderungen, Änderungen an einer Variablen, durchführen, da ansonsten wegen der großen Änderungen in der Wirkung die Akzeptanzrate für Konfigurationen, bei denen die Wirkung gestiegen ist, zu klein wird und das System sich nur langsam durch den Konfigurationsraum bewegt¹⁹.

Nichtlokalität der effektiven Wirkung

Leider ist aber unsere Wirkung $S_{\text{eff}} = S_G - \ln \det M$ wegen der (Fermionen-) Determinante nicht lokal, so daß der Algorithmus auch bei lokalen Änderungen den Konfigurationsraum nur langsam durchläuft. Ohnehin stellt die für jeden Markov Schritt zu berechnende Determinante einer sehr großen, wenn auch nur dünn besetzten, Matrix ein erhebliches rechenstechnisches Problem dar. Für die meisten Simulationen ignoriert man deshalb die dynamischen Fermionen und setzt

$$\det M(\{U\}) \equiv 1. \quad (3.62)$$

Diese Approximation wird "quenched" genannt, weil –anschaulich gesprochen– dadurch die geschlossenen Fermionenschleifen in den Feynman-Diagrammen zusammengedrückt werden und somit aus dem Vakuum keine virtuellen Fermionenpaare erzeugt werden können²⁰. Es gibt aber auch Methoden, die dynamische Fermionen mehr oder weniger exakt bei der Generierung von Konfigurationen gemäß (3.60) berücksichtigen. Trotzdem muß bei den meisten dieser Algorithmen pro Sweep mindestens eine Operation der Größenordnung "Matrixinversion" durchgeführt werden (siehe z.B. Referenzen in [Thi99], Kap. 13.7.4). In dieser Arbeit beschränken wir uns daher auf statische Fermionen, so daß wir unsere Stichproben gemäß

$$P_{eq}(\{U\}) = \frac{1}{Z} \exp(-S_G(\{U\})) \quad (3.63)$$

¹⁹Es ist klar, daß eine einzelne lokale Änderung die Ergozitätsforderung des Markov Prozesses verletzt. Allerdings wird die Ergozität dadurch wieder erreicht, daß man nacheinander (oder auch zufällig gezogen) jede Linkvariable lokal ändert.

²⁰In der Störungsrechnung steht der Ausdruck $\ln \det M$ für die Summe (über i) von geschlossenen Fermionenschleifen mit i externen Gluonen (bzw. Links) ([MM97], Kap. 5.1).

wählen wollen²¹. Wir haben somit mit dem Metropolis Algorithmus einen Algorithmus gefunden, der im Prinzip geeignet ist, unsere Konfigurationen zu erzeugen. In der Praxis stellt sich aber heraus, daß der Algorithmus auf Grund des lokalen Updates sehr starke Korrelationen zwischen den erzeugten Konfigurationen hervorruft und somit sehr viel Rechenzeit benötigt, um einigermaßen unkorrelierte Konfigurationen zu erzeugen, die dann zur Berechnung des Mittelwerts (3.58) benutzt werden können.

3.2.4 Die Heat-Bath Methode

Eine effektivere Methode erhält man durch die Wahl der kanonischen Verteilungsdichte

$$W(\{U\} \rightarrow \{U\}') = Z^{-1} \exp(-S_G(\{U\}')) \quad (3.64)$$

als Übergangswahrscheinlichkeitsdichte, da der Übergang damit unabhängig von $\{U\}$ ist und folglich immer stattfindet, so daß aufeinander folgende Konfigurationen weniger korreliert sind als beim Metropolis Algorithmus [CJR79]. Es ist offensichtlich, daß (3.64) die Bedingungen zur Erzeugung einer irreduziblen, aperiodischen und positiven Markov Kette sowie die Reversibilitätsbedingung (3.60) erfüllt. Eine direkte Simulation des Update Prozesses mit (3.64) ist jedoch wegen der großen Anzahl von Konfigurationen unmöglich. Stattdessen kann man aber (3.64) lokal anwenden, indem man alle Linkvariablen bis auf eine festhält. Ein solcher Algorithmus heißt "Heat-Bath" Algorithmus, weil der zu erneuernde Link mit einem unendlich großen Hitzebad in Kontakt gebracht wird. Der Übergang (3.64) wird somit durch

$$W(\{U\} \rightarrow \{U\}') = \prod_x W_x(\{U\} \rightarrow \{U\}') \prod_{y \neq x} \delta(U_y - U'_y) \quad (3.65)$$

beschrieben, wobei x und y über die Linkvariablen laufen und

$$W_x(\{U\} \rightarrow \{U\}') \equiv W_x(\{U\}')$$

die bedingte Übergangswahrscheinlichkeitsdichte (3.64) bezeichnet, bei der alle Links außer dem x . festgehalten werden²². Sie ist idempotent, da

$$\int W(\{U\} \rightarrow \{U\}') dU = 1$$

ist. In einer numerischen Berechnung muß man diese bedingte Übergangswahrscheinlichkeitsdichte nacheinander (oder zufällig gezogen) für jede Linkvariable simulieren, was im Prinzip einfach ist, wenn man das Integral über die Verteilungsdichte $W_x(\{U\}) dU_x = dE_x$ und ihr Inverses E_x^{-1} kennt. Mit einer gleichverteilten

²¹Es gibt einige phänomenologische Hinweise, daß die geschlossenen Quarkschleifen in dem Niederenergiebereich hadronischer Physik eine geringe Rolle spielen ([MM97], Kap. 5.1 und Referenzen darin).

²²Selbstverständlich muß diese bedingte Übergangswahrscheinlichkeitsdichte lokal alle Bedingungen erfüllen, die (3.64) global erfüllt, damit das Gesamtsystem gemäß (3.65) zum Gleichgewicht geführt wird. Insbesondere sind dabei lokale Ergozität und lokale Reversibilität im Gleichgewicht wichtig.

Zufallszahl $r \in [0, 1]$ und dem Wertebereich der Linkvariablen $U_x \in [a, b]$ kann man die Linkvariablen U_x wegen der Translationsinvarianz von dE_x mit

$$E^{-1}\{E(a) + r(E(b) - E(a))\}$$

erzeugen²³ ([MM97], Kap. 7.3 und [Thi99], Kap. B).

Rejection Methode

Die explizite Integration und anschließende Invertierung ist meist umständlich oder unmöglich. Deshalb wenden wir die "Rejection Methode" an²⁴, indem wir eine approximative Hilfsdichte

$$W_x^0(\{U\}) \geq W_x(\{U\})$$

benutzen, deren Integral E_x^0 endlich ist und wir explizit berechnen und invertieren können [PTVF93]. Wir generieren mit W_x^0 –wie oben für W_x erläutert– die Linkvariable U_x und berücksichtigen die wirkliche Verteilung mit einem "accept-reject" Schritt, indem wir für jede mit W_x^0 erzeugte Variable U_x eine weitere gleichverteilte Zufallsvariable $r' \in [0, 1]$ benutzen, die entscheidet, ob die neue Variable U_x angenommen wird oder nicht. Für

$$r' \leq \frac{W_x(\{U\})}{W_x^0(\{U\})} \min_{a \leq U_x \leq b} \frac{W_x^0(\{U\})}{W_x(\{U\})} \leq 1 \quad (3.66)$$

akzeptieren wir den neuen Link U_x , ansonsten verwerfen wir ihn. Die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte zu diesem Zweistufenprozeß ist gegeben durch

$$W_x^{(1)} = \lambda_x W_x + (1 - \lambda_x).$$

Dabei ist die Akzeptanzrate des Zweistufenprozesses gegeben durch

$$\lambda_x = \frac{1}{b - a} \min_{a \leq U_x \leq b} \frac{W_x^0(\{U\})}{W_x(\{U\})} \int dU_x \frac{W_x(\{U\})}{W_x^0(\{U\})}.$$

Je besser die Approximation von W_x^0 an W_x ist, desto größer ist die Akzeptanzrate, und desto schneller erhält man auch die gewünschte Übergangswahrscheinlichkeitsdichte W_x . Denn wegen der Idempotenz von W_x ist die erhaltene Dichte nach n Versuchen

$$W_x^{(n)} = (W_x^{(1)})^n = (1 - (1 - \lambda_x)^n)W_x + (1 - \lambda_x)^n.$$

Im Limes geht sie in die gewünschte Dichte

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W_x^{(n)} = W_x$$

über. In der Praxis muß man schließlich nach endlich vielen Schritten abbrechen, was kein Problem darstellt, da $W_x^{(n)}$ als stationäre Verteilung W_x hat und natürlich "Detailed Balance" erfüllt²⁵. Der optimale Wert für n wird normalerweise numerisch

²³Dabei bezeichnet das Intervall $[a, b]$ momentan symbolisch die Grenzen der Parameter, mit denen die Linkvariablen im konkreten Fall dargestellt werden.

²⁴Sie ist auch bekannt als "Von Neumann Methode".

²⁵Beides wegen der Idempotenz von W_x .

gefunden, indem man fordert, für wichtige Observablen in gegebener Rechenzeit möglichst kleine statistische Fehler zu erhalten. Der Heat-Bath Algorithmus ist im Prinzip equivalent zu jedem anderen ergodischen Algorithmus, den man mit einer großen Zahl von Wiederholungen ("Hits") der Reihe nach lokal anwendet²⁶.

3.2.5 Der Heat-Bath Algorithmus von Creutz für die SU(2)

Wir betrachten zunächst den Heat-Bath Algorithmus für Linkvariablen als Elemente der SU(2) [Cre80]. Einen Link $U \in \text{SU}(2)$ parametrisieren wir mit

$$U = a_0 + i \sum_{k=1}^3 a_k \sigma_k = a_0 + \vec{a} \vec{\sigma}, \quad (3.67)$$

wobei σ_i die Paulimatrizen bezeichnet²⁷. Aus der Unitarität $U^{-1} = U^\dagger$ folgt, daß $a^2 = a_0^2 + \vec{a}^2 = 1$ gelten muß. Das invariante Haar Maß DU mit $\int DU = 1$ (siehe auch Abschnitt 3.1.3) ist dadurch ein Integral über die Oberfläche der vierdimensionalen Einheitskugel

$$DU = \frac{1}{2\pi^2} \delta(a^2 - 1) d^4 a. \quad (3.68)$$

Es sei nun U der gemäß (3.65) lokal zu ändernde Link. Da die Wirkung $S_{\text{eff}} = S_G$ lokal ist (wir rechnen quenched!), gibt es nach (3.48b) nur 6 Terme \tilde{U}_r , bestehend aus je 3 Links, die mit unserem gewählten Link in Berührung kommen und somit zu der Übergangswahrscheinlichkeitsdichte beitragen. Es ist also

$$dE_U(U) \sim \exp \left(\frac{\beta}{2} \text{Re Sp} \left(U \sum_{r=1}^6 \tilde{U}_r \right) \right) dU. \quad (3.69)$$

Wir nutzen nun den Umstand, daß eine Summe von Elementen der SU(2) proportional zu einem weiteren Element der SU(2) ist²⁸ und schreiben $\sum_r \tilde{U}_r = k \bar{U}$ mit $\bar{U} \in \text{SU}(2)$ und

$$k = \left(\det \sum_r \tilde{U}_r \right)^{\frac{1}{2}} \geq \sqrt{6}.$$

²⁶Insbesondere wird in der Literatur oftmals von einem "n-Hit-Metropolis" Algorithmus gesprochen, wobei man meint, daß man den Metropolis Algorithmus lokal n mal zum Update eines Links benutzt, bevor man den nächsten Link bearbeitet. Für diesen Fall spricht man von der Äquivalenz zum Heat-Bath Algorithmus bei $n = 127$.

²⁷In der Folge bezeichnet $f(U)$ eine Funktion des Links U im Unterschied zu $f(\{U\})$ als einer Funktion der Konfiguration.

²⁸Dies sieht man leicht, indem man die explizite Darstellung $U = (\det A)^{-\frac{1}{2}} A \in \text{SU}(2)$ mit $A = \begin{pmatrix} 1 - ic & -b - ia \\ b - ia & 1 + ic \end{pmatrix}$ anwendet ([Wag98], Kap. 16.7.2) und für $U, U' \in \text{SU}(2)$ die Summe $U + U' = \sqrt{\det(U + U')} U''$ mit $U'' \in \text{SU}(2)$ ausrechnet. Dabei erhält man auch, daß $\sqrt{\det(U + U')} \geq 2$ gilt.

Dies wenden wir zusammen mit der Invarianz des Haar Maßes an und erhalten für (3.69) mit Hilfe von (3.67) und (3.68)

$$\begin{aligned} dE_U(U\bar{U}^{-1}) &\sim \exp\left(\frac{\beta}{2} k \operatorname{Re} \operatorname{Sp} U\right) dU \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \exp(\alpha a_0) \delta(a^2 - 1) d^4 a \end{aligned} \quad (3.70)$$

mit $\alpha = \beta k > 0$. Die Generierung eines neuen Links U' für U reduziert sich nach (3.70) auf die Generierung eines zufälligen Punkts auf der vierdimensionalen Kugeloberfläche mit exponentieller Gewichtung in der a_0 Richtung. Dieser repräsentiert nach (3.67) einen Link U^* . Der alte Link U wird ersetzt durch $U' = U^*\bar{U}^{-1}$. Die Integration über $|\vec{a}|$ kann mit Hilfe der Deltafunktion²⁹ durchgeführt werden und (3.70) vereinfacht sich dadurch zu

$$dE_U(U\bar{U}^{-1}) = \frac{1}{4\pi N} da_0 d\Omega (1 - a_0^2)^{\frac{1}{2}} \exp(\alpha a_0), \quad (3.71)$$

wobei $d\Omega$ der differentielle Raumwinkel von \vec{a} ist. Die Normierungskonstante in (3.71) erhalten wir durch Integration

$$N = \int_{-1}^1 da_0 (1 - a_0^2)^{\frac{1}{2}} \exp(\alpha a_0) = \int_0^\pi dt \sin^2 t \exp(\alpha \cos t).$$

Nach einer partiellen Integration über

$$\int dt \sin t \exp(\alpha \cos t) = -\frac{1}{\alpha} \exp(\alpha \cos t)$$

und unter Benutzung von [AS72], Gleichung 9.6.19 ergibt sich

$$N = \frac{\pi}{\alpha} I_1(\alpha).$$

Damit ist die Dichte $W(a_0)$ aus (3.71) für $-1 < a_0 < 1$ gegeben durch

$$W(a_0) = N^{-1} (1 - a_0^2)^{\frac{1}{2}} \exp(\alpha a_0). \quad (3.72)$$

Die Verteilungsfunktion für a_0 ist nicht analytisch berechenbar und invertierbar, so daß wir stattdessen die Rejection Methode benutzen:

- Wir generieren a'_0 für $-1 \leq a'_0 \leq 1$ gemäß

$$W_0(a'_0) = N_0^{-1} \alpha \exp(\alpha a'_0), \quad (3.73)$$

indem wir ein gleichverteiltes $r \in [\exp(-\alpha), \exp(\alpha)]$ erzeugen, so daß $a'_0 = \frac{1}{\alpha} \ln r$ mit der Dichte

$$W_0(a'_0) = \frac{\int_{\exp(-\alpha)}^{\exp(\alpha)} \delta(a'_0 - \frac{1}{\alpha} \ln r) dr}{\int_{\exp(-\alpha)}^{\exp(\alpha)} dr}$$

für $-1 \leq a'_0 \leq 1$ gilt. Die Normierungskonstante aus (3.73) berechnet sich dabei zu $N_0 = 2 \frac{\sinh \alpha}{\alpha}$.

²⁹Es gilt $\int \delta(f(x)) dx = \sum_i \int \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i) dx$ für einfache Nullstellen $f(x_i) = 0$ und $f'(x_i) \neq 0$.

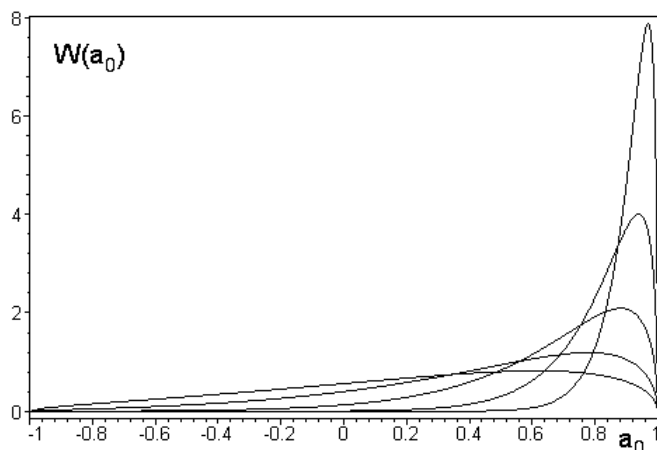


Abbildung 3.4: Die Dichte $W(a_0)$ (3.72) für verschiedene Werte $\alpha = 1, 2, 4, 8, 16$ (von unten $\alpha = 1$ nach oben $\alpha = 16$). Für größere Werte von α werden Werte $a_0 \sim 1$ immer wahrscheinlicher.

- Mit Wahrscheinlichkeit $(1 - a_0'^2)^{\frac{1}{2}}$ nehmen wir das erzeugte a_0' an, indem wir eine Zufallszahl $r' \in [0, 1]$ würfeln und die linke Seite der Bedingung (3.66) testen. Wir erhalten damit (3.72) durch

$$W(a_0) = \frac{\int_{-1}^1 da_0' \int_0^1 dr' W_0(a_0') \theta(1 - a_0'^2 - r'^2) \delta(a_0' - a_0)}{\int_{-1}^1 da_0' \int_0^1 dr' W_0(a_0') \theta(1 - a_0'^2 - r'^2)}, \quad (3.74)$$

wobei der Nenner für die korrekte Normierung sorgt.

- Die Richtung von \vec{a} generieren wir gleichförmig gemäß $d\Omega = d\phi d(\cos\theta)$.
- Wir berechnen $U^* = a_0 + \vec{a}\vec{\sigma}$ und ersetzen den alten Link U durch $U' = U^* \bar{U}^\dagger$.

In Abb. 3.4 ist $W(a_0)$ für α Werte von 1, 2, 4, 8, 16 dargestellt. Man sieht deutlich, daß für größere Werte von α Werte von $a_0 \sim 1$ immer wahrscheinlicher werden. Analytisch gilt für große α nach [AS72], Gleichung 9.7.1, daß $N \sim \alpha^{-\frac{3}{2}} \exp \alpha$ ist. Somit trägt für große α tatsächlich $W(a_0) \sim \exp(\alpha(a_0 - 1))$ nur für $a_0 \sim 1$ bei. Wir berechnen die Wahrscheinlichkeit $P_C(\alpha)$, mit der ein gemäß (3.73) erzeugtes a_0' akzeptiert wird. Sie ist gegeben durch den Nenner von (3.74). Wir erhalten

$$P_C(\alpha) = N_0^{-1} \int_{-1}^1 da_0' (1 - a_0'^2)^{\frac{1}{2}} \exp(\alpha a_0') = \frac{N}{N_0} = \frac{\pi I_1(\alpha)}{2 \sinh \alpha}. \quad (3.75)$$

In Abb. 3.5 ist die Akzeptanzwahrscheinlichkeit $P_C(\alpha)$ für $1 \leq \alpha \leq 20$ dargestellt. Sie fällt kontinuierlich mit wachsendem α . Da $k > \sqrt{6}$ gilt und $\beta \sim 2$ physikalisch interessant ist, ist α mindestens von der Größenordnung 5, in der Praxis aber meist von der Größenordnung 16. Damit werden die mit W_0 erzeugten a_0 durch den "accept-reject" Schritt leider zu knapp 70% abgelehnt, was den Algorithmus in der Praxis ineffizient macht.

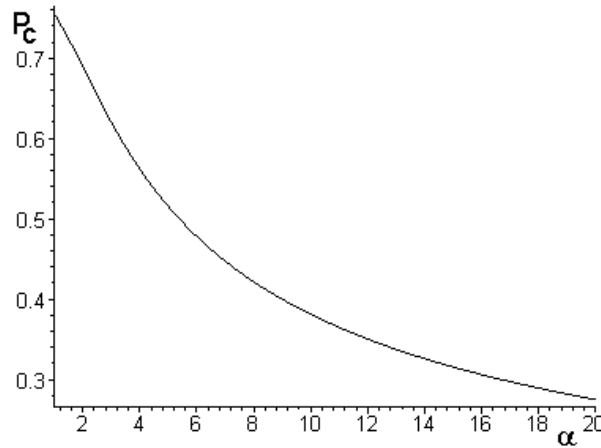


Abbildung 3.5: Die Wahrscheinlichkeit $P_C(\alpha) = \frac{\pi I_1(\alpha)}{2 \sinh \alpha}$ des Creutz Algorithmus, ein gemäß (3.73) vorgeschlagenes a'_0 im "accept-reject" Schritt zu akzeptieren. In der Praxis sind Werte von $\alpha = \beta k \sim 16$ üblich. Demnach sinkt die Wahrscheinlichkeit, von ca. 75% für $\alpha = 1$ auf 30% für $\alpha = 16$.

3.2.6 Der Kennedy-Pendleton Algorithmus für die SU(2)

Es gibt eine verbesserte Variante des Creutz Algorithmus, bei der die Akzeptanz gerade für $a_0 \sim 1$ besser wird [KP85]. Wir führen dazu in (3.71) bzw. (3.74) die Variablensubstitution $\delta = (1 - a_0)^{\frac{1}{2}}$ durch und erhalten

$$W'(\delta) d\delta = N'^{-1} (1 - \frac{1}{2} \delta^2)^{\frac{1}{2}} \delta^2 \exp(-\alpha \delta^2) d\delta \quad (3.76)$$

für $0 < \delta < \sqrt{2}$. Für große α werden Werte $\delta \sim 0$ häufig. Die Verteilungsfunktion ist nicht explizit berechenbar, so daß wir wieder die Rejection Methode benutzen:

- Wir generieren zunächst ein δ' für $0 < \delta' < \infty$ gemäß

$$W'_0(\delta') = N_0'^{-1} \delta'^2 \exp(-\alpha \delta'^2). \quad (3.77)$$

Wir benutzen dazu eine gleichverteilte Zufallszahl $X \in [0, 1]$ und setzen $\xi = (-\frac{1}{\alpha} \ln(X))^{\frac{1}{2}}$. ξ ist verteilt mit der Dichte

$$W_1(\xi) = \int_0^1 \delta(\xi - (-\frac{1}{\alpha} \ln(X))^{\frac{1}{2}}) dX = 2\xi \alpha \exp(-\alpha \xi^2) \quad (3.78)$$

für $0 \leq \xi < \infty$. Wir generieren eine zweite gleichverteilte Zufallszahl $X' \in [0, 1]$ und setzen $\rho = \chi \cos(2\pi X')$ bzw. $\rho' = \chi \sin(2\pi X')$, wobei χ gemäß (3.78) verteilt ist. Die Dichte von ρ bzw. ρ' berechnen wir aus

$$W_2(\rho) = \int_0^\infty d\chi \int_0^1 dX' W_1(\chi) \delta(\rho - \chi \cos(2\pi X')) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp(-\alpha \rho^2), \quad (3.79)$$

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

indem wir erst $\theta = 2\pi X'$ substituieren, dann das Integral in kartesischen Koordinaten umschreiben und schließlich eine Gaussintegration durchführen. Wir kombinieren nun eine der nach (3.79) verteilten Zahlen ρ oder ρ' mit einer nach (3.78) verteilten ξ , indem wir $\delta' = (\xi^2 + \rho^2)^{\frac{1}{2}}$ setzen. Die Dichte von δ' berechnen wir nach

$$W'_0(\delta') = \frac{\int_0^\infty d\xi \int_{-\infty}^\infty d\rho W_1(\xi) W_2(\rho) \delta(\delta' - (\xi^2 + \rho^2)^{\frac{1}{2}})}{\int_0^\infty d\xi \int_{-\infty}^\infty d\rho W_1(\xi) W_2(\rho)} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \alpha^{\frac{3}{2}} \delta'^2 \exp(-\alpha \delta'^2),$$

indem wir das Integral in Polarkoordinaten umschreiben. Demnach ist

$$N'_0 = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \alpha^{-\frac{3}{2}}$$

in (3.77). Wir sind also mit 3 gleichverteilten Zufallszahlen in der Lage, 2 nach (3.77) verteilte $0 \leq \delta' < \infty$ zu erzeugen.

- Mit Wahrscheinlichkeit $(1 - \frac{1}{2}\delta'^2)^{\frac{1}{2}}$ nehmen wir ein mit W'_0 erzeugtes δ' an, wenn $\delta' < 2$. Wir lehnen es auf alle Fälle ab, falls $\delta' \geq 2$. Wir erhalten auf diese Weise mit einer weiteren Zufallszahl $r' \in [0, 1]$ die Verteilungsdichte

$$W(\delta) = \frac{\int_0^\infty d\delta' \int_0^1 dr' W'_0(\delta') \theta(1 - \frac{1}{2}\delta'^2 - r'^2) \delta(\delta' - \delta)}{\int_0^\infty d\delta' \int_0^1 dr' W'_0(\delta') \theta(1 - \frac{1}{2}\delta'^2 - r'^2)} \quad (3.80)$$

für $0 \leq \delta \leq \sqrt{2}$. Die Normierungskonstante berechnen wir, indem wir erst $\exp(-\alpha)$ aus dem Integral rausziehen, $t = 1 - \delta^2$ substituieren und dann wie bei der Normierung von (3.71) fortfahren. Wir erhalten

$$N' = 2^{-\frac{3}{2}} \exp(-\alpha) N = 2^{-\frac{3}{2}} \frac{\pi}{\alpha} \exp(-\alpha) I_1 \alpha.$$

- Schließlich setzen wir $a_0 = 1 - \delta^2$ und berechnen $U^* = a_0 + \vec{a}\vec{\sigma}$ und ersetzen den alten Link U durch $U' = U^* \bar{U}^\dagger$.

Damit erhalten wir mit diesem Verfahren für die Akzeptanzwahrscheinlichkeit $P_K(\alpha)$ gegeben durch den Nenner von (3.80)

$$P_K(\alpha) = \sqrt{2\pi\alpha} \exp(-\alpha) I_1(\alpha). \quad (3.81)$$

In Abb. 3.6 ist sie für $1 \leq \alpha \leq 20$ dargestellt. Wie man im Vergleich mit Abb. 3.5 sieht, ist sie dem Creutz Algorithmus für Werte $\alpha > 2$ überlegen. Insbesondere für realistische $\alpha \sim 16$ steigt die Akzeptanz auf über 95%.

In der Praxis empfiehlt es sich, beide Algorithmen zu verwenden, indem wir eine einfache "If-Then" Abfrage in das Simulationsprogramm einbauen, die für $\alpha \leq 2$ den Creutz Algorithmus und für $\alpha > 2$ den Kennedy-Pendleton Algorithmus benutzt. Damit können wir sicherstellen, daß die Akzeptanz unabhängig von α niemals kleiner als ca. 70% ist. Beide Algorithmen lassen sich zudem leicht parallelisieren und somit auf einem Vektor- bzw. Parallelrechner ausführen, denn das lokale Update benötigt keinen großen Kommunikationsaufwand im Vergleich zur Rechenzeit [FM87].

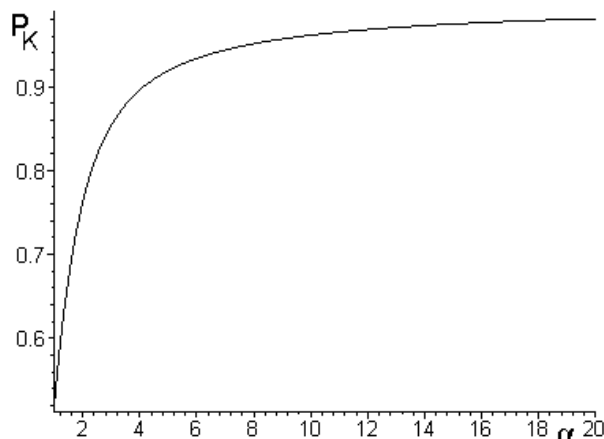


Abbildung 3.6: Die Wahrscheinlichkeit $P_K(\alpha) = \sqrt{2\pi\alpha} \exp(-\alpha) I_1(\alpha)$ des Kennedy-Pendleton Algorithmus, ein gemäß (3.77) vorgeschlagenes δ' im "accept-reject" Schritt zu akzeptieren. In der Praxis sind Werte von $\alpha = \beta k \sim 16$ üblich. Demnach steigt die Wahrscheinlichkeit, von ca. 60% für $\alpha = 1$ auf 95% für $\alpha = 16$.

3.2.7 Der Pseudo-Heat-Bath Algorithmus von Cabibbo-Marinari

Für $N > 2$ wird die direkte Konstruktion eines Heat-Bath Algorithmus immer schwieriger. Im Fall der $SU(3)$ gibt es eine direkte Verallgemeinerung des Creutz Algorithmus [Pie81]. Dieser ist jedoch eine Größenordnung langsamer als der von Creutz für die $SU(2)$. Stattdessen verwenden wir einen "Pseudo-Heat-Bath" Algorithmus [CM82a]. Er heißt so, weil er das Heat-Bath Update der einzelnen Links $U \in SU(N)$ auf das Update von $SU(2)$ Untergruppen der $SU(N)$ reduziert. Für das Update der Untergruppen kennen wir nach den letzten beiden Abschnitten effiziente Verfahren. Um die Funktionsweise der Projektion zu verstehen, definieren wir zunächst eine Menge

$$F = \{A_k : SU(2) \text{ Untergruppe von } SU(N), k = 1 \dots m\}$$

bestehend aus m $SU(2)$ Untergruppen A_k derart, daß es keine Untergruppe der $SU(N)$ gibt, die unter Multiplikation mit F von links invariant ist. Eine minimale Wahl von F ist z.B. gegeben durch die Menge der Untergruppen mit folgender Gestalt

$$a_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & (\alpha_k) & & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \in A_k, \quad (3.82)$$

wobei die Matrix $\alpha_k \in SU(2)$ Elemente in a_k an den Stellen (k, k) , $(k+1, k)$, $(k, k+1)$ und $(k+1, k+1)$ hat. Eine Erneuerung eines Links $U \in SU(N)$ führen wir mit einer

Folge von Erneuerungen der Matrizen a_k bzw. der α_k durch. Es sei

$$U' = a_m a_{m-1} \dots a_1 U ,$$

was wir mit $U^{(k)} = a_k U^{(k-1)}$ und $U^{(0)} = U$ als $U^{(m)} = U'$ schreiben. Die Matrizen a_k wählen wir gemäß der Dichte

$$dW(a_k) = da_k \frac{\exp(-S_G^U(a_k U^{(k-1)}))}{Z_k(U^{(k-1)})} , \quad (3.83)$$

wobei da_k das Haar Maß auf A_k darstellt und die Normalisierung durch

$$Z_k(V) = \int_{A_k} da \exp(-S_G^U(aV)) \quad (3.84)$$

gegeben ist. $S_G^U(V)$ bezeichnet die Wirkung S_G für die Konfiguration der Linkvariablen $\{U\}$, in der der Link U durch V ersetzt ist.

Beweis der Konsistenz der Vorgehensweise

Wir wollen nun beweisen, daß wir den Updateprozeß für U zu U' tatsächlich durch das sukzessive Wählen der Matrizen $a_1 \dots a_m$ gemäß (3.83) durchführen können. Dazu müssen wir zeigen, daß dieses Verfahren die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte gemäß (3.65) simuliert. Nach Wahl der Menge F gibt es keine invariante Untergruppe der $SU(N)$, die invariant unter Multiplikation mit F von links ist. Somit reicht es zu zeigen, daß die Folge der zufälligen Generierung der a_k gemäß (3.83) den gleichen Fixpunkt der Übergangswahrscheinlichkeitsdichte hat³⁰. Wir nehmen also an, daß U bereits nach der Gleichgewichtsverteilung verteilt ist und müssen zeigen, daß dann auch U' nach ihr verteilt ist³¹. Es sei zunächst die Dichte der $U^{(k)}$ durch

$$dP(U^{(k)}) = \frac{1}{Z} \exp(-S_G^U(U^{(k)})) dU^{(k)} \quad (3.85)$$

definiert, von der wir als Induktionsverankerung wissen, daß $U^{(0)}$ nach ihr verteilt ist. Wir nehmen an, daß $U^{(k-1)}$ auch nach (3.85) verteilt ist und berechnen den Induktionsschritt $k-1 \rightarrow k$

$$\begin{aligned} \int_{A_k} dW(a_k) dP(U^{(k-1)}) &= \frac{1}{Z} \int_{A_k} da_k \frac{\exp(-S_G^U(a_k U^{(k-1)}))}{Z_k(U^{(k-1)})} \exp(-S_G^U(U^{(k-1)})) dU^{(k-1)} \\ &= \frac{1}{Z} \int_{A_k} da_k \frac{\exp(-S_G^U(U^{(k)}))}{Z_k(a_k^{-1} U^{(k)})} \exp(-S_G^U(a_k^{-1} U^{(k)})) d(a_k^{-1} U^{(k)}) \\ &= \frac{\exp(-S_G^U(U^{(k)}))}{Z} dU^{(k)} \frac{1}{Z_k(U^{(k)})} \int_{A_k} da_k \exp(-S_G^U(a_k^{-1} U^{(k)})) \\ &= \frac{1}{Z} \exp(-S_G^U(U^{(k)})) dU^{(k)} , \end{aligned}$$

³⁰Dieser ist nach unseren Forderungen an die Markov Kette eindeutig. Somit enden beide Markov Prozesse in der gleichen Fixpunktverteilung.

³¹Genau wie es für (3.64) bzw. (3.65) der Fall ist.

wobei wir die Gruppenintegrationseigenschaften des Haar Maßes (3.52) und die Invarianz von $Z_k(bU) = Z_k(U)$ unter Multiplikation von links mit $b \in A_k$ benutzt haben. Damit ist der Induktionsschritt gezeigt und insbesondere für $k = m$ gilt, daß das System im Gleichgewicht bleibt.

Reduktion auf die SU(2)

Wir können also wie geplant vorgehen und wollen nun die Generierung der a_k gemäß (3.83) auf die Generierung der α_k zurückführen, weil wir dafür nach dem letzten Abschnitt bereits ein effektives Verfahren kennen. Dazu zerlegen wir wie in (3.69) die Wirkung wieder in einen konstanten Anteil und einen, der mit dem zu ändernden Link $a_k U^{(k-1)}$ über 6 Terme $R = \sum_r \tilde{U}_r$ in Kontakt steht und erhalten

$$\begin{aligned} S_G^U(a_k U^{(k-1)}) &= \text{const} - \frac{\beta}{N} \text{Re Sp}(a_k U^{(k-1)} R) \\ &= \text{const}' - \frac{\beta}{N} \text{Re Sp}(\alpha_k r_k), \end{aligned} \quad (3.86)$$

wobei r_k in R die gleiche Struktur hat wie α_k in A_k ³². Die beiden Konstanten tragen nicht zur Dichte (3.83) bei, weil sie nicht von U bzw. α_k abhängen. Damit lassen sich die a_k gemäß

$$dW(a_k) \sim \exp\left(-\frac{\beta}{N} \text{Re Sp}(a_k r_k)\right) da_k \quad (3.87)$$

generieren. Diese hat die gleiche Form wie (3.69) und wir können den Creutz oder den Kennedy-Pendleton Algorithmus nacheinander für $k = 1 \dots m$ anwenden³³. Der zeitaufwendigste Teil des Algorithmus besteht in der Berechnung von R , die am Anfang des Updates von U einmalig für alle k erfolgt. Daher bietet sich an, die Menge F zu erweitern, um die Effektivität zu erhöhen. Eine naheliegende Ergänzung sind alle Matrizen der Form a_{ik} , bei denen die Elemente von α_{ik} an den Stellen (k, k) , (k, i) , (i, k) und (i, i) sind. Der Pseudo-Heat-Bath Algorithmus angewandt auf die SU(3) mit dem Creutz Algorithmus für die SU(2) Untergruppen und der minimalen Menge F ist einem optimierten Metropolis Algorithmus quantitativ als auch qualitativ überlegen. Er ist ca. 3 mal schneller und aufeinanderfolgende Konfigurationen sind weniger (um die Hälfte gemessen für die Plaquette) korreliert [CM82a].

3.2.8 Überrelaxation zur Beschleunigung der Thermalisierung

Wie oben schon erwähnt, gibt es zwei wichtige Effizienzkriterien für einen Thermalisierungsalgorithmus. Er sollte nach möglichst wenigen Markov Schritten Konfigurationen erzeugen, die im Gleichgewicht sind und die Korrelation zwischen Konfigurationen im Gleichgewicht sollte nach möglichst wenigen Markov Schritten vernachlässigbar klein sein, so daß nur möglichst wenige Schritte zwischen einzelnen

³²Wir beschränken uns zunächst auf die minimale Menge F .

³³Im Detail ist allerdings auf folgendes zu achten: r_k hat anders als in (3.69) komplexe Komponenten in der Darstellung $r_k = r_{k0} + i\vec{\sigma} \vec{r}_k$, was einen Unterschied für die Projektion von r_k auf eine SU(2) Matrix ausmacht. Es ist dann $\text{Re Sp}(\alpha r_k) = \frac{1}{2} z_k \text{Sp}(\alpha u)$ mit $u = z_k^{-1}(2\text{Re } r_{k0} + 2i\vec{\sigma} \text{Re } \vec{r}_k) \in \text{SU}(2)$ und $z_k^2 = \det(2\text{Re } r_{k0} + 2i\vec{\sigma} \text{Re } \vec{r}_k)$ (siehe [KP85] Gleichung (7-10)). Damit ist die zu (3.70) analoge Verteilung $W(\alpha) \sim \delta(\alpha^2 - 1) \exp(\frac{\beta}{N} z_k \alpha_0) d\alpha$.

Messung nötig sind (beides am besten für eine große Vielfalt von Observablen und einen großen Parameterbereich der Theorie³⁴). Durch das lokale Erneuern der Links wird der Konfigurationsraum aber insbesondere bei großen Gittern nur langsam durchlaufen und durch starke Korrelationen behindert. Es gibt nichtlokale Verfahren, die dieses Problem direkt angehen wie die "Fourier Beschleunigung" [Bat85] oder die "Multigrid" Methode [GS86].

