Thermodynamik der SU(3) Gittereichtheorie mit verbesserten Wirkungen

Diplomarbeit (*revidiert*)

Prof. Dr. Frithjof Karsch
Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Burkhard Beinlich

20. Juni 1996

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Einleitung

Die Teilchenphysik befaßt sich mit der Suche nach den fundamentalen Bestandteilen der Materie und ihren Wechselwirkungen. Die Antwort auf die Frage, welche Teilchen als fundamental betrachtet werden können, war in den letzten hundert Jahren einem ständigen Wechsel unterworfen, welcher mit der Entwicklung immer besserer und genauerer experimenteller Methoden einherging.

Nach heutigem Wissen, kann man sämtliche Dynamik in der Physik auf vier fundamentale Wechselwirkungen, die Gravitation, den Elektromagnetismus, die schwache und die starke Wechselwirkung, zurückführen. Das *Standard Modell* beschreibt die Phänomene der Teilchenphysik durch Eigenschaften einer verhältnismäßig geringen Zahl von Teilchen. Die Materieteilchen sind *Leptonen* und *Quarks*, welche Spin-$\frac{1}{2}$ Fermionen sind. Darüber hinaus gibt es einen Satz von Spin-1 Bosonen, den sogenannten *Eichbosonen*, welche in der Theorie als Träger der Wechselwirkungskräfte dienen.
Die Stärke des Standard Modells beruht auf der enorm präzisen Vorhersage von störungstheoretischen Berechnungen im elektro-schwachen Bereich für die experimentellen Befunde aus Streuexperimenten, die in den letzten Jahrzehnten in immer höheren Energiebereichen und mit wachsender Genauigkeit betrieben werden.

Diese Arbeit bezieht sich auf den Bereich der starken Wechselwirkung, die – wie auch die elektro-schwache Wechselwirkung – im Rahmen einer quantisierten Eichfeldtheorie formuliert ist. Die experimentelle Evidenz für die der starken Wechselwirkung zugrunde liegenden Theorie – der *Quanten Chromo Dynamik* (QCD) – ist jedoch auf einen kleinen Bereich, den der tief inelastischen Streuung, beschränkt. Dies ist darin begründet, daß die Anwendung der Störungstheorie auf die QCD nur für große Impulsüberträge möglich ist. Dennoch erfüllt die QCD die von Richard Feynman formulierten Kriterien einer "guten Theorie", sie ist einfach und nicht offensichtlich falsch.

Quarks sind die der starken Wechselwirkung unterliegenden Teilchen. Sie treten in sechs verschiedenen *Geschmäckern* auf, welche sich durch Masse und Ladung unterscheiden. Darüber hinaus besitzen Quarks noch einen inneren Freiheitsgrad, der als

Farbe bezeichnet wird. Ein Quark wird also durch ein Trippel aus den drei Farbkomponenten des Quantenfeldes beschrieben. Die freie Theorie besitzt nun eine Invarianz unter globalen SU(3) Transformationen dieser Farbkomponenten. Das Prinzip der *lokalen Eichinvarianz* führt zu der Einführung der bosonischen Eichfelder, welche entsprechend der acht Generatoren der Eichgruppe SU(3) in acht verschiedenen Sorten vorkommen. Die Wechselwirkung zwischen den Quarks findet durch Austausch der Quanten dieses chromodynamischen Feldes, den sogenannten *Gluonen*, statt. In dieser Arbeit soll die QCD in der sogenannten *Valenzquarkapproximation* betrachtet werden, in der der Einfluß dynamischer Fermionen vernachläßigt wird. In der zugrundeliegenden *SU(3) Yang-Mills Theorie* findet dabei nur der gluonische Anteil an der QCD Lagrange-Dichte Berücksichtigung.

Die begrenzte Anwendbarkeit der Störungstheorie auf die QCD ist eng verknüpft mit der Tatsache, daß Quarks in den Experimenten nie als freie Teilchen beobachtet werden, sondern stets in den farbneutralen, gebundenen Zuständen der hadronischen Materie, also als Baryonen und Mesonen. Dies ist darin begründet, daß Quarks sich bei kleinen Abständen bzw. großen Impulsüberträgen *asymptotisch frei* verhalten, d. h. daß die starke Kopplungskonstante α_s klein wird, wogegen die Stärke der Wechselwirkung bei großen Abständen so ansteigt, daß ein störungstheoretischer Zugang für Distanzen größer als 1 fm nicht mehr sinnvoll ist. Die Seperation von Quarks erfordert nach der *Confinement-Hypothese* eine unendliche Menge Energie, da das Potential zwischen zwei Quarks für große Abstände linear ansteigt.
Eine weitere nicht streng bewiesene Hypothese besagt, daß ein thermodynamisches System von Quarks und Gluonen bei niedrigen Temperaturen die oben beschriebene Confinement-Eigenschaft besitzt, also ein Hadron-Gas bildet, daß es aber bei hohen Temperaturen einen *Deconfiment-Phasenübergang* zu einem *Quark-Gluon-Plasma* gibt, in dem die Quarks auch als freie Zustände auftreten. Da das System bei hohen Temperaturen von Moden großer Impulse dominiert wird, erwartet man aufgrund der asymptotischen Freiheit der Theorie, daß das thermodynamische Verhalten des Systems bei Temperaturen weit oberhalb des Phasenübergangs einem idealen Gas aus nicht wechselwirkenden Quarks und Gluonen nahe kommt.

Um ein Verständnis dieser fundamentalen Eigenschaften der starken Wechselwirkung zu erlangen, ist ein nicht-störungstheoretischer Zugang zur QCD notwendig. Eine solche Methode ist in den siebziger Jahren von Kenneth Wilson entwickelt worden [3], sie beruht auf der Feynman'schen Pfadintegralformulierung. In der euklidischen Pfadintegralformulierung kann das Pfadintegral als Zustandssumme eines thermodynamischen Systems interpretiert werden, wobei die Temperatur der inversen zeitlichen Ausdehnung des Systems entspricht. Die Einführung eines diskreten Raum-Zeit-Gitters führt dabei zu einer Regularisierung des überabzählbar-unendlich dimensionalen Pfadintegrals zu einem endlich dimensionalen Integral, welches numerisch berechnet werden kann.
Dieser Zugang, welcher als *Gittereichtheorie* bezeichnet wird, erlaubt die qualitati-

ve und quantitative Untersuchung der Temperaturabhängigkeit thermodynamischer Observablen, wie dem Druck und der Energiedichte, sowie die Bestimmung der kritischen Temperatur an dem der Deconfiment-Phasenübergang geschieht. Thermodynamische Observable sind in der Gitterformulierung durch Erwartungswerte von Gitteroperatoren bezüglich der Boltzmann-Verteilung e^{-S} gegeben, wobei S die *Wirkung* des Systems ist.

Die Gitterregularisierung der Theorie führt auf der anderen Seite aber zu systematischen Fehlern, die auf den endlichen Gitterabstand a (*Cut-off*) zurückgehen. In der ursprünglich von Wilson vorgeschlagenen Formulierung der SU(3) Gittereichtheorie zeigen sich Abweichungen zur Kontinuums-Formulierung in $\mathcal{O}(a^2)$ des Cut-offs. Da der endliche Cut-off einer Unterdrückung von Moden hoher Impulse entspricht (*ultraviolett Cut-off*), wird das Hochtemperaturverhalten thermodynamischer Observablen besonders stark durch ultraviolett Cut-off-Effekte beeinflußt.
Gitter-störungstheoretische Rechnungen zeigen, daß die Abweichungen vom Verhalten des idealen Gases $\mathcal{O}((aT)^2)$ sind. In numerischen Simulationen mit der standard Wilson-Formulierung auf Gittern mit zeitlicher Ausdehnung $N_\tau = 1/aT$ zeigt sich ebenfalls der Einfluß von Cut-off-Effekten [4]. Eine Extrapolation zum Kontinuumsverhalten ist durch Simulation auf Gittern mit verschiedener zeitlicher Ausdehnung N_τ möglich. Erst bei Gittern mit $N_\tau \geq 8$ sind die Abweichungen von der Kontinuumsextrapolation auf wenige Prozent reduziert.
Da es auf der anderen Seite notwendig ist, das Verhältnis von räumlicher und zeitlicher Ausdehnung des Gitters (N_σ/N_τ) möglichst groß zu wählen, um die Auswirkungen durch das endliche Volumen möglichst gering zu halten, ist man bei Simulationen auf Gittern mit großer zeitlicher Ausdehnung mit einem enormen numerischen Aufwand konfrontiert. Es stellt sich also die Aufgabe, die ultraviolett Cut-off-Effekte zu reduzieren, ohne die zeitliche Ausdehnung des Gitters zu vergrößern.

Eine Möglichkeit dazu ergibt sich daraus, daß die Diskretisierung einer Kontinuumstheorie nicht eindeutig vorgeschrieben ist. Es gibt viele Gitterformulierungen, die in dem Sinne äquivalent sind, daß die Wirkung im *naiven Kontinuumslimes* ($a \to 0$) die Kontinuums-Lagrangedichte reproduziert. Diese Formulierungsfreiheit der Gitter-Wirkung kann dazu genutzt werden, die beschriebenen endlichen Cut-off-Effekte von vornherein zu reduzieren. In den vergangenen Jahren gab es verschiedene Ansätze dazu, die unter den Bezeichnungen *Symanzik verbesserte Wirkungen* [5], Renormierungsgruppen verbesserte Wirkungen [6] und perfekte Wirkungen [7, 8] bekannt sind.

Im Zentrum dieser Arbeit stehen, die *verbesserte Wirkungen*, die auf Symanzik zurückgehen, und ihr Einfluß auf die endlichen Cut-off-Effekte im Verhalten thermodynamischer Observablen. Teile dieser Arbeit wurden bereits in [9] veröffentlicht. Verbesserte Wirkungen sind so konstruiert, daß die Abweichungen von der Kontinuumsformulierung erst bei einer höheren Ordnung des Cut-offs beginnen. Demzufolge ist zu erwarten, daß verbesserte Wirkungen auch zu einem verbesserten Ultraviolett-Verhalten thermodynamischer Größen führen und die endlichen Cut-off-Effekte reduzieren.

Dazu soll zunächst im ersten Kapitel in die Systematik der Gitterregularisierung und die Konstruktion verbesserter Wirkungen am Beispiel der freien Skalaren Feldtheorie eingeführt werden.

Im zweiten Kapitel folgt eine Beschreibung der QCD in der Kontinuumsformulierung und standard Wilson-Formulierung auf dem Gitter. Daran schließt sich ein Abschnitt über die QCD Thermodynamik und die Formulierung thermodynamischer Observablen als Gitteroperatoren an.

Im dritten Kapitel wird das Konstruktionsschema verbesserter SU(N) Wirkungen dargestellt. Es werden dabei zwei $\mathcal{O}(a^4)$ und eine $\mathcal{O}(a^6)$ verbesserte Wirkungen formuliert, die in den folgenden Kapiteln studiert werden.

Das vierte Kapitel befaßt sich mit der Frage, inwieweit verbesserte Wirkungen zu einer Reduktion der Korrekturen zum Idealen-Gas-Limes im Hochtemperatur-Limes führen. Dazu wird eine störungstheoretische Entwicklung der Energiedichte in niedrigster Ordnung der Eichkopplung g durchgeführt. Die ausführlichen Ergebnisse dieser Berechnungen sind aus Gründen der Übersichtlichkeit in Anhang B aufgelistet.

Im fünften Kapitel werden die Resultate der Monte-Carlo-Simulationen mit verbesserten Wirkungen dargestellt. Zunächst wird das Prinzip der Monte-Carlo-Integration eingeführt. Für eine $\mathcal{O}(a^4)$ verbesserte SU(3) Wirkung wurde eine vollständige Analyse der Temperaturabhängigkeit des Druckes durchgeführt. Tabellen der numerischen Resultate der berechneten Operatoren sind im Anhang A zusammengefaßt. Am Ende dieses Kapitels werden die verwendeten Algorithmen sowie die Architektur des Quadrics-Parallelrechners erläutert.