Minimierung als Grenzfall

Lokale Monte Carlo Algorithmen lassen sich aber auch durch bereits bekannte numerische Verfahren aus anderen Bereichen leicht verbessern [Adl89]. Wie wir im folgenden sehen werden, sollten z.B. Methoden für das Lösen von Minimierungsproblemen eigentlich für jeden Thermalisierungsprozeß nützlich sein. Jeder Prozeß hat das Ziel, Konfigurationen mit der Verteilung (3.63) zu erzeugen, die wir auch als $P_{eq}(\{U\}) = \exp(-\beta S'_G(\{U\}))$ schreiben können, wobei wir die Kopplung β explizit außerhalb der Wirkung notieren und auch als inverse Temperatur auffassen können. Im Limes $T \rightarrow 0$ bzw. $\beta \rightarrow \infty$ werden Fluktuationen der Linkvariablen eingefroren, und das Pfadintegral wird von Konfigurationen $\{U\}_i$ dominiert, die die Wirkung minimieren und für die demnach

$$\partial_U S_G(\{U\})|_{\{U\}_i} \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.88)$$

gelten muß. Somit wird in diesem Limes jeder Monte Carlo Algorithmus ein Algorithmus zur Minimierung der Wirkung. Umgekehrt kann man also versuchen, bekannte Minimierungsalgorithmen auf endliche β als neue Monte Carlo Verfahren zu verallgemeinern.

Sukzessive Überrelaxation

Zum Beispiel kann man die Heat-Bath Methode leicht um die Methode der sukzessiven Überrelaxation ("successive Over-Relaxation", SOR, siehe z.B. [DeV94], Kap. 5) erweitern. Für die Monte Carlo Simulation einer multiquadratischen (lokalen) Wirkung³⁵ bzw. für einen Spezialfall einer nur quadratischen (lokalen) Wirkung hat Adler gezeigt, daß auf diese Weise der Thermalisierungsvorgang beschleunigt wird [Adl81]. Ausgangspunkt ist dabei eine multiquadratische (lokale) Wirkung $S^\phi(\phi) = A(\phi - C)^2 + B$, wobei die A , B und C nicht von der gerade zu erneuernden Variablen ϕ , sondern nur den restlichen Variablen der Konfiguration $\{\phi\}$ abhängen. Bezüglich dieser beschreibt eine gaussische Übergangswahrscheinlichkeitsdichte der Form

$$W(\phi \rightarrow \phi') = \left(\frac{\omega(2-\omega)}{\beta A \pi} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{\beta A}{\omega(\omega-2)} [\phi' - \omega C - (1-\omega)\phi]^2 \right) \quad (3.89)$$

mit dem Relaxationsparameter $0 < \omega \leq 2$ einen Markov Prozeß mit der Gleichgewichtsverteilung $P_{eq}(\{\phi\}) = \exp(-\beta S(\{\phi\}))$, wie dort gezeigt wird. Der Mittelwert der Dichte (3.89) ist durch

$$\mu_{\phi'} = C + (\omega - 1)(C - \phi)$$

³⁴Hier gibt es auf alle Fälle im Kontinuumsimes ein Problem, das als "Critical Slowing Down" bekannt ist: Die Autokorrelationszeit des Markov Prozesses divergiert in diesem Fall.

³⁵z.B. eine Yang-Mills Wirkung mit kanonischer Eichung

gegeben. Für $\omega = 1$ entspricht dieser Algorithmus dem gewöhnlichen Heat-Bath Algorithmus für eine multiquadratische (lokale) Form der Wirkung, bei dem die neue Variable um den die lokale Wirkung minimierenden Wert C bei festgehaltenen restlichen Variablen gaussisch verteilt ist. Für $1 < \omega \leq 2$ wird der Mittelwert der Dichte in die entgegengesetzte Richtung von ϕ verschoben (daher der Name Überrelaxation), im anderen Fall $0 < \omega < 1$ in die Richtung von ϕ (Unterrelaxation). Gleichzeitig skaliert die Breite mit $\sqrt{\omega(2-\omega)} < 1$ im Vergleich zum Heat-Bath. Besonders interessant ist der mikrokanonische Limes $\omega = 2$, bei dem keine Änderung der Wirkung $\Delta S = 0$ durch das Update $\phi \rightarrow \phi'$ stattfindet³⁶ und für den der Mittelwert der Dichte (3.89) zu $\mu_{\phi'} = 2C - \phi$ mit der Breite Null wird.

Der Brown-Woch Algorithmus

Leider ist die Wirkung (3.48b) nicht multiquadratisch, so daß die gerade skizzierte Methode zunächst nicht darauf anwendbar ist. Adler selbst hat eine direkte Verallgemeinerung für die $SU(N)$ entwickelt, aber für eine Wirkung, die sich im Kontinuumslimit um Terme $\sim a^2$ von der Wilsonwirkung unterscheidet [Adl88]. Die Verallgemeinerung von Adler's Algorithmus auf die $SU(2)$ mit der Wilsonwirkung (3.48b) ist bekannt als "Brown-Woch" Algorithmus [BW87]. Die Idee dabei besteht darin, von der $SU(2)$ mit der Wirkung S_G auf den \mathbb{R}^3 so zu transformieren, daß dabei aus der bekannten Heat-Bath Verteilung (3.70) der $SU(2)$ eine dreidimensionale Gaussverteilung wird. Von dieser wissen wir bereits nach [Adl81], wie wir sie um SOR verallgemeinern (siehe (3.89)). Wir erzeugen daher mit ihr gaussisch verteilte neue Variablen im \mathbb{R}^3 und transformieren danach zurück auf die $SU(2)$. Da im \mathbb{R}^3 nach [Adl81] alle Bedingungen an einen Markov Prozeß erfüllt sind, ist dies ein gültiges Vorgehen für unser Vorhaben. Die Transformation beschreiben wir dabei durch eine Funktion $r = f(\theta)$, die wir durch

$$Z_r^{-1} \int_0^{r=f(\theta)} x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx \stackrel{!}{=} Z_\theta^{-1} \int_0^\theta \sin^2 \omega \exp(\alpha \cos \omega) d\omega \quad (3.90)$$

mit den entsprechenden Normierungen Z_r und Z_θ definieren, wobei wir

$$\vec{r} = r(r_x, r_y, r_z)$$

setzen. Damit transformiert sich die Verteilung (3.70) in eine dreidimensionale (Einheits-) Gaussverteilung³⁷. Das Update vollziehen wir durch

$$\vec{r}' = (1 - \omega)\vec{r} + \omega(2 - \omega)\vec{\eta},$$

³⁶Dies sieht mal leicht, wenn man sich den Minimierungsvorgang der SOR Methode für die Wirkung S in Erinnerung ruft. Dabei wird iterativ immer der Wert $\phi' = C + (1 - \omega)(\phi - C)$ gewählt, der die Wirkung lokal weiter minimiert. Der Gedächtniseffekt an die alte Lösung wird über ω gesteuert. Die Methode konvergiert für den Fall $S(\phi) - S(\phi') \geq 0$, daß die Wirkung durch ϕ' weiter minimiert wird. Dies berechnet sich für die (multi-) quadratische Wirkung zu $A \frac{2-\omega}{\omega} (\phi - \phi')^2 \geq 0$, woraus $0 \leq \omega \leq 2$ folgt (für $A > 0$ wegen Beschränktheit der Wirkung von unten).

³⁷Der Winkelanteil ist dabei oben für beide Seiten nicht angegeben.

wobei wir $\vec{\eta}$ gemäß einer Gaussverteilung mit $\langle \eta_i \rangle = 0$ und $\langle \eta_i \eta_j \rangle = \delta_{ij}$ ziehen. Damit erhalten wir für unser Gruppenelement $U^* \in \text{SU}(2)$

$$U^* = \begin{pmatrix} \cos \theta' + ir'_x \sin \theta' & (r'_y + ir'_z) \sin \theta' \\ (-r'_y + ir'_z) \sin \theta' & \cos \theta' - ir'_x \sin \theta' \end{pmatrix} \quad (3.91)$$

wobei die Rücktransformation durch $\theta' = f^{-1}(r')$ vollzogen wird (für Details siehe [BW87]).

Mikrokanonischer Fall

Uns interessiert insbesondere der mikrokanonische Fall $\omega = 2$ ³⁸. Für diesen ist $\vec{r}' = -\vec{r}$, $r' = r$ und $\theta' = f^{-1}(r') = f^{-1}(r) = \theta$. Damit erhalten wir aus (3.91) deterministisch das Inverse

$$U^* = U^\dagger = U^{-1} \quad (3.92)$$

als Update, so daß dieser Fall besonders leicht zu simulieren ist, da das (approximative) Berechnen von f aus (3.90) nicht nötig ist. Hieran sieht man auch noch einmal, daß bei einem solchen Update mit $\omega = 2$ die Wirkung nicht verändert wird, da $\text{Sp } U = \text{Sp } U^\dagger$ gilt. Durch das Erneuern von $\text{SU}(2)$ Untergruppen im Sinne des Pseudo-Heat-Bath Algorithmus kann man den Brown-Woch Algorithmus auch für beliebige $\text{SU}(N)$ Gruppen anwenden. Für $\omega = 2$ gibt es auch Erweiterungen für den Metropolis Algorithmus [Cre87]. Dabei ist der neue Vorschlag für U durch $U^0 U^{-1} U^0$ gegeben, wobei U_0 ein Link ist, der die Wirkung lokal approximativ minimiert³⁹. Beide Algorithmen werden durch diese Verallgemeinerung um SOR erheblich verbessert, der Heat-Bath Algorithmus um für bestimmte Observablen bis zu Faktor 3 für den mikrokanonischen Fall [BW87]. Jedoch ist insbesondere für diesen Fall nicht klar, inwieweit Ergozität noch sichergestellt ist. Daher vermischt man meist mehrere Updatestrategien. Insbesondere versteht man unter "OR n Metropolis" einen Brown-Woch Algorithmus für $\omega = 2$ (bzw. manchmal auch den erweiterten Metropolis Algorithmus von Creutz) gefolgt von n Standard Metropolis-Schritten. Für große n entspricht das der Anwendung des Brown-Woch gefolgt von dem Heat-Bath Algorithmus, beides eventuell im Sinne von Cabibbo-Marinari auf $\text{SU}(2)$ Untergruppen.

3.3 Observablen auf dem Gitter

In diesem Kapitel stellen wir die Observablen zusammen, die wir messen und auswerten werden. In Abschnitt 3.3.1 beginnen wir mit der Plaquette, mit der wir entscheiden werden, ob wir hinreichend dekorrelierte und thermalisierte Konfigurationen erzeugt haben. In Abschnitt 3.3.2 definieren wir den Wilsonoperator, mit dem wir die Strings Spannung auf dem Gitter messen können. In Abschnitt 3.4 werden wir sehen, daß wir damit die Skala fixieren und (bei richtiger Wahl der Parameter)

³⁸Man differenziert zwischen "Tunable- ω " Algorithmen wie dem Adler Algorithmus oder dem Brown-Woch Algorithmus für $0 < \omega < 2$ und mikrokanonischen Algorithmen wie dem Brown-Woch für $\omega = 2$ oder dem erweiterten Metropolis Algorithmus von Creutz (siehe unten).

³⁹Dies stellt eine Verallgemeinerung der Gleichung $\mu_{\phi'} = C - \phi + C$ auf Gruppenelemente dar.

aus unseren numerischen Ergebnissen physikalisch aussagekräftige Größen gewinnen können. In Abschnitt 3.3.3 wenden wir uns schließlich der Punkt-zu-Punkt-Korrelationsfunktion aus 2.2 zu und sehen im letzten Abschnitt 3.3.4, wie wir mit ihrer Hilfe die Masse des leichtesten Teilchens im Kanal berechnen können.

3.3.1 Die Plaquette

Wir haben die Plaquette $U_{\mu\nu}(n)$ als kleinste invariante Schleife auf dem Gitter (siehe Abb. 3.3) in Abschnitt 3.1.2 eingeführt. Wir definieren den Plaquetteoperator bzw. die Plaquette auf dem Gitter als

$$\bar{U} = \frac{1}{N} \sum U_{\square}, \quad (3.93)$$

indem wir über alle Gitterpunkte und alle Richtungen mitteln⁴⁰. Da wir ohne dynamische Fermionen rechnen werden, ist durch den Erwartungswert von U im Prinzip der Erwartungswert der Wirkung (3.48a) gegeben. An diesem sind wir aber eigentlich nicht interessiert. Stattdessen werten wir die Plaquette $U(i)$ für jede Konfiguration i aus und berechnen mit diesen Werten die normierte Autokorrelationsfunktion

$$\rho(\tau) = \frac{\langle [U(i + \tau) - \langle U(i + \tau) \rangle] [U(i) - \langle U(i) \rangle] \rangle}{\langle [U(i + \tau) - \langle U(i + \tau) \rangle]^2 \rangle^{\frac{1}{2}} \langle [U(i) - \langle U(i) \rangle]^2 \rangle^{\frac{1}{2}}} \quad (3.94)$$

für die Konfigurationen, wobei die Mittelung in (3.94) über i berechnet wird. Mit dieser sind wir in der Lage zu entscheiden, wieviele Konfigurationen mindestens zwischen den Stichproben liegen müssen, so daß diese unabhängig voneinander sind. Es ist klar, daß ρ in dieser Form im Prinzip nur aussagekräftig ist für Stichproben, die zum Mittelwert der Plaquette beitragen. Deshalb werden wir vorsichtig sein und den durch ρ erhaltenen Wert der Autokorrelationszeit weit überschreiten.

3.3.2 Die Strings Spannung

In diesem Abschnitt wollen wir den Ausdruck für die Grundzustandsenergie eines statischen (d.h. unendlich schweren) Quark-Antiquark Paares angeben. Diesen benutzen wir, um die Strings Spannung auf dem Gitter zu berechnen.

Quantenmechanik als Beispiel

Wir wollen die Vorgehensweise zunächst anhand der Quantenmechanik erläutern und beginnen mit dem Propagator (A.7) eines quantenmechanischen Systems mit einem Teilchen in imaginärer Zeit

$$\langle x_f | \hat{U}(\tau_f, \tau_i) | x_i \rangle = \sum_n \langle x_f | n \rangle \langle n | x_i \rangle \exp(-E_n(\tau_f - \tau_i)), \quad (3.95)$$

den wir in Energieeigenfunktionen entwickelt haben. Wir bilden zuerst den Limes $m \rightarrow \infty$, um zu einem statischen ($H_0 \rightarrow 0$) Teilchen zu gelangen und dann den Limes

⁴⁰Oftmals definiert man in Gitterrechnungen Raum-Raum U_{ss} und Raum-Zeit U_{st} Plaquetteoperatoren und mittelt jeweils nur über die angegebenen Richtungen.

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

$T \equiv \tau_f - \tau_i \rightarrow \infty$, weil die Summe dadurch von dem Grundzustand dominiert wird. Wir erhalten in diesem Limes aus (3.95)

$$\langle x_f | \hat{U}(\tau_f, \tau_i) | x_i \rangle \rightarrow \langle x_f | 0 \rangle \langle 0 | x_i \rangle \exp(-V_o T), \quad (3.96)$$

woraus wir das Potential im Grundzustand bei Kenntnis des Propagators berechnen können. Dies ist ein interessanter Zusammenhang, weil er eine auf dem Gitter berechenbare Größe mit einer phänomenologischen Größe verbindet. In [Rot98], Kap. 7 (und Referenzen darin) ist die eben angegebene Vorgehensweise (der Limesbildung) auf die SU(3) Eichtheorie verallgemeinert, indem ein Zustand propagiert wird, der einen von null verschiedenen Überlapp mit dem Zustand eines statischen Quark-Antiquark Paares hat. Damit wird die Greensfunktion (linke Seite von (3.96)) für eine pure Eichtheorie (quenched) berechnet und ist in dieser Näherung proportional zu dem Erwartungswert des Wilsonoperators (3.97).

Der Wilsonoperator

Wir gehen stattdessen vor, wie (teilweise) in [Neg90] beschrieben. Wie oben erwähnt, müssen wir eichinvariante Operatoren konstruieren, um (ohne Eichfixierung) einen von null verschiedenen Erwartungswert zu erhalten. In purer Eichtheorie gibt es aber nur die Eichfelder in Form der Linkvariablen. Nach dem Transformationsverhalten (3.42) der Linkvariablen ist klar, daß somit die einzig denkbaren Observablen aus geschlossenen Schleifen der Form

$$W(\mathcal{C}) = \text{Sp} \prod_{(n,\mu) \in \mathcal{C}} U_\mu(n) \quad (3.97)$$

über den Pfad \mathcal{C} bestehen. Noch allgemeiner kann man zeigen, daß jede Observable, die kontinuierlich von den Linkvariablen abhängt, beliebig genau durch einen Ausdruck der Form

$$\sum_n \sum_{\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_n} a(\mathcal{C}_1, \dots, \mathcal{C}_n) W(\mathcal{C}_1) \dots W(\mathcal{C}_n) \quad (3.98)$$

genähert werden kann [Dur80]. Somit haben die Schleifen der Form (3.97) eine fundamentale Bedeutung. Die einfachste Observable besteht aus einer Schleife allein ($a = 1$, $n = 1$) und heißt "Wilsonschleife". Übersetzt man Gleichung (3.97) ins Kontinuum, so entspricht das dem Ausdruck $P \exp(\int_{\mathcal{C}} dz_\mu A_\mu(z))$ und stellt die Phase im Farbraum dar, die ein Quark auf dem Pfad \mathcal{C} akkumulieren würde. Unter Eichtransformationen der Form (3.35) für Quarkfelder und (3.42) für die Linkvariablen transformieren sich die Ausdrücke

$$\begin{aligned} \psi(n) \bar{\psi}(m) &\rightarrow G(n) \psi(n) \bar{\psi}(m) G^{-1}(m) \\ (\text{Links von } n \text{ zu } m) &\rightarrow G(n) (\text{Links von } n \text{ zu } m) G^{-1}(m) \end{aligned}$$

gleich, so daß für eine reine Eichtheorie (ohne geschlossene Fermionenschleifen) die Enden einer Kette von Linkvariablen äquivalent zu einer externen Quark-Antiquark Quelle sind. Der Pfad \mathcal{C} beschreibe im folgenden einen rechteckigen Pfad der Länge

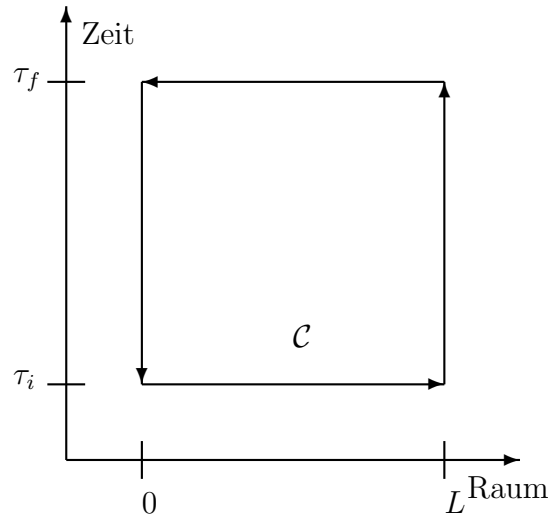


Abbildung 3.7: Eine Wilsonschleife der Länge R im Raum und $T \equiv \tau_f - \tau_i$ in der Zeit

L im Raum und der Länge T in der Zeit (Raum-Zeit Wilsonschleife). Wir betrachten die zeitliche Evolution eines Systems, die mit dem Erwartungswert $\langle W(\mathcal{C}) \rangle$ einer Schleife der Form $(L, T \equiv \tau_f - \tau_i)$ korrespondiert, wie in Abb. 3.7 dargestellt. Vor dem Zeitpunkt τ_i gibt es keine Farbquellen im System, so daß die Evolution den Gluonengrundzustand $|0\rangle = \exp(-H\tau_i) |Q=0\rangle$ mit Ladung $Q=0$ herausfiltert. Zum Zeitpunkt τ_i erzeugt die Linie der Linkvariablen von 0 bis L eine externe Antiquarkquelle bei 0 und eine Quarkquelle bei L . Die Links in Zeitrichtung zwischen τ_i und τ_f halten diese aufrecht, so daß für diese Zeiten die Evolution den Zustand $|\psi\rangle = \exp(-(t - \tau_i)H)\psi(0)\bar{\psi}(L) |0\rangle$ herausfiltert, der die niedrigste Gluonenkonfiguration im Beisein einer externen Quark-Antiquark Quelle darstellt. Zum Zeitpunkt τ_f werden die externen Quellen schließlich durch eine Linie der Linkvariablen von L zu 0 nihiliert, und das System kehrt in den $Q=0$ Grundzustand zurück. Wenn $T \equiv \tau_f - \tau_i$ groß genug ist, dann wird die Gluonenkonfiguration mit der niedrigsten Energie im Beisein der externen Quark-Antiquark Quelle dominieren, und der Erwartungswert $\langle W \rangle$ wird analog zu (3.96) proportional zu $\exp(-V(L)T)$, wobei $V(L)$ das statische Quark-Antiquark Potential ist. Somit haben wir einen zu (3.96) analogen

$$\langle W \rangle \stackrel{T \rightarrow \infty}{\sim} \exp(-V(L)T)$$

Zusammenhang zwischen einer auf dem Gitter berechenbaren Größe und einer phänomenologischen Größe gefunden.

Die Strings Spannung und das Flußröhrenmodell

Für große Entfernungen L wird das Potential $V(L) \sim L$, weil die Flußröhre im reinen Eichsektor nicht durch Paarerzeugung zerbrechen kann. Demnach kann man mit dem Erwartungswert der Wilsonschleife direkt die Strings Spannung σ berechnen,

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

indem man

$$W(L, T) = \langle W \rangle^{R, T \rightarrow \infty} \exp(-\sigma LT) \quad (3.99)$$

für große T und R berechnet. Für große Schleifen ist somit der Exponent proportional zu der Fläche RT und signalisiert Confinement als eine direkte Folge der Linearität des Potentials für große Abstände. Da die Stringspannung nach (3.99) direkt berechnet werden kann, ist es nützlich, sie durch eine experimentell ermittelte Größe, die Steigung der Regge Trajektorie, auszudrücken. Es ist eine experimentelle Tatsache, daß Familien von Mesonen mit gegebenen (internen) Quantenzahlen (aber verschiedenem J) eine Abhängigkeit der Masse M_J vom totalen Drehmoment J der Form

$$M_J^2 = \frac{1}{\alpha'} J + \text{const} \quad \text{mit} \quad \alpha' = 0.9 \text{ GeV}^{-2} \quad (3.100)$$

haben, die man Regge Trajektorie nennt [Reg59]. Wir suchen eine Verbindung zur Stringspannung und stellen uns dazu zwei masselose (und zur Vereinfachung spinlose) Quarks vor, die durch einen String der Länge $2d$ verbunden sind und mit Lichtgeschwindigkeit $c = 1$ um ihr Zentrum rotieren [GR81], was Abb. 3.8 entnom-

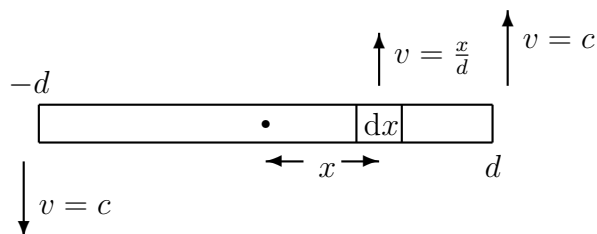


Abbildung 3.8: Relativistische Flußröhre mit der Stringspannung σ zwischen einem Quark bei d und einem Antiquark bei $-d$, die mit der Lichtgeschwindigkeit $c = 1$ umeinander rotieren.

men werden kann. Die Geschwindigkeit des Segments der Länge dx am Punkt x beträgt $v = x/d$. Die Energie pro Längeneinheit der Flußröhre in ihrem Ruhesystem sei σ . Damit ist der Beitrag am Punkt x zur Energie des Systems $dE = \sigma \gamma dx$ und zum Drehimpuls $dJ = \sigma \gamma v x dx$ mit dem üblichen Faktor $\gamma = (1 - v^2)^{-\frac{1}{2}}$. Durch Integration erhalten wir

$$M = \sigma \int_{-d}^d \left(1 - \frac{x^2}{d^2}\right)^{-\frac{1}{2}} dx = \pi \sigma d$$

und

$$J = \frac{\sigma}{d} \int_{-d}^d \left(1 - \frac{x^2}{d^2}\right)^{-\frac{1}{2}} x^2 dx = \frac{\pi}{2} \sigma d^2,$$

woraus wir wegen (3.100)

$$\sigma = (2\pi\alpha')^{-1} = 420^2 \text{ MeV}^2 \quad (3.101)$$

erhalten. Offensichtlich stellt dieses Flußröhrenmodell eine drastische Vereinfachung für Quarks kleiner Masse dar und bedarf insbesondere für kleine Drehimpulse J

wegen der endlichen Breite der Röhre, ihrer genauen Struktur an beiden Enden und des Problems der Lokalisierung der Quarks gewaltiger Korrekturen. Da wir es jedoch für im Prinzip unendlich schwere Quarks benutzen, stellt es für uns eine brauchbare Approximation dar.

Das Creutzverhältnis

In der Praxis muß man (3.99) bei der Berechnung auf endlichen Gittern durch Terme proportional zum Umfang der Schleife wegen Selbstenergieeffekten des Quark-Antiquark Paares und um eine Konstante wegen Gluonenaustausch an den Ecken der Schleife korrigieren, so daß aus (3.99)

$$W(L, T) \sim \exp(-(\sigma LT + \alpha(L + T) + \beta)) \quad (3.102)$$

wird. Daher bietet es sich an, für $L = la$ und $T = ta$ das sogenannte "Creutzverhältnis"

$$\chi(l, t) = -\ln \left(\frac{W(l, t) W(l-1, t-1)}{W(l-1, t) W(l, t-1)} \right) \sim a^2 \sigma \quad (3.103)$$

zu berechnen, so daß sich die unerwünschten Terme kürzen. In der Praxis werden wir bei der Berechnung des Wilsonoperators (3.97) wie bei der Plaquette über alle Gitterpunkte und (passenden) Orientierungen des Weges mitteln

$$W(C) = \frac{1}{N} \sum \text{Sp} \prod_{(n, \mu) \in C} U_\mu(n), \quad (3.104)$$

wobei für unsere Zwecke der Weg C entweder eine Fläche parallel zu den Raumachsen (Raum-Raum Wilsonschleife) oder parallel zu einer Raum- und der Zeitachse (Raum-Zeit Wilsonschleife) verläuft.

3.3.3 Die Korrelationsfunktion

Wir sind nun in der Lage zu erkennen, wie wir das Ergebnis für die Korrelationsfunktionen (2.19) und (2.20) aus Abschnitt 2.2.1 numerisch berechnen können. Auf dem Gitter identifizieren wir gemäß (3.51) die Gluonen mit den Linkvariablen und den wechselwirkenden Feynman-Propagator mit dem Inversen der Fermionenmatrix. Wir erzeugen mit einem Monte Carlo Verfahren N unabhängige Stichproben und nähern das Integral durch den Mittelwert über diese gemäß (3.58). Egal mit welchem Verfahren wir die Erzeugung der Stichproben vornehmen -quenched oder nicht-, für jede Stichprobe müssen wir pro Flavour eine N dimensionale Matrix invertieren⁴¹. Die Dimension von M ist $N = 786432$ für ein Gitter mit 16^4 Gitterpunkten. Gleichzeitig ist M dünn besetzt, denn M verbindet wegen der Wilsonform der diskretisierten symmetrischen Ableitung einen Gitterpunkt mit nur 8 anderen. Wegen der ungeheuren Größe der Dimension von M benötigen wir einen Algorithmus zur Invertierung, dem dieser Umstand zu Gute kommt. Wir benutzen zur Näherung der Inversen einen optimierten Conjugate Gradient Algorithmus von DeGrand [DeG88], den wir ausführlich im Anhang B vorstellen. Es ist ein iterativer Algorithmus, der

⁴¹Wir werden uns auf einen Flavour beschränken.

für einen gegebenen Anfangswert x_0 die Lösung von $Mx = b$ durch sukzessive Approximationen x_1, x_2, \dots, x_i für $x = M^{-1}b$ sucht. Als Konvergenzkriterium zieht er den Betrag des Residuums $r_i = M(x - x_i)$ heran, um zu entscheiden, ob x_i als approximative Lösung für x angenommen wird. Wenn M kleine Eigenwerte aufweist, beinhaltet diese Kriterium eine potentielle Fehlerquelle: Ein kleiner Betrag des Residuums bedeutet nicht automatisch, daß eine hohe Konvergenz erreicht ist (siehe Anhang B). Die Fermionenmatrix (3.49) hat die Eigenschaft, daß

$$M(0, x) = \gamma_5^E M^\dagger(x, 0) \gamma_5^E \quad (3.105)$$

gilt, so daß wir auch für die Mesonen nur $M(x, 0)$ invertieren müssen⁴². Nehmen wir an, wir hätten M invertiert, so erhalten wir für den Erwartungswert nach (3.58) auf dem Gitter für die Mesonen

$$\bar{R}^{\text{Mes}}(x) = \frac{1}{N} \sum_i \text{Sp} \left\{ M_i^{-1}(x, 0) \Gamma^E \gamma_5^E M_i^{-1\dagger}(x, 0) \gamma_5^E \Gamma^E \right\} \quad (3.106)$$

und für die Baryonen vom Typ A

$$\bar{R}_A^{\text{Bar}}(x) = \frac{1}{N} \sum_i (M_i^{-1})_{\alpha\delta}^{ad}(x, 0) (M_i^{-1})_{\beta\epsilon}^{be}(0, x) (M_i^{-1})_{\gamma\iota}^{cf}(0, x) \chi_{\alpha\beta\gamma}^E \chi_{\delta\epsilon\iota}^E \epsilon_{abc} \epsilon_{def}, \quad (3.107)$$

wobei der Index i an der Matrix andeutet, daß diese für die Stichprobe $\{U\}_i$ invertiert wird. Bei den Baryonen berücksichtigen wir noch den Austauschterm bei der Kontraktion und bilden für den Typ B die Spur über $x_\mu \gamma_\mu^E$, wie in Abschnitt 2.2 beschrieben. Als Quelle für die Invertierung (das b aus $Mx = b$) nehmen wir eine Punktquelle an der Stelle 0 ($b(0) = 1$ und sonst 0), da wir Punkt-zu-Punkt-Korrelationsfunktionen berechnen. Die Abweichung des Mittelwertes berechnet sich nach (3.59) gemäß

$$\sigma^2(x) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_i [R_i(x) - \bar{R}(x)]^2, \quad (3.108)$$

wobei $R_i(x)$ die Korrelationsfunktion für eine Konfiguration $\{U\}_i$, also den Summanden aus (3.106) für Mesonen bzw. (3.107) für Baryonen, darstellt.

3.3.4 Die Masse

Wir haben in Abschnitt 2.2 die Ebene-zu-Ebene-Korrelationsfunktion (2.13) definiert. Diese erhalten wir, indem wir $R(x)$ durch Summation über \vec{x} auf Impuls null projizieren. Somit erhalten wir aus (3.106) bzw. (3.107) analog

$$\bar{R}_{E2E}(\tau) = \sum_{\vec{x}} \bar{R}(\vec{x}, \tau), \quad (3.109)$$

auf dem Gitter. Wir erinnern uns an die Definition der Korrelationsfunktion (2.10) im Kontinuum und definieren den Zeitscheibenprojektionsoperator

$$\hat{S}(\tau) = \sum_{\vec{x}} \hat{J}(x, \tau),$$

⁴²Zur Erinnerung: Auf dem Gitter ist $x = na$.

so daß (2.13) auch als

$$R_{E2E}(\tau) = \langle 0 | \hat{S}(\tau) \hat{S}(0) | 0 \rangle \quad (3.110)$$

geschrieben werden kann. Auf einem (endlichen) Gitter mit periodischen Randbedingungen (der Länge T in der Zeitrichtung) gilt $\hat{S}(\tau + T) = \hat{S}(\tau)$. Wir benutzen dies in (A.10) und erhalten für große Zeiten $T > \tau$ im Fall der Mesonen

$$R_{E2E}^{\text{Mes}}(\tau) = \text{const} \cosh(m(T/2 - \tau)) \quad (3.111)$$

bzw. im Fall der Baryonen

$$R_{E2E}^{\text{Bar}}(\tau) = \text{const}^+ \exp(m^+(T/2 - \tau)) + \text{const}^- \exp(m^-(\tau - T/2)) \quad (3.112)$$

nach [MM97], Kap. 5. Bei den Baryonen kommt im Unterschied zu den Mesonen noch der Beitrag des leichtesten Teilchens im Kanal mit negativer Parität hinzu, denn die Baryonenströme koppeln an beide Paritäten (siehe Tab. 2.1). Durch einen Fit an die Gleichungen (3.111) und (3.112) können wir aus den Gitterdaten die Masse m (auf dem Gitter) gewinnen (siehe Abschnitt 4.4.2).

3.4 Der Kontinuumslimes

Durch das Einführen des kubischen Gitters der Kantenlänge a in Abschnitt 3.1 haben wir die QCD regularisiert. Das Ergebnis der Berechnung einer Observablen soll nicht von dieser Regularisierung abhängen. Am Ende der Rechnung muß das Gitter durch den Limes $a \rightarrow 0$ entfernt werden. Formal haben wir diesen Limes schon bei der Konstruktion der Wirkung auf dem Gitter untersucht, allerdings nur, um die Wahl der diskretisierten Wirkung zu begründen. In der Praxis können wir natürlich nicht mit immer feineren Gitterabständen rechnen, um die Diskretisierungseffekte zu minimieren, da wir dadurch wieder mit den auftretenden Divergenzen in der Theorie zu tun hätten, die wir eigentlich durch die Regularisierung eliminieren wollten. Wir haben bei der Konstruktion der Wirkung auf dem Gitter in Kauf genommen, daß die Rotationsinvarianz (entspricht der Lorentzinvarianz im Minkowski Raum) verletzt wird. Im korrekten Kontinuumslimes muß sie wieder hergestellt werden, um physikalische Ergebnisse zu erhalten. Dazu reicht es nicht aus, Korrelationen über Entfernungen r zu betrachten, die viel größer sind als der Gitterabstand a . Für ein gewähltes β bzw. g_0^2 wird die Korrelationsfunktion (3.106) bzw. (3.107) eine Richtungsabhängigkeit zeigen und damit auch jede Masse, die wir daraus extrahieren (vergleichbar mit einem Kristall in der Festkörperphysik, bei dem die effektive Masse der Ladungsträger für verschiedene Richtungen unterschiedlich ist).

Kritischer Punkt und Phasenübergang

In purer Gittereichtheorie ist der einzig dimensionsbehaftete Parameter der Gitterabstand a . Die Ergebnisse der numerischen Berechnung sind immer dimensionslos, und die korrekte Dimension einer Observablen kann mit Hilfe von a wieder hergestellt werden. Die Berechnung einer Masse auf dem Gitter beispielsweise hat die Form

$$m = \frac{1}{a} f(g) \quad (3.113)$$

und würde im naiven $a \rightarrow 0$ Kontinuumsliches divergieren. Mit anderen Worten $f(g)$ ist eine Zahl der Ordnung $O(1)$ und damit ist $m \sim 1/a$, was wir nicht anders erwarten, weil wir durch das Gitter den Impuls Cutoff π/a eingeführt haben. Der richtige Limes wird gebildet, indem man m statt $g = g_0$ im Limes $a \rightarrow 0$ festhält. Dafür müssen wir angeben, wie sich $g(a)$ verhält und erhalten aus (3.113)

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{a} f(g(a)) \rightarrow \text{const}, \quad (3.114)$$

indem wir m im Limes festhalten. Das bedeutet, daß im Limes

$$\left\{ \begin{array}{l} a \rightarrow 0 \\ g \rightarrow g_c \end{array} \right\} \quad \text{mit} \quad f(g_c) = 0 \quad (3.115)$$

gelten muß. Anders formuliert gilt im Kontinuumsliches

$$\lim_{a \rightarrow 0} (a m(a)) = \lim_{a \rightarrow 0} f(g(a)) = \lim_{g \rightarrow g_c} f(g) = 0, \quad (3.116)$$

daß die Korrelationslänge auf dem Gitter

$$\xi = 1/(am(a))$$

divergiert. Dies ist ein typisches Signal für einen Phasenübergang zweiter Ordnung [Cre97]. In der Nähe des kritischen Punktes g_c treten langreichweitige Fluktuationen über viele Gitterzellen hinweg auf, so daß das System die ursprüngliche Gitterstruktur vergißt⁴³. Somit besteht die Möglichkeit, daß dabei die Rotationsinvarianz im Kontinuum wieder hergestellt wird. Dabei ist g_c die reine Kopplungskonstante des Kontinuums. Sie beschreibt die Wechselwirkung bei Impulsen in der Größenordnung des Cutoffs. Für eine asymptotisch freie Theorie nimmt die Kopplung ab, wenn der Cutoff erhöht wird. Somit ist $g_c = 0$ für eine asymptotisch freie Theorie.

Strong Coupling Expansion

Im anderen Extremfall $g \rightarrow \infty$ kann man die Eichtheorie analytisch behandeln, indem man die Exponentialfunktion in $\beta \sim 1/g^2$ asymptotisch entwickelt. Diese Entwicklung ist bekannt unter dem Namen "Strong Coupling Expansion" und entspricht der Hochtemperaturentwicklung der Statistik ([MM97], Kap. 3.4). Wir wollen den Erwartungswert einer Wilsonschleife (3.97) über einen rechteckigen Pfad \mathcal{C} der Länge $L = la$ im Raum und der Länge $T = ta$ in der Zeit

$$\langle W \rangle = \frac{\int DU W(\mathcal{C}) \exp\left(\frac{1}{g^2} \sum_{\square} \text{Sp}\left(U_{\square} + U_{\square}^{\dagger}\right)\right)}{\int DU \exp\left(\frac{1}{g^2} \sum_{\square} \text{Sp}\left(U_{\square} + U_{\square}^{\dagger}\right)\right)} \quad (3.117)$$

⁴³Dies ist auch ein Problem für die Generierung von Stichproben mittels lokaler Update Strategien. In diesem Parameterbereich der Theorie können die Algorithmen durch langreichweitige Korrelationen nur langsam den Konfigurationsraum durchlaufen. Ein einfaches Mittel dagegen sind Überrelaxationsmethoden (siehe auch 3.2.8).

in führender Ordnung von g^{-2} berechnen und entwickeln dazu den Boltzmann Faktor in erster Ordnung. Wir benutzen die Gruppenintegrationsregeln

$$\int dUU = \int dUU^\dagger = \int dUUU = \int dUU^\dagger U^\dagger = 0 \quad (3.118a)$$

$$\int dUU_{ij}U_{kl}^\dagger = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}, \quad (3.118b)$$

die man aus (3.52) und $UU^\dagger = 1$ ableiten kann. Demnach muß in niedrigster Ordnung immer ein U_l von der Wilsonschleife auf ein U_l^\dagger vom Boltzmann Faktor treffen, um einen nicht verschwindenden Beitrag zum Erwartungswert (3.117) zu liefern. Dies können wir graphisch darstellen, indem wir die Schleife mit der kleinst möglichen Fläche der Linkvariablen ausfüllen, wie aus Abb. 3.9 zu entnehmen ist. Demnach erhalten wir in führender Ordnung

$$\langle W \rangle \stackrel{g \rightarrow \infty}{\sim} \left(\frac{1}{3g^2} \right)^{lt} = \exp(-lt \ln(3g^2)). \quad (3.119)$$

Es tritt (wie nicht anders zu erwarten) in diesem Limes Confinement auf, weil der

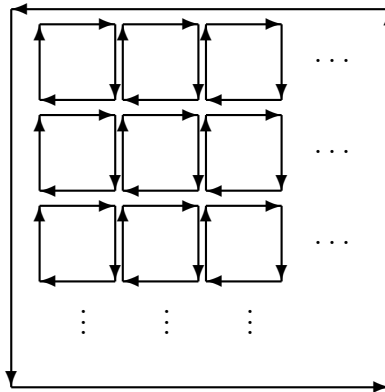


Abbildung 3.9: Der führende Beitrag zum Erwartungswert (3.117) der Wilsonschleife

Exponent aus der Fläche der Schleife besteht. Damit erhalten wir für $g \rightarrow \infty$ für die Stringspannung (3.99) in führender Ordnung

$$\sigma = \frac{1}{a^2} \ln(3g^2) \quad (3.120)$$

für große l und t . Es ist klar, daß dieser Grenzfall nichts mit der QCD des Kontinuums zu tun hat. Die Massen sind nämlich viel größer als der Cutoff, und Rotationsinvarianz ist stark verletzt. Die Stringspannung würde zunehmen, wenn man die Quellen von den Achsen verschiebt.

Renormierung mit Hilfe der Renormierungsgruppe

Wir müssen g genau in die andere Richtung ändern, wo wir für $g \rightarrow 0$ das Kontinuum erwarten. Allerdings darf auf dem Weg dahin kein Phasenübergang stattfinden,

3 Grundlagen der Gittereichtheorie

wenn wir eine asymptotisch freie Theorie im Limes $a \rightarrow 0$ erhalten wollen⁴⁴. Das Ergebnis (3.120) für die Stringspannung entspricht dem Resultat für eine unendlich enge und direkte Flußröhre zwischen den Quarks, das wir erhalten haben, weil die Links in führender Ordnung der Entwicklung eine minimale Oberfläche der Schleife bilden (siehe Abb. 3.9). Berücksichtigen wir höhere Ordnungen in g^{-2} , dann beginnt diese Oberfläche zu fluktuieren. Die Flußröhre bekommt dadurch eine endliche transversale Länge und die Stringspannung bzw. ihre Wurzel bestimmt durch die dimensionslose Funktion $f(g)$ in

$$\sigma^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{a} f(g) \quad \text{mit} \quad \lim_{g \rightarrow \infty} f(g) = (\ln(3g^2))^{\frac{1}{2}} \quad (3.121)$$

und nimmt mit abnehmender Kopplung g ab. Mit anderen Worten: $f(g)$ ist monoton wachsend in g mit dem Grenzwert

$$\lim_{g \rightarrow \infty} f(g) = (\ln(3g^2))^{\frac{1}{2}}.$$

Das Verhältnis zwischen dem Radius der Flußröhre und dem Gitterabstand wird

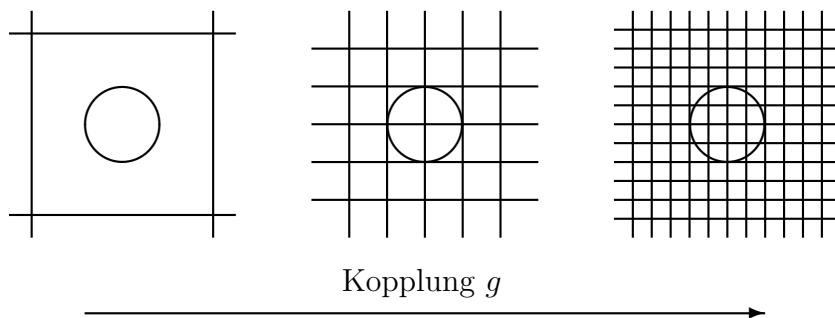


Abbildung 3.10: Übergang von starker über mittlerer hinzu schwacher Kopplung g . Je schwächer die Kopplung, desto feiner wird die Auflösung auf dem Gitter.

mehr und mehr physikalisch akzeptabel, was in Abb. 3.10 symbolisch gezeigt ist. Im Kontinuumsimes ist der Gitterabstand klein im Vergleich zu den charakteristischen physikalischen Abständen. Im Prinzip können wir also wie folgt vorgehen, um die Renormalisierung auf dem Gitter durchzuführen:

- Wir wählen einen Wert für g und berechnen für eine Menge von Observablen $\langle O_i \rangle$, indem wir

$$\langle O_i \rangle = a^{-d_i} \langle f_i(g) \rangle \quad (3.122)$$

setzen, wobei d_i die Dimension des Operators in Gittereinheiten a und f_i die dazugehörige dimensionslose Größe ist. Beispielsweise ist die Stringspannung durch $\sigma = a^{-2} \tilde{\sigma}$ gegeben (siehe auch (3.120) bzw. (3.121)).

⁴⁴Auf einem endlichen Gitter mit N_t Gitterpunkten in der Zeitrichtung ist diese Aussage so nicht haltbar. Entspricht doch einem Gitter (mit periodischen Randbedingungen in der Zeit) die physikalische (inverse) Temperatur $\beta_t = N_t a$. Das bedeutet, daß ein Verkleinern von a die Temperatur des Systems erhöht. Wie wir gleich sehen werden, hängt a von g aber genau in der Weise ab, daß ein Verkleinern von g auch a verkleinert. Auf einem endlichen Gitter beeinflusst somit die Wahl von g auch die physikalische Temperatur des Systems.

- Wir benutzen nun den physikalischen Wert eines Operators, z.B. O_1 , um das zu g passende a zu berechnen. Für die Stringspannung beispielsweise ergibt sich dadurch mit (3.101)

$$a = \sqrt{\bar{\sigma}}/420 \text{ MeV}^{-1}. \quad (3.123)$$

Mit diesem Wert von a sind dann alle anderen Observablen $O_2 \dots O_N$ für den gewählten Wert g bestimmt.

- Wir wiederholen die Rechnung für verschiedene (kleiner werdende) Werte von g und bestimmen dabei die Funktion $a(g)$ wie auch eine Folge von Werten für jede Observable $O_2 \dots O_N$. Jede dieser Folgen für $O_2 \dots O_N$ sollte für $g \rightarrow 0$ gegen einen Wert streben, und dieser Wert sollte ihr physikalischer Wert sein.

In der Praxis (endliches Gitter) stellt sich heraus, daß es unmöglich ist, g klein genug zu wählen, um das oben beschriebene Vorgehen in den Kontinuumsbereich fortzusetzen.

Die Renormierungsgruppe

Man benutzt stattdessen die Renormierungsgruppengleichung, wie wir im folgenden sehen werden. Im Kontinuumslimes sollte das Gitter keine relevante Rolle mehr spielen und damit die Größe des Cutoffs irrelevant werden. Wir erwarten deshalb in diesem Limes, daß es möglich sein muß, die Kopplung g und den Gitterabstand a gleichzeitig zu ändern, so daß die physikalischen Eigenschaften des Systems dabei unverändert bleiben. Diese (Renormierungs-) Forderung bestimmt die Funktion $f(g)$ aus (3.121) eindeutig, denn es muß für die Wurzel der Stringspannung (wie auch für ähnlich dimensionierte Observablen z.B. Massen) wegen der Unabhängigkeit vom Cutoff

$$a \frac{d}{da} \sigma^{\frac{1}{2}} = 0 \quad (3.124)$$

gelten, was uns aus (3.121) mit $g(a)$ auf eine Differentialgleichung erster Ordnung für $f(g)$ auf

$$\frac{d}{dg} f(g) \beta_L(g) - f(g) = 0 \quad (3.125)$$

führt, wobei wir die Betafunktion auf dem Gitter

$$\beta_L(g) = a \frac{d}{da} g(a) = \frac{dg(a)}{d \ln(1/\Lambda_L a)} \quad (3.126)$$

mit einer Konstanten Λ_L definiert haben, die das Argument des Logarithmus dimensionslos macht. Die Betafunktion $\beta_L(g)$ kann mit Hilfe von perturbativen Methoden in einer Umgebung von $g_c = 0$ berechnet werden

$$\beta_L(g) = \gamma_0 g^3 + \gamma_1 g^5 + \gamma_2^L g^7 + \dots, \quad (3.127)$$

wobei die ersten beiden Koeffizienten unabhängig von der Art der Regularisierung sind [Gro75]. Deshalb können wir für sie die Werte von Ein- und Zwei-Schleifen Berechnungen

$$\gamma_0 = \frac{1}{16\pi^2} \frac{11N}{3} \quad \text{und} \quad \gamma_1 = \left(\frac{1}{16\pi^2} \right)^2 \frac{34N^2}{3} \quad (3.128)$$

aus dem Kontinuum nehmen [GW73], [Pol73], [Jon74], [Cas74]. In dieser Ordnung integrieren wir (3.125) und erhalten

$$\begin{aligned} f(g) &= C (\gamma_0 g^2)^{-\frac{\gamma_1}{2\gamma_0}} \exp\left(-\frac{1}{2\gamma_0 g^2}\right) (1 + O(g^2)) \\ &= C \left(\frac{16\pi^2}{11g^2}\right)^{\frac{51}{121}} \exp\left(-\frac{8\pi^2}{11g^2}\right) (1 + O(g^2)) \end{aligned} \quad (3.129)$$

mit einer Integrationskonstante C und unter Benutzung von (3.128) für $N = 3$. Für a erhalten wir durch Integration aus (3.126) in derselben Näherung

$$\lambda_L a(g) = \left(\frac{16\pi^2}{11g^2}\right)^{\frac{51}{121}} \exp\left(-\frac{8\pi^2}{11g^2}\right) (1 + O(g^2)), \quad (3.130)$$

so daß (3.121) in der Zwei-Schleifen Approximation durch

$$\sigma^{\frac{1}{2}} = C_{\sqrt{\sigma}} \Lambda_L \quad (3.131)$$

gegeben ist. Λ_L ist dabei ein Cutoff unabhängiger Parameter mit der Dimension 1/Länge, der die Skala festlegt⁴⁵ und mit dessen Hilfe die Dimension der Observablen hergestellt wird (analog zu a vorher). Die Integrationskonstante C_σ aus (3.129) bzw. (3.131) beinhaltet den gesamten nichtpertubativen Inhalt der Theorie und wird Verbindungskonstante genannt. Wir haben somit durch die Renormierungsforderung (3.124) gefunden, daß im Kontinuumsimes für jede Observable aus (3.122)

$$\langle O_i \rangle = C_i \Lambda_L^{d_i} \quad (3.132)$$

und insbesondere für eine Masse $m = C_m \Lambda_L$ bzw. die Wurzel der Stringspannung (3.131) gilt.

Scaling und Asymptotic Scaling

Wenn der Gitterabstand a endlich ist, wird es Korrekturterme auf der rechten Seite von Gleichung (3.124) geben, die nach Störungsrechnung in führender Ordnung proportional zu $O(a^2(\ln a)^P)$ sind. Demnach verschwinden diese Korrekturterme wegen (3.130) mit abnehmenden g exponentiell mit $1/g^2$. Kontinuumsverhalten setzt ein, wenn die Korrekturterme vernachlässigbar sind, da dann der Meßwert unabhängig vom Cutoff ist. Das Verhalten in diesem Bereich der Kopplungsstärke wird dann eindeutig durch die Betafunktion beschrieben, denn nach (3.125) gilt

$$f(g) \sim \exp\left(\int^g \beta_L(g') dg'\right).$$

Das Verhalten der Observablen in diesem Bereich der Kopplungsstärke heißt im Unterschied zu oben "Skalieren" ("scaling"). Es ist wegen der Abhängigkeit der höheren Koeffizienten der Betafunktion (3.127) vom Regulierungsschema abhängig. Wenn die Kopplungsstärke g so klein ist, daß die polynomialen Terme $\sim g^2$ in der

⁴⁵Dadurch ist in die klassisch skalenfreie Theorie durch Renormierung eine Skala eingeführt worden. Dieser Vorgang wird "Dimensional Transmutation" genannt.

Klammer (3.129) vernachlässigbar sind, dann ist Verhalten der Observablen (3.132) unabhängig von der Regulierung und wird in diesem Bereich der Kopplungsstärke "asymptotisches Skalieren" ("asymptotic scaling") genannt.

Scaling Window

Das Verfahren zur Extraktion von Kontinuumsphysik, das wir im Anschluß an (3.121) beschrieben haben, führen wir demnach nur solange durch, bis wir asymptotisches Skalieren gemäß (3.132) feststellen. Meist wird es aber nur einen kleinen Bereich der Kopplungsstärke, das sogenannte "scaling window", geben, in dem asymptotisches Skalieren feststellbar ist. Denn wenn man g immer kleiner wählt, wird das untersuchte (physikalische) Volumen gemäß (3.130) irgendwann nicht mehr auf das (in der Praxis endliche) Gitter passen, so daß "finite size" Effekte eine dominante Rolle spielen. Macht man andererseits die Kopplung zu groß, so verläßt man das Gebiet, in dem überhaupt Skalierung vorliegt.

Wir sind nun nach den theoretischen Überlegungen dieses Teils der Arbeit in der Lage, die Berechnung der Korrelationsfunktion (2.10) numerisch in der Praxis vorzunehmen und beginnen damit im nächsten Kapitel.

4 Die Rechnung in der Praxis

Im letzten Kapitel haben wir alle Elemente der Gittertheorie zusammengestellt, die wir bei der Berechnung der Korrelationsfunktion (2.10) auf dem Computer benötigen. Bei der konkreten Realisation der Monte Carlo Simulation gehen wir –wie teilweise in Abschnitt 3.2.1 beschrieben– in zwei Schritten vor:

1. Erzeugung der Konfigurationen

Wir erzeugen Konfigurationen der Linkvariablen (siehe 3.1.2) ohne dynamische Fermionen (quenched, siehe 3.2.3) mit Hilfe des Pseudo-Heat-Bath Algorithmus von Cabibbo und Marinari (siehe 3.2.7) angewandt auf drei SU(2) Untergruppen der SU(3). Für das lokale Update der SU(2) Untergruppen verwenden wir den Kennedy-Pendleton (siehe 3.2.6) bzw. den Creutz Algorithmus (siehe 3.2.5). Zur Beschleunigung benutzen wir das mikrokanonische Überrelaxationsverfahren (OR) von Brown und Woch (siehe 3.2.8). Das Verfahren kontrollieren wir durch Messung der Plaquette (3.3.1) und der Wilsonschleife (3.104). Mit Hilfe des Creutzverhältnisses (3.103) fixieren wir die Skala über den Zusammenhang mit der Stringspannung (siehe 3.4).

2. Berechnung der hadronischen Observablen

Wir beschreiben (statische) Fermionen auf dem Gitter nach Wilson (siehe 3.1.1). Zur Berechnung der Korrelationsfunktion (siehe 3.3.3) invertieren wir die Fermionenmatrix (3.49) nacheinander mit Hilfe des Conjugate Gradient (CG) Verfahrens von DeGrand (siehe B.2) für die erzeugten Konfigurationen und berechnen damit $R_i(x)$ aus Abschnitt 3.3.3 für jeden Strom aus Tab. 2.1 und jede Konfiguration.

Zur Umsetzung beider Schritte auf dem Computer diskutieren wir im nächsten Abschnitt 4.1 einige Details der Programmierung, so daß die bisher abstrakte Vorstellung des Gitters auf dem Computer konkretisiert wird. Danach stellen wir in Abschnitt 4.2 die Parameter der Simulation zusammen, bevor wir sie in Abschnitt 4.3 festlegen. In Abschnitt 4.4 zeigen wir einige Ergebnisse der Berechnung der Punkt-zu-Punkt-Korrelationsfunktion und werten die Informationen der Ebene-zu-Ebene-Korrelationsfunktion aus.

4.1 Details der Programmierung

Zur Implementation der Gitterrechnung auf dem Computer benutzen wir die Programmiersprache "C" ([DD94]) und die von der MILC Kollaboration im Quelltext frei erhältliche Bibliothek "MILC" für Gittersimulationen [B⁺]. Sie enthält alle im letzten Kapitel beschriebenen Algorithmen (und noch viele mehr), wie auch essentiell wichtige Routinen zum Laden und Speichern der erzeugten Konfigurationen und berechneten Propagatoren. Darüber hinaus ermöglicht sie transparent die Kommu-

nikation zwischen verschiedenen Computern oder Prozessoren eines Parallelrechners über PVM oder MPI [GKP96], so daß man leicht parallele Rechnungen durchführen kann. Wir benutzen aus der Bibliothek die Pakete "pure_gauge" und "wilson_invert", die wir für unsere Zwecke in "dipl_pure_gauge" und "dipl_wilson_invert" abändern¹. Das erste Paket mit dem Hauptprogramm "createconfigs" dient hauptsächlich der Erstellung der Konfigurationen und Messung von Observablen im reinen Eichsektor², während das zweite mit dem Hauptprogramm "calccorr" die Wilsonmatrix invertiert und damit die Korrelationsfunktion (3.106) und (3.107) berechnet³.

Das Gitter als Array

Es ist klar, daß wir auf dem Computer im Unterschied zum letzten Kapitel nicht mit einem unendlichen Gitter rechnen können. Wir wählen stattdessen ein endliches Gitter mit n_x in x , n_y in y , n_z in z und n_t Punkten in (euklidischer) Zeitrichtung und periodischen Randbedingungen. Dabei besteht das Gitter auf dem Computer als Array einer Struktur "site" mit der Dimension $vol = n_x \times n_y \times n_z \times n_t$, deren (generische) Definition in Abb. 4.1 dargestellt ist⁴. Der erste Teil der Struktur ist beiden Paketen gleich. Er besteht immer aus den Koordinaten des Punktes, der dazugehörenden Parität, dem Index des Punktes innerhalb des Arrays und den vier von diesem Punkt ausgehenden Linkvariablen. Der zweite Teil ist vom jeweiligen Paket (bzw. Programm) abhängig. Er beinhaltet einerseits Ergebnisplatzhalter für Messungen von Observablen, die nicht über das gesamte Gitter gemittelt werden (wie z.B. die Plaquette (3.93)), sondern vom Gitterpunkt abhängen (wie z.B. die Korrelationsfunktion $R(x)$ oder der Propagator $M^{-1}(x, 0)$) und andererseits unterschiedliche Hilfsgrößen, die für die diversen Algorithmen beider Pakete benötigt werden (siehe Abb. 4.1).

Erzeugung der Konfigurationen mit "createconfigs"

Das Programm zum Erzeugen der Konfigurationen wie auch zur Messung rein gluonischer Observablen wird durch eine Eingabedatei (siehe Abb. 4.2) gesteuert, die es nach dem Start ("createconfigs < eingabedatei") einliest und auswertet. Mit der Angabe von `nx`, `ny`, `nz` und `nt` wird die Dimension des Gitters bestimmt und mit `beta` wird die gewünschte Kopplung gewählt. Das Verhältnis zwischen dem OR

¹Die beiden Pakete zum Messen der Observablen aus 3.3 und insbesondere zur Messung der Korrelationsfunktion (2.10) liegen zusammen mit den notwendigen Änderungen an der Version 6 der MILC Bibliothek unter <http://www.th.physik.uni-frankfurt.de/~loizides/diplom/clmilctree6.tar.gz>. Nach dem Entpacken erhält man eine komplette Verzeichnisstruktur der Bibliothek zusammen mit den beiden Verzeichnissen "dipl_pure_gauge" und "dipl_wilson_invert".

²Es wird durch ein "make createconfigs -f *Makefile*" im Verzeichnis "dipl_pure_gauge" erstellt. Dazu muß vorher aus dem Verzeichnis "Makefiles" ein dem System (Betriebssystem/Prozessor) und der gewünschten Kommunikationsart (keine/PVM/MPI) entsprechendes Makefile "*Makefile*" in "dipl_pure_gauge" (symbolisch) gelinkt werden.

³Es wird durch ein "make calccorr -f *Makefile*" im Verzeichnis "dipl_wilson_invert" erstellt. Dazu muß vorher aus dem Verzeichnis "Makefiles" ein dem System (Betriebssystem/Prozessor) und der gewünschten Kommunikationsart (keine/PVM/MPI) entsprechendes Makefile "*Makefile*" in "dipl_wilson_invert" (symbolisch) gelinkt werden.

⁴Zu sehen ist tatsächlich ein (nachbearbeiteter) Auszug aus der in der MILC Bibliothek sehr zentralen Definitionsdatei "lattice.h". Jedes Paket der Bibliothek besitzt eine eigene derartige Datei.

4 Die Rechnung in der Praxis

```
typedef struct {
    /* Koordinaten des Punkts */
    short x,y,z,t;
    /* Parität des Punktes: gerade/ungerade */
    char parity;
    /* Ort des Punkts innerhalb des Arrays */
    int index;
    /* Linkvariablen dieses Punktes */
    su3_matrix link[4];

    /* -----*/
    /* Programmabhängige Platzhalter */

    /* Verschiedene Platzhalter für Ergebnisse von
    Berechnungen, die nicht wie die Plaquette
    übers gesamte Gitter gemittelt werden */
    float value1; /* z.B. für R(x) */
    /* ... */
    float valuen;

    /* createconfigs */
    /* Stapel für die Monte Carlo Methode
    Creutz oder Kennedy-Pendleton */
    su3_matrix staple;
    /* weitere Hilfsgrößen */

    /* calccorr */
    /* Propagator an diesem Punkt */
    wilson_propagator quark_propagator;
    /* Quell- und Lösungsvektor der Conjugate
    Gradient Methode */
    wilson_vector psi;
    wilson_vector chi;
    /* weitere Hilfsgrößen für die CG-Methode */
} site;
```

Abbildung 4.1: Die wichtigsten Elemente der Struktur "site". Das Gitter auf dem Computer besteht aus einem Array dieser Struktur. Damit ist sie auch gleichzeitig (bei fester Gittergröße) der entscheidende Faktor für den Speicherbedarf einer Gittersimulation und muß so klein wie möglich sein. Für das Erstellen der Konfigurationen beträgt ihre Größe 888 Byte und für das Invertieren und Berechnen der Korrelationsfunktion 1844 Byte. Somit braucht das Array $vol \times 888$ Byte bzw. $vol \times 1844$ Byte. Dazu kommt noch der Speicherplatzbedarf für Kommunikationsstrukturen (ca. $vol \times 128$ Byte).

```

prompt 0          # 0 = nicht interaktiv fragen
nx 16            # Punkte in x Richtung
ny 16            # Punkte in y Richtung
nz 16            # Punkte in z Richtung
nt 16            # Punkte in t Richtung
iseed 0          # Zufallsgenerator initialisieren
warms 1000       # Anzahl Sweeps vor der Messung
trajecs 3000     # Anzahl Sweeps insgesamt
traj_between_meas 15 # Anzahl Sweeps zwischen Messung
beta 5.7         # Kopplung
steps_per_trajectory 3 # Überrelaxed Schritte pro Sweep
qhb_steps 1      # Heat-Bath Schritte pro Sweep
fresh           # Beginne mit U=diag(1,1,1) am Anfang
no_gauge_fix    # Keine Eichfixierung
save_serial links # Speichere Linkvariablen in "links"

```

Abbildung 4.2: Typische Eingabedatei für das Programm "createconfigs". Die Kommentare sind nachträglich eingefügt und werden vom Programm nicht verstanden!

und dem Pseudo-Heat-Bath Algorithmus wird durch `steps_per_trajectory` und `qhb_steps` gesteuert. Pro Update werden erst `steps_per_trajectory` OR Sweeps und danach `qhb_steps` Pseudo-Heat-Bath Sweeps durchgeführt⁵. Zur Thermalisierung werden vor der ersten Messung `warms` Updateschritte (ohne Messung) durchgeführt. Danach beginnt der Meßvorgang. Das Programm führt weitere `trajecs` Updateschritte durch und mißt immer nach `traj_between_meas` Schritten die gewünschten Observablen. Am Ende speichert es die letzte Konfiguration in der Datei `links`. Alle weiteren Einstellungen sind direkt in Abb. 4.2 beschrieben und hier nicht weiter relevant. Die zu messenden Observablen muß man im Zweifel als Unterrou-tinen selbst programmieren und an geeigneten Stellen zur Messung aufrufen. Ein guter Platz sind die Dateien "clinit.c", "clbefore.c", "clmiddle.c" und "clafter.c", die an passenden Stellen im Quelltext von der Hauptdatei "control.c" eingefügt werden.

Berechnung der hadronischen Observablen mit "calccorr"

Das Programm zur Berechnung der Korrelationsfunktion wird ebenfalls durch eine Eingabedatei (siehe Abb. 4.3) gesteuert, die es nach dem Start ("calccorr < eingabedatei") einliest und auswertet. Mit der Angabe von `nx`, `ny`, `nz` und `nt` wird die Dimension des Gitters festgelegt und mit `kappas` wird die gewünschte Quarkmasse gewählt. Das Programm liest die Konfiguration der Linkvariablen aus der Datei `links` ein. Es invertiert daraufhin die Wilsonmatrix mit der CG Methode zu einer Punktquelle (`point`) an der Stelle 0 (fest in "lattice.h" implementiert). Der CG terminiert, wenn das Residuum kleiner als `error_for_propagator` ist oder wenn

⁵Auf dem Computer erzeugt man Zufallszahlen mit einem Pseudo-Zufallsgenerator. Dieser erzeugt –geeignet initialisiert– durch eine mathematische Vorschrift "Pseudo-Zufallszahlen", die nur schwer von wirklichen Zufallszahlen (beispielsweise aus radioaktiven Zerfall) unterscheidbar sind (siehe [Thi99], Kap. Anhang B und Referenzen darin). Wenn wir im weiteren von Zufallszahlen reden, meinen wir immer Pseudo-Zufallszahlen.

4 Die Rechnung in der Praxis

```
prompt 0          # 0 = nicht interaktiv fragen
nx 16            # Punkte in x Richtung
ny 16            # Punkte in y Richtung
nz 16            # Punkte in z Richtung
nt 16            # Punkte in t Richtung
number_of_kappas 1 # Anzahl zu berechnender Kappa-Werte
kappa 0.165      # Kappa-Werte
max_cg_iterations 350 # Max. Zahl an CG Iterationen
max_cg_restarts 1   # Max. Zahl an Wiederholungsversuchen
error_for_propagator 1e-7 # Wert des Residuums
point            # Punktquelle
r0 1.0           # unwichtig für uns
reload_parallel links # Lade Linkkonfiguration aus "links"
no_gauge_fix     # Keine Eichfixierung
forget           # Vergiss Konfiguration am Schluss
fresh_prop       # Beginne mit neuem Propagator
save_serial_prop prop # Speichere Propagator in "prop"
serial_scratch_prop bla # unwichtig für uns
```

Abbildung 4.3: Typische Eingabedatei für das Programm "calccorr". Die Kommentare sind nachträglich und werden vom Programm nicht verstanden!

maximal `max_cg_restarts` mal `max_cg_iterations` Iterationen durchlaufen sind. Am Schluß wird der Propagator in der Datei `prop` gespeichert. Schließlich konstruiert das Programm mit dem berechneten Propagator die Korrelationsfunktion für die gewünschten Ströme und speichert das Ergebnis in einer Datei, die aus der Umgebungsvariablen "\$CONFIGFILENAME" ausgelesen wird. Alle weiteren Einstellungen sind direkt in Abb. 4.3 beschrieben und hier nicht weiter relevant.

Rechenzeit bei 16^4 Gitterpunkten

Da die Rechenleistung der zur Verfügung stehenden Computer bei der Berechnung dieser Arbeit extrem wichtig ist, geben wir hier die Rechendauer beider Programme für die Standardgittergröße (16^4 Gitterpunkte, 16 Punkte in jede Richtung) dieser

	Speicherbedarf [MB]	Athlon ^a [s]	Dracula ^b [s]	GSI-Cluster ^c [s]
"createconfigs"	62	26.7	89.2	43.2
"calccorr"	124	2.7	10.2	3.5

^aAMD (Thunderbird 700 MHz, 256MB), <http://www.amd.com/products/cpg/athlon/overview.html>

^bSGI Power-Challenge (10 MIPS-Prozessoren R10000, 4GB Shared Memory) <http://www.rz.uni-frankfurt.de/hlr/hlr-ffm.html>

^cIntel (Pentium III 600 MHz, 512 MB), <http://www-linux.gsi.de/Cluster/lxcluster.jpg>

Tabelle 4.1: Speicherplatz und Rechenaufwand bei einem 16^4 Gitter mit Standardeingabewerten (wie im Text beschrieben)

Arbeit in Tab. 4.1 an. Für das Updating ist der angegebene Wert für die Rechenzeit derjenige eines Updateschritts bei $\beta = 5.7$ mit einem Mischungsverhältnis von 3 : 1

von OR zu Pseudo-Heat-Bath. Genauso ist die angegebene Rechenzeit zum Invertieren der Matrix bei $\kappa = 0.168$ diejenige eines CG Schrittes. Alle Zeiten sind natürlich ohne Eingabe/Ausgabe über mehrere Schritte (100) bzw. Iterationen (1200) gemittelt. Es wird deutlich, daß der Parallelrechner mittlerweile in die Jahre gekommen ist. Wir benutzen ihn nur bei Rechnungen, die wegen ihres Speicherbedarfs (ca. 2.2 GB) nicht auf anderen Computern gerechnet werden können (z.B. für ein 32^4 Gitter ohne Wechselwirkung, siehe Abschnitt 5.1).

Parallelisierung

Durch die Kommunikationsroutinen der MILC Bibliothek können beide Programme über MPI oder PVM auch mit mehreren Prozessoren Parallel-Rechnungen ausführen. Jeder an der Rechnung beteiligte Prozessor des (virtuellen) Parallelrechners verwaltet einen Teil des Arrays und heißt "Knoten". Durch die Parallelisierung entsteht

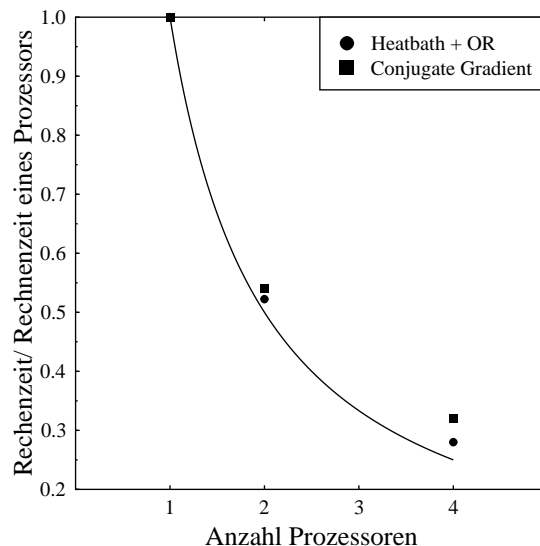


Abbildung 4.4: Skalierung der relativen Rechenzeit für die Parallelisierung des Erzeugungs- und Invertierungsverfahrens gemessen auf Dracula (unter PVM) für ein 16^4 Gitter mit gewöhnlichen Parametern bei beiden Algorithmen. Die durchgezogene Linie zeigt die optimale Skalierung.

ein zusätzlicher Kommunikationsaufwand unter den Knoten, wenn sie Informationen aus Teilen des Gitters benötigen, auf die sie direkt keinen Einfluß haben. Bei guter Parallelisierbarkeit unseres Problems sollte dieser (zeitliche) Aufwand deutlich unter dem Rechenaufwand liegen. Im Idealfall skaliert die Rechenzeit invers zu der Anzahl der Knoten und die Effizienz beträgt 100%. Durch die lokale Updatestrategie des Pseudo-Heat-Bath und OR Algorithmus läßt sich dieser leicht parallelisieren. Nur für die am Rand des Bereichs eines Knotens liegenden Gitterplätze entsteht ein zusätzlicher Kommunikationsaufwand (z.B. beim Berechnen des Stapels). Auch die

CG Methode läßt sich wegen der Bandstruktur der Fermionenmatrix mit geringem Aufwand parallel ausführen. Eine Messung auf dem Parallelrechner "Dracula" der Universität Frankfurt unter PVM bestätigt diese Aussagen quantitativ, wie in Abb. 4.4 zu sehen ist. Durch Verwenden zweier Prozessoren kann man die Rechenzeit in beiden Fällen quasi halbieren, bei vier Prozessoren macht sich der Kommunikationsaufwand zwar bemerkbar, trotzdem sinkt die Rechenzeit auf 28% im ersten und 32% im zweiten Fall im Vergleich zur Rechenzeit von einem Knoten. Allerdings ist das auch von der Problemgröße (hier gezeigt 16^4) und der Struktur des Kommunikationsmediums (bzw. der Gitterplatzanordnung im Array) abhängig.

4.2 Zusammenstellung der Parameter

In diesem Abschnitt stellen wir die in den vergangenen Abschnitten erwähnten Parameter zusammen. Wir verfügen über zwei verschiedene Typen von Parametern, mit denen wir die Simulation steuern können.

1. Direkte Parameter

Die Wahl dieser Parameter beeinflusst direkt die physikalischen Eigenschaften des betrachteten Systems:

- **Berücksichtigung von dynamischen Fermionen: ja oder nein!** Wir haben hier keine wirkliche Wahl wegen des ansonsten zu hohen Rechenaufwands beim Erstellen der Konfigurationen. Deshalb rechnen wir *quenched* und setzen $\det M = 1$, wie in Abschnitt 3.2.3 erläutert⁶.
- **Anzahl der Quark-Flavour** Dadurch, daß wir wegen der Invertierung der Fermionenmatrix ohnehin nur mit relativ großen Quarkmassen (ca. 20 – 270 MeV) rechnen können, beschränken wir uns auf *einen* Flavour, berücksichtigen natürlich aber beide (up und down) bei der Kontraktion (siehe Abschnitt 3.3.3). Je unphysikalischer die gewählte Quarkmasse ist, um so vernachlässigbarer ist diese Einschränkung. Die Beschränkung auf einen Flavour reduziert gleichzeitig auch die Anzahl der zu invertierenden Fermionenmatrizen um die Hälfte.
- **Masse der statischen Quarks** Durch den *Hoppingparameter* κ aus Gleichung (3.50) des verbleibenden einen Flavours wählen wir die Quarkmasse des Systems. Wir werden sehen, daß wir allerdings zur wirklichen Angabe der Quarkmasse in MeV, den Wert des Hoppingparameters κ_c benötigen, bei dem der chirale Limes, den wir durch Einführung des Wilsonterms in die naive Fermionenwirkung (3.29) gebrochen haben, wieder hergestellt ist.

2. Indirekte Parameter

⁶Man kann sich auch auf den Standpunkt stellen, daß dies kein Parameter ist, sondern einfach ein systematischer Fehler der Rechnung und diesen Punkt bei den indirekten Parametern erwähnen.

Diese Parameter haben keinen Einfluß auf die charakteristischen Eigenschaften des Systems. Durch sie steuern wir aber die Genauigkeit und Aussagekraft der Rechnung:

- **Gittergröße und Kopplung** Durch die *Anzahl der Gitterpunkte für jede Richtung* und durch die Wahl der *Kopplung* β bestimmen wir das Volumen des Gitters über den Zusammenhang $a(g)$ aus Gleichung (3.130)⁷. Wie in Abschnitt 3.4 beschrieben, können wir im Scaling Window dann über einen experimentellen Meßwert die Skala Λ_L nach (3.132) fixieren, so daß wir auch bei endlichem a unsere Rechnung mit anderen Regulierungsschemata vergleichbar machen. Damit kennen wir dann nach (3.130) auch $a(g)$ im Skalierungsbereich und können damit alle Größen physikalisch vergleichbar ausdrücken. Das Volumen muß groß genug sein, um unser betrachtetes System (etwa ein Proton mit dem Radius ~ 1 fm) beinhalten zu können. Trotzdem sind Volumeneffekte nicht zu vermeiden. Außerdem treten Diskretisierungseffekte durch die endliche Größe von a auf. Wir werden beide Effekte ausführlich in Kapitel 5 untersuchen.
- **Anzahl der Konfigurationen** Die *Anzahl der Konfigurationen* N , die zur Messung beitragen, beeinflußt direkt den statistischen Fehler. Er ist proportional $1/N^{\frac{1}{2}}$ gemäß (3.59).
- **Güte der Konfigurationen** Wie in Abschnitt 3.2.1 betont, müssen wir darauf achten, daß nur thermalisierte und unabhängige Konfigurationen zum Stichprobenmittel beitragen. Die *Anzahl der Schritte bis zur ersten Messung* werden wir durch den Meßverlauf einiger Observablen und Vergleiche mit der Literatur festlegen. Die Anzahl der notwendigen *Updateschritte zwischen Messungen* bestimmen wir aus der Korrelationslänge von Messungen an der Plaquette. Dazu bestimmen wir das *Mischungsverhältnis* K zwischen dem OR und Pseudo-Heat-Bath Algorithmus, das zur kürzesten Autokorrelationszeit führt.
- **Güte der Matrixinversion** Wie in Abschnitt 3.3.3 und B ausgeführt, können wir die Fermionenmatrix nicht exakt invertieren. Als Abbruchkriterium für die Genauigkeit benutzen wir die *Größe des Residuums*, das wir anhand der Abhängigkeit der Änderung physikalischer Observablen von der Größe des Residuums klein genug wählen werden.

⁷Wir beschränken uns auf symmetrische Gitter $N_x = N_y = N_z = N_t$ und definieren für diese Temperatur null. Eigentlich steuert man durch $1/T = \beta_T = N_t a(g)$ über g bzw. N_t die Temperatur des Systems auf dem endlichen Gitter, also eine physikalische Größe. Dazu benutzt man aber gewöhnlich asymmetrische Gitter, bei denen $N_t < N_x = N_y = N_z$ gilt.