Kapitel 1

Skalare Feldtheorie

1.1 Kontinuumstheorie und Gitterregularisierung

Die einfachste Quantenfeldtheorie ist die des freien skalaren Feldes. Sie beschreibt nicht-wechselwirkende Bose-Teilchen und stellt aufgrund ihrer Einfachheit ein gutes Schulbeispiel dar, anhand dessen die konzeptionellen Ideen dieser Arbeit eingeführt werden sollen.

Kontinuumstheorie.
Die klassische Bewegungsgleichung, für ein freies skalares Feld ϕ mit Masse M ist die *Klein-Gordon-Gleichung*

$$(\Box + M^2)\phi(x) = 0 \quad , \tag{1.1}$$

dabei ist $\Box$ der d'Alembert Operator und x ein Vierervektor mit Koordinaten x_μ. Diese Gleichung ergibt sich nach dem Variationsprinzip, $\delta S = 0$, mit Wirkung

$$S = \int d^4x \ \mathcal{L}(x) \tag{1.2}$$

durch Funktionalableitung der *Lagrangedichte*

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial^\mu\phi\partial_\mu\phi - \frac{1}{2}M^2\phi^2 \quad . \tag{1.3}$$

In der *Quantenfeldtheorie* werden das klassische Feld $\phi(x)$ und der kanonisch konjugierte Impuls $\pi(x) \equiv \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}}(x)$ zu Operatoren $\Phi(x)$ und $\Pi(x)$, welche die *kanonischen Vertauschungsrelationen* erfüllen.

Sämtliche Information über das System ist in den *Greenschen Funktionen* enthalten, diese sind Vakuumerwartungswerte zeitgeordneter Produkte von Operatoren $\Phi(x)$

$$G(x, y, \ldots) = \langle 0|T[\Phi(x), \Phi(y), \ldots]|0\rangle \quad . \tag{1.4}$$

Die *Pfadintegralformulierung* der Quantenfeldtheorie erlaubt die Quantisierung der Felder ohne die Einführung von Operatoren, so sind die Greenschen Funktionen gegeben durch

$$G(x, y, \ldots) = \frac{\int \mathcal{D}\phi\ \phi(x)\phi(y)\cdots\ e^{iS[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi\ e^{iS[\phi]}} \quad , \tag{1.5}$$

wobei $\int \mathcal{D}\phi$ zunächst rein formal† für die Integration über alle Feldkonfigurationen steht, was dazu führt, daß auch Quantenfluktuationen, welche keine Lösungen der klassischen Feldgleichungen sind, Berücksichtigung finden.

Euklidische Pfadintegralformulierung.
Als Startpunkt für eine jede Feldtheorie auf dem Gitter dient die *euklidische Pfadintegralformulierung.*
Dabei setzt man die Greenschen Funktionen zu imaginären Zeiten fort, indem man die Substitution $x_0 \to -ix_4$ mit $x_4 \in \mathcal{R}$ durchführt. Dadurch sind die Felder $\phi(x)$ nicht mehr auf dem Minkowsky-Raum, sondern auf einem vierdimensionalen Raum mit euklidischer Metrik definiert. Weiter geht die Wirkung S in die *euklidische Wirkung,*

$$S_E[\phi] = \frac{1}{2}\int d^4x\ \phi(x)(-\Box_E + M^2)\phi(x) \quad , \tag{1.6}$$

über, wobei $\Box_E$ den vierdimensionalen Laplace Operator

$$\Box_E = \sum_{j=1}^{4} \partial_j \partial_j \tag{1.7}$$

bezeichnet.
Die Greenschen Funktionen erhalten die Gestalt

$$\langle \phi(x)\phi(y)\cdots\rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi\ \phi(x)\phi(y)\cdots\ e^{-S_E[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi\ e^{-S_E[\phi]}} \quad , \tag{1.8}$$

sie haben also die Form einer *Korrelationsfunktion eines statistisch mechanischen Systems mit Zustandssumme*††

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\phi\ e^{-S[\phi]} \quad . \tag{1.9}$$

Der Vorteil der euklidischen Pfadintegralformulierung liegt in dieser Analogie zwischen einer quantenfeldtheoretischen und einer statistisch mechanischen Beschreibung.

†Das Integrationsmaß ist im strengen mathematischen Sinne nicht wohldefiniert. Dieses Manko wird aber in der sich anschließenden diskretisierten Formulierung behoben.

††Da von nun an die euklidische Formulierung zugrunde gelegt wird, steht der Einfachheit halber S für S_E, sowie $\Box$ für $\Box_E$.

Gitterregularisierung.
Um das bisher nur formal hingeschriebene Integrationsmaß $\mathcal{D}\phi$, das die Integration über den unendlichdimensionalen Konfigurationsraum beschreibt, auch im strengen mathematischen Sinne zu definieren, ist es notwendig, die Dimension des Konfigurationsraum endlich zu machen.
Dies geschieht, indem der kontinuierliche $\mathcal{R}^4$ auf ein diskretes Raum-Zeit-Gitter mit Gitterabstand a eingeschränkt wird, so daß die Vierervektoren $x \in \mathcal{R}^4$ nur noch die Werte $x = na$ mit $n \equiv (n_1, n_2, n_3, n_4) \in \mathcal{Z}^4$ annehmen. Das System wird des weiteren nur noch in einem endlichen Volumen $V = (aN_\sigma)^3 \cdot aN_\tau$ betrachtet, wobei N_σ und N_τ die Anzahl der Gitterpunkte in räumlicher bzw. zeitlicher Richtung sind. Rand- und Oberflächeneffekte können durch die Forderung periodischer Randbedingungen vermindert werden.
So wird aus dem Feld $\phi(x_\mu)$ mit überabzählbar vielen Freiheitsgraden ein Feld $\phi(n_\mu)$ mit endlich vielen.

Beim Übergang von der Kontinuumsformulierung zu der auf dem Gitter müssen weiterhin noch die Ableitungen durch Differenzenquotienten und das Integral über den euklidischen Raum durch eine endliche Summe über die Gitterpunkte ersetzt werden, es sind also folgende Substitutionen erforderlich:

$$\begin{aligned}
x_\mu &\longrightarrow n_\mu a \quad , \\
\phi(x) &\longrightarrow \phi(na) \quad , \\
\int d^4x &\longrightarrow a^4 \sum_n \quad , \\
\Box\phi(x) &\longrightarrow \frac{1}{a^2}\sum_\mu (\phi(na+\hat{\mu}a) + \phi(na-\hat{\mu}a) - 2\phi(na)) \quad , \\
\mathcal{D}\phi &\longrightarrow \prod_n d\phi(na) \quad ,
\end{aligned} \tag{1.10}$$

dabei ist $\hat{\mu}$ ein Einheitsvektor in μ-Richtung.

Die euklidische Gitter-Wirkung lautet damit

$$\begin{aligned}
S &= a^4 \sum_n (-\frac{1}{2}\frac{1}{a^2}\phi(na)\sum_{\mu=1}^{4}(\phi(na+\hat{\mu}a) + \phi(na-\hat{\mu}a) - 2\phi(na)) \\
&\quad + \frac{M^2}{2}\phi(na)^2) \quad .
\end{aligned} \tag{1.11}$$

Mit dem Gitterabstand a ist nun eine dimensionsbehaftete Größe eingeführt und es ist möglich alle anderen Größen in Einheiten von a auszudrücken, so daß der Pfadintegralausdruck nur noch dimensionslose Größen enthält. Diese werden definiert durch

$$\hat{\phi}_n \equiv a\phi(na) \quad , \tag{1.12}$$
$$\hat{M} \equiv aM \quad . \tag{1.13}$$

Macht man diese Ersetzungen in (1.8) und (1.11), so erhält man

$$\langle \hat{\phi}_n \hat{\phi}_m \cdots \rangle = \frac{\int \prod_l d\hat{\phi}_l \; \hat{\phi}_n \hat{\phi}_m \cdots \; e^{-S[\hat{\phi}]}}{\int \prod_l d\hat{\phi}_l \; e^{-S[\hat{\phi}]}} \quad , \tag{1.14}$$

$$S = -\frac{1}{2} \sum_{n,\hat{\mu}} \hat{\phi}_n \hat{\phi}_{n+\hat{\mu}} + \frac{1}{2}(8 + \hat{M}^2) \sum_n \hat{\phi}_n \hat{\phi}_n \quad , \tag{1.15}$$

wobei die Summe über μ positive und negative Richtungen umfaßt.

1.2 Verbesserung der Wirkung

Durch die Gitterregularisierung der Kontinuumsfeldtheorie wurde im vorherigen Abschnitt eine diskrete Version des Pfadintegrals und insbesondere der euklidischen Wirkung abgeleitet.

Geht man nun den umgekehrten Weg, wird also der Limes $a \to 0$ unter Berücksichtigung der richtigen Skalierung aller Größen gebildet, auch *naiver Kontinuumslimes* genannt, so sollte die Gittertheorie die aus der Kontinuumstheorie bekannten Ausdrücke reproduzieren. Da dies die einzige a priori Forderung an eine Gittertheorie ist, ergeben sich gewisse Freiheiten bei der Formulierung der Gitterwirkung.
Andererseits entstehen durch die Diskretisierung der Theorie Abweichungen von der Kontinuumsformulierung, die sich i. a. in Potenzen des Gitterabstandes a ausdrücken lassen. Man kann nun versuchen, diese Abweichungen zu verringern, indem man die oben beschriebenen Freiheiten in der Formulierung auf dem Gitter ausnutzt, so daß die Abweichungen erst bei höheren Ordnungen im Gitterabstand beginnen.
In diesem Sinne soll nun die Gitterwirkung *verbessert* werden.

Insbesondere die Diskretisierung des Laplaceoperators kann auf verschiedene Weise vor sich gehen.
Betrachten wir dazu zunächst eine Taylorentwicklung des Feldes ϕ

$$\phi(x + \hat{\mu}a) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a^k}{k!} \partial_\mu^{(k)} \phi(x) \tag{1.16}$$

und substituieren dies im Laplaceoperator

$$\begin{aligned} \frac{1}{a^2}(\phi(x+\hat{\mu}a) + (\phi(x-\hat{\mu}a) - 2\phi(x)) &= \frac{1}{a^2}\left(\sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{a^k}{k!} + \frac{(-a)^k}{k!}\right)\partial_\mu^{(k)}\phi(x) - 2\phi(x)\right) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2a^{2(k-1)}}{(2k)!} \partial_\mu^{(2k)} \phi(x) \\ &= \partial_\mu \partial_\mu \phi(x) + O(a^2) \quad . \end{aligned} \tag{1.17}$$

Dies liefert den richtigen Ausdruck im Limes $a \to 0$. Das gilt ebenso für den allgemeineren Term

$$\begin{aligned} \Delta_\mu^{(l)}(x) &\equiv \frac{1}{(la)^2}(\phi(x+l\hat{\mu}a)+(\phi(x-l\hat{\mu}a)-2\phi(x)) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty}\frac{2(la)^{2(k-1)}}{(2k)!}\partial_\mu^{(2k)}\phi(x) \end{aligned} \quad (1.18)$$

Man kann also auch an Stelle von (1.17) eine Summe von verallgemeinerten Gitter-Laplaceoperatoren setzen:

$$\Delta_\mu(x) = \sum_{l=1}^{\infty} c_l \Delta_\mu^{(l)}(x) \quad . \quad (1.19)$$

Die Koeffizienten c_l können nun so gewählt werden, daß die Korrekturen in der Taylorentwicklung erst mit höheren Ordnungen von a beginnen.
Sollen beispielsweise die Korrekturen bis einschließlich $\mathcal{O}(a^{2N})$ beseitigt werden, so können die Koeffizienten $c_l = 0$ für $l > (N+1)$ gewählt werden. Die Übrigen ergeben sich als Lösung eines (N+1)-dimensionalen Gleichungssystems

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^{N+1} c_l &= 1 \\ \sum_{l=1}^{N+1} l^{2k} c_l &= 0 \quad , k=1,\ldots,N \ . \end{aligned}$$

Eine $\mathcal{O}(a^{2N})$ verbesserte Wirkung ist damit gegeben durch

$$S^I = \sum_n \left[-\frac{1}{2}\sum_{l=1}^{\infty}\left(c_l \sum_{\hat{\mu}>0}\left(\hat{\phi}_n\hat{\phi}_{n+l\hat{\mu}} + \hat{\phi}_n\hat{\phi}_{n-l\hat{\mu}} - 2\hat{\phi}_n\hat{\phi}_n\right)\right) + \frac{1}{2}\hat{M}^2\hat{\phi}_n\hat{\phi}_n \right] \quad (1.20)$$