4.3 Festlegung indirekter Parameter

4.3.1 Thermalisierungsschritte

Um ein Gefühl für die anstehenden Rechnungen zu bekommen, messen wir als erstes den Verlauf der Plaquette (3.93) für verschiedene β auf einem kleinen (8^4) Gitter mit dem Mischungsverhältnis $K = 3 : 1$ und je 10 Mittelungen pro β (100 Thermalisierungsschritte, 10 Schritte zwischen Messungen)⁸ und vergleichen unser Ergebnis mit dem zweier anderer Erzeugungsverfahren, der "Refresh Monte Carlo" und der "Hybrid Monte Carlo" Methode ([Rot98], Kap. 16 und Referenzen darin). Das Ergebnis ist in Abb. 4.5 dargestellt. Die Verfahren liefern untereinander konsistente

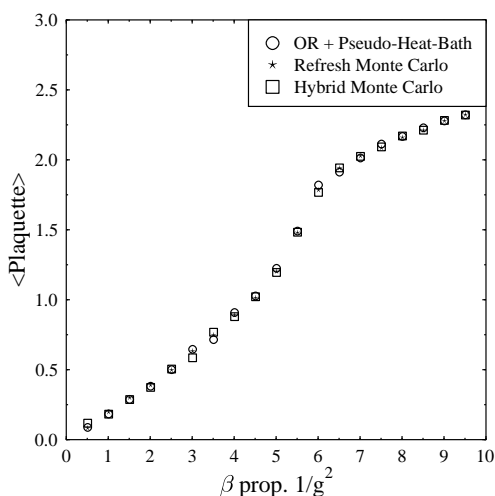


Abbildung 4.5: Die Messung der Plaquette (3.93) für verschiedene Werte von β auf einem 8^4 Gitter mit $K = 3 : 1$ und 100 Thermalisierungsschritten vor jeder Messung im Vergleich mit zwei anderen (in der Arbeit nicht weiter erwähnten) Verfahren

Ergebnisse, so daß bei der Erzeugung der Konfigurationen durch unser Programm systematische Fehler ausgeschlossen sind. Die Messung deutet eine Konvergenz der Plaquette bei $2.5 - 3$ an. Für $\beta \rightarrow \infty$ erwarten wir $\bar{U} = 3$, weil in diesem Limes keine Wechselwirkung vorliegt. Wir nennen die Konfiguration für $\beta = \infty$ und daraus extrahierte Größen deshalb "frei". Eine freie Konfiguration muß nicht berechnet werden, sondern wir setzen dazu "per Hand" alle Linkvariablen gleich der Einheitsmatrix im Farbraum. Dies wählen wir auch üblicherweise als Anfangswert beim Erzeugen einer Konfiguration für endliches β . Die tatsächlichen Werte der Plaquette sind für uns nicht weiter von Bedeutung.

Wir stellen den Verlauf der Plaquette und der Wilsonschleife (3.104) für einen quadratischen Weg der Seitenlänge 2, 3 und 4 (gemittelt für \mathcal{C} über Raum- und Zei-

⁸Diese Messung dient außerdem zum ersten Testen des Programms "createconfigs".

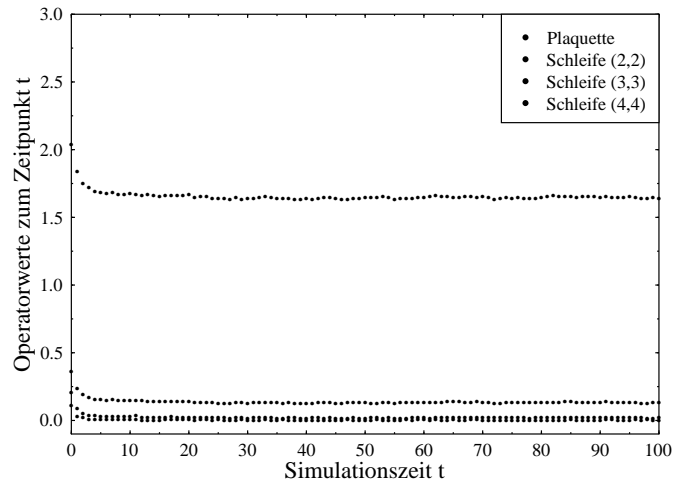


Abbildung 4.6: Der Verlauf der Plaquette und der (quadratischen) Wilsonschleife für die Seitenlänge 2, 3 und 4 (von oben nach unten) auf einem 8^4 Gitter mit $\beta = 5.7$ ($K = 3 : 1$) über die ersten 100 Schritte (mit der freien Konfiguration als Startkonfiguration)

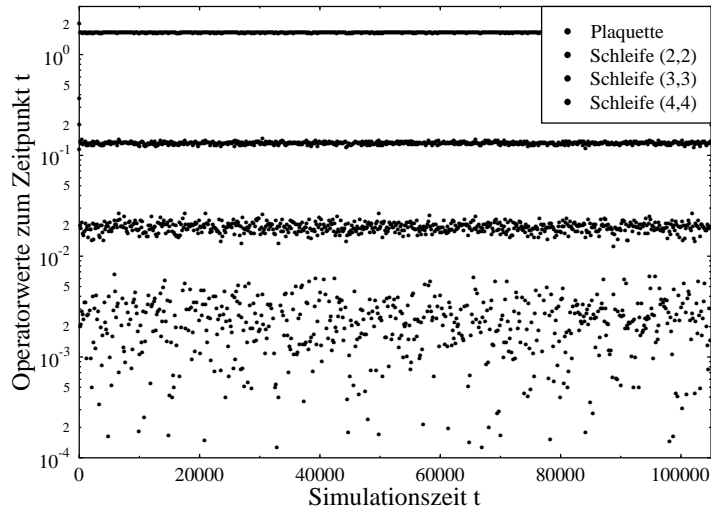


Abbildung 4.7: Der Verlauf (logarithmisch) der Plaquette und der (quadratischen) Wilsonschleife für die Seitenlänge 2, 3 und 4 (von oben nach unten) über 105000 Schritte für dieselben Parameter wie Abb. 4.6

trichtungen) in Abb. 4.6 dar. Die Gittergröße ist wiederum 8^4 und $\beta = 5.7$, und wir wählen erneut $K = 3 : 1$. Schon nach wenigen Iterationen sind die Werte relativ stabil und verändern sich kaum. Die Werte werden für größere Schleifen immer kleiner. In Abb. 4.7 ist der Verlauf bis zu 105000 Schritten fortgeführt und logarithmisch dargestellt. Nach 100000 Schritten ist das System mit Sicherheit thermalisiert, das Verhalten der Kurven zu dem nach 100 Schritten hat sich aber nicht geändert, die Werte schwanken um ihren Mittelwert. Wir nehmen daher an, daß 1000 – 2500 Schritte bei einem Gitter der Größe 16^4 ausreichen, um die Thermalisierung der Konfigurationen zu erreichen.

4.3.2 Optimale Wahl des Mischungsverhältnisses

Durch den logarithmischen Plot in Abb. 4.7 sehen wir, daß die Schleifen um so mehr fluktuieren, je größer sie sind. Wir berechnen deshalb aus den Daten die Autokorrelation über 100000 Meßpunkte für die verschiedenen Observablen (Plaquette und

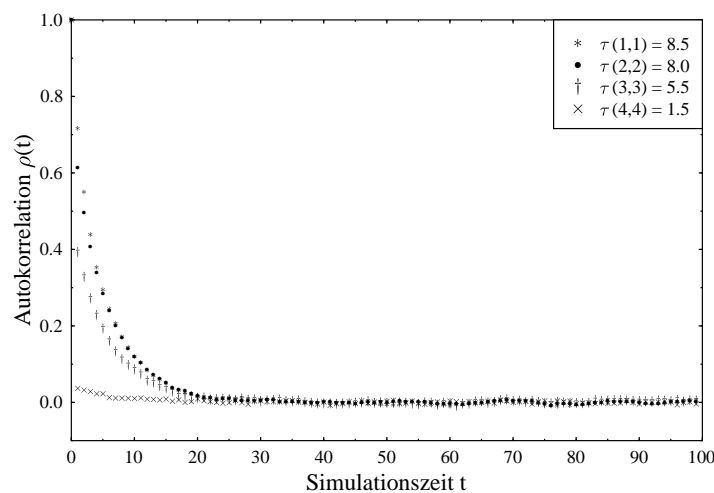


Abbildung 4.8: Die Autokorrelation der Observablen für die Messung aus Abb. 4.6, errechnet aus 100000 Meßpunkten und die daraus berechnete integrierte Autokorrelationszeit. Je kleiner die Schleife, desto größer ist die Autokorrelation.

quadratische Wilsonschleifen) gemäß (3.94)⁹. Sie ist in Abb. 4.9 dargestellt. Es ist deutlich zu sehen, daß die kleineren Schleifen korrelierter sind. Um dies quantifizieren zu können, definieren wir die Autokorrelationszeit durch

$$\tau = \rho(0) + 2 \sum_{i=1}^N \rho(i) \frac{N-i}{N}. \quad (4.1)$$

⁹Die ersten 5000 Meßpunkte lassen wir zur Sicherstellung der Thermalisierung weg.

Diese Definition ist sinnvoll. Sind die Daten minimal korreliert, dann ist $\rho(t > 0) = 0$ und somit $\tau = 1$. Sind sie maximal korreliert, dann ist $\tau = N$. Es ist außerdem immer $\rho(0) = 1$. Wir berechnen die Autokorrelationszeit gemäß (4.1) für jede Observable aus Abb. 4.6 mit $N = 100$ über 100000 Meßpunkte. Das Ergebnis ist in Abb. 4.9 angegeben und bestätigt, daß die Plaquette die größte Autokorrelationszeit ($\tau = 8.5$) besitzt. Wie wir in Abschnitt 3.2.8 behauptet haben, können wir durch die Kombination von OR und Heat-Bath Algorithmus den Konfigurationsraum schneller durchlaufen und die Korrelationszeit eventuell dadurch verkürzen. Um das optimale Mischungsverhältnis K zu finden, starten wir eine Meßreihe bei $\beta = 5.7$ mit je 5000 Schritten für 7 verschiedene Mischungsverhältnisse $K = 0 : 1$ bis $K = 6 : 1$ auf einem 8^4 Gitter. Als Startkonfiguration wählen wir für jedes K immer ein gleiches (gespeichertes) Gitter, das bereits mit 2500 Schritten thermalisiert ist. Ziel der Messung ist es, das Mischungsverhältnis K zu finden, bei dem die Autokorrelationszeit am kleinsten ist. Die Autokorrelationszeit τ_0 berechnen wir nach (4.1), allerdings nicht mit festem N , sondern wir suchen das $N < 1000$, für das die Autokorrelationszeit maximal ist. Zu Vergleichszwecken berechnen wir auch τ für $N = 100$ fest wie oben. Das Ergebnis der Versuchsreihe ist in Abb. 4.9 dargestellt. Es ist klar zu erkennen, daß $K > 0$ deutlich die Korrelationszeit verkürzt und die Überrelaxation einen positiven Einfluß auf die Autokorrelationszeit hat. In den meisten Fällen unterscheidet sich τ_0 nicht signifikant von τ . Da τ_0 langreichweitige Korrelationen (bis 1000 Schritte) berücksichtigt, ist es für unsere Zwecke aussagekräftiger. Demnach ist laut unserer Meßreihe $K = 3$ oder $K = 5$ mit einer Autokorrelationszeit von $\tau_0 = 8$ eine gute Wahl. Diese Aussage ist konsistent mit Aussagen einer großen Meßreihe der QCD-TARO Kollaboration [Kol92], [Kol93] und mit unserer vorherigen Messung aus Abb. 4.8. Aus [Kol93] geht hervor, daß die Autokorrelation deutlich mit der Größe des Gitters zunehmen kann. Leider ist dort nicht exakt der uns interessierende Wert $\beta = 5.7$ für ein Gitter der Größe 16^4 berechnet, da dort die Korrelationszeit beim Phasenübergang zum Deconfinement ($\beta = 6.3 - 6.8$) bestimmt wird. Daher und weil die Autokorrelation für andere Observablen größer sein kann, sind wir vorsichtig und wählen einen Wert von 750 Schritten bei $K = 3$ beim Erzeugen der Stichproben für die zu berechnenden hadronischen Korrelationsfunktionen aus Abschnitt 4.3.2 und sonst (bei Messungen für die Stringspannung auf einem 10^4 Gitter) einen Wert von 200 – 500.

4.3.3 Größe des Residuums

Wie bereits mehrmals erwähnt, ist das Residuum insbesondere bei kleinen Eigenwerten der zu invertierenden Matrix eigentlich kein guter Konvergenzparameter. Allerdings ist es das einzige Kriterium, das wir bei der CG Methode zur Verfügung haben. Um zu verdeutlichen, wie sich die Größe des Residuums als Funktion der CG Schritte bei verschiedenen Werten von κ verhält, berechnen wir die Inverse einer 8^4 Fermionenmatrix bei $\beta = 5.7$ für verschiedene Hoppingparameter $\kappa = 0.1575, 0.160, 0.1625, 0.165$ und 0.1675 . Wir brechen die Invertierung ab, wenn das Residuum kleiner als 10^{-6} ist oder maximal 300 Iterationen erfolgt sind. In Abb. 4.10 ist das Ergebnis gezeigt. Je größer der Hoppingparameter ist, um so mehr Iterationen bei der Invertierung werden benötigt. Wie wir sehen werden, entspricht

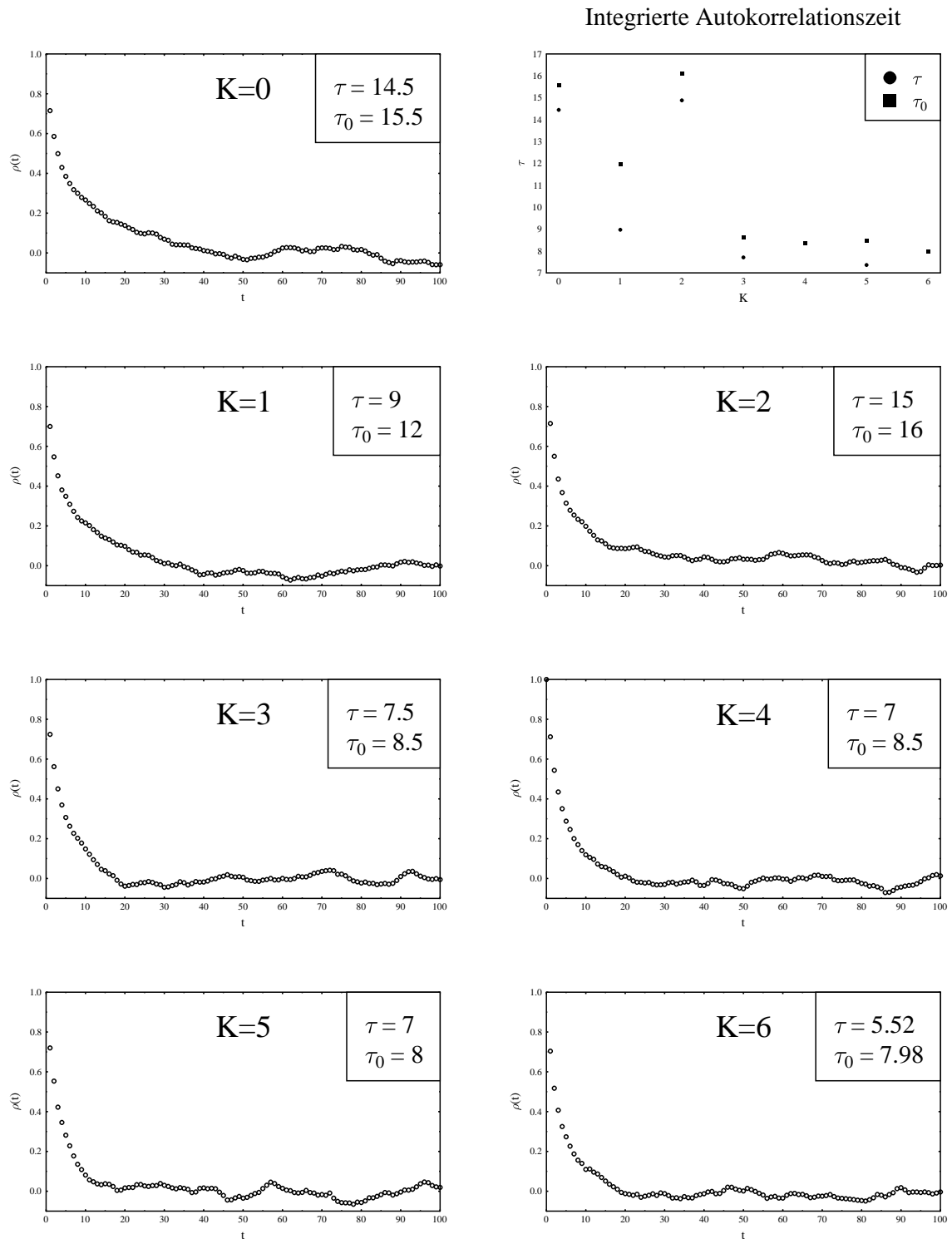


Abbildung 4.9: Die Meßreihe zur Bestimmung des optimalen Mischungsverhältnisses K auf einem 8^4 Gitter mit 5000 Datenpunkten und $\beta = 5.7$. Es ist klar zu sehen, daß OR die Korrelationszeit verkürzt. Gemäß τ_0 (Erläuterung im Text) ist $K = 3$ oder $K = 5$ eine gute Wahl, wobei wir $K = 3$ wegen des geringeren Rechenaufwands vorziehen.

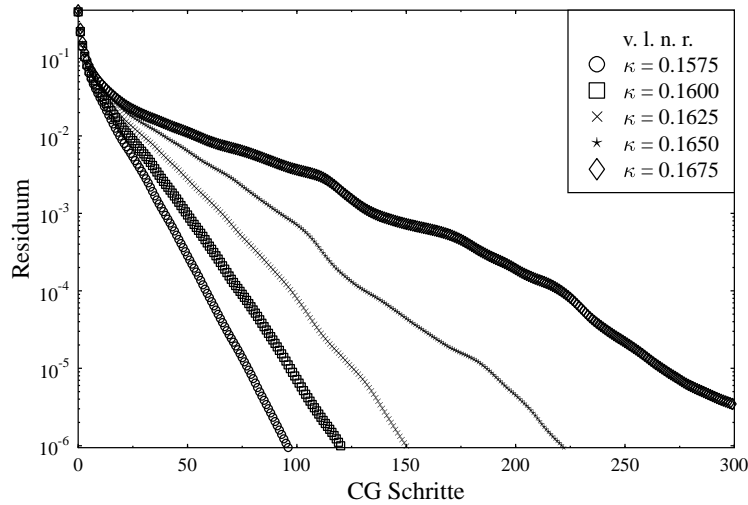


Abbildung 4.10: Der Verlauf des Residuums bei Invertierung einer Fermionenmatrix (Gittergröße 8^4 bei $\beta = 5.7$) mit dem optimierten CG Verfahren von DeGrand für verschiedene Hoppingparameter. Je größer der Hoppingparameter, desto mehr Schritte benötigt das Verfahren, um ein Residuum kleiner als 10^{-6} zu erreichen.

$\kappa = 0.1675$ einer Quarkmasse von 30 MeV. Trotzdem braucht der Algorithmus über 550 Iterationen (hier nicht gezeigt), um das Residuum unter 10^{-6} zu drücken¹⁰. Bei der Berechnung der Korrelationsfunktion werden wir den Inverter bei einem Residuum der Größe 10^{-7} terminieren lassen. Dies ist für unsere Berechnung exakt genug, denn der (gemessene) relative, punktweise Unterschied der Punkt-zu-Punkt-Korrelationsfunktion bei $\kappa = 0.167$ berechnet mit einem Residuum von $r = 10^{-7}$ und derjenigen berechnet mit einem Residuum von $r = 10^{-8}$ ist kleiner als 0.05% in allen Kanälen und für alle Abstände, so daß die Wahl von $r = 10^{-7}$ ausreichend klein ist für die Berechnung der Korrelationsfunktion.

4.3.4 Bestimmung des Gitterabstands bei $\beta = 5.7$

Um den Gitterabstand zu bestimmen, gehen wir vor wie in Abschnitt 3.4 beschrieben und benutzen den experimentellen Wert für die Stringspannung (3.101) zum Fixieren der Skala. Um die Stringspannung und ihre Abhängigkeit von β auf dem

¹⁰Die hier gezeigten Zahlen für die Schritte zur Invertierung sind nur die Iterationen für eine Kombination von Farbe und Spin der Fermionenmatrix. Insgesamt benötigen wir beim Berechnen des Propagators also 12 mal so viele Iterationen.

4 Die Rechnung in der Praxis

Gitter zu erhalten, starten wir eine Meßreihe, bei der wir für 30 Gitter der Größe 10^4 zwischen $\beta = 5.0$ bis $\beta = 8.0$ die Raum-Zeit Wilsonschleifen $W(l, t)$ der Form (3.104) für $l, t \leq 5$ berechnen. Für jedes β führen wir bei freiem Start zunächst 1000 Thermalisierungsschritte durch und messen dann 10 Meßwerte für die Schleifen mit 100 Updateschritten dazwischen¹¹. Aus den Mittelwerten der Schleifen erhalten wir über das Creutzverhältnis (3.103) die Stringspannung. In Abb. 4.11 ist ihre Wurzel

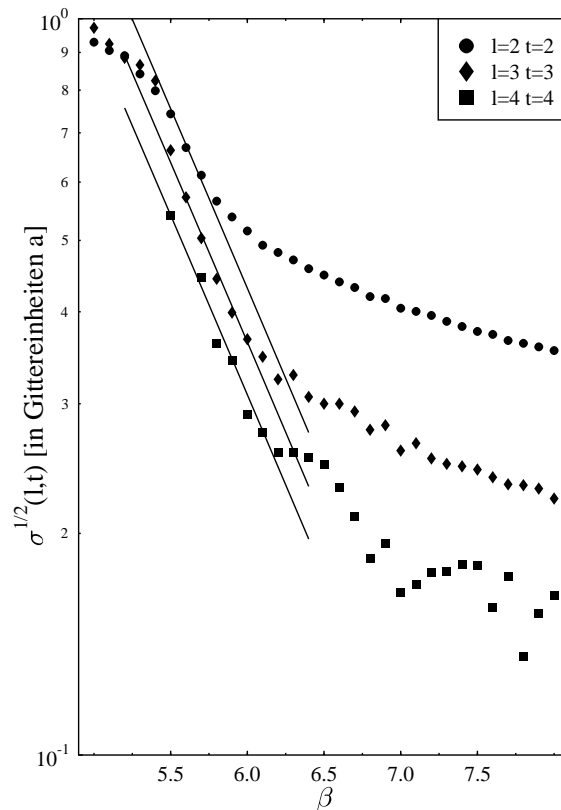


Abbildung 4.11: Die Wurzel der Stringspannung auf dem Gitter berechnet aus dem Creutzverhältnis $\chi(2, 2)$, $\chi(3, 3)$ und $\chi(4, 4)$ gegen die Kopplung β . Die durchgezogenen Linien entsprechen Fits der Renormierungsgruppengleichung an die Daten.

gegen β aufgetragen. Die Daten für die (5, 5) Schleife sind zu verrauscht und daher

¹¹Aus technischen Gründen (Mißgeschick beim Speichern der Fehler für die Schleifen) kann der statistische Fehler der einzelnen Messungen nicht angegeben werden. Es ist aber anhand der vorhandenen Daten klar, daß er für die größten Schleifen sehr groß (in der Größenordnung des Mittelwerts selbst) ist.

nicht gezeigt. Die durchgezogenen Linien stellen (Chi-Quadrat-) Fits¹² der Gleichung (3.129) an die Daten dar. Sie bestimmen die Verbindungskonstante $C_{\sqrt{\sigma}}$ für die (2,2) Schleife zu $C_{\sqrt{\sigma}} = 183.6$, für die (3,3) Schleife zu $C_{\sqrt{\sigma}} = 155.1$ und für die (4,4) Schleife zu $C_{\sqrt{\sigma}} = 131.5$. Aus der größten Schleife erhalten wir für die Skala nach (3.131)

$$\Lambda_L = 7.6 \times 10^{-3} \sqrt{\sigma}. \quad (4.2)$$

Mit dem experimentellen Wert $\sqrt{\sigma} = 420$ MeV erhalten wir damit $\Lambda_L = 3.2$ MeV.

l	t	$\chi(l, t)$	a [fm]
2	2	0.376	0.279
2	3	0.329	0.261
3	3	0.254	0.229
2	4	0.291	0.245
3	4	0.267	0.235
4	4	0.199	0.202

Tabelle 4.2: Ergebnis des Creutzverhältnisses $\chi(l, t)$ auf dem 10^4 Gitter für $\beta = 5.7$ und des Gitterabstands a nach Fixierung mit $\sqrt{\sigma} = 420$ MeV.

Das ist zwischen einem und zwei MeV weniger als in [Neg90] (und Referenzen darin) angegeben. Tatsächlich ist der Wert $C_{\sqrt{\sigma}} = 167$ der Originalmessung von Creutz und Moriarty [CM82b] im Laufe der Jahre durch immer genauere Rechnungen auf $C_{\sqrt{\sigma}} = 77$ gefallen [DBF90]. Letztere ist gemessen für einen räumlichen Abstand des Quark-Antiquark Paares von $12a$. Wir berechnen den Gitterabstand a für $\beta = 5.7$ aus der Wurzel des Creutzverhältnisses mit (3.123). Das Ergebnis ist zusammen mit dem Creutzverhältnis in Tab. 4.2 aufgelistet. Wir erhalten aus der größten Schleife einen Wert von

$$a = 0.2 \text{ fm} \quad (4.3)$$

für das 10^4 Gitter bei $\beta = 5.7$. Die Werte für die quadratischen Wilsonschleifen sind in exzellenter Übereinstimmung mit [GHZM83]. Dort sind die Schleifen allerdings auf einem Gitter der Größe 16^4 (bei $\beta = 5.4$ und $\beta = 5.7$) berechnet, so daß wir unser Ergebnis für die bevorstehende Rechnung auf einem 16^4 Gitter übernehmen können.

4.4 Berechnung der Korrelationsfunktion

Wir haben nun alle indirekten Parameter für die bevorstehende Rechnung zusammen. Es fehlen nur noch die Quarkmassen, für die wir $\bar{R}(x)$ auf dem Gitter berechnen wollen. Sie sind der folgenden Zusammenstellung beigefügt:

- $\beta = 5.7$ auf 16^4 Gitter¹³ mit $a = 0.2$ fm

¹²Wenn nichts anderes erwähnt ist, sind die (Chi-Quadrat-) Fits in dieser Arbeit immer mit der Bibliothek "ROOT", Version 2.25 (<http://root.cern.ch>) durchgeführt.

¹³Diese Größe ist mit heutigen PCs gerade noch berechenbar (siehe Tab. 4.1).

4 Die Rechnung in der Praxis

- $N = 10$ Konfigurationen (quenched)¹⁴
- 2500 Thermalisierungsschritte mit Mischungsverhältnis $K = 3$ und 750 Schritten zwischen jedem Abspeichern der Konfiguration
- Ein Flavour und Quarkmassen von $\kappa = 0.155, 0.160, 0.162, 0.163, 0.164, 0.165, 0.166, 0.167$ und 0.168 ¹⁵
- Residuum der Größe $r = 10^{-7}$

Wir berechnen gemäß diesen Vorgaben die Korrelationsfunktion (3.106) und (3.107) mit den beiden oben beschriebenen Programmen. Dazu erzeugen wir zunächst mit den angegebenen Parametern die 10 Konfigurationen. Danach invertieren wir für jede Konfiguration die Fermionenmatrix für alle aufgelisteten κ Werte und berechnen damit die Korrelationsfunktion $R_i(x)$ für jede Konfiguration und jeden Strom, wie in Abschnitt 3.3.3 beschrieben ist¹⁶.

4.4.1 Die Korrelationsfunktion

Als erstes wenden wir uns der Korrelationsfunktion $\bar{R}(x)$ zu. Sie ist für alle Kanäle bei $\kappa = 0.165$ in Abb. 4.12 dargestellt.

Es ist im Argument immer $\tau = 0$, so daß x auch in Minkowski Raumzeit total räumlich ist, wie bei der Definition der Korrelationsfunktion in Abschnitt 2.2 betont ist. Außerdem ist zum besseren Vergleich mit dem Kontinuum $\bar{R}(x)$ gegen den Betrag von x gezeichnet, und wir haben $\bar{R}(x)$ bei $x = 1a$ auf eins normiert. Wir erinnern uns, daß im Kontinuum $R(x)$ nach (2.10) oder (2.31) eine Funktion des Betrags von x ist und somit invariant unter (räumlichen) Rotationen ist. Auf den ersten Blick sehen wir beim Betrachten von Abb. 4.12, daß wir durch die Diskretisierung des Raumes diese Invarianz verletzt haben. Natürlich sollte dieser Effekt idealerweise im Kontinuumsmlimes verschwinden, doch in der Praxis können wir (für den Wechselwirkungsfall) nicht mit größeren Gittern rechnen. Wir müssen also versuchen, diese Effekte zu verstehen und im Idealfall zu beheben, was wir in Kapitel 5 versuchen werden.

Hier wollen wir zunächst nur die verschiedenen Richtungen auf dem Gitter charakterisieren. Wir unterscheiden für $x = (\vec{x}, \tau = 0)$ folgende Richtungen bzw. Gitterpunktstypen:

- Kartesischer Typ der Form: $\vec{x} = (n, 0, 0)$

¹⁴Die kleine Wert liegt nur an der zur Verfügung stehenden Rechenzeit. Er ist im Prinzip jederzeit erhöhbar.

¹⁵Für diesen Wert ist die Aussage, daß die relative Änderung der Observablen berechnet bei dem Residuum $r = 10^{-7}$ und bei $r = 10^{-8}$ kleiner als 0.05% ist, nicht überprüft, weil schon bei $r = 10^{-7}$ zum Invertieren einer Spalte ca. 2000 Iterationen nötig sind.

¹⁶Als Ergebnis erhalten wir pro Konfiguration und pro κ Wert ein ca. 12 MB großes File, in dem $R_i(x)$ für alle Kanäle und alle Gitterpunkte aufgeführt ist. Die Weiterverarbeitung und Gewinnung aller nun folgenden Ergebnisse geschieht dann mit Hilfe eines von uns entwickelten Programmierpakets, das unter <http://www.th.physik.uni-frankfurt.de/~loizides/diplom/auswertung.tar.gz> zu finden ist und hier nicht weiter erwähnt wird.

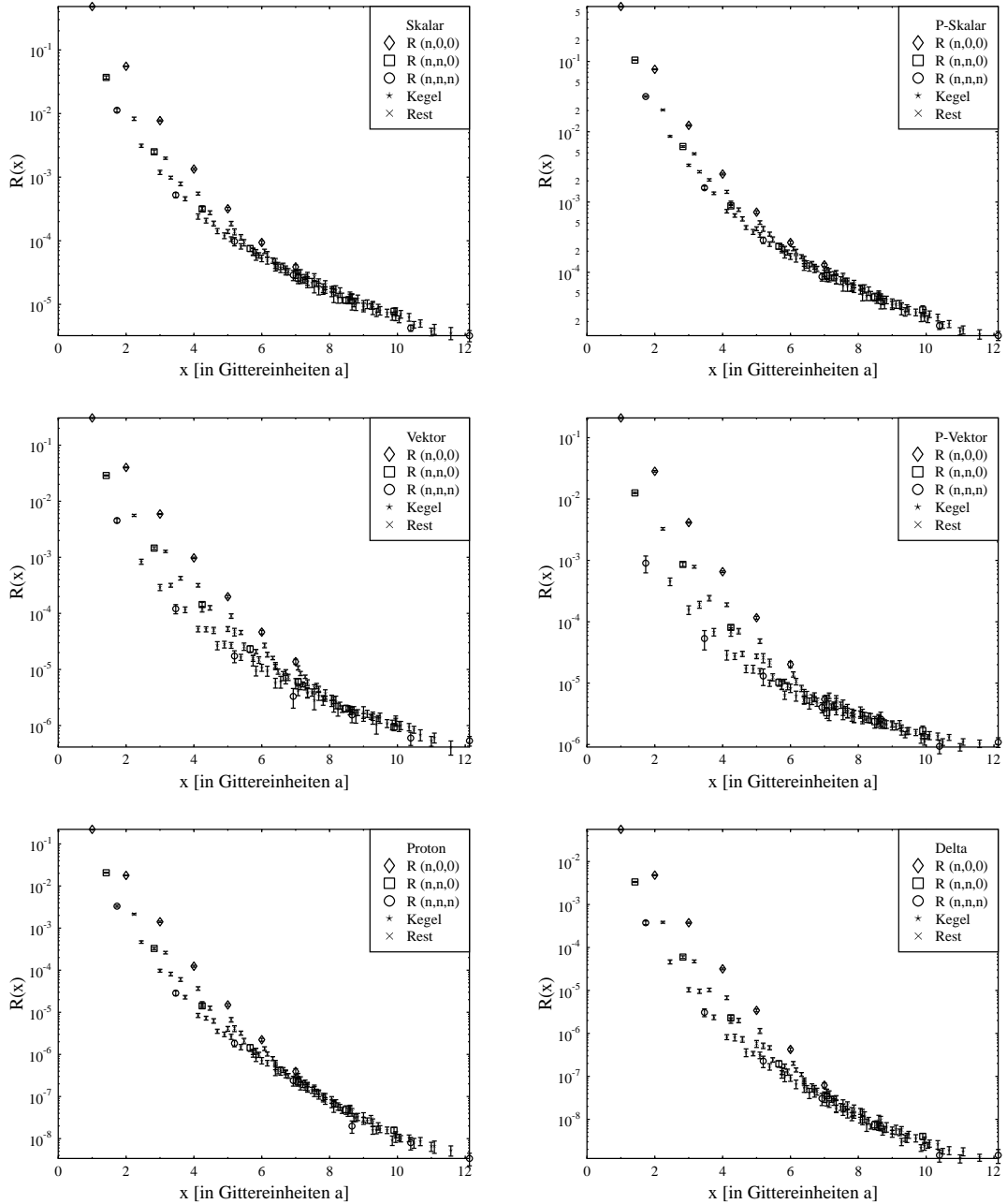


Abbildung 4.12: Die (normierte) Korrelationsfunktion $\bar{R}(x)$ bei $\kappa = 0.165$ für alle Kanäle. Es sind von links oben nach rechts unten der skalare, pseudo-skalare, Vektor- und Pseudo-Vektor-Kanal für die Mesonenströme sowie der Proton- und Delta-Kanal für die Baryonenströme aus Tab. 2.1. Wie im Text erläutert, ist $\bar{R}(x)$ gegen den Betrag von x für $\tau = 0$ für verschiedene Richtungen gezeigt.

4 Die Rechnung in der Praxis

- Diagonaler Typ der Form: $\vec{x} = (n, n, n)$
- Subdiagonaler Typ der Form: $\vec{x} = (n, n, 0)$
- Kegeltyp der Form: $\vec{x} = (n_x, n_y, n_z)$ mit $\vec{x} \cdot \vec{d} \geq 0.9$. Dazu gehören also alle Punkte des Gitters, die in einem Kegel um die Diagonale \vec{d} mit dem Öffnungswinkel $\arccos(0.9) = 26^\circ$ liegen¹⁷.
- Resttyp: alle sonstigen Punkte

Der Wert $\bar{R}(x)$ ist für einen gewissen Abstand x dann jeweils über die dazugehörigen Kombinationen des gleichen Typs gemittelt. Für den kartesischen Typ sind das drei, $(n, 0, 0)$, $(0, n, 0)$ und $(0, 0, n)$, für den diagonalen Typ einer (also keine Mittelung nötig), für den subdiagonalen Typ wiederum drei und für die restlichen Typen sechs Kombinationen. Der Sinn dieser Einteilung wird erst richtig klar, wenn wir im nächsten Kapitel auch die freie Korrelationsfunktion berechnen. Für den Moment akzeptieren wir, daß in Abb. 4.12 zu sehen ist, daß $\bar{R}(x)$ genommen an kartesischen und subdiagonalen Abständen stets höher ist als genommen an Diagonal- oder Kegelaabständen (mit ähnlichem Wert des Betrags von x). Letztere scheinen über die gesamte Länge von $12a$ auf einer Linie zu liegen, und wir werden sehen, daß sie am wenigsten unter den Diskretisierungseffekten beeinflusst werden. Eine genauere Untersuchung dieses Sachverhalts nehmen wir im nächsten Kapitel vor und berechnen hier zunächst die Ebene-zu-Ebene-Korrelationsfunktion aus den Gitterdaten.

4.4.2 Die Ebene-zu-Ebene-Korrelationsfunktion

Nach Gleichung (3.109) müssen wir unser Ergebnis $\bar{R}(x)$ für jede Zeitscheibe τ auf Impuls null projizieren, in dem wir über alle räumlichen Abstände \vec{x} summieren. Das Ergebnis für alle Ströme und alle κ ist in Abb. 4.13 gezeigt.

Chiquadrat-Fit

Als erstes extrahieren wir daraus die Massen der leichtesten Teilchen im Kanal durch einen (Chiquadrat-) Fit der Gleichungen (3.111) und (3.112) an die Daten. Nach [Tou89] minimieren wir nicht einfach nur den quadratischen Fehler

$$\chi^2 = \sum_{\tau} \frac{(\bar{R}_{E2E}(\tau) - R_{E2E}(\tau))^2}{\sigma(\tau)^2},$$

sondern den quadratischen Fehler

$$\chi^2 = \sum_{\tau\tau'} \frac{(\bar{R}_{E2E}(\tau) - R_{E2E}(\tau))(\bar{R}_{E2E}(\tau') - R_{E2E}(\tau'))}{\sigma(\tau)\sigma(\tau')} H^{-1}(\tau, \tau') \quad (4.4)$$

¹⁷Der Grund für diese Wahl ist, daß Propagatoren zu diesen Punkten dieselbe Klasse von Quarkwegen auf dem Gitter darstellen wie zu den Diagonalepunkten, so daß, wie wir sehen werden, diese Punkte zusammen mit den Diagonalepunkten trotz endlicher Gitterbreite eine brauchbare Beschreibung der Kontinuumsfunktion auf dem Gitter darstellen.