Impulsraumdarstellung.
Um die Auswirkungen dieser Verbesserungen zu untersuchen ist es aufschlußreich, die Wirkung in den Impulsraum zu transformieren. Die Fouriertransformierte des Feldes $\phi(x)$ ist definiert durch

$$\hat{\phi}_p \equiv \frac{1}{\sqrt{N_\sigma^3 N_\tau}}\sum_n e^{-ipn}\hat{\phi}_n \ , \quad (1.21)$$

so daß

$$\hat{\phi}_n \equiv \frac{1}{\sqrt{N_\sigma^3 N_\tau}}\sum_p e^{ipn}\hat{\phi}_n \ . \quad (1.22)$$

Dabei sind die Impulse p ebenfalls Punkte eines $N_\sigma^3 \times N_\tau$ Gitters

$$
\begin{aligned}
p_i &\equiv \frac{2\pi}{N_\sigma} k_i \quad k_i = 0, \pm 1, \ldots, \pm\left(\frac{N_\sigma}{2} - 1\right), \frac{N_\sigma}{2} \quad \text{für} \quad i = 1,2,3 \\
p_4 &\equiv \frac{2\pi}{N_\tau} k_4 \quad k_4 = 0, \pm 1, \ldots, \pm\left(\frac{N_\tau}{2} - 1\right), \frac{N_\tau}{2} \; .
\end{aligned}
\tag{1.23}
$$

Da das Feld $\hat{\phi}$ in der Ortsraum-Darstellung reell ist, erfüllt das komplexe Feld in der Impulsraum-Darstellung die Bedingung $\hat{\phi}_{-p} = \hat{\phi}_p^*$.

Damit erhält man

$$
\begin{aligned}
\sum_n \hat{\phi}_n \hat{\phi}_n &= \frac{1}{N_\sigma^3 N_\tau} \sum_{p,p'} \sum_n \hat{\phi}_p \hat{\phi}_{p'} e^{in(p+p')} \\
&= \sum_p \hat{\phi}_p^* \hat{\phi}_p
\end{aligned}
\tag{1.24}
$$

$$
\begin{aligned}
\sum_n \hat{\phi}_n \hat{\phi}_{n \pm l\hat{\mu}} &= \frac{1}{N_\sigma^3 N_\tau} \sum_{p,p'} \sum_n \hat{\phi}_p \hat{\phi}_{p'} e^{in(p+p')} e^{\pm i l p'_\mu} \\
&= \sum_p \hat{\phi}_p^* \hat{\phi}_p e^{\mp i l p_\mu} \\
&= \sum_p \hat{\phi}_p^* \hat{\phi}_p \cos(l p_\mu)
\end{aligned}
\tag{1.25}
$$

und die verbesserte Wirkung in der Impulsraum-Darstellung

$$
\begin{aligned}
S^I &= \frac{1}{2} \sum_p \left(\left(\sum_l c_l \sum_\mu (2 - 2\cos(l p_\mu)) \right) + \hat{M}^2 \right) \hat{\phi}_p^* \hat{\phi}_p \\
&= \frac{1}{2} \sum_p \left(\left(4 \sum_l c_l \sum_\mu \sin^2(l p_\mu / 2) \right) + \hat{M}^2 \right) \hat{\phi}_p^* \hat{\phi}_p \quad .
\end{aligned}
\tag{1.26}
$$

Aus der Zustandssumme

$$
\begin{aligned}
Z &= \int \prod_{p_\mu \geq 0} d\hat{\phi}_p \; e^{-S^I} \\
&= \int \prod_{p_\mu \geq 0} d\hat{\phi}_p \; \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_p \hat{\phi}_p^* G^{-1}(p) \hat{\phi}_p \right]
\end{aligned}
$$

bekommt man den inversen Propagator

$$
G^{-1}(p) = 4 \sum_\mu \left(\sum_l c_l \sin^2(l p_\mu / 2) \right) + \hat{M}^2 \; . \tag{1.27}
$$

In der ursprünglichen Wirkung ($c_1 = 1$, $c_l = 0$ für $l > 1$) führt der ultraviolett Cut-off ($a > 0$) dazu, daß der Propagator nur bei endlich vielen, nämlich $N_\sigma^3 \times N_\tau$, Impulsen in der Brillouin Zone ausgewertet wird. Der Kontinuumspropagator $(P^2 + M^2)^{-1}$ dagegen wird bei sämtlichen Impulsen $-\pi/a \leq p_\mu^c \leq \pi/a$ betrachtet. Will man dem in der Gitterformulierung näher kommen, so ist man gezwungen das Volumen des Gitters zu vergrössern, wie sich an (1.23) zeigt.
Ein Vergleich mit dem Propagator, der sich aus der verbesserten Wirkung ergibt, zeigt aber, daß hier bei gleichem Gittervolumen zu den ursprünglichen Impulsen p_μ zusätzliche Impulse lp_μ zum Propagator beitragen.

Diese heuristischen Überlegungen sollen zeigen, wie durch eine $\mathcal{O}(a^{2N})$ Verbesserung der Wirkung die Gitterartefakte, insbesondere ultraviolett Cut-off-Effeke verringert werden können. Diese verbesserten Wirkungen ermöglichen es also, sich der Kontinuumsphysik zu nähern, ohne dabei eine Vergrößerung des betrachteten Gittervolumens inkaufnehmen zu müssen.

Kapitel 2

QCD bei endlicher Temperatur

2.1 QCD im Kontinuum

Die fundamentale Theorie der starken Wechselwirkung ist die *Quanten Chromo Dynamik* (QCD). Sie beschreibt die Wechselwirkung von Quarks und Gluonen, der elementaren Bestandteile der Kernmaterie.
Die Quarks sind Spin 1/2 Materiefelder und treten in sechs verschiedenen Sorten, sog. *Geschmack* (*flavour*), nämlich *up, down, strange, charm, top* und *bottom*, zuzüglich der entsprechenden Antiteilchen auf. Sie tragen verschiedene Massen, nach denen man sie in drei Generationen aus jeweils zwei leichten, zwei schweren und zwei sehr schweren Quarks einteilt.
Quarks besitzen darüber hinaus noch einen inneren Freiheitsgrad, welcher als *Farbladung* (*colour*) bezeichnet wird und dessen Einführung notwendig ist, um einige Teilchen, z. B. das Δ^{++}, das aus drei up-Quarks aufgebaut ist, zu beschreiben. Es gibt drei Farbladungen (z. B. rot, blau und gelb), welche jedoch in hadronischer Materie "unsichtbar" bleiben, da hier nur bzgl. der Farbladung neutrale Zwei- (Mesonen) bzw. Drei-Quark-Zustände (Baryonen) auftreten.

Die QCD Lagrangedichte.
Als Fermionen genügen die Quarks der *Dirac-Gleichung*

$$(i\partial\!\!\!/ - m_f)\Psi^f_\alpha(x) = 0 \quad , \tag{2.1}$$

mit $\partial\!\!\!/ \equiv \gamma_\mu \partial_\mu$, die jedoch, da sie für alle Colour- und Flavour-Freiheitsgrade unabhängig gilt, keinerlei Wechselwirkung zwischen den Quarks beschreibt.
Die Dirac-Gleichung erhält man als Funktionalableitung der *Lagrangedichte*

$$\mathcal{L}(x) = \sum_{f,\alpha} \bar{\Psi}(x)^f_\alpha (i\partial\!\!\!/ - m_f)\Psi^f_\alpha(x) \tag{2.2}$$

nach den Feldern $\Psi(x)^f_\alpha$. Dabei stellen die Felder $\bar{\Psi}(x) \equiv \Psi^\dagger\gamma^0$ die entsprechenden Antiteilchen dar.

Diese Lagrangedichte ist invariant unter globalen SU(3)-Transformationen, d. h. unter der Ersetzung

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\longrightarrow G\Psi(x) \quad , \\ \bar{\Psi}(x) &\longrightarrow \bar{\Psi}(x)G^\dagger \quad , \end{aligned} \tag{2.3}$$

mit $G \in SU(3)$ bleibt $\mathcal{L}$ unverändert.
Da die spezielle Wahl der Felder nicht von der eines anderen Beobachters abhängen sollte, ergibt sich die Forderung, daß die Eichsymmetrie der Lagrangedichte nicht nur global, sondern auch lokal gelten muß.
Diese lokale Invarianz erreicht man durch die sogenannte *minimale Substitution*. Dazu führt man acht reelle Eichfelder $A^a_\mu(x)$ ein, aus denen man das Vierer-Gluon-Potential durch Summation über die acht Generatoren λ_a der Eichgruppe SU(3) bildet

$$A_\mu(x) = \frac{1}{2}A^a_\mu(x)\lambda_\alpha \tag{2.4}$$

und ersetzt die Ableitung ∂_μ durch die *kovariante Ableitung*

$$D_\mu \equiv \partial_\mu + igA_\mu(x) \quad . \tag{2.5}$$

Da die Gluonfelder sich nun entsprechend der adjungierten Darstellung der SU(3) transformieren sollen,

$$A_\mu(x) \longrightarrow G(x)A_\mu(x)G^\dagger(x) - \frac{i}{g}G(x)\partial_\mu(x)G^\dagger(x) \quad , \tag{2.6}$$

erhält die neue Lagrangedichte

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x) &= \sum_{f,\alpha,\beta} \bar{\Psi}(x)^f_\alpha(i\not{D}^{\alpha\beta} - m_f\delta^{\alpha\beta})\Psi^f_\beta(x) \\ &= \sum_{f,\alpha,\beta} \bar{\Psi}(x)^f_\alpha(i\gamma^\mu\partial_\mu - g\gamma^\mu A_\mu(x))^{\alpha\beta}\Psi^f_\beta(x) - \bar{\Psi}(x)^f_\alpha m_f\delta^{\alpha\beta}\Psi^f_\beta(x) \end{aligned} \tag{2.7}$$

nun auch eine lokale SU(3)-Eichsymmetrie.

Durch die Einführung der Gluon-Felder sind die Quarks nun nicht mehr unabhängig, sondern wechselwirken über den Austausch von Gluonen. Die Kopplungskonstante g ist dabei eine dimensionslose Größe, die die Stärke der Wechselwirkung, ähnlich wie die elektrische Ladung in der QED, beschreibt.
Da die Eichfelder kein äußeres Potential sind, sondern selbst an der Dynamik des Systems beteiligt sind, muß man noch einen weiteren eichinvarianten Term zu der Lagrangedichte addieren, der die Kopplung der Eichfelder untereinander enthält

$$\mathcal{L}_G(x) = -\frac{1}{4}F^a_{\mu,\nu}(x)F^{\mu,\nu}_a(x) \tag{2.8}$$

mit

$$F^a_{\mu,\nu}(x) = \partial_\mu A^a_n(x) - \partial_\nu A^a_\mu(x) - g f^a_{bc} A^b_\mu(x) A^c_\nu(x) \quad , \tag{2.9}$$

wobei die f^a_{bc} die Strukturfunktionen der SU(3) sind.
Gerade durch diese Wechselwirkung der Gluonen untereinander, die darauf zurückgeht, daß die Eichgruppe nicht-abelsch ist, ergeben sich im Vergleich zur QED, in der die Photonen nicht aneinander gekoppelt sind, völlig neue Eigenschaften. Dies führt zu dem der starken Wechselwirkung typischen Verhalten wie dem *Confinement*, also der Tatsache, daß Quarks stets in gebundenen Zuständen auftreten und sich nicht als freie Teilchen beobachten lassen.

In der störungstheoretischen Entwicklung der QCD, ergibt sich durch Renormierung eine Kopplung g die nicht mehr konstant ist, sondern vom Impulsübertrag Q^2 abhängt

$$g(Q^2) = \frac{48\pi}{(33 - 2N_f)\log\left(\frac{Q^2}{\Lambda}\right)} \quad , \tag{2.10}$$

wobei N_f die Anzahl der Flavour bezeichnet und Λ ein freier Skalenparameter ist.
Diese *rennende Kopplung* geht gegen Null für große Impulsüberträge bzw. kleine räumliche Abstände, ein Verhalten, das als *asymptotische Freiheit* bekannt ist. In diesem Bereich ist die störungstheoretische Beschreibung in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden.
Gleichung (2.10) impliziert aber auch, daß für große Abstände (kleine Q^2) die Kopplung groß wird, so daß die Störungstheorie zusammenbricht und auch (2.10) nicht mehr anwendbar ist. Dieser Anstieg in der Kopplung gibt aber andererseits einen Hinweis darauf, daß die Farbquellen mit zunehmendem Abstand immer stärker wechselwirken, so daß diese nicht voneinander separiert werden können, also *confined* sind.

2.2 Thermodynamik der QCD

Die im letzten Abschnitt beschriebenen Eigenschaften der QCD haben großen Einfluß auf das thermodynamische Verhalten, welches im Mittelpunkt dieser Arbeit steht.

Deconfinement-Phasenübergang.
Aus der asymptotischen Freiheit ergeben sich Hinweise darauf, daß die QCD bei hohen Temperaturen ein qualitativ anderes Verhalten aufweist, als bei niedrigen Temperaturen. Während bei niedrigen Temperaturen, wie sie in unserer Welt vorkommen, die kleinen Impulse das System dominieren, wodurch die Quarks confined sind und die uns bekannte Materie aus Hadronen bilden, bekommen bei hohen Temperaturen auch große Impulsüberträge ein immer größeres Gewicht. Aufgrund dessen

gerät das System bei hohen Temperaturen mehr und mehr in den Bereich der asymptotischen Freiheit, d. h. es ergibt sich ein System von nur schwach wechselwirkenden Quarks und Gluonen, die nicht mehr nur in gebundenen Zuständen auftreten, also *deconfined* sind und ein *Quark-Gluon-Plasma* bilden.

Dies gibt Anlaß zu der Vermutung eines Phasenübergangs von einer kalten, hadronischen Phase zu einer heißen Plasma-Phase. Dieser Phasenübergang wird durch die Zunahme der Freiheitsgrade des Systems beim Überschreiten einer *kritischen Temperatur* T_c bestimmt, was sich in einem starken Anstieg thermodynamischer Observablen wie der Energiedichte oder dem Druck manifestiert.

Die Zustandssumme.
Will man nun diesen Phasenübergang untersuchen, so ist es notwendig eine *statistische QCD* zu formulieren. Dies ist zunächst ein im Prinzip gut verstandenes Problem, denn hat man die Lagrangedichte $\mathcal{L}$ gegeben, so ist die *großkanonische Zustandssumme* definiert durch

$$Z(T,\mu,V) = Tr\{e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/T}\} \quad , \tag{2.11}$$

wobei der Hamiltonoperator $\hat{H}$ durch die Lagrangedichte bestimmt ist und μ und $\hat{N}$ chemisches Potential und Teilchenzahloperator sind. Wir müssen also in der Spur über alle möglichen physikalischen Zustände im Volumen V summieren.
Hat man $Z(T,\mu,V)$ bestimmt so erhält man daraus die thermodynamischen Observablen wie üblich. Also

$$\epsilon = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial\left(\frac{1}{T}\right)}\right)_{V,\mu} + \mu n \tag{2.12}$$

für die Energiedichte und

$$P = T\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{T,\mu} \tag{2.13}$$

für den Druck.

Der entscheidende Punkt ist also, die Zustandssumme zu berechnen. Will man dies tun, so stellt man fest, daß im Bereich der kritischen Temperatur langreichweitige Korrelationen und Viel-Teilchen-Wechselwirkungen auftreten, so daß eine störungstheoretische Behandlung des Problems unmöglich ist.

Idealer-Gas-Limes.
Geht man nun aber davon aus, daß in der Hochtemperatur-Phase der QCD aus der stark wechselwirkenden Materie ein Plasma aus nur schwach wechselwirkenden Quarks und Gluonen wird, so kann man dieses System im Limes unendlicher Temperatur als ein ideales Gas aus masselosen, nicht wechselwirkenden Bosonen und Fermionen auffassen. Die Quarks tragen zwar endliche Ruhemassen, diese kann man

aber wegen der Dominanz hoher Impulse im Hochtemperatur-Limes vernachlässigen.
Für ein solches System kann man die Zustandssumme (2.11) explizit und in geschlossener Form ausführen, z. B. in [10]. Das Ergebnis ist

$$T \ln Z = f_b \left(\frac{\pi^2 V T^4}{90} \right) + f_f \left(\frac{V}{12} \right) \left[\left(\frac{7\pi^2 T^4}{30} \right) + \mu^2 T^2 + \left(\frac{\mu^4}{2\pi^2} \right) \right] \quad . \tag{2.14}$$

Hierbei bezeichnen f_b die Anzahl der bosonischen und f_f die Anzahl der fermionischen Freiheitsgrade.

Im Hauptteil dieser Arbeit soll die Thermodynamik einer SU(N) Yang-Mills Theorie betrachtet werden, deren Lagrangedichte nur aus dem Gluon-Selbstwechselwirkungsterm $\mathcal{L}_G = -1/4 F^a_{\mu,\nu} F^{\mu,\nu}_a$ der QCD-Lagrangedichte besteht. Für diesen Fall wird wegen der verschwindenden Gesamtbaryonenzahl auch $\mu = 0$ und aus (2.14) ergibt sich mit $f_b = 2(N^2 - 1)$

$$\epsilon = \frac{(N^2-1)\pi^2}{15} T^4 \tag{2.15}$$

für die Energiedichte und

$$P = \frac{\epsilon}{3} = \frac{(N^2-1)\pi^2}{45} T^4 \tag{2.16}$$

für den Druck im Limes großer Temperatur T.

Wie bereits oben erwähnt, kann die QCD Thermodynamik nicht im Rahmen der Störungstheorie untersucht werden. Es wird also ein anderer nicht-störungstheoretischer Zugang zur Lösung einer relativistischen Quantenfeldtheorie benötigt. Die einzige bis heute bekannte Methode dafür ist die Gitterformulierung, die auf K.Wilson zurückgeht und in den folgenden Abschnitten behandelt werden soll.

2.3 Gitterformulierung der QCD bei endlicher Temperatur

Die Zustandssumme im Euklidischen Pfadintegralformalismus.
Wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben, ist es zur Formulierung der QCD-Thermodynamik notwendig, eine Möglichkeit zur Berechnung der Zustandssumme zu finden.
Im euklidischen Pfadintegralformalismus, der in Kapitel 1 für eine skalare Feldtheorie

eingeführt wurde, ergibt sich eine Möglichkeit, die Zustandssumme (2.11) mit Hilfe der Euklidischen Lagrangedichte $\mathcal{L}_E$ auszudrücken

$$\begin{aligned} Z(T,V) &= Tr\{e^{-\hat{H}/T}\} \\ &= \int dA\ d\Psi\ d\bar{\Psi}\ \exp\left(-\int_V d^3x \int_0^{1/T} d\tau\ \mathcal{L}_E(A,\Psi,\bar{\Psi})\right) \end{aligned} \tag{2.17}$$

Anstatt in der Spur die Summe über alle möglichen Viel-Teilchen-Zustände auszuführen, summiert man nun über alle möglichen Feldkonfigurationen des Systems. Für die Beschreibung des Systems bei endlicher Temperatur T wird nun aber im Gegensatz zu Kapitel 1 die Integration in der imaginären Zeitrichtung nur über ein endliches Intervall $\tau \in [0, T^{-1}]$ ausgeführt. Das Verhalten der Zustandssumme bei endlicher Temperatur ist also ein Effekt, der von der endlichen Ausdehnung des Systems in der imaginären Zeitrichtung herrührt.
In der Integration über die Feldkonfigurationen finden nur die Vektorfelder A mit periodischem Verhalten und nur die Spinorfelder Ψ mit antiperiodischem Verhalten an den Grenzen der imaginären Zeitrichtung Berücksichtigung. Also

$$\begin{aligned} A_\mu(\vec{x},0) &= A_\mu(\vec{x},1/T) \ , \\ \Psi^f_\mu(\vec{x},0) &= -\Psi^f_\mu(\vec{x},1/T) \ . \end{aligned}$$

Durch den Übergang zu imaginären Zeiten erhält man aus der Lagrangedichte

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x) &= \sum_{f,\alpha,\beta} \bar{\Psi}(x)^f_\alpha (i\not{D}^{\alpha\beta} - m_f\delta^{\alpha\beta})\Psi^f_\beta(x) \\ &\quad -\frac{1}{4}F^a_{\mu,\nu}(x)F^{\mu,\nu}_a(x) \end{aligned} \tag{2.18}$$

auf dem Minkowsky-Raum die euklidische Lagrangedichte auf dem $\mathcal{R}^4$ mit euklidischer Metrik,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_E(x) &= \sum_{f,\alpha,\beta} \bar{\Psi}(x)^f_\alpha (\gamma^E_\mu D_\mu^{\ \alpha\beta} + m_f\delta^{\alpha\beta})\Psi^f_\beta(x) \\ &\quad +\frac{1}{4}F^a_{\mu,\nu}(x)F^{\mu,\nu}_a(x) \ . \end{aligned} \tag{2.19}$$

Dabei erfüllen die Matrizen γ^E_μ aufgrund der euklidischen Metrik die Relation

$$\{\gamma^E_\mu, \gamma^E_\nu\} = 2\delta_{\mu,\nu} \ . \tag{2.20}$$

Mit der so definierten Lagrangedichte erhält man die *euklidische Wirkung* bei der Temperatur T

$$S_E(A,\Psi,\bar{\Psi}) = \int_V d^3x \int_0^{1/T} d\tau\ \mathcal{L}_E(A,\Psi,\bar{\Psi}) \ , \tag{2.21}$$

so daß der thermische Erwartungswert eines Operators $\mathcal{O}$ gegeben ist durch

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{1}{Z} Tr\{e^{-\hat{H}/T} \mathcal{O}\} \\ &= \frac{1}{Z} \int d\Psi \; d\bar{\Psi} \; dA \;\; \mathcal{O}(\Psi, \bar{\Psi}, A) e^{-S_E(\Psi,\bar{\Psi},A)} \end{aligned} \tag{2.22}$$

Gitterregularisierung der SU(N) Yang-Mills Theorie in der Standard Wilson Formulierung.
Um den oben zunächst nur formal hingeschriebenen Ausdruck (2.22) für den thermischen Erwartungswert auch im mathematischen Sinne zu definieren, und damit berechenbar zu machen, ist es nun in Analogie zu Kapitel 1 notwendig, die Felder auf ein endliches $N_\sigma^3 \times N_\tau$ Gitter mit Gitterabstand a einzuschränken.

Für die fermionischen Felder ist die Diskretisierung direkt möglich und man definiert die dimensionslosen Größen

$$\hat{\Psi}(n) = a^{3/2} \cdot \Psi(na) \;\; , \tag{2.23}$$

$$\hat{\bar{\Psi}}(n) = a^{3/2} \cdot \bar{\Psi}(na) \;\; , \tag{2.24}$$

$$\hat{m} = a \cdot m \;\; . \tag{2.25}$$

Das Integral $\int d^4x$ wird durch die Summe $a^4 \sum$ und die Ableitungen durch endliche Differenzenquotienten ersetzt.
Dadurch treten im fermionischen Teil der Gitterwirkung bilineare Terme der Form $\hat{\bar{\Psi}}(n)\hat{\Psi}(n+\hat{\mu})$ auf, die sich unter einer lokalen Eichtransformation nach (2.3), wie

$$\hat{\bar{\Psi}}(x)\hat{\Psi}(y) \longrightarrow \hat{\bar{\Psi}}(x) G^{-1}(x) G(y) \hat{\Psi}(y) \tag{2.26}$$

transformieren.
Um bei der Diskretisierung die zentrale Eigenschaft der lokalen Eichsymmetrie zu erhalten, ist es notwendig, einen Faktor einzuführen, der die Eichfelder A enthält und eine Verbindung zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten herstellt, die die Eichvariation in (2.26) kompensiert. Dies geschieht durch das *Schwingersche Linienintegral*

$$U(x,y) = e^{ig \int_x^y dz_\mu A^\mu(z)} \;\; , \tag{2.27}$$

wobei das Integral über einen Weg ausgeführt wird, der die Punkte x und y verbindet. $U(x,y)$ ist ein Element der Eichgruppe SU(N) und transformiert sich unter einer lokalen Eichtransformation $G(x) \in SU(N)$

$$U(x,y) \longrightarrow G(x) U(x,y) G^{-1}(y) \;\; . \tag{2.28}$$

Damit kann man nun bilineare Terme aus den Fermionfeldern bilden, die eichinvariant sind

$$\bar{\Psi}(x) U(x,y) \Psi(y) \;\; . \tag{2.29}$$

Auf dem Gitter ist der kleinst mögliche Abstand durch den Gitterabstand a gegeben und die einfachste Form des Ausdrucks für die Eichfelder ist

$$U_\mu(x) = e^{ig \int_x^{x+a\cdot\hat{\mu}} dy \;\, A_\mu(x+y)} \quad . \tag{2.30}$$

Diese Ausdrücke, die im Gegensatz zu den Fermionfeldern auf den Verbindungsstüken zweier benachbarter Punkte definiert sind und deshalb als *Linkvariable* oder einfach als *Links* bezeichnet werden, repräsentieren also die Eichfelder auf dem Gitter.