4.4 Berechnung der Korrelationsfunktion

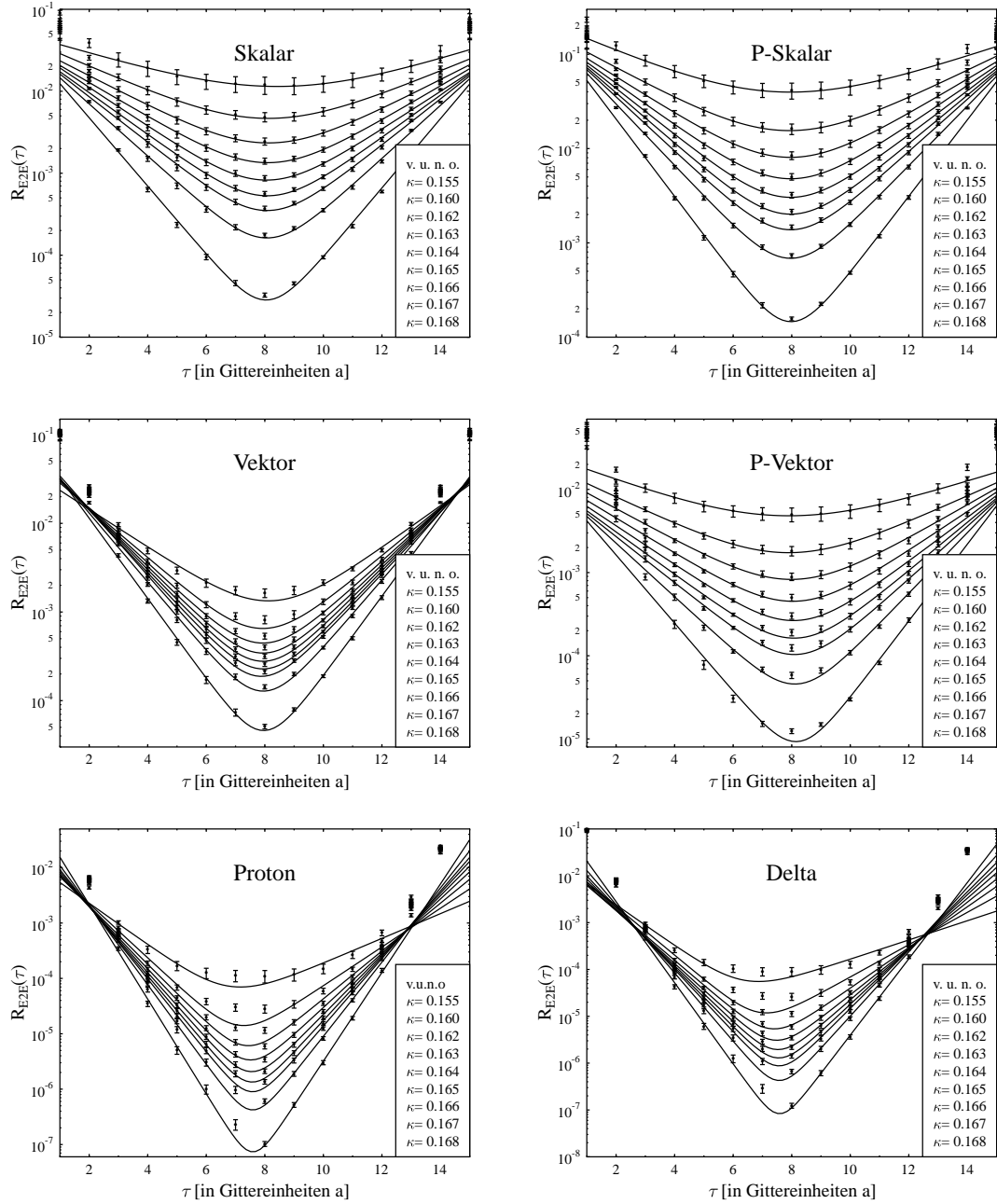


Abbildung 4.13: Das Ergebnis der Ebene-zu-Ebene-Korrelationsfunktion $\overline{R}_{E2E}(\tau)$ für alle κ Werte. Die durchgezogene Linie stellt jeweils den Fit an die Daten zur Berechnung der Masse des leichtesten Teilchens in den verschiedenen Kanälen dar.

unter Berücksichtigung von Korrelationen der Daten untereinander. Dabei ist

$$H(\tau, \tau') = \sum_l \frac{(\overline{R}_{E2E}^l(\tau) - R_{E2E}(\tau))(\overline{R}_{E2E}^l(\tau') - R_{E2E}(\tau'))}{\sigma(\tau) \sigma(\tau')} \quad (4.5)$$

die (normierte) Korrelationsmatrix, die sich im Fall von unkorrelierten Daten zu $\delta(\tau, \tau')$ reduziert. Der Index l an \overline{R}_{E2E}^l bedeutet, daß der Mittelwert unter Weglassen der Konfiguration l berechnet wird. Die Bedingung $T > \tau$ aus Abschnitt 3.3.4 läßt sich bei einem kleinen Gitter kaum erfüllen¹⁸. Wir entscheiden uns nach Vergleichen mit anderen Varianten, zwischen $3 \leq \tau \leq 12$ zu fitten. Das graphische Ergebnis ist ebenfalls in Abb. 4.13 gezeigt. Deutlich zu erkennen ist, daß sich die Mesonen relativ gut fitten lassen. Nur für die Vektormesonen scheint einige Male die gefundene Kurve bei $\tau = 8$ etwas zu niedrig zu sein. Das bedeutet, daß die extrahierten Massen in diesen Fällen ein wenig zu groß sein könnten. Im Fall der Baryonen scheint der Fit nicht zufriedenstellend zu verlaufen. Allerdings kommt es vor allem auf die Punkte zwischen 3 und 6 an, da dafür sowohl der Einfluß angeregter Zustände positiver Parität als auch des Grundzustands mit negativer Parität einigermaßen gedämpft sind, so daß die gewünschte Masse des Grundzustands mit positiver Parität extrahiert werden. Die Zahlenergebnisse für die einzelnen Kanäle und Massen auf dem Gitter sind in Tab. 4.3 angegeben.

κ	Skalar	π^+ (P-Skalar)	ρ^+ (Vektor)	P-Vektor	Proton	Delta
0.155	0.96 ± 0.02	0.94 ± 0.02	1.04 ± 0.02	0.94 ± 0.03	1.93 ± 0.07	1.95 ± 0.07
0.160	0.73 ± 0.02	0.75 ± 0.02	0.90 ± 0.02	0.74 ± 0.03	1.61 ± 0.05	1.62 ± 0.06
0.162	0.64 ± 0.02	0.66 ± 0.02	0.84 ± 0.02	0.64 ± 0.03	1.45 ± 0.05	1.46 ± 0.06
0.163	0.59 ± 0.03	0.62 ± 0.02	0.81 ± 0.02	0.59 ± 0.03	1.40 ± 0.05	1.37 ± 0.06
0.164	0.54 ± 0.03	0.57 ± 0.02	0.78 ± 0.02	0.54 ± 0.03	1.32 ± 0.05	1.28 ± 0.06
0.165	0.48 ± 0.03	0.51 ± 0.03	0.75 ± 0.02	0.49 ± 0.03	1.24 ± 0.05	1.20 ± 0.06
0.166	0.42 ± 0.04	0.45 ± 0.04	0.71 ± 0.02	0.44 ± 0.04	1.15 ± 0.05	1.11 ± 0.07
0.167	0.36 ± 0.07	0.38 ± 0.06	0.65 ± 0.03	0.38 ± 0.06	1.05 ± 0.06	1.07 ± 0.08
0.168	0.28 ± 0.19	0.30 ± 0.14	0.49 ± 0.04	0.29 ± 0.13	0.69 ± 0.08	0.72 ± 0.09

Tabelle 4.3: Extrahierte Massen aus dem Fit an die Ebene-zu-Ebene-Korrelationsfunktion für die verschiedenen κ Werte. Die Umrechnung in MeV geschieht durch Multiplikation mit 1000 MeV für $a = 0.2$ fm. Die κ entsprechenden Quarkmassen sind in Tab. 4.4 zu finden.

Quarkmasse der Wilsonfermionen

Bevor wir die Zahlenwerte weiter untersuchen, bestimmen wir die Quarkmasse, die mit dem jeweiligen Hoppingparameter korrespondiert. Dazu erinnern wir uns daran, daß wir durch Einführung der Wilsonwirkung (3.29) die chirale Invarianz der Theorie für verschwindende Quarkmasse $M_0 = 0$ explizit gebrochen haben. Im Limes $M_0 \rightarrow$

¹⁸16 Punkte in der Zeitrichtung ist wenig für die Bestimmung von Massen. Üblicherweise werden bis zu 80 Punkte genommen und zusätzlich auch nichtlokale Operatoren mit einem besseren Überlapp zu dem interessierenden Grundzustand.

0 werden die Pionen aber in der Natur als Goldstone Bosonen interpretiert, die durch die spontane Symmetriebrechung der chiralen Symmetrie entstehen¹⁹. Auf dem Gitter können wir demnach M_0 aus der Definition von κ (3.50) nicht als pure Quarkmasse interpretieren, da die chirale Invarianz durch den Wilsonterm explizit gebrochen ist. Wir können die Quarkmasse aber uminterpretieren, indem wir wie folgt vorgehen: Die Masse M_π des Pions auf dem Gitter zum Quadrat sollte linear gegen null gehen für $M_0 \rightarrow 0$. Das wird für einen "kritischen" Wert κ_c mit über (3.50) korrespondierendem Wert M_c geschehen, so daß die Definition der Quarkmasse als $m_q = M_0 - M_c$ bzw.

$$m_q = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c} \right) \quad (4.6)$$

in erster Näherung sinnvoll ist. Eine rigorose Herleitung dieser Renormalisierung für die Quarkmasse ist in [MM97], Kap. 5.3 zu finden.

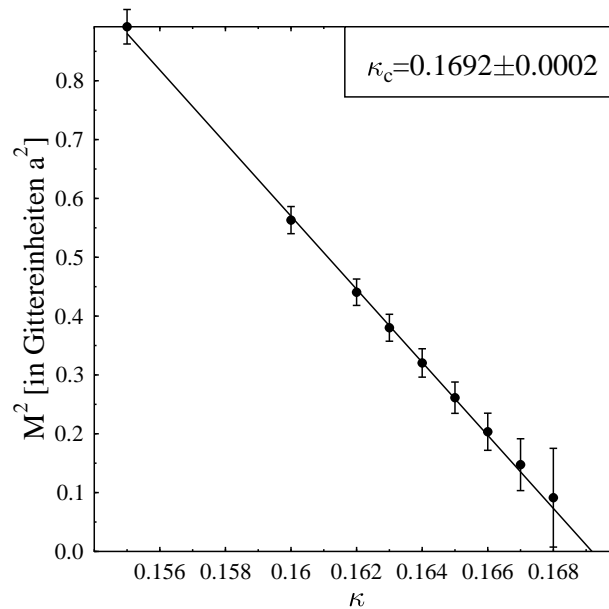


Abbildung 4.14: Die Extrapolation des Quadrats der Pionmasse zum kritischen Wert κ_c

Wir bestimmen κ_c mit den angegebenen Werten für die Masse des Pions aus Tab. 4.3, und extrapolieren den kritischen Wert des Hoppingparameters, bei dem das

¹⁹Eine Symmetrie der Wirkung wird "spontan gebrochen" genannt, wenn sie vom Grundzustand nicht respektiert wird. Wenn die zur Symmetrie gehörende Transformationsgruppe eine kontinuierliche Gruppe darstellt, dann ist dieser spontane Bruch der Symmetrie begleitet durch das Auftauchen von masselosen Teilchen, den sogenannten "Goldstone" Bosonen, die über große Distanzen propagieren können und langreichweitige Korrelationen haben. Die Anzahl derartiger Bosonen ist bestimmt durch die Anzahl der Generatoren des gebrochenen Teils der Gruppe.

Quadrat der Masse verschwindet. Das Ergebnis ist in Abb. 4.14 gezeigt. Wir erhalten

$$\kappa_c = 0.1692 \pm 0.0002.$$

Den Fehler $\Delta\kappa_c = 0.0002$ berechnen wir dabei mit der "Jackknife" Methode [Efr79]. Unser Ergebnis steht in bemerkenswerten Einklang mit beispielsweise [B+88], [B+89]. Dort wird ein Wert von $\kappa_c = 0.16922 \pm 0.00007$ angegeben, der mit Hilfe von 294 Konfigurationen der Größe $12^3 \times 24$ ermittelt wurde. Mit Hilfe von κ_c sind wir nach (4.6) in der Lage, die Quarkmassen für unsere Wahl der Hoppingparameter zu berechnen. Sie sind in Tab. 4.4 angegeben.

κ	m_q [a]
0.155	0.271
0.160	0.170
0.162	0.131
0.163	0.112
0.164	0.094
0.165	0.075
0.166	0.057
0.167	0.039
0.168	0.021

Tabelle 4.4: Zusammenhang von Hoppingparameter κ und Quarkmasse m_q für $\beta = 5.7$ berechnet für das gemessene $\kappa_c = 0.1692$. Die Umrechnung der Quarkmasse in MeV geschieht durch Multiplikation mit 1000 MeV für $a = 0.2$ fm.

Fixierung der Skala durch die Masse des Protons

Wir haben die Skala bislang durch Messen der Strings Spannung auf dem Gitter festgelegt und $a = 0.2$ fm gefunden. Nun haben wir gemäß (3.132) auch die Möglichkeit, die Skala durch eine Masse zu fixieren. Üblicherweise benutzt man dazu die Rhomeson- oder Protonenmasse. In Abb. 4.15 sind die interessierenden Massen gegen κ zusammen mit jeweils einem linearen Fit²⁰ zur Extrapolation bei κ_c dargestellt. Für das Proton liefert der lineare Fit eine Masse von 0.864 und für das Rho eine Masse von 0.576. Für a bedeutet eine Fixierung durch die experimentellen Meßwerte beider Massen einen Wert von $a = 0.18$ fm bzw. $a = 0.15$ fm. Je nach Fixierung mit einer der beiden Massen wird natürlich die Vorhersage für die andere Masse deutlich verschieden vom experimentellen Wert sein. Das ist ein Zeichen, daß wir vom Kontinuums limit weit entfernt sind. Allerdings ist bekannt, daß bei $\beta = 5.7$ die Masse des Rho auf dem Gitter signifikant kleiner ist als der experimentelle Wert [B+89], so daß wir den daraus erhaltenen Wert für a nicht weiter berücksichtigen. Ein Wert von $a = 0.18$ bis 0.2 fm ist bei unserer Gittergröße (und für die lokalen Stromoperatoren) nicht ungewöhnlich. In der Literatur sind Werte von $a = 0.2$ fm gemessen an der Strings Spannung und $a = 0.17$ fm gemessen

²⁰Für die physikalische Rechtfertigung des linearen Fits, siehe [Rot98], Kap. 17.

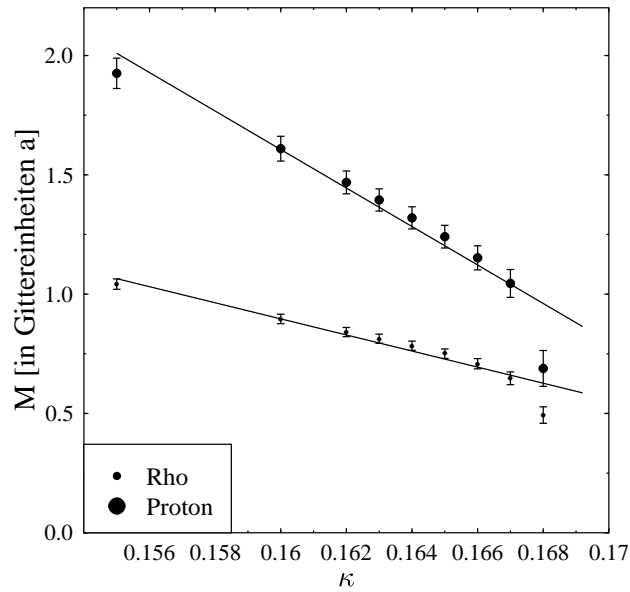


Abbildung 4.15: Die Extrapolation der Masse von Proton und Rho auf $\kappa_c = 0.1692$. Eine Fixierung der Skala bei κ_c liefert im ersten Fall $a = 0.18$ fm und im zweiten Fall $a = 0.15$ fm.

für das Proton bei vergleichbaren Simulationsbedingungen angegeben [GHZM83], [CGHN93b]. Wir verwenden im weiteren allerdings weiterhin den Wert von $a = 0.2$ fm gemessen an der Stringspannung, da er unabhängig von dem Fit der Massen ist.

Im nächsten Kapitel können wir nun das erhaltene Ergebnis für $\overline{R}(x)$ auswerten und unser Modell aus Abschnitt 2.2.2 anwenden.

5 Bearbeitung und Diskussion der Korrelationsfunktion

In diesem Kapitel wollen wir das Modell für $R(x)/R_0(x)$ aus Abschnitt 2.2.2 auf die auf dem Gitter ermittelte Korrelationsfunktion $\bar{R}(x)$ anwenden. Dazu berechnen wir in Abschnitt 5.1 zunächst die freie Korrelationsfunktion $R_0(x)$ auf dem Gitter und untersuchen die Gitterartefakte, die wir bereits im letzten Kapitel in Abschnitt 4.4.1 erwähnt haben. Danach wenden wir uns in Abschnitt 5.2 ausführlich den Spiegelbildern und ihrer numerischen Korrektur zu. Schließlich sind wir in Abschnitt 5.3 in der Lage, die Ergebnisse für $\bar{R}(x)/R_0(x)$ auf dem Gitter anzugeben und das Modell aus Abschnitt 2.2.2 auf die Daten $\bar{R}(x)/R_0(x)$ zu fiten.

5.1 Die freie Korrelationsfunktion

Wir haben bei der Modellierung unserer Erwartung an die wechselwirkende Korrelationsfunktion in Abschnitt 2.2.2 $R(x)$ in Gleichung (2.32) durch die freie Korrelationsfunktion für masselose Quarks geteilt, weil dies wegen der asymptotischen Freiheit der QCD eine Normierung für kleine Abstände auf eins bedeutet. Auf dem Gitter hat diese Division auch zusätzlich den Nutzen, daß sich Gitterartefakte dadurch herausheben, wie gleich sehen werden. Wir berechnen daher die freie Korrelationsfunktion auch auf dem Gitter¹. Diese Berechnung ist erheblich einfacher als die Berechnung von $R(x)$, da wir keine Konfigurationen erzeugen müssen. Wir müssen lediglich durch Wahl von κ einen Wert der Quarkmasse ($\kappa_c = 1/8$, siehe (3.50)) vorgeben und die Fermionenmatrix für $U = 1$ invertieren. Die Quarkmasse muß dabei möglichst klein (eigentlich null) sein. Allerdings macht eine zu kleine Quarkmasse Schwierigkeiten bei der Invertierung. Wir wählen $\kappa = 0.1235$ (bei einem Residuum von 10^{-12} zur Invertierung), was nach (3.50) einer Quarkmasse von ca. 50 MeV entspricht. Den Einfluß dieser Quarkmasse auf das Verhältnis $R(x)/R_0(x)$ berechnen wir im Kontinuum nach (2.32) mit $R(x)|_{M=0.05}/R_0(x)$, wobei wir $s = 4M^2$ und Λ entsprechend der Dimension proportional zu einer Potenz von M setzten. Wir erhalten das Ergebnis, daß die endliche Masse das Verhältnis $R(x)/R_0(x)$ bei Abständen von $x = 12a$ zwischen 1.5% im Baryonen und 3.5% im Vektor-Kanal überschätzt.

In Abb. 5.1 ist $R_0^G(x)$ bei $\kappa = 0.1235$ berechnet auf verschiedenen Gittergrößen (16^4 , 24^4 und 32^4) für den pseudo-skalaren Fall gezeigt. Die Darstellung ist für alle derartigen Graphen in dieser Arbeit gleich und in Abschnitt 4.4.1 beschrieben. Wir normieren $R_0^G(x)$ für $x = 1a$ auf eins und stellen zusätzlich zu Vergleichszwecken

¹Im Fall der Verwechslungsmöglichkeit mit der freien Kontinuumsfunktion aus Gleichung (2.22) oder (2.23) bezeichnen wir sie auch mit $R_0^G(x)$.

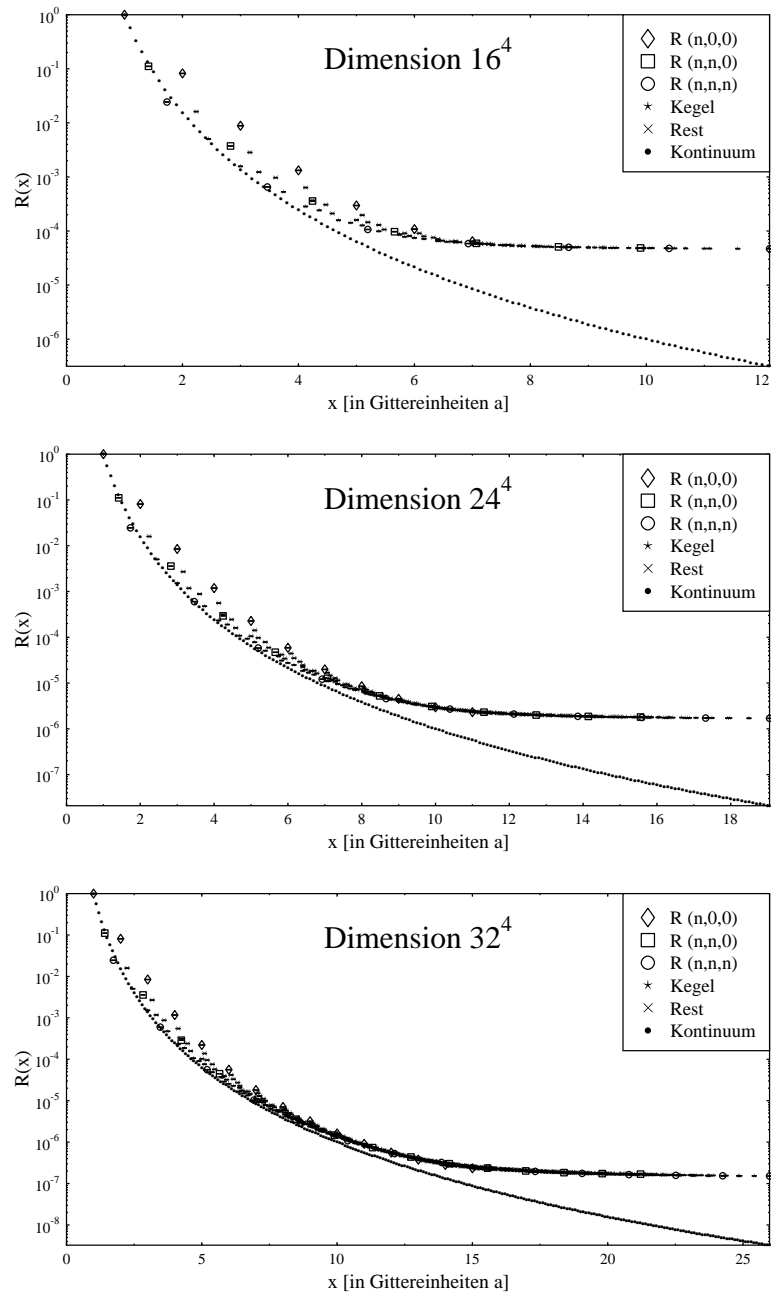


Abbildung 5.1: Die freie Korrelationsfunktion $R_0(x)$ mit $\kappa = 0.1235$ für den pseudoskalaren Fall bei den Gittergrößen 16^4 , 24^4 und 32^4 . Die gepunktete Linie entspricht der freien, masselosen Korrelation $R_0(x)$ des Kontinuums.

auch die freie Kontinuumsfunktion $R_0(x)$, je nach Teilchentyp Gleichung (2.22) oder (2.23), dar.

Volumeneffekt

Wir betrachten für einen Moment nur die Diagonal- oder Kegelpunkte, die wir in Abschnitt 4.4.1 definiert haben. Der Vorteil des größten Gitters gegenüber den kleineren ist klar zu erkennen. Bei $x = 12a$ ist die Abweichung vom (masselosen) Kontinuum 20 – 30% im Unterschied zu ein bzw. zwei Größenordnungen bei den kleineren Gittern. Es wäre sogar sinnvoll, den freien Fall auf einem 48^4 Gitter zu berechnen, um die Abweichung vom Kontinuum für die ersten 2 – 2.5 fm weiter zu verringern. Leider ist der dafür benötigte Speicherplatz (ca. 10 GB) außerhalb unserer Möglichkeiten. Wir begnügen uns notgedrungen mit dem 32^4 Gitter und berechnen $R_0^G(x)$ für alle Kanäle bei $\kappa = 0.1235$. Die Graphen für $R_0^G(x)$ sind im interessierenden Bereich bis 2.5 fm in Abb. 5.2 für alle Kanäle dargestellt. Nur für den Pseudo-Vektor-Kanal scheint eine gravierende Diskrepanz zum freien (masselosen) Fall im Kontinuum vorzuliegen². Die Abweichung zwischen $R_0(x)$ und $R_0^G(x)$ tritt in allen anderen Fällen erst ab ca. 2 fm auf und ist für alle Abstände geringer als 50%. Eine Ausnahme bildet der Proton-Kanal. Bei ihm setzt die Abweichung schon ab 1 fm ein, ist aber für alle Abstände kleiner als 10%.

Diskretisierungseffekt

Zusätzlich zum Volumeneffekt, den wir mit dem 32^4 Gitter einigermaßen kontrollieren, ist auch der bereits erwähnte Diskretisierungseffekt in Abb. 5.2 für jeden Kanal zu sehen. Wenn wir eben von Abweichung gesprochen haben, haben wir –wie erwähnt– immer die Diagonal- oder Kegelpunkte gemeint. Sie liegen offensichtlich in allen Fällen auf einer Linie und stimmen auch in Bereichen mit der Kontinuumsfunktion überein, in denen die anderen Typen zu hoch liegen. Ausgedrückt durch die ”Hopping Parameter Entwicklung” ([Rot98], Kap. 12) kann man das durchaus verstehen. Es ist klar, daß Gitterpunkte in kartesischer Richtung mit weniger Schritten zu erreichen sind als genauso weit entfernte Punkte in anderer Richtung. Für große Abstände sollten Entropieeffekte verwinkelte Pfadwege der Quarks bevorzugen, so daß das Kontinuumsergebnis aus allen Richtungen erreicht wird. Daher erwarten wir, daß die Korrelatoren in der Nähe kartesischer Achsen insbesondere für kleine Abstände größer sind als das Kontinuumsergebnis. Die Diagonalrichtung sollte am wenigsten von der Diskretisierung betroffen sein, und die Subdiagonalrichtung zwischen beiden Extremen liegen. Dieses Verhalten wird durch Abb. 5.2 auch für alle Kanäle außer dem Pseudo-Vektor-Kanal bestätigt. Allerdings liegen auch in diesem Fall die Diagonal- und Kegelrichtungen auf einer Linie. Mit einem prüfenden Blick auf Abb. 4.12 stellen wir fest, daß auch im Fall von Wechselwirkung die Punkte dieser beiden Typen in Bereichen auf einer Linie liegen, in denen die anderen Punkte höher liegen. Das gilt in Einklang mit unserer Erwartung insbesondere für kleine Abstände. Bei großen Abständen macht sich die Anisotropie des Gitters dagegen nicht bemerkbar. Da sich für kleine Abstände der freie und wechselwirkende Korrelator wegen der asymptotischen Freiheit ähnlich sind, wie von den Abbildungen auch unterstützt, haben wir guten Grund anzunehmen, daß wir mit den Diagonal-

²Diese Feststellung wird bei der Diskussion des Endergebnisses in 5.3.4 wichtig werden.

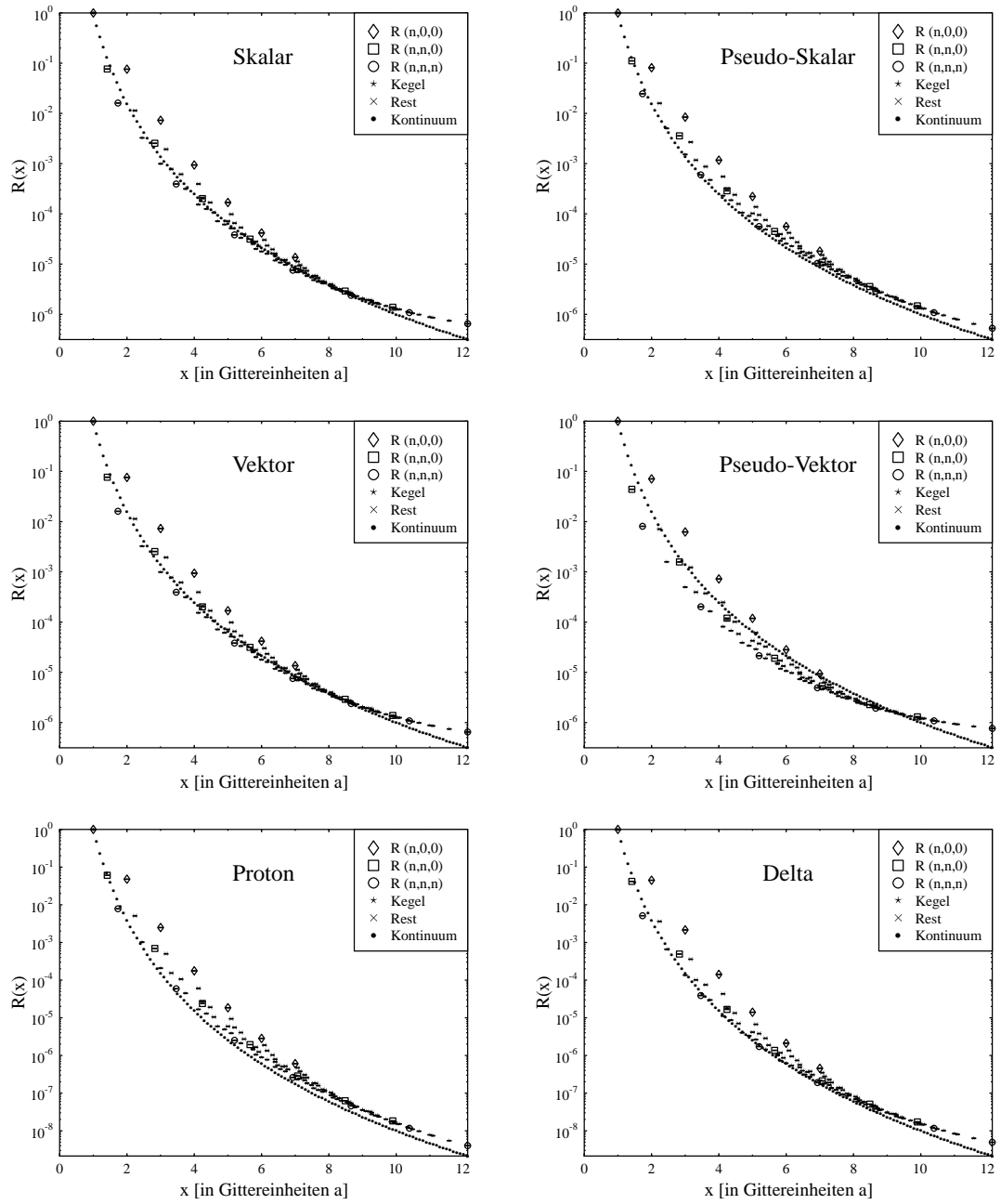


Abbildung 5.2: Die freie Korrelationsfunktion $R_0^G(x)$ (normiert auf 1 bei $x = 1$) bei $\kappa = 0.1235$ (entspricht 50 MeV bei $a = 0.2$ fm) für alle Kanäle. Die gepunktete Linie stellt die freie Kontinuumsfunktion $R_0(x)$ dar.

und Kegelpunkten die Kontinuumsfunktion auch im Wechselwirkungsfall wiedergeben können, und sich darüberhinaus die Gitterartefakte durch die Division teilweise aufheben, so daß das Verhältnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ einigermaßen isotrop ist. Dies wird insbesondere für kleine Abstände (Nenner und Zähler gleichen sich wegen der asymptotischen Freiheit) und für große Abstände (Nenner und Zähler sind schon isotrop) funktionieren. Wir werden auf diesen Punkt zurückkommen, wenn wir das Verhältnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ berechnen.

5.2 Korrektur der Spiegelbilder

Bevor wir die notwendige Division $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ durchführen, müssen wir noch ein weiteres Artefakt unserer Gitterrechnung berücksichtigen. Da wir mit periodischen

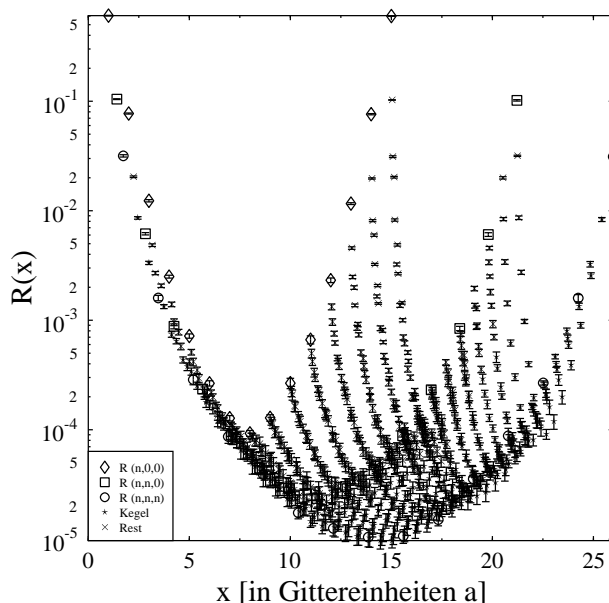


Abbildung 5.3: Die Korrelationsfunktion $\bar{R}(x)$ für den pseudo-skalaren Kanal bei $\kappa = 0.165$. Zur Verdeutlichung des Einflusses der periodischen Randbedingungen ist sie über die gesamte Länge des Gitters ($16 \times \sqrt{3}a$) gezeigt.

(räumlichen) Randbedingungen gerechnet haben, beinhalten unsere Quarkpropagatoren auch den Einfluß jeder Spiegelquelle, die in benachbarten Zellen (verschoben um $L \times (x, y, z)$ für $n_x, n_y, n_z \geq 1$, $L = 16$ bei uns) am gleichen Ort wie die Fundamentalquelle (bei uns am Ursprung) sitzen. So sieht das Ergebnis für $\bar{R}(x)$ nicht so aus, wie bisher gezeigt, sondern wie in Abb. 5.3. Hier werden zur Verdeutlichung des Effekts der periodischen Randbedingungen einmal alle Punkte über die gesamte

Länge des Gitters gezeigt und nicht wie sonst nur Punkte mit Koordinaten kleiner als $L/2 = 8$. Man sieht deutlich den Einfluß der periodischen Randbedingungen auf die Korrelation.

Wie in [Gra92] ausführlich erläutert, hat notwendigerweise bei der Berechnung von

$$\langle 0 | \hat{J}(x) \hat{J}(0) | 0 \rangle$$

jeder Term, bei dem eine Kontraktion zweier Propagatoren mit unterschiedlichen Fundamental- bzw. Spiegelströmen vorgenommen wird, wegen der Eichinvarianz der geschlossenen Propagatorschleifen die Topologie einer Wilsonlinie, die das gesamte Gitter umläuft ("Polyakov" Schleife). Diese Kreuzterme verschwinden daher in der Confinement-Phase der Theorie ([Rot98], Kap. 20). Das bedeutet glücklicherweise, daß unerwünschte Beiträge nur von Kontraktionen der Propagatoren zwischen gleichen Spiegelströmen herrühren. In einer Dimension trägt demnach jeder Spiegelterm zu der auf dem Gitter gemessenen Korrelationsfunktion $f_m(x)$ bei gemäß

$$f_m(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(x + Ln).$$

Berücksichtigen wir nur erste Spiegelbilder, so erhalten wir daraus in erster Näherung

$$f_m(x) \approx f(x) + f(L - x), \quad (5.1)$$

weil der Beitrag der ersten Spiegelquelle derselbe ist wie der Beitrag der fundamentalen am Ort der Spiegelquelle. Es ist klar, daß wir nur an $f(x)$ interessiert sind. Dazu müssen wir den Beitrag des ersten Spiegelbildes von der gemessenen Funktion subtrahieren. Doch leider kennen wir diesen nicht, weil wir sonst auch $f(x)$ kennen würden³. Wir kennen aber immerhin das asymptotische Verhalten von $f(x)$. Dieses Wissen kann ausreichen, wenn $f(x)$ hinreichend schnell abfällt. Nach Gleichung (2.30) für $R(x)$ ist das Verhalten für große x durch

$$f_a(x) = Ax^{-\frac{3}{2}} \exp(-mx) \quad (5.2)$$

gegeben. Da wir an der Korrektur des ersten Spiegelbildes für Punkte $x < L/2$ interessiert sind, dürfte die asymptotische Kenntnis der Spiegelfunktion ausreichen, und wir gehen wie teilweise in [BGN94] beschrieben vor:

1. Wir fitten $f_m(x)$ durch $f_a(x)$ mit einem Chiquadrat-Fit und gewinnen daraus die Parameter A und m .
2. Wir benutzen die erhaltenen Werte für A und m und ziehen den Beitrag der ersten Bilder $f_a(x)$ von $f_m(x)$ gemäß (5.1) ab:

$$f'_m(x) = f_m(x) - \sum_{i=1}^{2^d-1} f_a(x_i - x) \quad (5.3)$$

³Für Punkte mit bestimmter (einfacher) Symmetrie bezüglich der Spiegelquellen können wir aber eine Aussage machen: Für drei räumliche Dimensionen erfahren Punkte der Form $(L/2, 0, 0)$ die Korrektur $1/2$, Punkte der Form $(L/2, L/2, 0)$ die Korrektur $1/4$ und der Punkt $(L/2, L/2, L/2)$ die Korrektur $1/8$.

5 Bearbeitung und Diskussion der Korrelationsfunktion

für d Dimensionen, wobei x_i die Position der Spiegelquelle i bedeutet (z.B. $x_1 = (L, 0, 0)$ usw. für 3 Dimensionen mit der Quelle bei $(0, 0, 0)$).

3. Mit den so gewonnenen neuen Daten $f'_m(x)$ beginnen wieder bei Punkt 1, bis die Selbstkonsistenz der Daten erreicht ist und sich das Chiquadrat nicht weiter verbessert.