Die Darstellung des Teils der Wirkung, der der gluonische Selbstwechselwirkung entspricht,

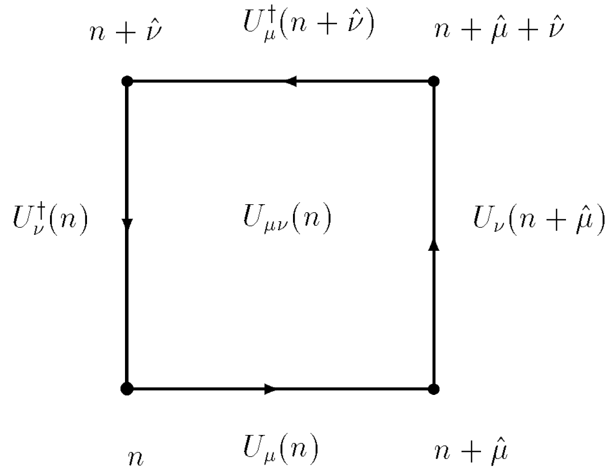
$$S_G^{Kont.} = -1/4 \int d^4x \;\, F^a_{\mu,\nu}(x) F_a^{\mu,\nu}(x) \quad , \tag{2.31}$$

muß also auf dem Gitter auch ein eichinvarianter Ausdruck der Linkvariablen $U_\mu(x)$ sein. Allgemein ergeben sich eichinvariante Grössen aus den Links, indem man das Produkt der Links entlang geschlossener Wege auf dem Gitter bildet. Hier ergeben sich gewisse Freiheiten in der Formulierung, auf die in Kapitel 3 detailliert eingegangen wird und deren Untersuchung im Mittelpunkt dieser Arbeit steht. Entscheidend ist bei der Wahl der Formulierung nur, daß die Terme im naiven Kontinuumslimes ($a \to 0$) zum richtigen Kontinuumsausdruck führen.

In der Standard-Formulierung, auch *Wilson-Formulierung*, bildet man einen Ausdruck, der aus dem Produkt der Links entlang des kleinst möglichen, geschlossenen Weges besteht

$$U_{\mu,\nu}(n) \equiv U_\mu(n) U_\nu(n+\hat{\mu}) U_\mu^\dagger(n+\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(n) \quad , \tag{2.32}$$

der als *Plaquette* bezeichnet wird.



Daraus wird die Eichwirkung

$$S_G(\{U\}) = \beta \sum_{n,\mu<\nu} \left(1 - \frac{1}{N} \mathrm{ReTr} U_{\mu,\nu}(n)\right) \tag{2.33}$$

gebildet, wobei man die Abkürzung $\beta = \frac{2N}{g^2}$ verwendet.
In Kapitel 3 wird im Zusammenhang mit den oben erwähnten Formulierungsfreiheiten ausführlich gezeigt, daß dieser Ausdruck den richtigen Kontinuumsausdruck liefert.

Die Valenzquarkapproximation.
Bisher ist nicht auf die konkrete Gestalt des fermionischen Anteils der diskretisierten Wirkung eingegangen worden. Es sei aber erwähnt, daß er quadratisch in den Fermionfeldern ist und sich in folgender Weise schreiben läßt

$$S_F = \sum_{m,n} \hat{\bar{\Psi}}(n) K_{nm}[U] \Psi(\hat{m}) \quad . \tag{2.34}$$

Dabei ist K die sogenannte Fermionmatrix, die von den Eichfeldern U abhängt. Betrachtet man nun, daß die Fermionfelder antikommutieren und damit als *Grassmann Variable* in der Zustandssumme auftreten, so kann man die Integration über die Fermionfelder ausführen

$$\int d\bar{\Psi} d\Psi e^{-S_F[U,\bar{\Psi},\Psi]} = \det K[U] \quad . \tag{2.35}$$

Dies führt dazu, daß man im Pfadintegral die Wirkung durch eine *effektive Wirkung*

$$S_{\mathrm{eff}}[U] = S_G[U] - \ln \det K[U] \tag{2.36}$$

ersetzen kann und die Integration nur noch über die Eichfelder U ausgeführt werden muß. Diese effektive Wirkung hängt nun nicht mehr nur lokal von den Links ab, was

in numerischen Simulationen zu einem immensen Aufwand führt.
Es soll deshalb von nun an die sogenannte *Valenzquarkapproximation* (*quenched approximation*) betrachtet werden, in der man die Determinante der Fermionmatrix durch eine von den Eichfeldern unabhängige Konstante ersetzt. In einer störungstheoretischen Entwicklung zeigt sich, daß die Determinante zu Feynmangraphen führt, die geschlossene Quarkloops mit beliebig vielen daranhängenden Eichfeldern enthalten. Sie beschreibt also Vakuum-Polarisations-Effekte, die in der Valenzquarkapproximation vernachlässigt werden.

Die Zustandssumme für die SU(N) Yang-Mills Theorie auf dem Gitter in der Wilson Formulierung lautet also

$$Z(T,V) = \int \prod_{n,\mu} dU_\mu(n)\ e^{-S_G[U]} \tag{2.37}$$

und der thermische Erwartungswert eines Operators $\mathcal{O}$ ist gegeben durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{n,\mu} dU_\mu(n)\ \mathcal{O}[U]\ e^{-S_G[U]} \quad . \tag{2.38}$$

Dabei ist die Temperatur $T = (aN_\tau)^{-1}$ und das Volumen $V = a^3 N_\sigma^3$. Der Gitterabstand a tritt allerdings nicht explizit in der Zustandssumme auf, sondern ist durch den freien Parameter g festgelegt. Der funktionale Zusammenhang zwischen a und g ist nicht a priori bestimmt, er kann aber durch den Vergleich kontinuumsphysikalischer Größen mit den entsprechenden Gitter-Größen ermittelt werden.

Diese Erwartungswerte können also explizit berechnet werden, indem die Integration über die Eichgruppe SU(N) in (2.37) und (2.38) ausgeführt wird. Dies ist numerisch mit der Methode der *Monte-Carlo Integration* möglich, auf die in Kapitel 5 ausführlich eingegangen wird.

2.4 Deconfinement-Phasenübergang auf dem Gitter

In diesem Abschnitt soll erläutert werden, wie sich der Deconfinement-Phasenübergang auf dem Gitter beobachten läßt, d. h. welche Gitterobservable zwischen den beiden Phasen unterscheiden läßt, also ein sogenannter *Ordnungsparameter* dieses Phasenübergangs ist. Wie oben erwähnt, ist dieser Phasenübergang dadurch bestimmt, ob die Wechselwirkung zwischen den Quarks deren Separation zuläßt oder nicht. Für die Bindungsenergie eines Quark-Antiquark-Paares sollte man also erwarten, daß diese in der Confinement-Phase mit wachsendem Abstand immer weiter ansteigt und nicht, wie in der Deconfinement-Phase gegen einen endlichen Wert

konvergiert.
In der reinen $SU(3)$-Eichtheorie beschreibt man nun ein System, in dem die Quarks statisch sind, also unendlich große Massen haben, und die Dynamik des Fermionsektors vernachlässigt wird. Betrachten wir also ein System aus einem Quark und einem Antiquark, so erlaubt dies aufgrund der großen Massen eine nicht-relativistische Behandlung, so daß auch ein Begriff wie der, des Potentials zwischen zwei schweren Quarks sinnvoll eingeführt werden kann.

Der Wilson-Loop.
Diese Idee soll zunächst anhand eines eindimensionalen quantenmechanischen Systems erläutert werden. Die Propagation eines Teilchens mit Masse m im Potential V wird beschrieben durch

$$G(x',t;x,0) = \langle x'|e^{-iHt}|x\rangle \underset{m\to\infty}{\longrightarrow} \delta(x-x')e^{-iV(x)t} \quad , \tag{2.39}$$

dabei ist $H = p^2/2m + V(x)$ und $|x\rangle$ ein Eigenzustand des Hamiltonoperators für $m \to \infty$. Das Potential kann also beim Übergang zu imaginären Zeiten ($t \to -iT$) aus dem exponentiellen Abfall von (2.39) gewonnen werden. Ist $|x\rangle$ kein Eigenzustand, z. B. bei endlicher Masse m, so erhält man aus einer Entwicklung nach Energieeigenzuständen

$$G(x',t;x,0) = \sum_n \langle x'|n\rangle\langle n|x\rangle e^{-iE_nt} \tag{2.40}$$

und für große euklidische Zeiten ergibt sich die Feynman-Kac-Formel

$$G(x',-iT;x,0) \underset{T\to\infty}{\longrightarrow} \langle x'|0\rangle\langle 0|x\rangle e^{-E_0T} \quad , \tag{2.41}$$

man erhält also die Grundzustandsenergie aus dem Limes $T \to \infty$.

Diese Überlegungen sollen nun auf die Eichfeld-Theorie übertragen werden. Wir betrachten zunächst ein System bei Temperatur gleich Null. Die Green'sche Funktion eines $Q\bar{Q}$-Paares das zur Zeit Null an den Orten $\vec{x}$ und $\vec{y}$ erzeugt und zur Zeit t an den Orten $\vec{x'}$ und $\vec{y'}$ vernichtet wird lautet

$$\begin{aligned} &G_{\alpha',\beta',\alpha,\beta}(\vec{x},\vec{y};\vec{x'},\vec{y'};t) \\ &= \langle 0|\boldsymbol{T}[\bar{\Psi}_{\beta'}(\vec{y'},t)U(\vec{y'},t;\vec{x'},t)\Psi_{\alpha'}(\vec{x'},t)\bar{\Psi}_\alpha(\vec{x},0)U(\vec{x},0;\vec{y},0)\Psi_\beta(\vec{y},0)]|0\rangle \quad , \end{aligned} \tag{2.42}$$

dabei bezeichnet U das Schwinger'sche Linienintegral, das die beiden Punkte verbindet.

Im Limes unendlicher Quarkmassen sind die Quarks an ihren Orten festgehalten und propagieren nur noch in der Zeit. In Analogie zu dem quantenmechanischen

Beispiel erwartet man nun das folgende Verhalten

$$G_{\alpha',\beta',\alpha,\beta}(\vec{x},\vec{y};\vec{x}',\vec{y}';-iT) \underset{\substack{m_Q\to\infty \\ T\to\infty}}{\longrightarrow} \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')\delta^{(3)}(\vec{y}-\vec{y}')C_{\alpha',\beta',\alpha,\beta}(\vec{x},\vec{y})e^{-E(R)T} \quad , \tag{2.43}$$

wobei m_Q die Quarkmasse, $C_{\alpha',\beta',\alpha,\beta}(\vec{x},\vec{y})$ eine Funktion, die den Überlapp mit dem Grundzustand beschreibt, und $E(R)$ die Grundzustandsenergie eines statischen $Q\bar{Q}$-Paares im Abstand $R = |\vec{x}-\vec{y}|$ ist.

Die Green'sche Funktion (2.42) kann man nun auch in Termen der Gittervariablen, also der Links, ausdrücken†. Dabei wird daraus der Erwartungswert des sogenannten zeitlichen *Wilson-Loops*

$$\hat{W}(\hat{R},\hat{T}) \equiv \left\langle \mathrm{Tr} \prod_{l\in\mathcal{C}} U_l \right\rangle \quad , \tag{2.44}$$

der die Spur des geordneten Produktes der Linkvariabeln U_l entlang eines rechteckigen Weges $\mathcal{C}$ mit einer räumlichen Ausdehnung $\hat{R}$ und einer zeitlichen Ausdehnung $\hat{T}$ ist. Details dieser Herleitung sind z. B. in [1] zu finden.

Zusammen mit (2.43) erhält man daraus das Potential

$$\hat{E}(\hat{R}) = \lim_{\hat{T}\to\infty} -\frac{1}{\hat{T}} \ln \hat{W}(\hat{R},\hat{T}) \quad . \tag{2.45}$$

Es sei bemerkt, daß anstelle der geradlinigen räumlichen Kanten des Wilson-Loops auch beliebige andere Verbindungen zwischen den beiden Eckpunkten und auch Linearkombinationen davon dazu benutzt werden können, den Grundzustandsüberlapp zu erhöhen, da das Schwinger'sche Linienintegral nicht notwendig in eine geradlinige Verbindung übersetzt werden muß.
Wegen des Confinements bei Temperatur gleich Null erwartet man, daß das Potential $\hat{E}(\hat{R})$ auch für große Abstände nicht gegen einen endlichen Wert geht. Ein gut bestätigter Ansatz für das Potential ist

$$\hat{E}(\hat{R}) = \hat{V}_0 + \frac{\hat{\alpha}}{\hat{R}} + \hat{\sigma}\hat{R} \quad , \tag{2.46}$$

der einen coulombartigen Term, der das kurzreichweitige Verhalten beschreibt, und eine linearen Term, der zum Confinement führt, enthält. Der Koeffizient $\hat{\sigma}$ des linearen Terms wird als *Saitenspannung* (*stringtension*) bezeichnet. Für große Zeitausdehnungen $\hat{T}$ erwartet man also

$$\hat{W}(\hat{R},\hat{T}) \propto e^{-(\hat{V}_0+\frac{\hat{\alpha}}{\hat{R}}+\hat{\sigma}\hat{R})\hat{T}} \quad . \tag{2.47}$$

†Die hier mit einem Hut versehenen Größen sind Gittergrößen in Einheiten des Gitterabstands.

Der Polyakov-Loop.
Betrachten wir nun ein System statischer Quarks bei endlicher Temperatur T. Die Argumente, die hier vorgebracht werden sind nicht rigoros und sollen lediglich den Zusammenhang veranschaulichen. (Eine detaillierte Diskussion siehe [11].)
Da das Gitter nun in der euklidischen Zeitrichtung endlich und periodisch ist, kann man den Wilson-Loop nicht mehr für große Zeitabstände betrachten, um das Potential zu extrahieren. An seine Stelle treten die sogenannten *Polyakov-Loop-Korrelationen*. Der *Polyakov-Loop* ist definiert als das geordnete Produkt der Links entlang eines Weges, der sich in der periodischen Zeitrichtung um das Gitter wickelt

$$L(\vec{n}) \equiv \mathrm{Tr} \prod_{n_4=1}^{N_\tau} U_4(\vec{n}, n_4) \quad . \tag{2.48}$$

Betrachten wir dazu zunächst die Zustandssumme eines unendlich schweren Quarks, das an ein fluktuierendes Eichpotential koppelt

$$Z = N \sum_s \left\langle s \left| \Psi(\vec{x},0) e^{-H/T} \bar{\Psi}(\vec{x},0) \right| s \right\rangle = N \sum_s \left\langle s \left| e^{-H/T} \Psi(\vec{x},1/T) \bar{\Psi}(\vec{x},0) \right| s \right\rangle \quad , \tag{2.49}$$

wobei N ein Normierungsfaktor ist und $|s\rangle$ ein Zustand, der dieses schwere Quark nicht enthält. Da nun

$$\Psi(\vec{x}, 1/T) = e^{ig \int_0^{1/T} d\tau \ A_4(\vec{x},\tau)} \ \Psi(\vec{x}, 0) \quad , \tag{2.50}$$

können wir die Zustandssumme auch schreiben als

$$Z = \mathrm{Tr}(e^{-H/T} \ L(\vec{x})) \quad , \tag{2.51}$$

mit

$$L(\vec{x}) = e^{ig \int_0^{1/T} d\tau \ A_4(\vec{x},\tau)} \quad . \tag{2.52}$$

Dies ist das Kontinuumsanalogon zum Polyakov-Loop.
Geht man nun zur euklidischen Pfadintegralformulierung auf dem Gitter über, so beschreibt (2.51) den Erwartungswert des Polyakov-Loops. Andererseits steht (2.51) in Beziehung zur freien Energie eines Systems mit einem schweren Quark relativ zu einem System ohne dieses Quark, denn $F_Q = -T \ln Z$, und man erhält

$$e^{-F_Q/T} = \langle L(\vec{x}) \rangle \quad . \tag{2.53}$$

Dies motiviert, daß die freie Energie eines statischen Quark-Antiquark-Paares an den Orten $\vec{m}$ und $\vec{n}$ aus der Korrelationsfunktion zweier solcher Loops bei $\vec{m}$ und $\vec{n}$ mit entgegengesetzter Orientierung gewonnen werden kann

$$e^{-F_{Q\bar{Q}}/T} = \langle L(\vec{m}) L^\dagger(\vec{n}) \rangle \quad . \tag{2.54}$$

Nimmt man nun die Cluster-Eigenschaft für die Korrelationsfunktion an, so gilt

$$\langle L(\vec{m}) L^\dagger(\vec{n}) \rangle \underset{|\vec{n}-\vec{m}| \to \infty}{\longrightarrow} |\langle L \rangle|^2 \quad . \tag{2.55}$$

An dieser Stelle zeigt sich nun die Bedeutung des Polyakov-Loops als Ordnungsparameter für den Deconfinement-Phasenübergang. Gilt nämlich $|\langle L\rangle|^2 = 0$, so nimmt die freie Energie mit zunehmendem Abstand zu und divergiert im Limes $|\vec{n} - \vec{m}| \to \infty$. Dies ist ein Zeichen für Confinement.
Ist dagegen $|\langle L\rangle|^2 > 0$, so konvergiert die freie Energie des $Q\bar{Q}$-Paares für große Abstände gegen einen endlichen Wert, diese können also separiert werden und sind deconfined.

Ein weiterer Zusammenhang des Phasenübergangs in der reinen $SU(3)$-Gittereichtheorie mit dem Polyakov-Loop ist durch die spontane Brechung einer Symmetrie in der Hochtemperatur-Phase gegeben. Die Eichwirkung S_G besitzt nämlich neben der periodischen Eichinvarianz noch eine weitere Symmetrie, die der Polyakov-Loop nicht hat.
Multipliziert man nämlich alle zeitlichen Links einer kompletten dreidimensionalen räumlichen Zeitschicht mit einem Element $z = e^{2\pi i l/3} \in Z(3)$, $l = 0, 1, 2$ des Zentrums der $SU(3)$

$$U_4(\vec{n}, n4) \longrightarrow zU_4(\vec{n}, n4), \quad \forall\vec{n}, \ n_4 \text{ fest} \quad , \tag{2.56}$$

so ist die Wirkung unter dieser Transformation invariant, wogegen der Polyakov-Loop sich nicht-trivial transformiert

$$L(\vec{n}) \longrightarrow zL(\vec{n}) \quad . \tag{2.57}$$

Da nun in der Confinement-Phase $|\langle L\rangle|^2 = 0$ gilt, bedeutet dies, daß die Konfigurationen, die durch die $Z(3)$-Symmetrietransformationen ineinander übergehen mit gleicher Wahrscheinlichkeit auftreten, denn dann gilt

$$|\langle L\rangle|^2 = |\frac{1}{3} \underbrace{\sum_l e^{2\pi i l/3}}_{=0} \langle L\rangle|^2 = 0 \quad . \tag{2.58}$$

In der Deconfinement-Phase ist dagegen wegen $|\langle L\rangle|^2 > 0$ die Zentrumssymmetrie notwendigerweise gebrochen, d. h. das System befindet sich bevorzugt in einer der drei Einheitswurzeln von $Z(3)$.

2.5 Thermodynamische Größen auf dem Gitter

Wie in Abschnitt 2.2 dargestellt wurde, erlaubt die Kontinuumstheorie der QCD es nicht, die Thermodynamik bei endlichen Temperaturen störungstheoretisch zu studieren. Mit der nun eingeführten Gitterregularisierung kann man die Zustandssumme numerisch ausführen, so daß das Phasendiagramm ermittelt werden kann.

In diesem Abschnitt sollen nun Ausdrücke für thermodynamische Observable, wie Energiedichte und Druck, in der Gitterformulierung gefunden werden. Dazu müssen die Kontinuumsgrößen

$$\epsilon = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial\left(\frac{1}{T}\right)}\right)_V \tag{2.59}$$

und

$$P = T\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_T \tag{2.60}$$

in der Gitterformulierung zu Erwartungswerten eichinvarianter Terme, die aus den Linkvariablen gebildet werden, übersetzt werden.

Da nach (2.59) und (2.60) das physikalische Volumen bzw. die physikalische Temperatur festgehalten werden, während man die Temperatur bzw. das Volumen variiert, ist es notwendig, die räumliche und zeitliche Ausdehnung des Gitters unabhängig von einander zu verändern.
Für ein gegebenes Gitter erreicht man dies durch die Wahl verschiedener Gitterabstände a_σ und a_τ in räumlicher bzw. zeitlicher Richtung. Das führt dazu, daß auch verschiedene Kopplungen g_σ und g_τ in die räumlichen und zeitlichen Anteile der Wirkung eingehen. Die Wirkung auf dem anisotropen Gitter lautet nun

$$S_G[U] = \frac{2N}{g_\sigma^2}\xi\; S_\sigma[U] + \frac{2N}{g_\tau^2}\frac{1}{\xi}\; S_\tau[U] \quad , \tag{2.61}$$

dabei ist $\xi = a_\sigma / a_\tau$ das Verhältnis von räumlichem und zeitlichem Gitterabstand. Die räumlichen und zeitlichen Bestandteile der Wirkung sind gegeben durch

$$S_\sigma[U] = \sum_{\mu<\nu<4} S_{\mu,\nu}[U] \quad , \tag{2.62}$$

$$S_\tau[U] = \sum_{\mu=1,2,3} S_{\mu,4}[U] \quad , \tag{2.63}$$

$$S_{\mu,\nu}[U] = \sum_n [1 - \frac{1}{N}\mathrm{ReTr}U_{\mu,\nu}(n)] \quad . \tag{2.64}$$

Die Kopplungen g_σ und g_τ hängen nun von den Gitterabständen a_σ und a_τ in der Weise ab, daß

$$(g_\sigma(a_\sigma,\xi))_{\xi=1} = (g_\tau(a_\sigma,\xi))_{\xi=1} = g(a) \quad , \tag{2.65}$$

$$\left(\frac{\partial g_\sigma(a_\sigma,\xi)}{\partial a_\sigma}\right)_{\xi=1} = \left(\frac{\partial g_\tau(a_\sigma,\xi)}{\partial a_\sigma}\right)_{\xi=1} = \frac{\partial g(a)}{\partial a} \quad . \tag{2.66}$$