Test des Verfahrens

Wir testen das eben beschriebene Verfahren auf seine Funktionsfähigkeit, indem wir mit einem Programm für $A = 10$ und $m = 0.5$ gemäß

$$f_m(x) = \sum_{i=1}^8 f_a(x_i - x) + \text{Zufallszahl} \quad (5.4)$$

periodische Daten generieren, die wir mit einem Zufallsgenerator⁴ verrauschen und einen relativen Durchschnittsfehler von 10% wählen⁵. Diese so generierten Daten sind in Abb. 5.4 dargestellt und ähneln den Originaldaten in Abb. 5.3. Wir versuchen nun aus den generierten Daten mit dem eben beschriebenen Verfahren die

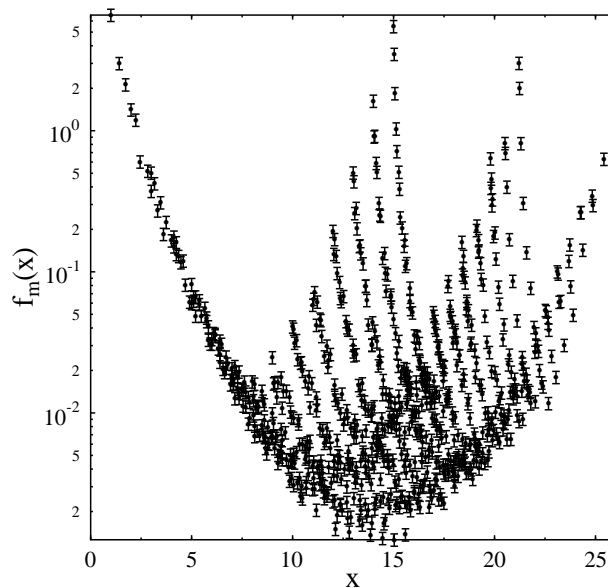


Abbildung 5.4: Mit Gleichung (5.4) generierte Daten für $A = 10$ und $m = 0.5$ zum Testen der im Text beschriebenen iterativen Methode zur Korrektur der Spiegelladungsbeiträge

⁴Die Zufallszahl darf dabei pro generiertem Punkt x bis zu 25% des Originalwerts betragen.

⁵Dieser Fehler entspricht dem Durchschnittsfehler der Daten aus Abb. 5.3.

Ursprungsfunktion, also die Parameter A und m , zu bestimmen. Der Algorithmus findet als Ergebnis des iterativen Fits $A = 8.36$ und $m = 0.467$ und scheint daher zu funktionieren.

Wir wenden ihn testweise auf die Korrelationsfunktion Abb. 4.12 (rechts oben) für den pseudo-skalaren Fall bei $\kappa = 0.165$ an. Das Ergebnis ist in Abb. 5.5 zu

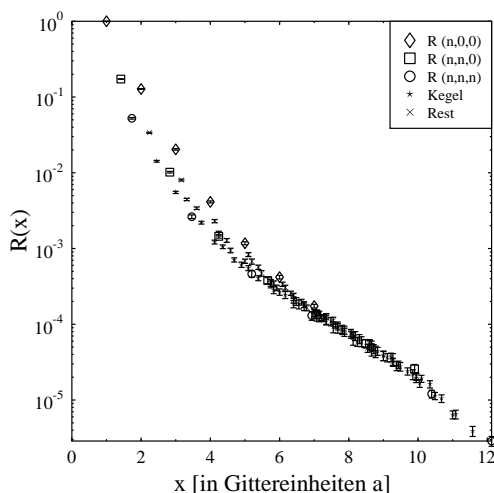


Abbildung 5.5: Der pseudo-skalare Korrelator bei $\kappa = 0.165$ von Abb. 4.12 nach Abzug der Spiegelbilder mit der im Text beschriebenen Methode

sehen. Klar zu erkennen ist, daß die Punkte im Vergleich zu dem Original nach unten verschoben sind. Um den Einfluß der Korrektur deutlich zu machen, teilen wir den unkorrigierten durch den korrigierten Korrelator und stellen das Verhältnis in Abb. 5.6 dar. An diesem Bild ist deutlich zu sehen, daß der Algorithmus dem Einfluß der Spiegelbilder entgegenwirkt. Wir überprüfen die Korrekturfaktoren an den Punkten, die den Symmetriepunkten am nächsten kommen. Der Punkt $(7, 7, 7)$ erfährt die höchste Korrektur, ca. Faktor 7.3, was unserer Erwartung entspricht, da er sehr zentral liegt und $(8, 8, 8)$ den Faktor 8 erhalten würde. Der Punkt $(7, 7, 0)$ wird durch den Faktor 2 korrigiert, was angesichts der Tatsache, daß $(8, 8, 0)$ den Faktor 4 erhalten würde, etwas zu wenig ist. Der Punkt $(7, 0, 0)$ wird mit dem Faktor 1.5 korrigiert, was in Ordnung ist, da $(8, 0, 0)$ mit 2 zu korrigieren wäre. Alles in allem ist auch der Gesamteindruck zufriedenstellend.

Wir wenden das beschriebene Verfahren auf unsere gesamten Ergebnisse für $\bar{R}(x)$ an. Bei den Baryonen berücksichtigen wir allerdings zusätzlich, daß sich die Spiegelbilder gemäß (2.18) vektoriell addieren. Daher ersetzen wir in unserem Algorithmus bei der Korrektur von Baryonen Gleichung (5.3) durch

$$f'_m(x) = f_m(x) - \sum_{i=1}^{2^d-1} f_a(x_i - x) \frac{x \cdot (x - x_i)}{(x - x_i)^2} \quad (5.5)$$

und verfahren ansonsten bei der Korrektur der Spiegelbilder wie bei den Mesonen.

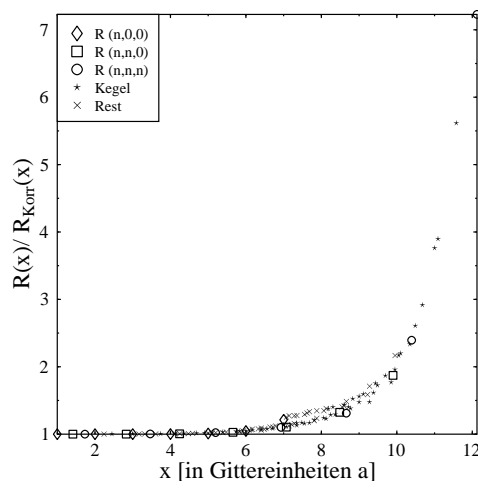


Abbildung 5.6: Der Effekt der Spiegeladungskorrektur. Er ist deutlich gemacht, indem der unkorrigierte, pseudo-skalare Korrelator aus Abb. 4.12 durch den korrigierten Korrelator aus Abb. 5.5 geteilt ist.

5.3 Diskussion der Ergebnisse

Da wir nun alle Gitterartefakte untersucht haben, können wir nach der Korrektur der Spiegeladungsbeiträge das Verhältnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ bilden. Es ist für $\kappa = 0.165$ in Abb. 5.7 für alle Kanäle dargestellt. Beim Betrachten der einzelnen Kanäle fällt auf, daß die am Ende von Abschnitt 5.1 diskutierten Punkttypen weiterhin im Rahmen der Fehlerbalken auf einer Linie liegen. Gute Beispiele sind die Vektor- und die Baryonen-Kanäle. Deutlich zu sehen ist, daß die kartesischen, die subdiagonalen und die restlichen Punkttypen sich insbesondere bei kleinen Abständen von den Diagonal- und Kegeltypen unterscheiden und im Vergleich mit den Diagonal- und Kegeltypen zu hoch liegen. Der pseudo-skalare Kanal bildet eine Ausnahme. Hier sind die kartesischen Punkte unterhalb der restlichen. Allerdings liegen auch in diesem Fall die Diagonal- und Kegeltypen auf einer Linie. Für mittlere Abstände (6–10 a) ist der Fehler in allen Kanälen am größten. Hier macht sich die Anisotropie des Gitters am deutlichsten im Verhältnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ bemerkbar, wie wir in Abschnitt 5.1 diskutiert haben. Der maximale relative Fehler liegt in allen Kanälen und für alle κ zwischen 16 – 50%. Hinzu kommt noch als systematischer Fehler die Abweichung von $R_0^G(x)$ zu $R_0(x)$ in einigen Kanälen, insbesondere im Pseudo-Vektor-Kanal. Da die Diagonal- und Kegelpunkte, wie bereits begründet, am ehesten die Kontinuumsfunktion beschreiben, werden wir in den weiteren Darstellungen die anderen Punkte nicht mehr berücksichtigen und $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ bei dem mit den Diagonal- und Kegelpunkten kleinstmöglichen Abstand von $\sqrt{3}a$ auf eins normieren (statt wie bisher bei $x = 1a$). Das entspricht einem physikalischen Abstand von ca. 0.35 fm.

Fit an das Modell

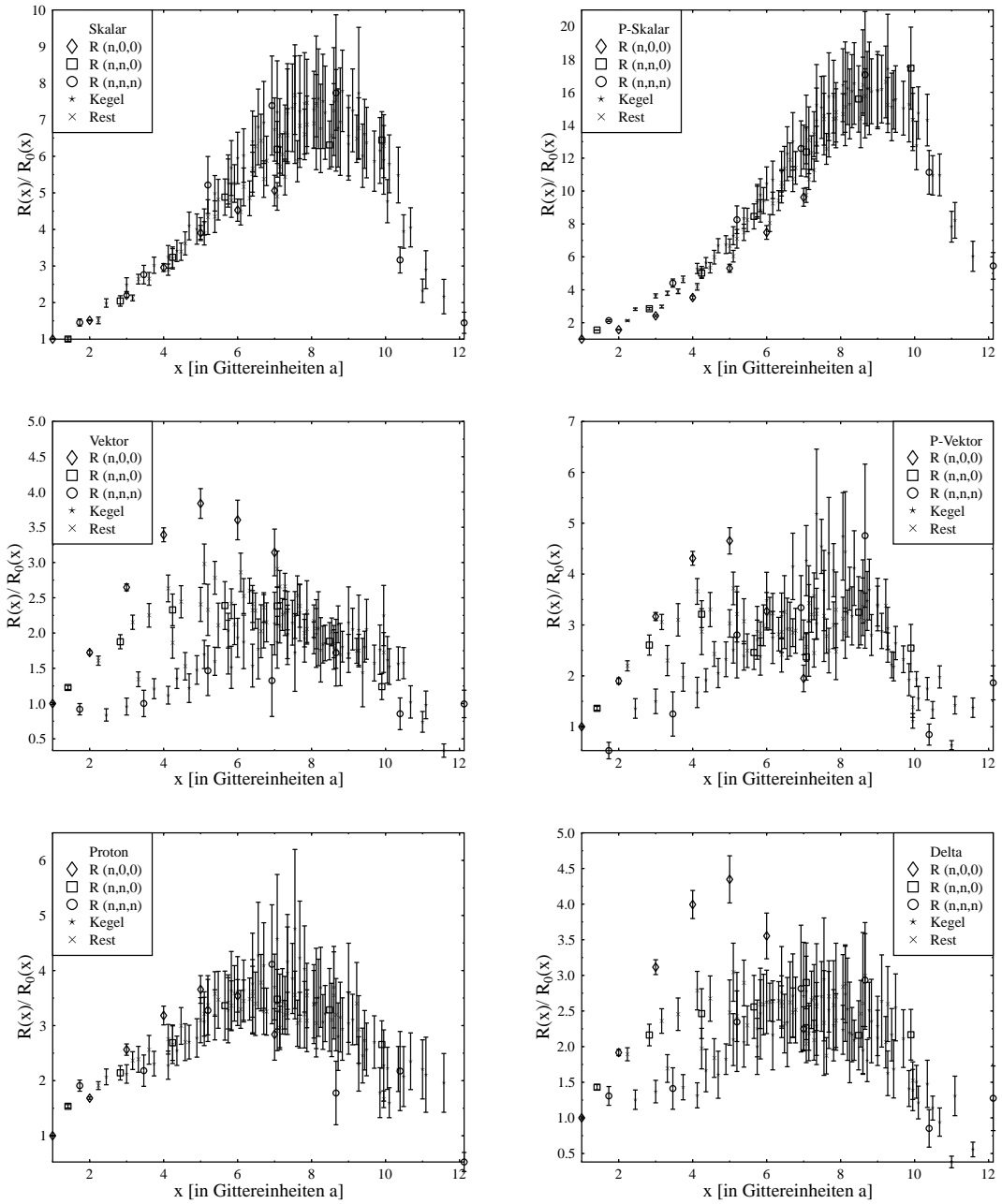


Abbildung 5.7: Das Ergebnis $\overline{R}(x)/R_0^G(x)$ nach Abzug der Spiegelbilder für $\kappa = 0.165$ und alle Kanäle. Es sind von links oben nach rechts unten der skalare, pseudo-skalare, Vektor- und Pseudo-Vektor-Kanal für die Mesonenströme sowie der Proton- und Delta-Kanal für die Baryonenströme aus Tab. 2.1.

Unser so gewonnenes Ergebnis wollen wir nun mit dem Modell aus Abschnitt 2.2.2 vergleichen und fitten dazu die Funktion aus Gleichung (2.32) (ebenfalls normiert bei $\sqrt{3}a$ für alle Kanäle bei verschiedenen κ Werten an die Gitterdaten, die durch die jeweiligen Diagonal- und Kegelpunkte repräsentiert werden. Dazu minimieren wir das Chiquadrat^{6 7} und erhalten die Parameter der Spektralfunktion (2.25) in Gittereinheiten. Die Resonanzmasse M , die die Masse des niedrigsten Eigenzustands mit den Quantenzahlen des erzeugenden Stroms darstellt, sollte konsistent mit der Masse sein, die wir aus der Ebene-zu-Ebene Korrelationsfunktion in Abschnitt 4.4.2 gewonnen haben. Im folgenden wollen wir das Ergebnis für $R(x)/R_0^G(x)$ und des Fits an die Gitterdaten für jeden Kanal einzeln diskutieren.

5.3.1 Der skalare Kanal

Das graphische Ergebnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ des skalaren Kanals ist in Abb. 5.8 für verschiedene Quarkmassen ($\kappa = 0.167, 0.165, 0.163, 0.160$ und 0.155 von oben nach unten) dargestellt. Das numerische Ergebnis des Fits für die Werte von M , Λ und s_0 ist in Tab. 5.1 zusammengestellt. Die Umrechnung von Gittereinheiten proportional a in physikalische Einheiten ist bei $a = 0.2$ fm ein Faktor von 1000 MeV bzw. 1 GeV, so daß die angegebenen Zahlenwerte genauso in GeV oder GeV^2 gelten. Die zu κ passenden Quarkmassen sind in Tab. 4.4 aufgelistet. Für kleinere Quarkmassen sehen wir eine immer deutlicher ausgeprägte Resonanz. Die dazugehörige Resonanzmasse stimmt zwischen 75% und 90% mit der aus dem exponentiellen Abfall der Ebene-zu-Ebene Korrelationsfunktion bestimmten Masse aus Tab. 4.3 überein. Das ist angesichts der Fehlerbalken in Ordnung, aber schlechter als in anderen Kanälen. Schwieriger dagegen ist die Interpretation der Resonanz. Sie ist experimentell für $I = 1$ nicht bekannt. Stattdessen erwarten wir in diesem Kanal ein schnelles Abklingen der Korrelationsfunktion auf null, im Prinzip die Korrelation zwischen zwei sehr schweren nicht wechselwirkenden Quarks. In [CGHN93a] berichten die Autoren auch genau von diesem Verhalten der Korrelationsfunktion im skalaren Kanal. Es ist abschließend nicht klar, warum unser Ergebnis von der Erwartung abweicht.

5.3.2 Der pseudo-skalare Kanal

Das graphische Resultat im pseudo-skalaren Kanal ist in Abb. 5.9 für verschiedene Quarkmassen ($\kappa = 0.168, 0.167, 0.165, 0.160$ und 0.155 von oben nach unten) dargestellt. Das numerische Ergebnis des Fits ist in Tab. 5.2 angegeben. Der gravierende Unterschied zu den anderen Kanälen fällt sofort auf. Die funktionale Abhängigkeit von der Quarkmasse ist viel größer als in den anderen Fällen und macht eine logarithmische Darstellung auf der y -Achse sinnvoll. Dies spiegelt offensichtlich die erwähnte spezielle Rolle des Pions als Goldstone Boson wider. Die Masse der klar ausgeprägten Resonanz stimmt für alle κ Werte zu mehr als 90% mit denen aus Tab. 4.3 überein, was eine ausgezeichnete Bestätigung für die Konsistenz des Ergebnisses

⁶Im Unterschied zu den anderen Fits in dieser Arbeit verwenden wir in diesem Fall das Programm "MATLAB", Version 6 (<http://www.mathworks.com/>).

⁷Das dabei numerisch zu behandelnde Integral über die Besselfunktion berechnen wir mit einem Fehler von 0.1–0.5%, was im Rahmen der Fehlerbalken mehr als ausreichend genau sein dürfte.

κ	$\Lambda[a^2]$	$M[a]$	$s_0[a^2]$
0.155	1.620	1.074	1.095
0.160	1.145	0.795	1.053
0.163	1.093	0.694	1.095
0.165	1.021	0.611	1.024
0.167	0.963	0.513	1.108
0.168	0.922	0.422	1.651

Tabelle 5.1: Ergebnisse für Λ , M und s_0 des skalaren Kanals durch den Fit von Gleichung (2.32) an das Gitterergebnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ für verschiedene κ Werte.

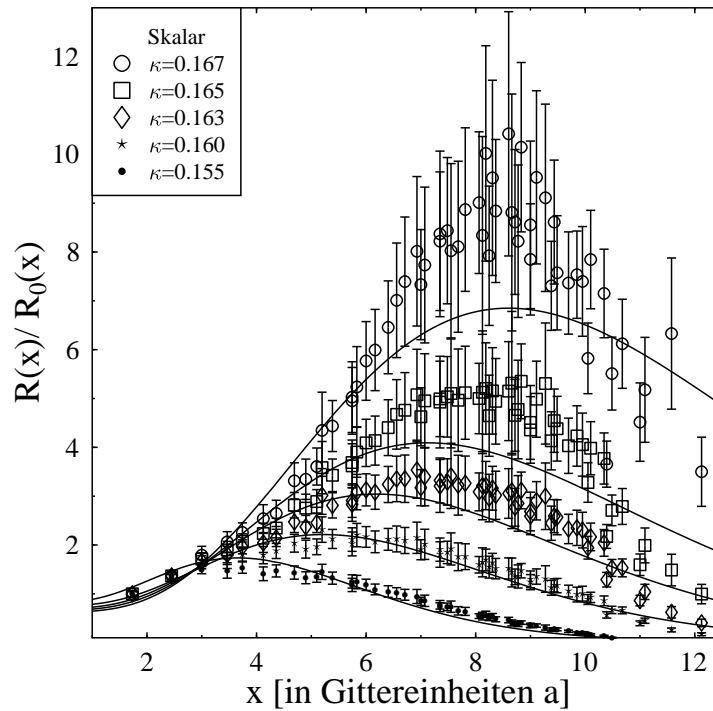


Abbildung 5.8: Der Fit für den skalaren Kanal von Gleichung (2.32) durch die Diagonal- und Kegelpunkte des Gitterergebnisses $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ (normiert bei $\sqrt{3}a$) für ausgewählte Werte von κ

κ	$\Lambda[a^2]$	$M[a]$	$s_0[a^2]$
0.155	1.094	0.910	1.974
0.160	1.058	0.740	1.684
0.165	0.860	0.513	0.323
0.167	0.864	0.422	0.324
0.168	0.845	0.337	0.323

Tabelle 5.2: Ergebnisse für Λ , M und s_0 des pseudo-skalaren Kanals durch den Fit von Gleichung (2.32) an das Gitterergebnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ für verschiedene κ Werte.

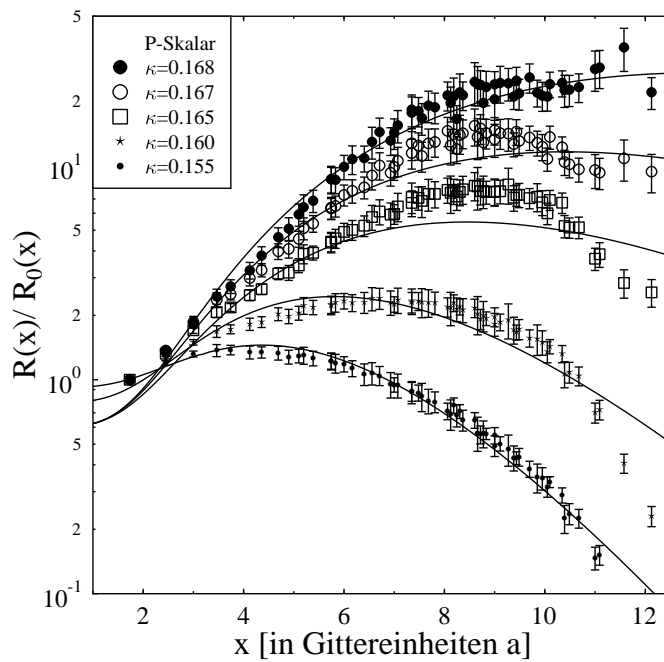


Abbildung 5.9: Der Fit für den pseudo-skalaren Kanal von Gleichung (2.32) durch die Diagonal- und Kegelpunkte des Gitterergebnisses $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ (normiert bei $\sqrt{3}a$) für ausgewählte Werte von κ

darstellt. Die Werte der phänomenologischen Abschätzung von Shuryak liegen bei $M = 0.138 \text{ GeV}$, $\Lambda = 0.23 \text{ GeV}^2$ und $s_0 = 1.69 \text{ GeV}^2$ [Shu93]. Es ist klar, daß wir zum Vergleich unsere Ergebnisse zunächst auf realistische Quarkmasse bzw. auf die Quarkmasse, bei der das Pion seine physikalische Masse auf dem Gitter erhält, extrapolieren müssen. Dies ist nicht ganz trivial. Eine mögliche Vorgehensweise ist, daß wir zunächst die erhaltenen Werte von $\overline{R}(x)/R_0^G(x)$ in Einheiten $n \leq x/a \leq n+1$ zu einem Wert y_n mit statistischer Abweichung σ_n^2 zusammenfassen. Dies führen wir für jedes berechnete κ durch, so daß wir jeden Wert $y_n(\kappa)$ einzeln auf realistische Quarkmasse extrapolieren können. Die so erhaltene Kurve muß danach wieder durch das Modell aus Gleichung (2.32) gefittet werden, um die Werte von M , Λ und s_0 für die extrapolierten Daten zu erhalten. Dies ist im Rahmen dieser Arbeit leider (zeitlich) nicht mehr zu unternehmen. Wir betrachten daher das Ergebnis nur für $\kappa = 0.167$. Dies entspricht einer Quarkmasse von 39 MeV (siehe Tab. 4.4) und ist die kleinste Quarkmasse, bei der wir sichergestellt haben, daß die Invertierung der Fermionenmatrix mit kleinerem Residuum das Ergebnis nicht signifikant verändert. Bevor wir die reinen Zahlenwerte bei $\kappa = 0.167$ mit den oben angegebenen Werten von Shuryak vergleichen können, müssen wir unsere durchgeführte Normierung bei 0.35 fm aus dem Λ herausrechnen. Wir erhalten $\Lambda = 0.356 \text{ GeV}^2$. Die Werte für Λ und M liegen demnach eindeutig im Bereich der phänomenologischen Werte. Die Schwelle weicht dagegen deutlich ab. Eine abschließende Aussage kann aber erst nach der Extrapolation erfolgen, insbesondere, da die Abhängigkeit von der Quarkmasse in diesem Kanal besonders groß ist.

5.3.3 Der Vektor-Kanal

Das graphische Resultat des Vektor-Kanals ist in Abb. 5.10 für verschiedene Quarkmassen ($\kappa = 0.167, 0.165, 0.160$ und 0.155 von oben nach unten) dargestellt, und das numerische Ergebnis des Fits für die Parameter ist in Tab. 5.3 angegeben. Eine Eigenschaft dieses Kanals fällt auf: das Verhältnis zwischen freiem und wechselwirkendem Korrelator, die beide jeweils um ca. 6 Größenordnungen variieren, bleibt bei $\kappa = 0.167$ über die gesamte x-Achse zwischen $1 \leq \overline{R}(x)/R_0^G(x) \leq 4$. Das ist nur im Proton-Kanal ähnlich. Wir wissen, daß das Verhältnis für $x \rightarrow 0$ wegen der asymptotischen Freiheit gegen eins gehen muß. Auffallend in diesem Kanal ist jedoch, daß es bei kleiner Quarkmasse auch bis ca. $x = 4a$ in der Nähe von eins bleibt. Eine Eigenschaft, die durch einfache Argumente nicht erklärt werden kann und von Shuryak "Superdualität" genannt wird [Shu93]. Die Resonanzmasse stimmt für alle Werte über 85% mit der Masse überein, die wir aus der Ebene-zu-Ebene Korrelationsfunktion gewonnen haben. Angesichts der Größe der Fehlerbalken ist das durchaus zufriedenstellend. Die phänomenologischen Ergebnisse von Shuryak aus einer Dispersionsanalyse von $e^+e^- \rightarrow n\pi$ mit n gerade sind $M = 0.78 \text{ GeV}$, $\Lambda = 0.2 \text{ GeV}^2$ und $s_0 = 2.52 \text{ GeV}^2$ [Shu93]. Wie im pseudo-skalaren Fall schon erläutert, können wir strenggenommen ohne Extrapolation bei einem Vergleich unserer Werte mit den physikalischen keine Aussage machen. Doch die Abhängigkeit von κ ist nur im pseudo-skalaren Fall besonders groß, so daß wir für die anderen Kanäle anhand der Ergebnisse der kleineren Quarkmassen eine qualitative Bewertung vornehmen. Im Fall des Vektor-Kanals ist die Tendenz unserer Ergebnisse relativ

κ	$\Lambda[a^2]$	$M[a]$	$s_0[a^2]$
0.155	1.044	1.003	0.694
0.160	1.131	0.901	5.834
0.165	0.975	0.655	3.334
0.167	0.905	0.541	2.323
0.168	0.888	0.553	1.846

Tabelle 5.3: Ergebnisse für Λ , M und s_0 des Vektor-Kanals durch den Fit von Gleichung (2.32) an das Gitterergebnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ für verschiedene κ Werte.

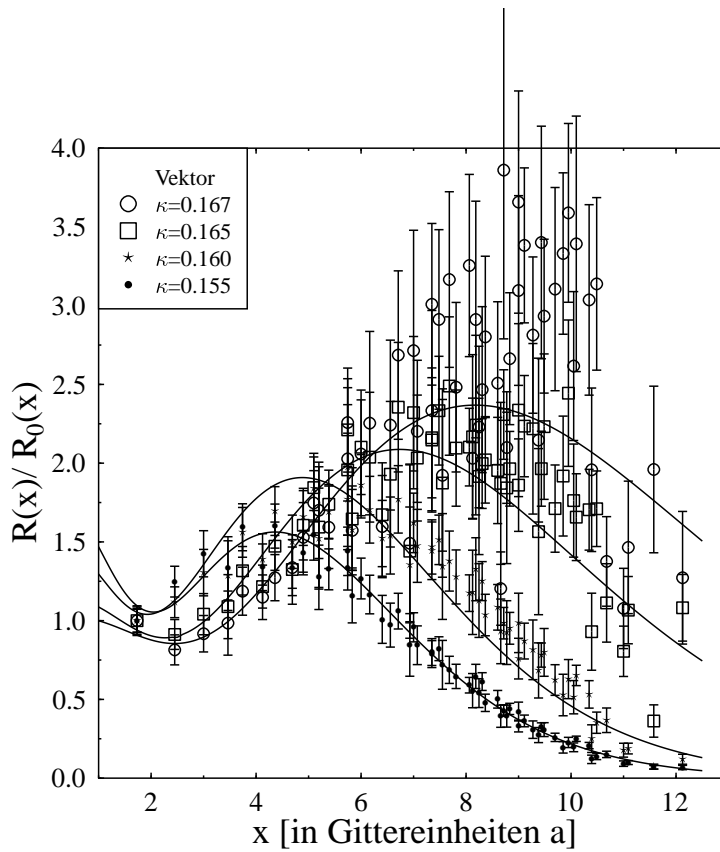


Abbildung 5.10: Fit für den Vektor-Kanal von Gleichung (2.32) durch die Diagonal- und Kegelpunkte des Gitterergebnisses $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ (normiert bei $\sqrt{3}a$) für ausgewählte Werte von κ

deutlich zu sehen. Die Resonanzmasse des Rho wird erheblich unterschätzt. Dies kann ein Effekt des Gitters bei zu großer Kopplung ($\beta = 5.7$) sein, wie wir bereits in 4.4.2 erwähnt haben. Allerdings ist der Unterschied zu der Gitterrechnung von [CGHN93a] (auch bei $\beta = 5.7$) noch 30%. Berücksichtigen wir die Normierung, erhalten wir für $\Lambda = 0.355 \text{ GeV}^2$ bei $\kappa = 0.167$. Somit liegen die Kopplung und die Schwelle zum Kontinuum im Bereich der phänomenologischen Werte.

5.3.4 Der Pseudo-Vektor-Kanal

Das graphische Ergebnis im Pseudo-Vektor-Kanal ist in Abb. 5.11 für verschiedene Quarkmassen ($\kappa = 0.167, 0.165$ und 0.160 von oben nach unten) dargestellt. Das numerische Ergebnis der Parameter ist in Tab. 5.4 zusammengestellt. Die bloße Anwendung des Modells aus Abschnitt 2.2.2 mit einem Resonanzterm ist hier eigentlich nicht gerechtfertigt. Die theoretische Untersuchung von Shuryak [Shu93] zeigt nämlich, daß wegen der Existenz der Goldstone Bosonen, nicht nur ein transversaler, sondern auch ein longitudinaler Anteil zur Spektraldichte (2.25) beiträgt. Der transversale koppelt an das A_1 -Meson, während der longitudinale als Konsequenz der Brechung der chiralen Symmetrie an das Pion koppelt. Durch die Kontraktion, die wir bei der Herleitung von (2.32) vorgenommen haben, haben wir den Einfluß des Pion Signals in der Korrelationsfunktion allerdings partiell unterdrückt. Die Resonanzstelle für das Pion beginnt nach Shuryak zudem erst bei Abständen größer als 1.0 fm . Wegen der großen Fehlerbalken in diesem Bereich können wir qualitativ nicht eindeutig erkennen, ob diese Aussagen auch von unserer Rechnung bestätigt werden. Allerdings hat es insbesondere für $\kappa = 0.167$ den Anschein, daß ab ca. $x = 10.5a$ ein zweiter Resonanzterm beginnt. Zusätzlich wird die Qualität des Ergebnisses in diesem Bereich auch durch einen systematischen Fehler in unserer Rechnung verschlechtert. Er kommt dadurch zustande, daß der freie Korrelator des Pseudo-Vektor-Kanals auf dem Gitter den freien Kontinuumsfall bis zu einem Abstand von 1.6 fm signifikant (ca. Faktor 2-3) unterschätzt (siehe Abb. 5.2, Mitte rechts) und somit bis zu diesen Bereichen das Verhältnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ überhöht. Ab ca. 2 fm überschätzt $R_0^G(x)$ dann aber die freie Kontinuumsfunktion bis zu einem Faktor 2, so daß dadurch möglicherweise die Pionresonanz zusätzlich unterdrückt wird. Klar ist aber auf alle Fälle, daß das leichteste Teilchen in diesem Kanal das Pion ist. Dies sehen wir durch Vergleichen der Spalten des pseudo-skalaren Kanals und des Pseudo-Vektor-Kanals in Tab. 4.3. Die Werte sind im Rahmen der angegebenen Fehler in völliger Übereinstimmung. Der Vergleich der Resonanzmasse aus unserem Fit (für einen Resonanzterm) zeigt eine Abweichung von 60% bis 80% zu diesen, was wir als Anzeichen dafür auffassen, daß unser Ergebnis tatsächlich Inkonsistenzen aufweist. Dies läßt den Schluß zu, daß wir durch unseren Fit mit einer fehlerhaften Erwartung (nur ein Resonanzterm) eine Vermischung von zwei Resonanzen gemessen haben. Es ist also zu prüfen, ob ein Fit mit zwei Resonanztermen, einer für das A_1 und einer für das Pion, erfolgreich verläuft. Leider ist ein derartiger Fit mit fünf Parametern nicht ganz einfach und hat bei den bisherigen Versuchen noch kein sinnvolles Ergebnis geliefert.

κ	$\Lambda[a^2]$	$M[a]$	$s_0[a^2]$
0.155	2.445	1.209	1.334
0.160	1.690	0.900	1.207
0.165	1.894	0.699	1.379
0.167	2.137	0.586	3.012
0.168	2.315	0.462	0.650

Tabelle 5.4: Ergebnisse für Λ , M und s_0 des Pseudo-Vektor-Kanals durch den Fit von Gleichung (2.32) an das Gitterergebnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ für verschiedene κ Werte.

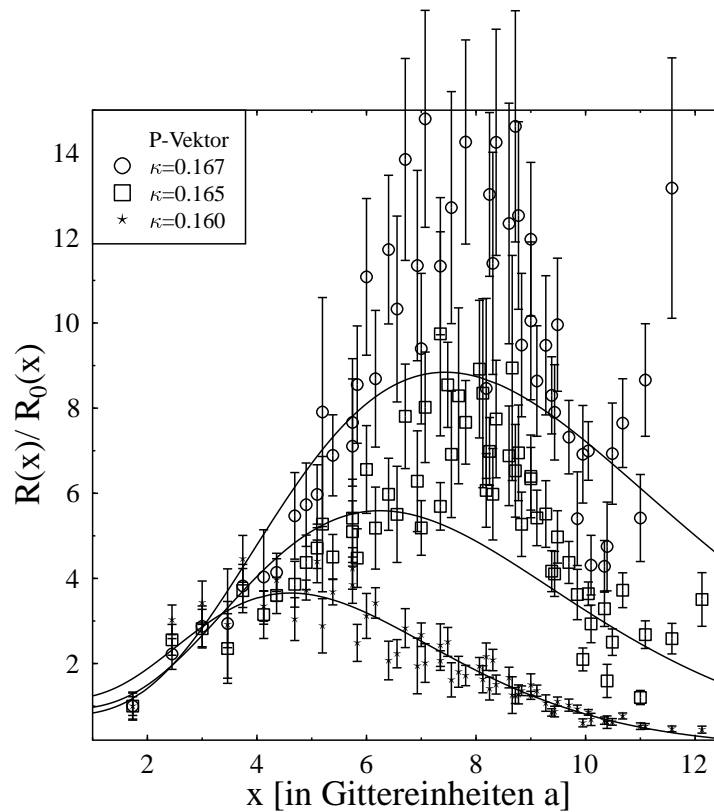


Abbildung 5.11: Der Fit für den Pseudo-Vektor-Kanal von Gleichung (2.32) durch die Diagonal- und Kegelpunkte des Gitterergebnisses $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ (normiert bei $\sqrt{3}a$) für ausgewählte Werte von κ

5.3.5 Der Proton-Kanal

Das graphische Resultat im Proton-Kanal ist in Abb. 5.12 für verschiedene Quarkmassen ($\kappa = 0.167, 0.165, 0.160$ und 0.155 von oben nach unten) dargestellt. Das numerische Ergebnis des Fits für die Parameter ist in Tab. 5.5 angegeben. Außer für die schwerste Quarkmasse stimmt die Resonanzmasse zu 80-90% mit der Masse aus dem Abfall der Ebene-zu-Ebene Korrelationsfunktion überein. Das ist ein zufriedenstellendes Ergebnis, insbesondere, da die Abweichung für die physikalischeren (kleineren) Quarkmassen geringer wird. Die Ergebnisse des Instantonenmodells von Shuryak sind $M = 0.96 \pm 0.03 \text{ GeV}$, $\Lambda = 0.03 \text{ GeV}^3$ und $s_0 = 2.25 \text{ GeV}^2$ [Shu93]. Die bekannten phänomenologischen Werte sind $M = 0.939 \text{ GeV}$ und $s_0 = 2.07$ [HZ98]. Es ist wiederum klar, daß strenggenommen unsere Ergebnisse ohne Extrapolation nicht vergleichbar sind. Dennoch ist der Trend der größten κ Werte in diesem Kanal klar. Wir vergleichen daher die Werte bei $\kappa = 0.167$. Für die Kopplung rechnen wir die Normierung aus unserem Ergebnis heraus und erhalten $\Lambda = 0.08$. Somit ist das Ergebnis für Λ in diesem Kanal von derselben Größenordnung wie das Ergebnis von Shuryak. Insbesondere die Masse und die Schwelle entsprechen darüberhinaus dem experimentellen Wert. Allerdings ist natürlich ein abschließendes Urteil erst nach der Extrapolation möglich.

5.3.6 Der Delta-Kanal

Das graphische Ergebnis im Delta-Kanal ist in Abb. 5.12 für verschiedene Quarkmassen ($\kappa = 0.167, 0.165$ und 0.160 von oben nach unten) dargestellt. Das numerische Ergebnis des Fits für die Parameter ist in Tab. 5.5 angegeben. Für die gezeigten κ Werte stimmt die Resonanzmasse mit der Masse aus der Ebene-zu-Ebene Korrelationsfunktion zu 85-90% überein. Die Ergebnisse des Instantonenmodells sind $M = 1.44 \pm 0.7 \text{ GeV}^2$, $\Lambda = 0.03 \text{ GeV}^3$ und $s_0 = 3.84 \text{ GeV}^2$ [Shu93]. Die phänomenologischen Werte sind $M = 1.23 \text{ GeV}$ und $s_0 = 3.84 \text{ GeV}^2$ [HZ98]. Wiederum wollen wir ohne Extrapolation unsere Werte für $\kappa = 0.167$ vergleichen. Unsere Masse liegt deutlich unter dem phänomenologischen Wert. Wir berücksichtigen die durchgeführte Normierung und erhalten für die Kopplung $\Lambda = 0.1 \text{ GeV}^3$. Sie ist damit um den Faktor 3 höher, als die Kopplung des Instantonenmodells, was mit dem niedrigen Wert der Masse verbunden sein kann. Die Schwelle liegt unter den beiden anderen Fällen, ist aber von derselben Größenordnung.