Es können nun in der Energiedichte und im Druck die Ableitung nach T^{-1} bzw. die Ableitung nach V durch die nach a_τ und ξ ersetzt werden

$$\epsilon = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial\left(\frac{1}{T}\right)}\right)_V$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{1}{a_\sigma^3 N_\sigma^3}\frac{1}{Z}\left(\frac{\partial Z}{\partial\,(a_\tau N_\tau)}\right)_{a_\sigma} \\
&= T^4\left(\frac{N_\tau}{\xi N_\sigma}\right)^3\left(a_\tau\left\langle\frac{\partial S_G}{\partial a_\tau}\right\rangle\right)_{a_\sigma} && (2.67)\\
&= T^4\left(\frac{N_\tau}{\xi N_\sigma}\right)^3\left(\xi\left\langle\frac{\partial S_G}{\partial \xi}\right\rangle\right)_{a_\sigma} && (2.68)
\end{aligned}
$$

und

$$
\begin{aligned}
P &= T\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_T \\
&= -\frac{T^4}{3}\left(\frac{N_\tau}{\xi N_\sigma}\right)^3\left(a_\sigma\left\langle\frac{\partial S_G}{\partial a_\sigma}\right\rangle\right)_{a_\tau} && (2.69)\\
&= -\frac{T^4}{3}\left(\frac{N_\tau}{\xi N_\sigma}\right)^3\left[\left(a_\tau\left\langle\frac{\partial S_G}{\partial a_\tau}\right\rangle\right)_\xi-\left(\xi\left\langle\frac{\partial S_G}{\partial \xi}\right\rangle\right)_{a_\sigma}\right] && (2.70)\\
&= \frac{\epsilon}{3}+\frac{T^4}{3}\left(\frac{N_\tau}{\xi N_\sigma}\right)^3\left(a_\tau\left\langle\frac{\partial S_G}{\partial a_\tau}\right\rangle\right)_\xi && (2.71)
\end{aligned}
$$

Nun kann man (2.68) und (2.71) berechnen, indem man die partiellen Ableitungen an (2.61) ausführt und anschließend $\xi = 1$ gesetzt wird. Da die thermodynamischen Größen immer noch die entsprechenden Vakuumsbeiträge beinhalten, müssen diese noch subtrahiert werden. Es ergibt sich dabei

$$
\begin{aligned}
\epsilon &= T^4\left(\frac{N_\tau}{N_\sigma}\right)^3\frac{2N}{g^2}\left\{\langle S_\sigma - S_\tau\rangle + g^2\left(c_\sigma\bar{S}_\sigma + c_\tau\bar{S}_\tau\right)\right\} && (2.72)\\
P &= \frac{\epsilon}{3}+T^4\left(\frac{N_\tau}{N_\sigma}\right)^3\frac{4N}{3g^3}\left(a\frac{\partial g}{\partial a}\right)\left(\bar{S}_\sigma+\bar{S}_\tau\right) \quad , && (2.73)
\end{aligned}
$$

wobei

$$
\bar{S}_\kappa = \langle S_\kappa\rangle_{(\beta,N_\tau)} - \langle S_\kappa\rangle_{(\beta,\infty)} \quad \kappa=\sigma,\tau \qquad (2.74)
$$

und die Koeffizienten c_σ und c_τ durch

$$
\begin{aligned}
c_\sigma &= \left(\frac{\partial g_\sigma^{-2}(a_\sigma,\xi)}{\partial\xi}\right)_{\xi=1} && (2.75)\\
c_\tau &= \left(\frac{\partial g_\tau^{-2}(a_\sigma,\xi)}{\partial\xi}\right)_{\xi=1} && (2.76)
\end{aligned}
$$

definiert sind. In [12] sind diese Koeffizienten in der Gitter-Störungstheorie berechnet worden.

Mit den Ausdrücken (2.72) und (2.73) können nun also Energiedichte und Druck durch die Berechnung von Erwartungswerten der räumlichen und zeitlichen Anteile der Wirkung bestimmt werden.

Aus Gleichung (2.73) folgt darüberhinaus auch eine Formel für die latente Wärme, die in dem erwarteten Phasenübergang erster Ordnung produziert wird. In der Region des Phasenübergangs muß sich der Druck auch im Limes unendlichen räumlichen Volumens kontinuierlich verhalten, während die Energiedichte eine Diskontinuität bei der kritischen Temperatur T_c aufzeigen sollte. Auf einem endlichen Gitter wird diese Diskontinuität allerdings ausgewischt und wird lediglich zu einem raschen Anstieg am kritischen Punkt. Wegen des kontinuierlichen Verlaufs des Druckes erhält man aus (2.73) eine gute Näherung für die latente Wärme

$$\Delta\epsilon = T_c^4 \left(\frac{N_\tau}{N_\sigma}\right)^3 \frac{4N}{g^3} \left(-a\frac{\partial g}{\partial a}\right) \Delta \langle S_\sigma + S_\tau \rangle \quad , \tag{2.77}$$

wobei $\Delta \langle S_\sigma + S_\tau \rangle$ die Differenz der Wirkung oberhalb und unterhalb des Phasenübergangs bezeichnet.

An dieser Stelle soll noch auf eine weitere Methode zur Bestimmung des Druckes eingegangen werden, die ohne die Berechnung der Koeffizienten c_σ und c_τ auskommt und somit nicht-störungstheoretisch ist.
Nimmt man nämlich die Homogenität des statistischen Systems an, so gilt folgende Beziehung zwischen dem Druck und der Helmholtz'schen freien Energiedichte

$$P = -f = \frac{T}{V} \ln Z \quad . \tag{2.78}$$

Betrachtet man zudem die Ableitung von $\ln Z$ nach der Kopplung $\beta = 2Ng^{-2}$

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \left\langle -\frac{\partial S_G}{\partial \beta} \right\rangle = -\langle S_\sigma + S_\tau \rangle \quad , \tag{2.79}$$

so wird deutlich, daß der Druck bis auf eine Integrationskonstante durch Integration über β berechnet werden kann. Dabei muß noch der Vakuumsbeitrag zum Druck subtrahiert werden

$$\begin{aligned} P &= -[f(T) - f(0)] \\ &= T^4 \left(\frac{N_\tau}{N_\sigma}\right)^3 \int_0^\beta d\beta' \; \left\{ \langle S_\sigma + S_\tau \rangle_{\beta',\infty} - \langle S_\sigma + S_\tau \rangle_{\beta',N_\tau} \right\} \quad . \end{aligned} \tag{2.80}$$

Kapitel 3

Verbesserte SU(N) Wirkungen

Im vorhergehenden Kapitel wurde die Gitterformulierung einer SU(N)-Eichtheorie hergeleitet. Im Folgenden soll nun untersucht werden, wie die Plaquettewirkung im Limes $a \to 0$ den richtigen Kontinuumsausdruck reproduziert.
Bei endlichem Gitterabstand a zeigen sich dabei Korrekturen in allen Ordnungen a^{2n}, analog der in Kapitel 1 ausgeführten Betrachtungen einer skalaren Feldtheorie. Dort ist es gelungen, durch eine Hinzunahme weiterer Terme zur Gitterwirkung diese Korrekturen bis zu einer bestimmten Ordnung des Gitterabstands zu beseitigen.
Das Ziel wird also sein, alternative Formulierungen der SU(N)-Gitterwirkung zu finden, die ebenfalls den richtigen naiven Kontinuumslimes besitzen, bei denen aber die Korrekturen reduziert sind.

3.1 Naiver Kontinuumslimes

In diesem Abschnitt soll nun die Plaquettewirkung in Ordnungen des Gitterabstands entwickelt werden. Dabei wird jedoch nur die niedrigste Ordnung in der Kopplung g betrachtet.

In Abschnitt 2.3 wurde die Plaquettewirkung wie folgt definiert:

$$S_G(\{U\}) = \beta \sum_{n,\mu<\nu} \left(1 - \frac{1}{N} \mathrm{ReTr} U_{\mu,\nu}(n)\right) \quad . \tag{3.1}$$

Dabei ist die Plaquette durch

$$U_{\mu,\nu}(n) \equiv U_\mu(n) U_\nu(n+\hat{\mu}) U_\mu^\dagger(n+\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(n) \tag{3.2}$$

gegeben.
Um den naiven Kontinuumslimes zu untersuchen, muß man nun die Linkvariablen $U_\mu(n)$, die sämtliche Freiheitsgrade auf dem Gitter beinhalten, durch die Kontinuumsfelder $A_\mu(x)$ ausdrücken, die die überabzählbar vielen Freiheitsgrade auf dem kontinuierlichen Raum darstellen. Dies geschieht vermittels des Schwinger'schen Linienintegrals (2.27).
Setzt man dies in den Plaquetteterm (3.2) ein, so erhält man

$$\begin{aligned} &U_{\mu,\nu}(n) \\ &= e^{ig\int_n^{n+a\hat{\mu}} A_\mu(y)\ dy} e^{ig\int_{n+a\hat{\mu}}^{n+a\hat{\mu}+a\hat{\nu}} A_\nu(y)\ dy} e^{-ig\int_{n+a\hat{\nu}}^{n+a\hat{\mu}+a\hat{\nu}} A_\mu(y)\ dy} e^{-ig\int_n^{n+a\hat{\nu}} A_\nu(y)\ dy} \end{aligned} \tag{3.3}$$

Mit der Baker-Hausdorff Formel $e^A e^B = e^{(A+B+1/2[A,B]+\dots)}$ kann man das Produkt der Exponentialfunktionen zusammenfassen:

$$\begin{aligned} U_{\mu,\nu}(n) &= \exp\Big\{ig\Big[\int_n^{n+a\hat{\nu}} A_\nu(y+a\hat{\mu}) - A_\nu(y)\ dy \\ &\quad - \int_n^{n+a\hat{\mu}} A_\mu(y+a\hat{\nu}) - A_\mu(y)\ dy\Big] + \mathcal{O}(g^2)\Big\} \quad . \end{aligned} \tag{3.4}$$

Eine Taylorentwicklung der Felder A_μ um den Mittelpunkt der Plaquette führt dazu, daß aus den Differenzen der Felder kontinuierliche Ableitungen werden

$$\begin{aligned} &\int_n^{n+a\hat{\nu}} A_\nu(y+a\hat{\mu}) - A_\nu(y)\ dy \\ &= \int_{-a\hat{\nu}/2}^{a\hat{\nu}/2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{y^j}{j!}\partial^{(j)} \left[A_\nu(a(n+\hat{\mu}+\hat{\nu}/2)) - A_\nu(a(n+\hat{\nu}/2))\right]\ dy \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2}{(2j+1)!}\left(\frac{a}{2}\right)^{(2j+1)} \partial_\nu^{(2j)} \left[A_\nu(a(n+\hat{\mu}+\hat{\nu}/2)) - A_\nu(a(n+\hat{\nu}/2))\right] \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2}{(2j+1)!}\left(\frac{a}{2}\right)^{(2j+1)} \partial_\nu^{(2j)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{a}{(2k+1)!}\left(\frac{a}{2}\right)^{2k} \partial_\mu^{(2k+1)} A_\nu(a(n+\hat{\mu}/2+\hat{\nu}/2)) \\ &= \sum_{j=0}^{\infty} a^{2(j+1)} \sum_{k=0}^{j} c_{jk}\partial_\nu^{(2(j-k))}\partial_\mu^{(2k)}\partial_\mu A_\nu(a(n+\hat{\mu}/2+\hat{\nu}/2)) \quad , \end{aligned} \tag{3.5}$$

mit

$$c_{jk} = \frac{2^{-2j}}{(2k+1)!(2(j-k)+1)!} \quad . \tag{3.6}$$

Damit ergibt sich für den Plaquetteterm

$$\begin{aligned} &U_{\mu,\nu}(n) = \\ &\exp\Big\{ig\Big[\sum_{j=0}^{\infty} a^{2(j+1)} \sum_{k=0}^{j} c_{jk}\partial_\nu^{(2(j-k))}\partial_\mu^{(2k)} F_{\mu,\nu}^{(0)}(a(n+\hat{\mu}/2+\hat{\nu}/2))\Big] + \mathcal{O}(g^2)\Big\} \end{aligned} \tag{3.7}$$