5.3.7 Zusammenfassung

Im Pseudo-Skalar-, Vektor-, Proton- und Delta-Kanal ist eine qualitative und semi-quantitative Übereinstimmung unserer Werte für die Parametrisierung der Spektraldichte mit anderen Modellen bzw. den phänomenologischen Werten vorhanden. Insbesondere im Proton-Kanal stimmt unser Ergebnis mit den experimentellen Daten überein. Im Pseudo-Vektor-Kanal sind die systematischen und statistischen Fehler größer, trotzdem wird die phänomenologische Untersuchung von Shuryak qualitativ unterstützt. Im skalaren Kanal weicht unser Ergebnis von der Erwartung ab.

5 Bearbeitung und Diskussion der Korrelationsfunktion

κ	$\Lambda[a^3]$	$M[a]$	$s_0[a^2]$
0.155	0.447	2.798	1.805
0.160	1.531	1.268	1.551
0.164	1.670	1.115	1.198
0.165	1.113	0.967	1.690
0.166	1.265	0.949	2.496
0.167	1.437	0.950	3.004

Tabelle 5.5: Ergebnisse für Λ , M und s_0 des Proton-Kanals durch den Fit von Gleichung (2.32) an das Gitterergebnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ für verschiedene κ Werte.

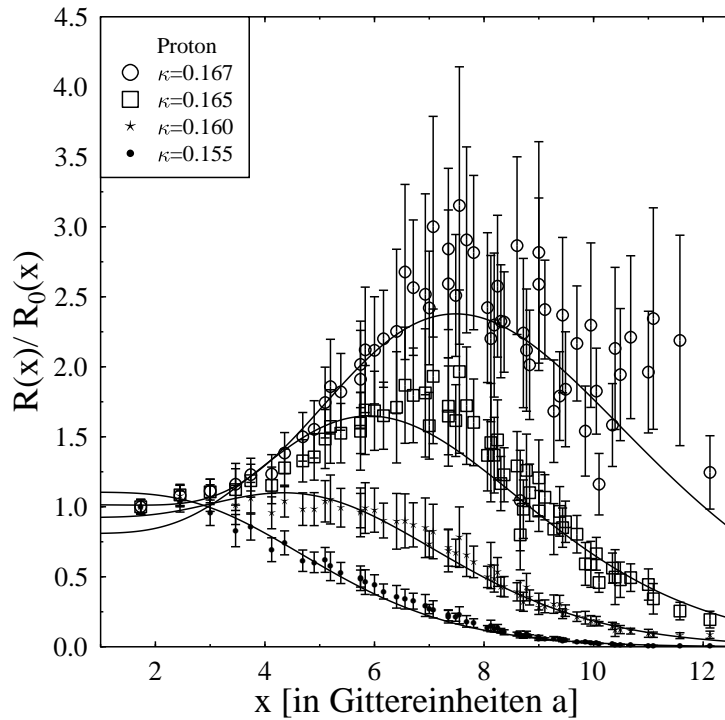


Abbildung 5.12: Der Fit für den Proton-Kanal von Gleichung (2.32) durch die Diagonal- und Kegelpunkte des Gitterergebnisses $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ (normiert bei $\sqrt{3}a$) für ausgewählte Werte von κ

κ	$\Lambda[a^3]$	$M[a]$	$s_0[a^2]$
0.155	0.464	2.743	1.842
0.160	2.308	1.372	1.868
0.165	1.701	1.104	5.558
0.166	1.426	0.999	4.890
0.167	0.981	0.802	3.709

Tabelle 5.6: Ergebnisse für Λ , M und s_0 des Delta-Kanals durch den Fit von Gleichung (2.32) an das Gitterergebnis $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ für verschiedene κ Werte.

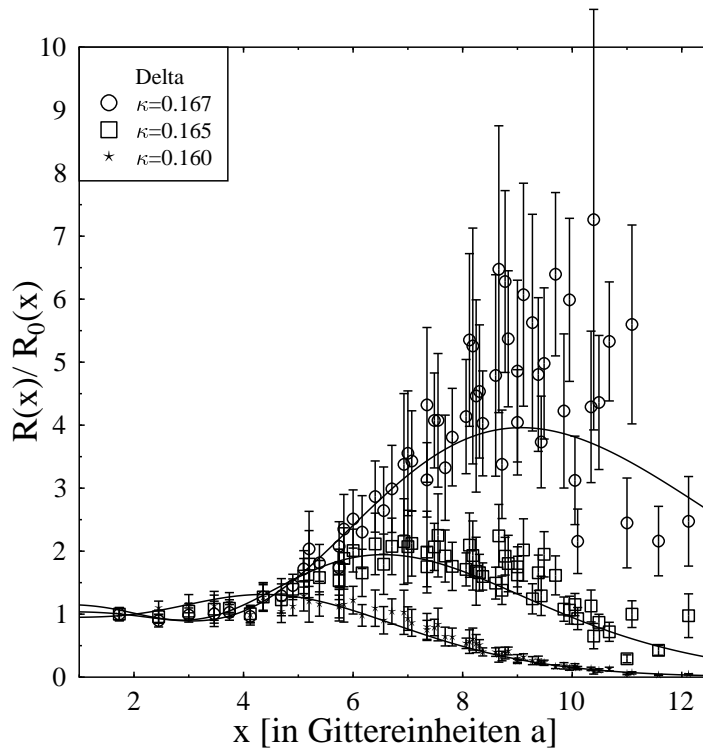


Abbildung 5.13: Der Fit für den Delta-Kanal von Gleichung (2.32) durch die Diagonal- und Kegelpunkte des Gitterergebnisses $\bar{R}(x)/R_0^G(x)$ (normiert bei $\sqrt{3}a$) für ausgewählte Werte von κ

5 Bearbeitung und Diskussion der Korrelationsfunktion

Wie wir mehrmals betont haben, sind weitere Untersuchungen notwendig, bevor wir abschließende Aussagen für die einzelnen Kanäle machen können. Im nächsten Kapitel geben wir einen knappen Überblick über die bestehenden Möglichkeiten, die durchgeführte Rechnung und ihre physikalische Interpretierbarkeit zu verbessern.

6 Ausblick

In diesem Kapitel wollen wir zum Abschluß einerseits auf die anstehenden Verbesserungen der durchgeführten Rechnung und ihrer Interpretation und andererseits auf sich anbietende anschließende Berechnungen der Korrelationsfunktion eingehen.

Statistische Fehler

Um die statistischen Fehler zu verringern, gibt es nach (3.59) nur eine Möglichkeit. Wir müssen die Anzahl der zum Mittelwert (3.58) beitragenden Konfigurationen erhöhen. Dies ist konzeptionell natürlich einfach. Es ändert sich nichts an der beschriebenen Vorgehensweise selbst. Wir benötigen einfach mehr Rechenzeit. Der statistische Fehler würde sich bei 100 (statt 10) beitragenden Konfigurationen ca. um den Faktor drei reduzieren.

Systematische Fehler

Es bieten sich mehrere Möglichkeiten, die systematischen Fehler zu reduzieren.

- Wichtig ist insbesondere die Berechnung der freien Korrelationsfunktion $R_0^G(x)$ auf einem 48^4 Gitter, um die endlichen Größeneffekte im interessierenden Bereich (bis ca. 2.5 fm) zu minimieren (siehe Abschnitt 5.1).
- Außerdem muß die in Abschnitt 5.3.2 erwähnte Extrapolation durchgeführt werden, um physikalische Aussagen für das Kontinuum zu gewinnen. Erst danach ist eine abschließende physikalische Untersuchung möglich.
- Desweiteren bietet es sich an, die Korrelationsfunktion $\bar{R}(x)$ auf einem etwas größeren Gitter ($20^3 \times 24$) und bei $\beta = 6.0$ zu berechnen, da die Rechnung dann mit Sicherheit im Kontinuumsbereich liegt (siehe Abschnitt 5.3).
- Ein extremer systematischer Fehler stellt natürlich die Einschränkung auf statische Fermionen dar. Wir können versuchen, dynamische Fermionen bei der Auswahl der Konfigurationen zu berücksichtigen und damit volle QCD zu rechnen (siehe 3.2.3). Diese Erweiterung ist konzeptionell einfach, wenn genügend Rechenzeit zur Verfügung steht. Wir müssen dazu die Fermionendeterminante beim Erzeugen der Konfigurationen berücksichtigen. Alles weitere (insbesondere die Invertierung zur Berechnung der Propagatoren) funktioniert dann wie bei der in dieser Arbeit beschriebenen Rechnung. Es ist allerdings klar, daß die Interpretation und die Extrapolation zum Kontinuumslimit erheblich komplizierter wird.

A Die Pfadintegralquantisierung

Das Pfadintegral ist für die Berechnung von quantisierten Theorien auf dem Computer der zentrale Ausgangspunkt, weil es Feldoperatoren durch Funktionen ersetzt. In diesem Kapitel soll deshalb die Methode der Pfadintegralquantisierung von ihren Wurzeln aus der Quantenmechanik bis hin zur Verwendung in der Feldtheorie erläutert werden.

A.1 Das Pfadintegral für ein Teilchen

Die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Systems mit einem Teilchen wird durch den unitären Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left(-i\hat{H}(t - t_0)\right) \quad (\text{A.1})$$

beschrieben, wobei der Hamiltonoperator \hat{H} eine Funktion des Satzes kanonisch konjugierter Variablen ist ([Nol94], Kap. 3.4).

Will man nun die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Übergang des Systems vom Anfangszustand $|x_i\rangle$ zum Zeitpunkt t_i in den Endzustand $|x_f\rangle$ zum Zeitpunkt t_f

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \langle x_f | \hat{U}(t_f, t_i) | x_i \rangle \quad (\text{A.2})$$

berechnen, so kann man dazu das von Feynman 1948 eingeführte Pfadintegral benutzen [Fey48], [FH65]. Wir werden es nun wegen seiner Wichtigkeit für die folgenden Aussagen explizit herleiten.

Es sei $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ ein Ein-Teilchen-Hamiltonoperator mit $H_0 = p^2/2m$. Wir teilen das Zeitintervall $t_f - t_i$ in N Zeitscheiben der (zeitlichen) Länge $\epsilon = (t_f - t_i)/N$ und definieren den Operator

$$\hat{W}_\epsilon = \exp\left(-i\hat{V}\frac{\epsilon}{2}\right) \exp\left(-i\hat{H}_0\epsilon\right) \exp\left(-i\hat{V}\frac{\epsilon}{2}\right).$$

Durch Taylor-Entwicklung kann man zeigen, daß $\hat{U}_\epsilon \equiv \exp(-i\hat{H}\epsilon) = \hat{W}_\epsilon + \hat{O}(\epsilon^3)$ gilt. Die gesuchte Wahrscheinlichkeitsamplitude (A.2) können wir auch als

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \langle x_f | \lim_{N \rightarrow \infty} \hat{W}_\epsilon^N | x_i \rangle$$

schreiben ([MM97], Kap. 1.2). Das wäre kein Fortschritt, wenn wir nicht das Matrixelement $\langle x | \hat{W}_\epsilon | y \rangle$ durch das Einfügen vollständiger Einsen und dem Ausrechnen des Gauss-Integrals im Impulsraum zu

$$\langle x | \hat{W}_\epsilon | y \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \epsilon}} \exp\left(i\frac{m}{2\epsilon}(x - y)^2 - i\frac{\epsilon}{2}V(x) - i\frac{\epsilon}{2}V(y)\right)$$

berechnen könnten. Mit diesem Ergebnis und nach Einfügen von $N - 1$ vollständigen Einsen im Ortsraum erhalten wir als Ergebnis für die gesuchte Amplitude (A.2)

$$\begin{aligned} \langle x_f | \hat{U}(t_f, t_i) | x_i \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \int dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left(\frac{m}{2\epsilon} \sum_j (x_j - x_{j+1})^2 \right) \\ &\quad \times \exp \left(-i\epsilon \left[\frac{V(x_0) + V(x_N)}{2} + \sum_{j=1}^{N-1} V(x_j) \right] \right) \end{aligned}$$

mit $x_i \equiv x_0$ und $x_N \equiv x_f$. Dies notieren wir in der symbolischen Form

$$\langle x_f | \hat{U}(t_f, t_i) | x_i \rangle = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} D(x(t)) \exp \left(i \int_{t_i}^{t_f} (H_0 - V) dt \right). \quad (\text{A.3})$$

Man spricht vom Pfadintegral, weil sämtliche Pfade, die das System klassisch durchlaufen kann und der Randbedingung entsprechen, gewichtet mit $\exp(iS)$ zur Übergangsamplitude additiv beitragen. Das erhaltene Resultat ist beachtlich, steht doch in (A.3) links ein Ausdruck mit c-Zahlen und q-Zahlen, rechts (im Pfadintegral) aber nur noch c-Zahlen. Daher bietet sich das Pfadintegral als Ausgangspunkt für numerische Rechnungen an. Mathematisch ist der Ausdruck nun ein Funktionalintegral, also ein Integral über alle Funktionen im betrachteten Funktionenraum. Es ist keineswegs klar, ob eine solche Größe mit dem komplexen Maß Dx konvergiert.

Zeitgeordnetes Produkt

Wir berechnen nun das zeitgeordnete Produkt

$$\langle x_f | T \left\{ \hat{O}_1(x, t_1) \hat{O}_2(x, t_2) \hat{U}(t_f, t_i) \right\} | x_i \rangle = \langle x_f t_f | \hat{O}_1(x, t_1) \hat{O}_2(x, t_2) | x_i t_i \rangle, \quad (\text{A.4})$$

wobei T der Zeitordnungsoperator ist, der die Operatoren in seinem Argument zeitlich anordnet, so daß Operatoren zu späteren Zeitpunkten weiter links stehen ($t_1 \geq t_2$). Unter Benutzung der Zeitentwicklung für Operatoren im Heisenbergbild schreiben wir (A.4) in $\langle x_f | \hat{U}(t_f, t_1) \hat{O}_1(x) \hat{U}(t_1, t_2) \hat{O}_2(x) \hat{U}(t_2, t_i) | x_i \rangle$ um. Nun teilen wir wieder das Intervall $t_f - t_i$ in N Zeitscheiben ein und führen die Rechnung wie oben durch. Das Ergebnis lautet

$$\langle x_f | T \left\{ \hat{O}_1(x, t_1) \hat{O}_2(x, t_2) \hat{U}(t_f, t_i) \right\} | x_i \rangle = \int_{x(t_i)=x_i}^{x(t_f)=x_f} Dx(t) O(x(t_1)) O(x(t_2)) \exp(iS). \quad (\text{A.5})$$

Es ist also implizit in der Konstruktion des Pfadintegrals bereits eine Zeitordnung enthalten. Diese hat ihre Ursache darin, daß man N groß genug wählt, damit der Kommutator $\sim \epsilon^2 [\hat{H}_0, \hat{V}]_-$ vernachlässigbar wird (vgl. die Taylorentwicklung oben).

A.2 Das euklidische Pfadintegral

Das Pfadintegral (A.3) ist in der Praxis nicht geeignet für eine numerische Auswertung, da $\exp(iS)$ sehr stark oszilliert und keinerlei Konvergenz erzwingt. Das

A Die Pfadintegralquantisierung

liegt an der Zeitentwicklung des Systems, denn die Energieeigenzustände des Systems oszillieren nach (A.1) zeitlich mit ihrer Energie als Frequenz. Setzt man (A.1) analytisch in euklidische Zeit $\tau = it$ fort¹

$$\hat{U}(\tau, \tau_0) = \exp\left(-\hat{H}(\tau - \tau_0)\right), \quad (\text{A.6})$$

so sieht man, daß in imaginärer Zeit die Energieeigenzustände mit der Zeit zerfallen, wenn V (und damit H) von unten beschränkt ist. Für einen beliebigen Anfangszustand zur Zeit τ_0 überwiegt für große τ immer der Zustand mit dem geringsten Energieeigenwert, per Definition also der Grundzustand des Systems. Das Pfadintegral berechnet sich ausgehend von (A.6) analog zu Abschnitt A.1² zu

$$\langle x_f | \hat{U}(\tau_f, \tau_i) | x_i \rangle = \int_{x(\tau_i)=x_i}^{x(\tau_f)=x_f} D(x(\tau)) \exp\left(-\int_{\tau_i}^{\tau_f} (H_0 + V) d\tau\right). \quad (\text{A.7})$$

Das Maß $D(x)$ unterscheidet sich äußerlich von dem aus (A.3) nur durch das Fehlen von i im Nenner und ist bekannt als das Wiener Maß [Wie24], [Wie32]. In der euklidischen Form (A.7) bekommt das Pfadintegral damit auch eine rigorose mathematische Definition, denn die Konvergenz ist in diesem Fall gesichert. Entscheidender für uns ist aber, daß (A.7) nun angeregte Zustände gemäß (A.6) dämpft und damit geeignet ist, Eigenschaften des Grundzustands numerisch zu berechnen. Außerdem hat es formale Ähnlichkeit mit der Zustandssumme der kanonischen Gesamtheit

$$\text{Sp} \exp\left(-\beta \hat{H}\right) = \int dx \langle x | \exp\left(-\beta \hat{H}\right) | x \rangle \quad (\text{A.8})$$

([Nol96], Kap. 2.3), so daß Methoden der statistischen Physik –insbesondere Monte Carlo Verfahren (siehe 3.2)– angewendet werden können, um es zu berechnen. Eine Bemerkung verdient noch der relative Vorzeichenwechsel zwischen H_0 und V in der Wirkung: In imaginärer Zeit bewegt sich das Teilchen im invertierten Potential $-V$. Dies ist der Ausgangspunkt für stationäre Lösungen in klassisch verbotenen Bereichen. Die euklidische Wirkung, die aus S durch die analytische Fortsetzung $t = -i\tau$ entsteht, werden wir im folgenden meist mit S_E bezeichnen³.

Grundzustandserwartungswert

Wir berechnen nun den Erwartungswert eines Operators \hat{A} im Grundzustand mit dem euklidischen Pfadintegral und der formalen Analogie zur statistischen Mechanik. Der Erwartungswert einer Observablen \hat{A} in der kanonischen Gesamtheit ist gegeben durch

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\text{Sp} \left\{ \exp\left(-\hat{H}\tau\right) \hat{A} \right\}}{\text{Sp} \exp\left(-\hat{H}\tau\right)} \quad (\text{A.9})$$

¹Diese Fortsetzung wird in der Literatur Wickrotation genannt.

²Alternativ kann man auch die oben erwähnte analytische Fortsetzung im Pfadintegral durchführen.

³Wenn eine Unsicherheit besteht, in welchem Raum ein Ausdruck nun gemeint ist, erkennt man dies stets an der Bezeichnung der Zeitvariablen t oder τ (bzw. x_0 und x_4 in der Feldtheorie).

([Nol96], Kap. 2.3) und der Umbenennung (und Uminterpretation) von β nach τ . Wir werten dies in der Basis von Energieeigenfunktionen $|n\rangle$ aus und erhalten

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\sum \exp(-E_n \tau) \langle n | \hat{A} | n \rangle}{\sum \exp(-E_n \tau)}.$$

Nutzen wir nun aus, daß die Energieeigenzustände mit der Zeit exponentiell abfallen, können wir das gesuchte Matricelement durch

$$\langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\text{Sp} \left\{ \exp(-\hat{H}\tau) \hat{A} \right\}}{\text{Sp} \exp(-\hat{H}\tau)} \quad (\text{A.10})$$

berechnen, was in der statistischen Mechanik nichts anderes bedeutet, als den Erwartungswert von \hat{A} bei Temperatur $\beta = 1/\tau \rightarrow 0$, also im Grundzustand des Systems, zu berechnen. Diese Gleichung ist grundlegend für diese Arbeit, ermöglicht sie es doch, Erwartungswerte im Grundzustand mittels des euklidischen Pfadintegrals zu berechnen, wie wir gleich sehen werden.

Korrelationsfunktion

Dies wollen wir anhand der Korrelationsfunktion $\langle 0 | \text{T} \{ \hat{O}(x, t_1) \dots \hat{O}(x, t_n) \} | 0 \rangle$ zeigen. Wir erhalten zunächst für $t_1 \geq t_2 \dots \geq t_n$ unter Ausnutzung der Zeitentwicklung für Heisenbergoperatoren und nach der analytischen Fortsetzung in imaginäre Zeit

$$\langle 0 | \exp(\hat{H}\tau_1) \hat{O}(x) \hat{U}(\tau_1, \tau_2) \dots \hat{O}(x) \exp(-\hat{H}\tau_n) | 0 \rangle.$$

Wir benutzen (A.10) und schreiben für die euklidische Korrelationsfunktion

$$\langle 0 | \text{T} \left\{ \hat{O}(x, \tau_1) \dots \hat{O}(x, \tau_n) \right\} | 0 \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\text{Sp} \left\{ \hat{U}(\frac{\tau}{2}, \tau_1) \hat{O}(x) \hat{U}(\tau_1, \tau_2) \dots \hat{O}(x) \hat{U}(\tau_n, -\frac{\tau}{2}) \right\}}{\text{Sp} \exp(-\hat{H}\tau)}.$$

Wir rotieren (A.5) ins Euklidische und erhalten damit das Ergebnis als Pfadintegral mit periodischen Randbedingungen $x(-\frac{\tau}{2}) = x(\frac{\tau}{2})$

$$\langle 0 | \text{T} \left\{ \hat{O}(x, \tau_1) \dots \hat{O}(x, \tau_n) \right\} | 0 \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{Z(\tau)} \int_{x(-\frac{\tau}{2})=x(\frac{\tau}{2})} Dx(\tau') O(x(\tau_1)) \dots O(x(\tau_n)) \exp(-S_E) \quad (\text{A.11})$$

mit

$$Z(\tau) = \int_{x(-\frac{\tau}{2})=x(\frac{\tau}{2})} Dx(\tau') \exp(-S_E).$$

Die periodischen Randbedingungen sind dabei eine direkte Folge der Spurbildung aus (A.10). Gleichung (A.11) versetzt uns somit in die Lage, Grundzustandserwartungswerte von zeitgeordneten Produkten mittels des euklidischen Pfadintegrals zu berechnen.

A.3 Das Pfadintegral für Mehrteilchensysteme

Wir wollen den Ausdruck für das Pfadintegral (A.3) bzw. (A.7) auf beliebige Mehrteilchensysteme erweitern. In der Regel behandelt man Mehrteilchensysteme in der zweiten Quantisierung ([Nol94], Kap. 8). Die Erzeuger \hat{a}_λ^\dagger generieren aus dem Vakuumzustand $|0\rangle$ alle Basiszustände des Systems und somit den gesamten Fockraum. Sie führen von einem N dimensionalen Hilbertraum zu einem $N + 1$ dimensionalen. Die dazu adjungierten Operatoren \hat{a}_λ nennt man gewöhnlich Vernichter. Sie führen von einem N dimensionalen Hilbertraum zu einem $N - 1$ dimensionalen und verschwinden, wenn sie auf den Vakuumzustand wirken: $\hat{a}_\lambda |0\rangle = 0$. Um die Symmetrie bzw. die Anti-Symmetrie der Zustände zu gewährleisten, erfüllen Erzeuger und Vernichter die bekannten (Anti-) Kommutationsrelationen

$$[\hat{a}_\lambda^\dagger, \hat{a}_\mu^\dagger]_{-\zeta} = 0 \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu]_{-\zeta} = 0 \quad [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu^\dagger]_{-\zeta} = \delta_{\lambda\mu},$$

wobei $\zeta = +1$ für Bosonen und $\zeta = -1$ für Fermionen steht. Sie stellen darüberhinaus eine Basis für alle Operatoren des Fockraums dar. Insbesondere gilt das natürlich für den Hamiltonoperator und damit auch für den zu (A.1) analogen Zeitentwicklungsoperator. Diesen bzw. dessen Matrixelement müssen wir wie in Abschnitt A.1 untersuchen, um das Pfadintegral für Mehrteilchensysteme zu erhalten. Dazu erinnern wir uns, daß wir beim Herleiten des Ausdrucks (A.3) für (A.2) insbesondere Ortsraum-Eigenfunktionen (bzw. Impulsraum-Eigenfunktionen) $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ und die Vollständigkeitsrelation $\int dx |x\rangle \langle x| = 1$ benötigt haben, weil der Hamiltonoperator und damit der Zeitentwicklungsoperator eine Funktion von \hat{x} und \hat{p} war. Die dazu analogen Zustände, die wir im Fall der zweiten Quantisierung benötigen, sind kohärente Zustände $|\xi\rangle$, die als Eigenzustand der Vernichter

$$\hat{a}_\alpha |\xi\rangle = \xi_\alpha |\xi\rangle$$

definiert sind⁴. Wir wenden zwei Vernichter auf einen kohärenten Zustand an und erhalten unter Ausnutzung der (Anti-) Kommutationsbeziehungen

$$\hat{a}_\alpha \hat{a}_\beta |\xi\rangle = \xi_\alpha \xi_\beta |\xi\rangle = -\zeta \xi_\beta \xi_\alpha |\xi\rangle.$$

Die Eigenwerte müssen also auch $[\xi_\alpha, \xi_\beta]_{-\zeta}$ genügen. Im Fall von Bosonen macht dies natürlich keinen Unterschied, die Eigenwerte sind weiterhin c-Zahlen. Für Fermionen allerdings muß man die sogenannten Grassmann-Zahlen einführen, die der sogenannten Grassmann-Algebra $\xi_\alpha \xi_\beta + \xi_\beta \xi_\alpha = 0$ genügen⁵ ([Ryd97], Kap. 6.7). Ausgehend von bosonischen oder fermionischen Mehrteilchenzuständen in der Besetzungszahldarstellung kann man zeigen, daß der kohärente Zustand durch

$$|\xi\rangle = \exp\left(\zeta \sum_\alpha \xi_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger\right) |0\rangle$$

darstellbar ist und die Vollständigkeitsrelation

$$1 = \int d\mu(\xi) \exp\left(\sum_\alpha \xi_\alpha^* \xi_\alpha\right) |\xi\rangle \langle \xi|$$

⁴Die Erzeuger können a priori keine (Ket-)Eigenzustände haben, weil sie die Komponente eines Zustands mit der Minimalzahl an Teilchen immer um eins erhöhen.

⁵Grassmann- und c-Zahlen kommutieren natürlich untereinander.

mit dem Maß $d\mu(\xi) = \aleph^{-1} \prod_{\alpha} d\xi_{\alpha}^* d\xi_{\alpha}$ erfüllt, wobei $\aleph = 2\pi i$ für Bosonen und $\aleph = 1$ für Fermionen ist ([NO88], Kap. 1.5). Damit können wir das Matricelement $\langle \phi_{\alpha,f} | \hat{U}(t_f, t_i) | \phi_{\alpha,i} \rangle$ berechnen, indem wir das Zeitintervall $t_f - t_i$ wieder in genügend viele Intervalle der Länge ϵ aufteilen, so daß wir für jede Zeitscheibe

$$\exp(-i\hat{H}(\hat{\alpha}^{\dagger}, \hat{\alpha})\epsilon) = : \exp(-i\hat{H}(\hat{\alpha}^{\dagger}, \hat{\alpha})\epsilon) : + \hat{O}(\epsilon^2)$$

setzen können⁶. Zwischen jede Zeitscheibe fügen wir eine vollständige Eins der obigen Form ein. Wir erhalten mit $\phi_{\alpha,0} = \phi_{\alpha,i}$ und $\phi_{\alpha,N} = \phi_{\alpha,f}$

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\alpha,f} | \hat{U}(t_f, t_i) | \phi_{\alpha,i} \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left\{ \prod_{k=1}^{N-1} d\mu(\phi_k) \right\} \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k} \right) \\ &\quad \times \prod_{k=1}^M \left\{ \langle \phi_k | : \exp(-i\hat{H}(\hat{\alpha}^{\dagger}, \hat{\alpha})\epsilon) : + \hat{O}(\epsilon^2) | \phi_{k-1} \rangle \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \left\{ \prod_{k=1}^{N-1} d\mu(\phi_k) \right\} \exp \left(- \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k} \right) \\ &\quad \times \exp \left(\sum_{k=1}^M \left\{ \sum_{\alpha} \phi_{\alpha,k}^* \phi_{\alpha,k-1} - i\epsilon H(\phi_{\alpha,k}^*, \phi_{\alpha,k-1}) \right\} \right). \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis schreiben wir unter Unterdrückung der expliziten Notierung der Komponenten $\phi_{\alpha}(t)$ von $\phi(t)$ wieder in symbolischer Form

$$\langle \phi_f | \hat{U}(t_f, t_i) | \phi_i \rangle = \int_{\phi(t_i)=\phi_{t_i}}^{\phi^*(t_f)=\phi_{t_f}^*} D(\phi^*(t), \phi(t)) \exp \left(i \int_{t_i}^{t_f} dt L(\phi^*(t), \phi(t)) \right), \quad (\text{A.12})$$

wobei wir $L = i\frac{\partial}{\partial t} - H$ gesetzt haben und eine Konstante, die von der Wahl der Randbedingungen herrührt, in das Maß gezogen haben ([NO88], Kap. 2,2). Dies können wir ohne Sorge machen, da wir nach (A.10) immer normierte Erwartungswerte berechnen werden.

Euklidisches Pfadintegral für Mehrteilchensysteme

Das euklidische Pfadintegral für Mehrteilchensysteme erhalten wir analog (A.7) wieder durch analytische Fortsetzung in imaginäre Zeit $t = -i\tau$.

Der Vakuumerwartungswert eines Operators $T \{ \hat{O}_1(t_1) \dots \hat{O}_n(t_n) \}$ ist analog zu (A.10) bzw. (A.11) durch

$$\begin{aligned} \langle 0 | \left\{ T \hat{O}_1(\tau_1) \dots \hat{O}_n(\tau_n) | 0 \right\rangle &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{Z(\tau)} \int_{\phi(-\frac{\tau}{2})=\zeta\phi(\frac{\tau}{2})} D(\phi^*(\tau'), \phi(\tau')) O_1(\phi^*(\tau_1), \phi(\tau_1)) \\ &\quad \dots O_n(\phi^*(\tau_n), \phi(\tau_n)) \exp(-S_E(\phi^*, \phi)) \quad (\text{A.13}) \end{aligned}$$

⁶Hierbei bezeichnet $:\hat{A}$: die Normalordnung eines Operators \hat{A} , so daß im Resultat alle Erzeuger links von allen Vernichtern stehen. Damit ist der Vakuumerwartungswert eines normalgeordneten Operators null.

gegeben, wobei $Z(\tau)$ (A.13) für $\hat{O} \equiv 1$ ist. Wie oben angegeben, ist $\zeta = +1$ für Bosonen und $\zeta = -1$ für Fermionen. Die Randbedingung stammt dabei von der Spurbildung, denn es gilt

$$\text{Sp}A = \int d\mu(\xi) \exp\left(-\sum_{\alpha} \xi_{\alpha}^* \xi_{\alpha}\right) \langle \zeta \xi | A | \xi \rangle$$

für kohärente Zustände.

A.4 Das Pfadintegral in der Feldtheorie

Das Pfadintegral läßt sich auf eine Quantenfeldtheorie übertragen, wenn wir nicht nur das Zeitintervall in ϵ -Intervalle, sondern Zeit und Raum in kleine vierdimensionale Volumina $\sim \epsilon^4$ aufteilen. Aus dem Integral über alle Pfade $D(\phi(t)^*, \phi(t))$ wird ein Integral über alle Feldkonfigurationen $D(\phi^*(x_{\mu}), \phi(x_{\mu})) \equiv D\phi^* D\phi$. Die Felder sind weiterhin für Fermionen Grassmann-Variablen und für Bosonen komplexe Variablen. Will man es in euklidischer Form benutzen, so muß man sicherstellen, daß die Wickrotation umkehrbar ist. Es muß also insbesondere überprüft werden, daß bei der analytischen Fortsetzung in imaginäre Zeit nicht über Singularitäten (z.B. in Propagatoren) gedreht wird ([GR95], Kap. 12).

Der Vakuumerwartungswert eines Operators $T\{\hat{O}_1 \dots \hat{O}_n\}$ ausgedrückt durch Feldoperatoren $\hat{\phi}^*$ und $\hat{\phi}$ berechnet sich dann nach (A.13) gemäß

$$\langle 0 | T \{ \hat{O}_1 \dots \hat{O}_n \} | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int D\phi^* D\phi O_1(\phi^*, \phi) \dots O_n(\phi^*, \phi) \exp(-S_E(\phi^*, \phi)) \quad (\text{A.14})$$

mit Z gegeben durch (A.14) für $O_i = 1$. Die Randbedingungen der Felder sind je nach Typ wieder periodisch oder anti-periodisch.

Quadratische Wirkung als Beispiel

Wir werden (A.14) insbesondere für quadratische Wirkungen der Form

$$S(\chi^*, \chi, \omega) = \sum_{\alpha\beta} \chi_{\alpha}^* M(\omega)_{\alpha\beta} \chi_{\beta} + S_B(\omega) = \chi^* M(\omega) \chi + S_B(\omega) \quad (\text{A.15})$$

benötigen⁷, wobei z.B. χ^*, χ die Fermionenfelder $\bar{\psi}, \psi$ und ω ein reelles Bosonenfeld A in der Lagrangedichte (2.1) $\bar{\psi} (\gamma_{\mu} p^{\mu} - \gamma_{\mu} A^{\mu} + m) \psi + F_{\mu\nu}(A) F^{\mu\nu}(A)$ repräsentieren. Denn mit Hilfe der verallgemeinerten Formel für Gauss-Integrale über komplexe oder Grassmann-Variablen

$$\int d\mu(\xi^*, \xi) \exp(-\xi^* H \xi + \eta^* \xi + \eta \xi^*) = [\det H]^{-\zeta} \exp(\eta^* H^{-1} \eta) \quad (\text{A.16})$$

([NO88], Kap. 1.5) läßt sich die Integration über die Grassmann-Variablen im Pfadintegral ausführen⁸. Es ergibt sich für

$$Z = \int D\chi^* D\chi D\omega \exp(-S(\chi^*, \chi, \omega)) = \int D\omega \det M(\omega) \exp(-S_B(\omega)).$$

⁷Zur Vereinfachung der Notation lassen wir die Komponenten im folgenden meistens weg und meinen z.B. mit $\chi^* \eta = \sum_{\alpha} \chi_{\alpha}^* \eta_{\alpha}$.

⁸Für komplexe Integrationsvariable muß H positiv definit sein, damit das Integral existiert.

Übrig bleibt demnach nur die Integration über eine effektive bosonische Wirkung

$$S_{\text{eff}}(\omega) = S_B(\omega) - \ln \det M(\omega).$$

Greensfunktion für eine quadratische Wirkung

Wir wollen mit Hilfe von (A.16) die Korrelationsfunktion

$$G_{i_1 \dots i_n, j_1 \dots j_n}^{(n)} = \langle 0 | T \left\{ \hat{\psi}_{i_1} \dots \hat{\psi}_{i_n} \hat{\psi}_{j_1} \dots \hat{\psi}_{j_n} \right\} | 0 \rangle \quad (\text{A.17})$$

aus (A.14) für die quadratische Wirkung (A.15) berechnen und betrachten dazu zunächst den Grassmann-Teil im Pfadintegral

$$\int D\chi^* D\chi \chi_{i_1} \dots \chi_{i_n}^* \chi_{j_1} \dots \chi_{j_n} \exp(-\chi^* M \chi).$$

Wir schreiben den fermionischen Teil von (A.17) mit Hilfe der Funktionalableitung als

$$I_F = \frac{\partial^{2n}}{\partial \vartheta_{i_1}^* \dots \partial \vartheta_{i_n}^* \partial \vartheta_{j_1} \dots \partial \vartheta_{j_n}} \int D\chi^* D\chi \exp(-\chi^* M \chi + \vartheta^* \chi + \vartheta \chi^*) \Big|_{\vartheta=\vartheta^*=0}.$$

Die eingefügten Grassmann-Variablen ϑ^* und ϑ sind für uns ein Rechenrick, solche Terme sind in der Literatur als "Schwinger Quellen" bekannt ([Ryd97], Kap. 5.5 und Referenzen dort). Mit (A.16) erhalten wir zunächst

$$I_F = \frac{\partial^{2n}}{\partial \vartheta_{i_1}^* \dots \partial \vartheta_{i_n}^* \partial \vartheta_{j_1} \dots \partial \vartheta_{j_n}} \det M \exp(\vartheta^* M^{-1} \vartheta) \Big|_{\vartheta=\vartheta^*=0}.$$

Wir berechnen die Ableitungen unter Beachtung der Anti-Kommutativität der Ableitung $[\frac{\partial}{\partial \vartheta_\alpha}, \frac{\partial}{\partial \vartheta_\beta}]_+ = 0$ und erhalten

$$I_F = \sum_P \text{sign}(P) M_{i_{P(n)}j_n}^{-1} \dots M_{i_{P(1)}j_1}^{-1} \det M.$$

Dieses Zwischenergebnis ist für die kanonische Quantisierung unter dem Namen "Wick Theorem" bekannt ([IZ80], Kap. 4.2). Damit erhalten wir einen Ausdruck für die Korrelationsfunktion (A.17), in dem die fermionischen Variablen bereits ausintegriert sind

$$G_{i_1 \dots i_n, j_1 \dots j_n}^{(n)} = \frac{1}{Z} \int D\omega \sum_P \text{sign}(P) M_{i_{P(n)}j_n}^{-1} \dots M_{i_{P(1)}j_1}^{-1} \exp(-S_{\text{eff}}(\omega)) \quad (\text{A.18})$$

und nur noch die Bosonen über eine effektive Wirkung zu integrieren sind.

B Matrixinvertierungsmethoden

Die effiziente Invertierung der Fermionenmatrix M ist extrem wichtig für jede Monte Carlo Messung einer hadronischen Observablen mit endlicher Quarkmasse. Ist die Quarkmasse unendlich, dann ist der Hoppingparameter $\kappa = 0$, und M wird zur Einheitsmatrix (siehe (3.50) und (3.49)). Derartige Quarks propagieren nicht und werden im reinen Eichsektor durch Polyakov Linien dargestellt. Für endliche Quarkmasse müssen wir jedoch die Lösung $x = M^{-1}b$ zur Gleichung $Mx = b$ finden. Die Dimension von M ist $N = 786432$ für ein Gitter mit 16^4 Gitterpunkten. Gleichzeitig ist M dünn besetzt, denn M verbindet wegen der Wilsonform der diskretisierten symmetrischen Ableitung einen Gitterpunkt mit nur acht anderen. Es ist klar, daß wir bei der ungeheuren Größe der Dimension von M einen Algorithmus zur Invertierung benötigen, dem diese Tatsache nutzt. Ein gängiges Verfahren wie z.B. die LU-Zerlegung benötigt $N^3/3$ Operationen und ist damit ineffizient, weil es nicht berücksichtigt, daß M dünn besetzt ist (siehe [PTVF93], Kap. 2). Iterative Algorithmen starten mit einem Anfangswert x_0 und generieren sukzessive Approximationen x_1, x_2, \dots, x_i für x . Typischerweise terminiert ein iteratives Verfahren nach N Schritten mit der exakten Lösung, liefert aber auch bei erheblich weniger Schritten eine gute Approximation der Lösung. Die Matrix M wird dabei zur Multiplikationen der Form $\sum_j M_{ij}v_j$ benutzt. Somit müssen nur Elemente ungleich null gespeichert werden. Für jeden Schritt der Approximation benötigt man mindestens eine derartige Multiplikation. Somit ist die Anzahl der Operationen zum Erreichen der Approximation x_i von der Größenordnung iBN , wobei B die Anzahl der Bänder in M bezeichnet, die mit Elementen ungleich null gefüllt sind. In der Regel benutzt ein iterativer Algorithmus den Betrag des Residuums $r_i = M(x - x_i)$, um zu entscheiden, ob x_i als approximative Lösung für x angenommen wird und die Iteration damit beendet ist. Es ist

$$|r_i|^2 = \sum_j \lambda_j^2 ((x - x_i)v_j)^2,$$

wobei v_j ein Eigenvektor von M zum Eigenwert λ_j ist. Dieses Kriterium beinhaltet also eine potentielle Fehlerquelle: Wenn M kleine Eigenwerte besitzt, bedeutet ein kleiner Betrag des Residuums nicht automatisch, daß eine hohe Konvergenz erreicht ist.

B.1 Das Conjugate Gradient Verfahren

Ein sehr robustes und häufig benutztes iteratives Verfahren ist die "Conjugate Gradient" Methode [HS52], die meist in leicht abgewandelter und optimierter Form bei Optimierungsproblemen zum Einsatz kommt [Hes80]. Es sei A eine hermitesche und

positiv definite Matrix der Dimension N . Wir wollen die Gleichung

$$A\phi = k \quad (\text{B.1})$$

iterativ lösen, wobei ϕ die exakte Lösung und ϕ_n die approximative Lösung mit dem Residuum

$$r_n = k - A\phi_n \quad (\text{B.2})$$

nach n Schritten zum Startwert ϕ_0 darstellt. Der Algorithmus ist wie folgt definiert:

$$p_0 = r_0 = k - A\phi_0 \quad (\text{B.3a})$$

$$a_i = \frac{|r_i|^2}{(p_i, Ap_i)} \quad (\text{B.3b})$$

$$\phi_{i+1} = \phi_i + a_i p_i \quad (\text{B.3c})$$

$$r_{i+1} = r_i - a_i Ap_i \quad (\text{B.3d})$$

$$b_i = \frac{|r_{i+1}|^2}{|r_i|^2} \quad (\text{B.3e})$$

$$p_{i+1} = r_{i+1} + b_i p_i, \quad (\text{B.3f})$$

wobei Gleichung (B.3d) das Residuum zur Approximation ϕ_{i+1} darstellt. Da A natürlich als regulär angenommen ist, impliziert $|r_i|^2 = 0$, daß $\phi_i = \phi$ die exakte Lösung ist.

Konvergenzbeweis per Induktion

Wir wollen zeigen, daß die Methode nach maximal N Schritten mit der exakten Lösung als Ergebnis terminiert. Dazu müssen wir folgende Beziehungen

$$(p_i, r_j) = 0 \quad \text{für } i < j \quad (\text{B.4a})$$

$$(r_i, r_j) = 0 \quad \text{für } i \neq j \quad (\text{B.4b})$$

$$(p_j, r_j) = |r_j|^2 \quad (\text{B.4c})$$

$$(p_i, Ap_j) = 0 \quad \text{für } i \neq j \quad (\text{B.4d})$$

$$(r_j, Ap_j) = (p_j, Ap_j) \quad (\text{B.4e})$$

per vollständiger Induktion beweisen. Die Induktionsverankerung ist für $i, j = 0, 1$ wegen der Definition von r_0, r_1, p_0 und p_1 klar. Wir nehmen an, daß die Gleichungen (B.4) für $i, j \leq n$ (wo nötig $i < j$) gelten und wollen den Induktionsschritt von $n \rightarrow n+1$ durchführen. Es gilt unter Benutzung der Definition von (B.3b) in (B.3d)

$$r_{n+1} = r_n - \frac{|r_n|^2}{(p_n, Ap_n)} Ap_n. \quad (\text{B.5})$$

Wir berechnen $(p_i, r_{n+1}) = 0$ für $i \leq n$ und benutzen dafür (B.5) zusammen mit der Annahme der Gültigkeit von (B.4c) für $i < j \leq n$ (für $i = n$ ist die Aussage identisch erfüllt). Somit gilt (B.4a) für $i < j \leq n+1$. Als nächstes berechnen wir (r_i, r_{n+1}) für $i \leq n$. Es ergibt sich zunächst

$$(r_i, r_{n+1}) = (r_i, r_n) - \frac{(r_n, p_n)}{(p_n, Ap_n)} (r_i, Ap_n)$$

mit Hilfe von (B.5) und der Annahme der Gültigkeit von (B.4c) für $i \leq n$. Für $i = n$ benutzen wir die Gültigkeit von (B.4c) und (B.4e) nach Annahme, so daß sich beide Terme aufheben. Für $i < n$ benutzen wir die Annahme der Gültigkeit von (B.4b), so daß der linke Term verschwindet. Der rechte Term verschwindet in diesem Fall wegen der Definition (B.3f) von $r_i = p_i - b_{i-1}p_{i-1}$ und der Annahme der Gültigkeit von (B.4d). Damit ist (B.4b) für $i < j \leq n + 1$ gezeigt. Nun benutzen wir die Definition (B.3f)

$$p_{n+1} = r_{n+1} + \frac{|r_{n+1}|^2}{|r_n|^2} p_n \quad (\text{B.6})$$

und berechnen damit $(p_{n+1}, r_{n+1}) = |r_{n+1}|^2$ unter Benutzung von (B.4a), welche für $i = n$ und $j = n + 1$ wie oben erwähnt identisch verschwindet. Somit gilt auch (B.4c) für $j = n + 1$. Wir schreiben für (B.5) zunächst

$$Ap_n = \frac{(p_n, Ap_n)}{|r_n|^2} (r_n - r_{n+1}),$$

woraus wir wieder wegen der Gültigkeit (B.4a) für $i = n$ und $j = n + 1$

$$\frac{(r_{n+1}, Ap_n)}{(p_n, Ap_n)} = -\frac{|r_{n+1}|^2}{|r_n|^2} (r_n - r_{n+1})$$

berechnen, was wir schließlich in (B.6) benutzen, so daß wir

$$p_{n+1} = r_{n+1} - \frac{(r_{n+1}, Ap_n)}{(p_n, Ap_n)} p_n$$

erhalten. Mit dieser Form für p_{n+1} berechnet sich $(p_i, Ap_{n+1}) = 0$ für $i = n$ trivial. Für $i < n$ verschwindet die Projektion im rechten Term (p_i, p_n) nach Induktionsannahme für (B.4d). Die Projektion des linken Terms (p_i, Ar_{n+1}) mit der Definition (B.3d) und unter Zuhilfenahme der Induktionsannahme (B.4d) ergibt $(p_i, Ar_i) - a_i(p_i, Ap_i) = 0$ nach Definition (B.3b). Damit ist also auch (B.4d) für $i < j \leq n + 1$ gezeigt. Wir betrachten noch $(r_{n+1}, Ap_{n+1}) = (p_{n+1}, Ap_{n+1})$ wegen der Definition (B.3f) und nach (B.4d) für $i = n$ und $j = n + 1$, die wir soeben bewiesen haben. Es ist also auch (B.4e) für $j = n + 1$ gezeigt. Damit sind alle Gleichungen (B.4) durch Induktion bewiesen und wir kommen zu unserem eigentlichen Vorhaben, die Konvergenz der Methode zu beweisen. Nach (B.4b) sind die r_i eine Folge von orthogonalen Vektoren. In einem N dimensionalen Raum können davon aber nur N viele ungleich null sein. Haben wir ein $\tilde{r} = 0$ gefunden, dann bedeutet das aber nach der Definition (B.2), daß $A\tilde{\phi} = k$ gilt und $\tilde{\phi}$ somit die exakte Lösung ϕ darstellt.

Geometrisches Verhalten des Verfahrens

Wir wollen noch geometrisch verstehen, wie der Algorithmus die Lösung approximiert. Dazu stellen wir zunächst fest, daß das iterative Lösen von (B.1) der Minimierung der Funktion

$$F(\phi) = \frac{1}{2}(\phi, A\phi) - (\phi, k) \quad (\text{B.7})$$

gleichkommt. Wir definieren π_n als eine n dimensionale Hyperfläche durch den Startpunkt ϕ_0 aufgespannt durch die Vektoren p_0, p_1, \dots, p_{n-1} . Einen generischen Punkt auf dieser Hyperfläche schreiben wir als

$$\phi_n = \phi_0 + a_0 p_0 + \dots + a_{n-1} p_{n-1} = \phi_0 + Pa \quad (\text{B.8})$$

unter Einführung einer $N \times n$ Matrix P , deren Spalten aus den Vektoren p_0, \dots, p_{n-1} besteht. Wir suchen den Vektor a^* , der F auf der Hyperfläche π_n minimiert. Auf der Hyperfläche π_n gilt mit (B.8) in (B.7)

$$F(\phi_n) = F(\phi_0) + a^\dagger P^\dagger (A\phi_0 - k) + \frac{1}{2} a^\dagger P^\dagger A P a.$$

Somit ist a^* bestimmt durch die Gleichung

$$P^\dagger A P a^* = P^\dagger (k - A\phi_0) = P^\dagger r_0, \quad (\text{B.9})$$

was wir als $\sum_{j=0}^{n-1} (p_i, A p_j) a_j^* = (p_i, r_0)$ für $0 \leq i < n$ schreiben können. Mit der Gleichung (B.4d) gibt die Summe über den linken Term $(p_i, A p_i) a_i$. Die rechte Seite ergibt wegen (B.3e), (B.3f), (B.4b) und (B.4c) $|r_i|^2$, so daß a_i^* gerade durch Gleichung (B.3b) gegeben ist. Das bedeutet, daß der Algorithmus in jedem Schritt genau den Punkt ϕ_n erzeugt, der F auf der Hyperfläche π_n minimiert. Die Hyperfläche durch ϕ_0 wird durch die Vektoren p_0, \dots, p_{n-1} aufgespannt, und p_i ist nach Definition eine Linearkombination von $A^j r_0$ für $0 \leq j \leq i$. Somit ist also der von dem Algorithmus nach n Schritten gefundene Punkt ϕ_n zum Startwert ϕ_0 das Minimum von F auf der Hyperfläche, die von den Vektoren $r_0, A r_0, \dots, A^{n-1} r_0$ durch den Punkt ϕ_0 aufgespannt wird. In jedem Schritt nimmt $F(\phi_n)$ und damit auch der Fehler $|\phi - \phi_n|$ ab, so daß die Approximation ϕ_n in jedem Schritt besser wird. Das Residuum muß allerdings nicht notwendigerweise abnehmen. In [HS52] gibt Hestenes ein Beispiel für ein Residuum, das bei jeder Iteration größer wird. Leider sind in der Praxis die guten Konvergenzparameter $F(\phi_n)$ und $|\phi - \phi_n|$ nicht zugänglich, so daß wir gezwungen sind, das Residuum als Konvergenzparameter zu benutzen (siehe Abschnitt 4.3.3 für unsere Vorgehensweise in der Praxis).

Häufung der Eigenwerte

Wir nehmen nun an, daß die N Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ von A um m Werte $\mu_1 > \mu_2 > \dots > \mu_m > 0$ gehäuft sind, so daß für jedes λ_i ein μ_j existiert mit

$$\mu_j - \delta_j \leq \lambda_i \leq \mu_j + \delta_j \quad \text{für} \quad \frac{\delta_i}{\mu_i} \ll 1. \quad (\text{B.10})$$

Wir betrachten das Polynom

$$P(\lambda) = \prod_{j=1}^m \left(1 - \frac{\lambda}{\mu_j} \right) = 1 + \beta_0 \lambda + \beta_1 \lambda^2 + \dots + \beta_{m-1} \lambda^m \quad (\text{B.11})$$

und einen Punkt

$$\bar{\phi} = \phi_0 + \beta_0 r_0 + \beta_1 A^1 r_0 + \dots + \beta_{m-1} A^{m-1} r_0, \quad (\text{B.12})$$

dessen Residuum nach (B.2) mit (B.11) durch

$$\bar{r} = r_0 - \beta_0 A r_0 - \beta_1 A^2 r_0 - \dots - \beta_{m-1} A^m r_0 \quad (\text{B.13})$$

gegeben ist. Wir stellen r_0 durch (nicht normalisierte) Eigenvektoren ϵ_i von A dar, indem wir $r_0 = \sum_{i=1}^N \epsilon_i$ schreiben. Damit erhalten wir aus (B.13) für das Residuum

$$\bar{r} = P(A)r_0 = \sum_{i=1}^N P(\lambda_i)\epsilon_i. \quad (\text{B.14})$$

Die Minimierung der Fehlerfunktion (B.7) ist mit (B.2) äquivalent zur Minimierung von

$$\tilde{F}(\phi) = \frac{1}{2}(r, A^{-1}r) = F(\phi) + \frac{1}{2}(k, A^{-1}k), \quad (\text{B.15})$$

was für $\bar{\phi}$ mit dem Residuum (B.13)

$$\tilde{F}(\bar{\phi}) = \sum_{i=1}^N \frac{P(\lambda_i)^2}{\lambda_i} |\epsilon_i|^2 \quad (\text{B.16})$$

ergibt. Für jedes λ_i gibt es nach (B.10) ein μ_j mit $\sigma_j = |\lambda_i - \mu_j| \leq \delta_j$. Es sei $\sigma = \max \sigma_j$. Damit können wir mit (B.11)

$$P^2(\lambda_i) \leq \left(\frac{\sigma}{\mu_i}\right)^2 \prod_{j \neq i} \left(\frac{\mu_j - \lambda_i}{\mu_j}\right)^2 = \left(\frac{\sigma}{\mu_i}\right)^2 \tilde{P}_i$$

abschätzen und erhalten somit auch für (B.15) die Abschätzung

$$\tilde{F}(\phi) \leq \left(\frac{\sigma}{\mu_i}\right)^2 \sum_{i=1}^N \frac{P_i}{\lambda_i} |\epsilon_i|^2. \quad (\text{B.17})$$

Ein vom Algorithmus in m Schritten erzeugter Punkt ϕ_m der Hyperfläche π_m minimiert $\tilde{F}(\phi)$ auf π_m . Damit muß

$$\tilde{F}(\phi_m) \leq \tilde{F}(\bar{\phi}) \quad (\text{B.18})$$

gelten, da $\bar{\phi}$ nach (B.14) ebenfalls ein Punkt der Hyperfläche π_m ist. Je mehr gleiche Eigenwerte A hat, desto schneller konvergiert demnach das Verfahren, für m unabhängige Eigenwerte stellt ϕ_m sogar die exakte Lösung da.

Erweiterung der Methode

Falls A nicht hermitesch oder positiv definit ist, kann man die "Conjugate Gradient" Methode trotzdem benutzen, indem man A mit einer Matrix B multipliziert, so daß $B^\dagger A$ hermitesch und positiv definit ist. Dies funktioniert auf alle Fälle, denn die Wahl $B = A$ ist immer möglich. Gleichung (B.1) ist equivalent zu

$$B^\dagger A \phi = B^\dagger k. \quad (\text{B.19})$$

B.2 Ein verbessertes Conjugate Gradient Verfahren

Der Algorithmus hat dieselbe Form wie (B.3) mit dem Unterschied, daß überall k bzw. A durch $B^\dagger k$ bzw. $B^\dagger A$ ersetzt wird. Schreibt man dies wieder ausgedrückt in r und p , so wird daraus bzw. aus (B.3):

$$r_0 = k - A\phi_0 \quad (\text{B.20a})$$

$$p_0 = B^\dagger r_0 \quad (\text{B.20b})$$

$$a_i = \frac{|B^\dagger r_i|^2}{(p_i, B^\dagger A p_i)} \quad (\text{B.20c})$$

$$\phi_{i+1} = \phi_i + a_i p_i \quad (\text{B.20d})$$

$$r_{i+1} = r_i - a_i A p_i \quad (\text{B.20e})$$

$$b_i = \frac{|B^\dagger r_{i+1}|^2}{|B^\dagger r_i|^2} \quad (\text{B.20f})$$

$$p_{i+1} = B^\dagger r_{i+1} + b_i p_i. \quad (\text{B.20g})$$

Das iterative Lösen von (B.15) ist im Unterschied zu (B.3) für (B.1) durch die in jedem Schritt benötigte Multiplikation mit B^\dagger aufwendiger.

Weitere Verfahren

Die beiden anderen häufig benutzten iterativen Inversionsalgorithmen sind Erweiterungen der "Minimum Residuum" Methode [Oya86] und des "Gauss-Seidel" Algorithmus [WP81]. Die Minimum Residuum Methode minimiert das Residuum in jedem Schritt, so daß in diesem Fall das Residuum ein guter Konvergenzparameter ist. Außerdem erfordert sie nicht, daß A hermitesch und positiv ist, wodurch man pro Iteration die Multiplikation mit B^\dagger im Vergleich zu Conjugate Gradient Methode einspart. Für sehr kleine Quarkmassen konvergiert diese Methode jedoch nicht, weil M dann Eigenwerte mit einem negativen Realteil haben kann [Hoc90]. Gauss-Seidel ist ein typisches Iterationsverfahren und wird meist durch einen Relaxationsparameter zur schnelleren Konvergenz optimiert. Sowohl Minimal Residuum als auch Gauss-Seidel liefern für kleine Quarkmassen schlechte Ergebnisse und sind zudem auch nicht wesentlich effizienter als die Conjugate Gradient Methode [RDL87]. Insgesamt ist die Conjugate Gradient Methode für einen großen Parameterbereich die robusteste, was auch durch neuere Untersuchungen an extrem optimierten Algorithmen (der genannten Grundtypen) belegt wird [Fro96].

B.2 Ein verbessertes Conjugate Gradient Verfahren

Die Konvergenzgeschwindigkeit des Conjugate Gradient Algorithmus kann signifikant erhöht werden, indem man A bzw. in unserem Fall M geschickt präpariert ("preconditioned"), bevor man den Invertieralgorithmus anwendet. Wir wollen insbesondere ausnutzen, daß M dünn besetzt ist und daß der Algorithmus nach (B.17) schneller konvergiert, wenn die Eigenwerte der zu invertierenden Matrix gehäuft sind. Statt $Mx = b$ zu lösen, lösen wir $(QMP)P^{-1}x = Qb$, wobei Q und P Matrizen sein sollen, die leicht bzw. exakt zu invertieren sind. Wir wollen damit QMP der Einheitsmatrix ähnlich machen und nutzen aus, daß der Wechselwirkungsterm in (3.49) nur gerade mit ungeraden Gitterpunkten (bzw. benachbarte)

verbindet. Wir wollen diese Eigenschaft nutzen und ordnen den Raum in gerade und ungerade Hälften bezüglich der Parität der Gitterpunkte¹, indem wir für M

$$M = \begin{pmatrix} 1 & -kM_{gu} \\ -kM_{ug} & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.21})$$

schreiben, wobei

$$M_{gu} = -k^{-1}M_{nm}$$

mit n gerade und m ungerade bzw.

$$M_{ug} = -k^{-1}M_{nm}$$

mit n ungerade und m gerade ist [DeG88], [G⁺89]. Wir definieren die Matrizen

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -kM_{ug} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad U = \begin{pmatrix} 1 & -kM_{gu} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.22})$$

Ihre Inversen sind leicht zu berechnen und ergeben

$$L^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ kM_{ug} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad U^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & kM_{gu} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.23})$$

Damit erhalten wir

$$U^{-1}ML^{-1} = \begin{pmatrix} 1 - k^2M_{gu}M_{ug} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.24})$$

so daß wir

$$(U^{-1}ML^{-1})Lx = U^{-1}b$$

lösen müssen. Wir multiplizieren dies gemäß (B.15) mit der hermitesch konjugierten Matrix $(U^{-1}ML^{-1})^\dagger$, um die Conjugate Gradient Methode nach (B.20) anwenden zu können und setzen

$$\begin{aligned} M' &= U^{-1}ML^{-1} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ M'^\dagger &= L^{-1\dagger}M^\dagger U^{-1\dagger} = \begin{pmatrix} A^\dagger & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ x' &= Lx \\ b' &= U^{-1}b \\ A &= 1 - k^2M_{ug}M_{gu}, \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

so daß wir letztendlich

$$M'^\dagger M'x' = M'^\dagger b' \quad (\text{B.26})$$

¹Die Parität eines Gitterpunkts $x = na$ mit $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$ bestimmt sich aus der Summe seiner Komponenten $n_1 + n_2 + n_3 + n_4$. Ist diese gerade, so hat der Punkt gerade Parität (g), andernfalls ungerade (u).

nach der Methode (B.20) lösen müssen. Um zu sehen, wie die Methode auf die Matrix A wirkt, zerlegen wir den Startvektor x_0 und den Quellvektor b entsprechend zu M in geraden und ungeraden Anteil

$$x_0 = \begin{pmatrix} x_0^{(g)} \\ x_0^{(u)} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b^{(g)} \\ b^{(u)} \end{pmatrix} \quad (\text{B.27})$$

und erhalten für x'_0 und b'

$$\begin{aligned} x'_0 &= Lx_0 = \begin{pmatrix} x_0^{(g)} \\ x_0^{(u)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_0^{(g)} \\ x_0^{(u)} - kM_{ug}x_0^{(g)} \end{pmatrix} \\ b' &= U^{-1}b = \begin{pmatrix} b^{(g)} \\ b^{(u)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b^{(g)} + kM_{gu}b^{(u)} \\ b^{(u)} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Wir schreiben (B.26) explizit in der gewählten (Schachbrett-) Basis aus und erhalten

$$\begin{pmatrix} A^\dagger A & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'^{(g)} \\ x'^{(u)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^\dagger b'^{(g)} \\ b'^{(u)} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.28})$$

so daß wir in dieser Basis für die ungeraden Gitterpunkte die Lösung angeben können. Wir wenden damit den Algorithmus (B.20) nur auf die geraden Gitterpunkte zum Startwert $b'^{(g)}$ an. Nach n Iterationen erhalten wir damit für die Approximation

$$x_n = L^{-1}x'_n = \begin{pmatrix} x_n^{(g)} \\ kM_{ug}x_n^{(g)} + b'^{(u)} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.29})$$

Der Betrag des Residuums ist allein gegeben durch das Residuum für die geraden Punkte. Auf diese Weise erreichen wir also, daß wir nur noch eine Matrix der Dimension $N/2$ zu invertieren brauchen, was sich erheblich in der Konvergenzgeschwindigkeit bemerkbar macht.

Literaturverzeichnis

- [Adl81] S. L. Adler. Overrelaxation method for the Monte Carlo evaluation of the partition function for multiquadratic actions. *Phys. Rev.*, 23D:2901, 1981. 50, 51
- [Adl88] S. L. Adler. Overrelaxation algorithms for lattice field theories. *Phys. Rev.*, 37D:458, 1988. 51
- [Adl89] S. L. Adler. Algorithms for pure gauge theory. *Nucl. Phys.*, 9B (Proc. Suppl.):437, 1989. 50
- [AS72] M. Abramowitz und I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, 10. Auflage, 1972. 15, 43, 44
- [B⁺] C. Bernard et al. MIMD Lattice Computation (MILC) Collaboration: A DOE grand challenge application group. <http://physics.indiana.edu/~sg/milc.html>. 66
- [B⁺88] P. Bacilieri et al. The hadronic mass spectrum in quenched lattice QCD: Results at $\beta = 5.7$ und $\beta = 6.0$. *Physics Letters*, 214:115, 1988. 88
- [B⁺89] P. Bacilieri et al. The hadronic mass spectrum in quenched lattice QCD: $\beta = 5.7$. *Nucl. Phys.*, 317B:510, 1989. 11, 88
- [Bat85] G. G. Batrouni. *Phys. Rev.*, 32D:2736, 1985. 50
- [BGN94] M. Burkardt, J. M. Grandy, und J. W. Negele. Calculation and interpretation of hadron correlation functions in lattice QCD. *hep-lat/9406009*, 1994. 95
- [BW87] F. R. Brown und T. J. Woch. Overrelaxed heat bath and Metropolis algorithms for accelerating pure gauge Monte Carlo calculations. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2394, 1987. 51, 52
- [Cas74] W. Caswell. Asymptotic behaviour of non-abelian gauge theories to two-loop orders. *Phys. Rev. Lett.*, 33:244, 1974. 64
- [CGHN93a] M.-C. Chu, J. M. Grandy, S. Huang, und J. W. Negele. Correlation functions of hadron currents in the QCD vacuum calculated in lattice QCD. *Phys. Rev. Lett.*, 48:3340, 1993. 100, 105

- [CGHN93b] M.-C. Chu, J. M. Grandy, S. Huang, und J. W. Negele. Lattice calculation of point-to-point hadron current correlation functions in the QCD vacuum. *Phys. Rev. Lett.*, 70:255, 1993. [8](#), [11](#), [89](#)
- [CJR79] M. Creutz, L. Jacobs, und C. Rebbi. *Phys. Rev. Lett.*, 42:1390, 1979. [40](#)
- [CL84] T.-P. Cheng und L.-F. Li. *Gauge Theory of Elementary Particles Physics*. Oxford University Press, 1. Auflage, 1984. [4](#)
- [CM82a] N. Cabibbo und E. Marinari. A new method for updating SU(N) matrices in computer simulations of gauge theories. *Physics Letters*, 119B:2308, 1982. [47](#), [49](#)
- [CM82b] M. Creutz und K. J. M. Moriarty. *Phys. Rev.*, 26D:2166, 1982. [81](#)
- [Cre80] M. Creutz. Monte Carlo study of quantized SU(2) gauge theory. *Phys. Rev.*, 21D:2308, 1980. [42](#)
- [Cre83] M. Creutz. *Quarks, Gluons and Lattices*. Cambridge University Press, 1. Auflage, 1983. [38](#)
- [Cre87] M. Creutz. Overrelaxation and Monte Carlo simulation. *Phys. Rev.*, 36D:515, 1987. [52](#)
- [Cre97] M. Creutz. Phase transitions. *hep-lat-9708021*, 1997. [60](#)
- [D⁺92] D. Daniel et al. Phenomenology with Wilson fermions using smeared sources. *hep-lat/9204011*, 1992. [11](#)
- [DBF90] H.-Q. Ding, C. F. Baillie, und G. C. Fox. *Phys. Rev.*, 22D:2912, 1990. [81](#)
- [DD94] H. M. Deitel und P. J. Deitel. *C: How to Program*. Prentice Hall, 2. Auflage, 1994. [66](#)
- [DeG88] T. A. DeGrand. A conditioning technique for matrix inversion for Wilson fermions. *Comp. Phys. Commun.*, 52:161, 1988. [57](#), [126](#)
- [Deg89] T. Degrand. Techniques and results for lattice QCD spectroscopy. *Quantum Fields on the Computer*, M. Creutz, Seite 1, 1989. [3](#)
- [DeV94] P. L. DeVries. *A First Course in Computational Physics*. John Wiley and Sons, Inc., 1. Auflage, 1994. [50](#)
- [Dur80] B. Durhuus. On the structure of gauge invariant classical observables in lattice gauge theories. *Lett. Math. Phys.*, 4:515, 1980. [54](#)
- [Efr79] B. Efron. Computers and the theory of statistics: Thinking the unthinkable. *Siam Rev.*, 21:460, 1979. [88](#)

- [Eli75] S. Elitzur. Impossibility of spontaneously breaking local symmetries. *Phys. Rev.*, D12:3978, 1975. 35
- [Fey48] R. P. Feynman. *Rev. Mod. Phys.*, 20:367, 1948. 112
- [FGM72] H. Fritzsch und M. Gell-Mann. *Proc. XVI Int. Conf. on High Energie Physics*, 2:135, Chicago-Batavia 1972. 4
- [FH65] R. P. Feynman und A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill Book Company, 1. Auflage, 1965. 112
- [FM87] K. Fredenhagen und M. Marcu. A modified heat bath method suitable for Monte Carlo simulations on vector and parallel processors. *Physics Letters*, 193B:486, 1987. 46
- [Fro96] A. Frommer. *hep-lat/9608074*, 1996. 125
- [G⁺89] R. Gupta et al. QCD with dynamical Wilson fermions. *Phys. Rev.*, 40D:2072, 1989. 126
- [GHZM83] F. Gutbrod, P. Hasenfratz, Z.Kunszt, und I. Montvay. String tension in SU(3) gauge theory on a 16^4 lattice. *CERN*, Ref. Th. 3591, 1983. 81, 89
- [GKP96] G. Geist, J. Kohl, und P. Papadopoulos. PVM and MPI: A comparison of features. <http://citeseer.nj.nec.com/geist96pvm.html>, 1996. 67
- [GMN64] M. Gell-Mann und Y. Ne'eman. *The Eightfold Way*. Benjamin, 1. Auflage, 1964. 4
- [GR81] S. Gasiorowicz und J. L. Rosner. *Am. J. Phys.*, 49:954, 1981. 56
- [GR93] W. Greiner und J. Reinhardt. *Feldquantisierung*, Band 7A von *Theoretische Physik*. Verlag Harri Deutsch, 1. Auflage, 1993. 13, 15, 32
- [GR95] W. Greiner und J. Reinhardt. *Quantenelektrodynamik*, Band 7 von *Theoretische Physik*. Verlag Harri Deutsch, 2. Auflage, 1995. 12, 118
- [Gra92] J. M. Grandy. *Investigation of Hadronic Structure by Solving QCD on a Lattice*. Doktorarbeit, Massachusetts Institute of Technology, 1992. 95
- [Gro75] D. J. Gross. *Lectures at the Les Houches Summer School (North Holland P. C.)*, 1975. 63
- [GS86] J. Goodman und A. D. Sokal. *Phys. Rev. Lett.*, 56:1015, 1986. 50
- [GW73] D. J. Gross und F. Wilczek. *Phys. Rev. Lett.*, 30:1343, 1973. 4, 64
- [Hes80] M. R. Hestenes. *Conjugate Direction Method in Optimization*. Springer, 1. Auflage, 1980. 120

- [Hoc90] Hockney. *Nucl. Phys.*, 17 B (Proc. Suppl.):301, 1990. [125](#)
- [HS52] M. R. Hestenes und E. Stiefel. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 29:409, 1952. [120](#), [123](#)
- [HZ98] D. Haidt und P. M. Zerwas. Review of particle physics. *The European Physical Journal C*, 3, 1998. [107](#)
- [IZ80] C. Itzykson und J.-B. Zuber. *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill, 1. Auflage, 1980. [119](#)
- [Jon74] D.R.T Jones. Two-loop diagrams in Yang-Mills theory. *Nucl. Phys.*, 251 B:531, 1974. [64](#)
- [Koc97] V. Koch. Aspects on chiral symmetry. *LBNL-39463 UC-413*, 1997. [5](#)
- [Kol92] Taro Kollaboration. Autocorrelation in updating pure SU(3) lattice gauge theory by the use of overrelaxed algorithms. *hep-lat/9212009*, 1992. [77](#)
- [Kol93] Taro Kollaboration. Systematic study of autocorrelation time in pure SU(3) lattice gauge theory. *hep-lat/9312026*, 1993. [77](#)
- [KP85] A. D. Kennedy und B. J. Pendleton. Improved heat bath method for Monte Carlo calculations in lattice gauge theories. *Physics Letters*, 156B:393, 1985. [45](#), [49](#)
- [Kre79] E. Kreyszig. *Statistische Methoden und ihre Anwendungen*. Vandenhoeck und Ruprecht, 7. Auflage, 1979. [36](#)
- [KS81] L.H. Karsten und J. Smith. *Nucl. Phys.*, 183:103, 1981. [29](#)
- [MM97] I. Montvay und G. Münster. *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, 1. Auflage, 1997. [28](#), [29](#), [34](#), [39](#), [40](#), [41](#), [59](#), [60](#), [87](#), [112](#)
- [MRR⁺53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, und E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21:1087, 1953. [39](#)
- [Mut98] T. Muta. *Foundation of Quantum Chromodynamics: An Introduction to Perturbative Methods in Gauge Theories*, Band 57 von *World Scientific Lecture Notes in Physics*. World Scientific, 2. Auflage, 1998. [4](#), [5](#), [6](#), [9](#)
- [Neg90] J. Negele. QCD and hadrons on a lattice. *Hadrons and Hadronic Matter (NATO Advanced Study Series)*, B228:369, 1990. [54](#), [81](#)
- [NN81] H. B. Nielsen und M. Ninomiya. Absence of neutrinos on a lattice. *Nucl. Phys.*, 185:20, 1981. [27](#)

- [NO88] J. W. Negele und H. Orland. *Quantum Many-Particle Systems*, Band 68 von *Frontiers in Physics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1. Auflage, 1988. [36](#), [37](#), [117](#), [118](#)
- [Nol94] W. Nolting. *Quantenmechanik Teil 1: Grundlagen*, Band 5 von *Grundkurs Theoretische Physik*. Verlag Zimmermann-Neufang, 2. Auflage, 1994. [112](#), [116](#)
- [Nol96] W. Nolting. *Statistische Physik*, Band 6 von *Grundkurs Theoretische Physik*. Verlag Zimmermann-Neufang, 2. Auflage, 1996. [114](#), [115](#)
- [Oya86] Y. Oyanagi. An incomplete LDU decomposition of lattice fermions and its application to conjugate residual methods. *Comp. Phys. Commun.*, 42:333, 1986. [125](#)
- [Pie81] E. Pietarinen. String tension in SU(3) lattice gauge theory. *Nucl. Phys.*, B190:349, 1981. [47](#)
- [Pol73] H. D. Politzer. *Phys. Rev. Lett.*, 30:1346, 1973. [4](#), [64](#)
- [PTVF93] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, und B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2. Auflage, 1993. [41](#), [120](#)
- [RDL87] P. Rossi, C. T. H. Davies, und G. P. Lepage. A comparison of a variety of matrix inversion algorithms for Wilson fermions on the lattice. *Nucl. Phys.*, 297B:287, 1987. [125](#)
- [Reg59] T. Regge. *Nuovo Cimento*, 14:951, 1959. [56](#)
- [Rot98] H. J. Rothe. *Lattice Gauge Theories: An Introduction*, Band 59 von *World Scientific Lecture Notes in Physics*. World Scientific, 2. Auflage, 1998. [24](#), [28](#), [38](#), [54](#), [74](#), [88](#), [92](#), [95](#)
- [Ryd97] L. H. Ryder. *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, 2. Auflage, 1997. [6](#), [7](#), [116](#), [119](#)
- [SH82] F. Stummel und K. Hainer. *Praktische Mathematik*. Teubner Verlag, 2. Auflage, 1982. [35](#)
- [Shu88] E. V. Shuryak. *The QCD Vacuum, Hadrons and the Superdense Matter*, Band 8 von *World Scientific Lecture Notes in Physics*. World Scientific, 1. Auflage, 1988. [9](#)
- [Shu93] E. V. Shuryak. Correlation functions in the QCD vacuum. *Rev. Mod. Phys.*, 65:1, 1993. [3](#), [8](#), [103](#), [105](#), [107](#)
- [SR96] N. Sadooghi und H. J. Rothe. *hep-lat/9610001*, 1996. [26](#)
- [Thi99] J. M. Thijssen. *Computational Physics*. Cambridge University Press, 1. Auflage, 1999. [39](#), [41](#), [69](#)

- [Tou89] D. Toussiant. Error analysis of simulation results: A sample problem. *Proceedings of the 1989 Theoretical Advanced Study Institute in Elementary Particle Physics*, Seite 121, 1989. [84](#)
- [Wag98] M. Wagner. *Gruppentheoretische Methoden in der Physik*. Vieweg Verlag, 1. Auflage, 1998. [42](#)
- [Wie24] N. Wiener. *Proc. Lond. Math. Soc.*, 22:454, 1924. [114](#)
- [Wie32] N. Wiener. *J. Math. Phys.*, 2:131, 1932. [114](#)
- [Wil75] W. G. Wilson. Quarks and strings on a lattice. *New Phenomena in Subnuclear Physics*, ed. A. Zichini (Plenum Press, New York), Part A:69, 1975. [29](#)
- [WP81] D. Weingarten und D. N. Petcher. *Phys. Rev. Lett.*, 333:99B, 1981. [125](#)
- [YM54] C. N. Yang und R. L. Mills. *Phys. Rev.*, 96:191, 1954. [4](#)
- [Ynd92] F. J. Ynduráin. *The Theory of Quark and Gluon Interactions*. Springer Verlag, 2. Auflage, 1992. [5](#)
- [Yos98] T. Yoshie. Light hadron spectroscopy. *Nucl. Phys.*, 63B (Proc. Suppl.):3, 1998. [3](#)

Danksagung

Ich bedanke mich herzlich bei Herrn Professor Dr. Walter Greiner für die Aufnahme in das Institut für Theoretische Physik. Die zahlreichen fachlichen und persönlichen Gespräche der letzten zwei Jahre haben meine Entwicklung entscheidend gefördert.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Privatdozent Dr. Stefan Schramm für die Betreuung meiner Arbeit.

Meinen Zimmergenossen und Freunden Thomas Bürvenich und Kristof Balazs danke ich für viele interessante Diskussionen über physikalische und nichtphysikalische Themen.

Meinen Eltern bin ich herzlich verbunden für ihre vielfältigen Ratschläge und die jahrelange finanzielle Unterstützung, ohne die mein Studium niemals so abwechslungsreich und interessant hätte verlaufen können.

Meinen Freunden und insbesondere meiner Freundin danke ich für die psychologische Unterstützung in schwierigen Phasen der Arbeit und ihr Verständnis für meinen Zeitmangel der letzten Monate.

Zu guter Letzt möchte ich noch meinen ehemaligen Physiklehrer Herrn Dr. Dieter Vorländer erwähnen, der zu Gymnasialzeiten mein Interesse an der Physik geweckt hat und an dessen lehrreichen Unterricht ich manche Male während der Ausarbeitung dieser Arbeit erinnert worden bin.