Dabei ist $F^{(0)}_{\mu,\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\mu A_\nu$ der Kontinuumsfeldstärketensor in niedrigster Ordnung g. Indem dies in die Wirkung eingesetzt und die Exponentialfunktion entwickelt wird, ergibt sich

$$
\begin{aligned}
S_{\mu,\nu} &= 1 - \frac{1}{N}\mathrm{ReTr}\; U_{\mu,\nu} \\
&= \frac{g^2}{2N}\mathrm{Tr}\;\left[\sum_{j=0}^{\infty} a^{2(j+1)} \sum_{k=0}^{j} c_{jk}\partial_\nu^{(2(j-k))}\partial_\mu^{(2k)} F^{(0)}_{\mu,\nu}\right]^2 + \mathcal{O}(g^4) \\
&= \frac{g^2}{2N}\mathrm{Tr}\;\Big[a^4 F^{(0)}_{\mu,\nu}F^{(0)}_{\mu,\nu} + a^6\frac{1}{12}F^{(0)}_{\mu,\nu}(\partial_\mu^{(2)} + \partial_\nu^{(2)})F^{(0)}_{\mu,\nu} \\
&\quad + a^8 F^{(0)}_{\mu,\nu}\left(\frac{1}{360}(\partial_\mu^{(4)} + \partial_\nu^{(4)}) + \frac{1}{144}\partial_\mu^{(2)}\partial_\nu^{(2)}\right) F^{(0)}_{\mu,\nu} \\
&\quad + \mathcal{O}(a^{10})\Big] + \mathcal{O}(g^4) \quad .
\end{aligned} \tag{3.8}
$$

Bildet man nun den Limes $a \to 0$, so wird daraus

$$
\begin{aligned}
\lim_{a\to 0}\beta \sum_{n,\mu<\nu} S_{\mu,\nu} &= \lim_{a\to 0} a^4 \sum_{n,\mu<\nu}\left[\mathrm{Tr}\; F^{(0)}_{\mu,\nu}F^{(0)}_{\mu,\nu} + \mathcal{O}(a^2)\right] + \mathcal{O}(g^2) \\
&= \frac{1}{2}\int_V d^3x \int_0^{1/T} dx_4 \;\mathrm{Tr}\; F^{(0)}_{\mu,\nu}F^{(0)}_{\mu,\nu} + \mathcal{O}(g^2) \quad ,
\end{aligned} \tag{3.9}
$$

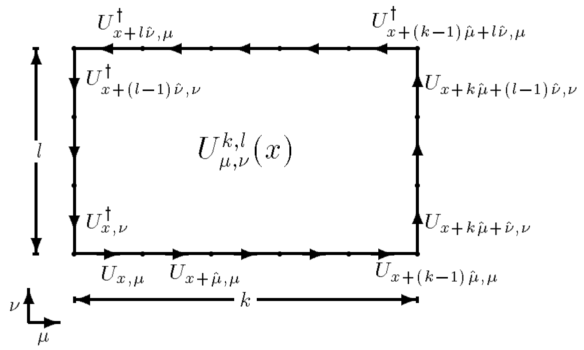
also die euklidische Kontinuumswirkung.
An dieser Stelle sei bemerkt, daß zwar die Rechnung nur in niedrigster Ordnung g durchgeführt wurde, daß aber auch der Term $g f^a_{bc} A^b_\mu A^c_\nu$ im naiven Kontinuumslimes korrekt reproduziert wird.

Wie man nun an (3.8) erkennen kann, führt also die Formulierung der Theorie auf dem Gitter durch die Einführung eines kleinstmöglichen Abstandes a in der Wirkung zu Termen, die in der Kontinuumswirkung nicht auftreten. Diese verschwinden zwar für $a \to 0$, doch in Monte-Carlo-Rechnungen bei nicht verschwindendem a sind sie für ein abweichendes Verhalten physikalischer Observablen verantwortlich. Auf diesen Punkt wird in den späteren Kapiteln noch näher eingegangen.

3.2 Konstruktion verbesserter SU(N) Wirkungen

Im letzten Abschnitt hat sich gezeigt, daß die Plaquettewirkung der SU(N) Gittereichtheorie Abweichungen in $\mathcal{O}(a^2)$ zur euklidischen Kontinuumswirkung besitzt. Es sollen nun Wirkungen konstruiert werden, bei denen diese Korrekturen erst bei höheren Ordnungen beginnen. Diese werden als *verbesserte Wirkungen* bezeichnet. Da die Verbesserungen nur in niedrigster Ordnung g vorgenommen wird, spricht man auch von *tree level improved actions.*

Wie schon in Abschnitt 2.3 erläutert wurde, sind auf dem Gitter eichinvariante Größen durch geordnete Produkte von Linkvariablen entlang geschlossener Wege gegeben. Es kann also ein Ansatz für eine verallgemeinerte Wirkung gemacht werden, indem zur Plaquettewirkung weitere Terme bestehend aus größeren Loops addiert werden. Es sollen der Einfachheit halber nur planare, rechteckige Loops, sogenannte *Wilson-Loops* betrachtet werden, die, um die Isotropie des Systems zu erhalten, in den beiden Richtungen symmetrisiert werden.



Die verallgemeinerte Wilson-Wirkung wird also definiert durch

$$\begin{aligned} S^I &= \sum_{x,\nu>\mu} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{l} a_{k,l}\, W^{k,l}_{\mu,\nu}(x) \\ &\equiv \sum_{x,\nu>\mu} S^I_{\mu,\nu}(x) \quad , \end{aligned} \tag{3.10}$$

wobei $W^{k,l}_{\mu,\nu}$ die symmetrisierte Linearkombination der $k \times l$ Wilson-Loops in der (μ,ν)-Ebene bezeichnet,

$$\begin{aligned} W^{k,l}_{\mu,\nu}(x) &= 1 - \frac{1}{2N}\Big(\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr} U^{k,l}_{\mu,\nu}(x) + \mathrm{Re}\ \mathrm{Tr} U^{l,k}_{\mu,\nu}(x)\Big) \\ &= 1 - \frac{1}{2N}\Big(\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr} L^{(k)}_{x,\mu} L^{(l)}_{x+k\hat\mu,\nu} L^{(k)+}_{x+l\hat\nu,\mu} L^{(l)+}_{x,\nu} + (k \leftrightarrow l)\Big) \quad . \end{aligned} \tag{3.11}$$

Dabei wird die abkürzende Schreibweise $L^{(k)}_{x,\mu} = \prod_{j=0}^{k-1} U_\mu(x+j\hat\mu)$ für die Produkte der Links entlang einer Kante des Wilson-Loops verwendet.

Um nun auch die verallgemeinerte Wirkung in Ordnungen a zu entwickeln, führt man zunächst wieder eine Taylorentwicklung der Wilson-Loops $U^{k,l}_{\mu,\nu}$ um ihren Mittelpunkt aus. Dazu setzt man wieder $U_\mu(x) = \exp(ig \int_0^{\hat\mu} A_\mu(x+y)\ dy)$:

$$\begin{aligned} U^{k,l}_{\mu,\nu}(x) &= L^{(k)}_{x,\mu} L^{(l)}_{x+k\hat\mu,\nu} L^{(k)+}_{x+l\hat\nu,\mu} L^{(l)+}_{x,\nu} \\ &= \exp\left\{ ig \sum_{j=0}^{l-1} \int_{j\hat\nu}^{(j+1)\hat\nu} A_\nu(x+k\hat\mu+y) - A_\nu(x+y)\ dy - (k \leftrightarrow l, \nu \leftrightarrow \mu) + \mathcal{O}(g^2) \right\} \\ &= \exp\left\{ ig \sum_{p=0}^{\infty} a^{2(p+1)} \sum_{q=0}^{p} c^{k,l}_{p,q} \partial_\nu^{(2(p-q))} \partial_\mu^{(2q)} F^{(0)}_{\mu,\nu}(x + \frac{l}{2}\hat\nu + \frac{k}{2}\hat\mu) + \mathcal{O}(g^2) \right\} \quad , \end{aligned} \tag{3.12}$$

wobei

$$c_{p,q}^{k,l} = \frac{k^{(2q+1)} l^{(2(p-q)+1)} 2^{(-2p)}}{(2q+1)!(2(p-q)+1)!} \quad . \tag{3.13}$$

Setzt man dies in (3.11) ein und entwickelt die Exponentialfunktion, so erhält man

$$\begin{aligned}
W_{\mu,\nu}^{k,l}(x) &= 1 - \frac{1}{2N}\Big(\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr} U_{\mu,\nu}^{k,l}(x) + \mathrm{Re}\ \mathrm{Tr} U_{\mu,\nu}^{l,k}(x)\Big) \\
&= \frac{g^2}{4N}\mathrm{Tr}\left\{\left[\sum_{p=0}^{\infty} a^{2(p+1)} \sum_{q=0}^{p} c_{p,q}^{k,l} \partial_\nu^{(2(p-q))} \partial_\mu^{(2q)} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x')\right]^2 + (k \leftrightarrow l)\right\} + \mathcal{O}(g^4) \\
&= \frac{g^2}{2N}\mathrm{Tr}\Big\{ a^4\ k^2 l^2 F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \\
&\qquad + a^6\ \frac{k^2 l^2 (k^2+l^2)}{24} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \left(\partial_\mu^{(2)} + \partial_\nu^{(2)}\right) F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \\
&\qquad + a^8\ \Big[\frac{k^4 l^4}{144} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \partial_\mu^{(2)} \partial_\nu^{(2)} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \\
&\qquad\quad + \frac{k^2 l^2 (k^4 + l^4)}{720} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \left(\partial_\mu^{(4)} + \partial_\nu^{(4)}\right) F_{\mu,\nu}^{(0)}(x')\Big] \\
&\qquad + \mathcal{O}(a^{10})\Big\} + \mathcal{O}(g^4)
\end{aligned} \tag{3.14}$$

und für die verallgemeinerte Wirkung folgt daraus die Entwicklung bis $\mathcal{O}(a^8)$

$$\begin{aligned}
S_{\mu,\nu}^{I}(x) &= \sum_{k=1}^{l}\ a_{k,l}\ W_{\mu,\nu}^{k,l}(x) \\
&= \frac{g^2}{2N} a^4\ \mathrm{Tr}\Big\{ \left(\sum_{k=1}^{l}\ a_{k,l}\ k^2 l^2\right) F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \\
&\qquad + a^2\ \left(\sum_{k=1}^{l}\ a_{k,l}\ k^2 l^2 (k^2 + l^2)\right) \frac{1}{24} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \left(\partial_\mu^{(2)} + \partial_\nu^{(2)}\right) F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \\
&\qquad + a^4\ \Big[\left(\sum_{k=1}^{l}\ a_{k,l}\ k^4 l^4\right) \frac{1}{144} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \partial_\mu^{(2)} \partial_\nu^{(2)} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \\
&\qquad\quad + \left(\sum_{k=1}^{l}\ a_{k,l}\ k^2 l^2 (k^4 + l^4)\right) \frac{1}{720} F_{\mu,\nu}^{(0)}(x') \left(\partial_\mu^{(4)} + \partial_\nu^{(4)}\right) F_{\mu,\nu}^{(0)}(x')\Big] \\
&\qquad + \mathcal{O}(a^6)\Big\} + \mathcal{O}(g^4) \quad .
\end{aligned} \tag{3.15}$$

An dieser Entwicklung erkennt man nun, daß man eine bis zu einer Ordnung a^{2n} verbesserte Wirkung erhält, die zum richtigen naiven Kontinuumslimes führt, wenn man die Koeffizienten $a_{k,l}$ so wählt, daß

$$\sum_{k=1}^{l} a_{k,l}\, k^2 l^2 = 1 \tag{3.16}$$

und die Vorfaktoren der Terme höherer Ordnung in a bis einschließlich der Ordnung a^{2n} gleich Null sind. Diese Überlegung führt auf ein Gleichungssystem für die Koeffizienten $a_{k,l}$, das in dieser Allgemeinheit jedoch die $a_{k,l}$ nicht eindeutig festlegt.

Die verbesserte Wirkung sollte aber nicht zuletzt auch aus Gründen der Handhabbarkeit in numerischen Simulationen möglichst *lokal* in dem Sinne, daß die berücksichtigten Loops von geringer Ausdehnung sind, und möglichst *einfach* in dem Sinne, daß die Zahl der eingehenden Terme gering ist, sein. Das bedeutet, daß die Koeffizienten für die größeren Wilson-Loops gleich Null gewählt werden.
In dieser Arbeit sollen insbesondere zwei bis $\mathcal{O}(a^4)$ verbesserte Wirkungen und eine $\mathcal{O}(a^6)$ verbesserte Wirkung untersucht werden.

$\mathcal{O}(a^4)$ verbesserte Wirkungen.
Um die Korrekturen proportional a^2 in der Wirkung zu beseitigen, genügt es, zum standard 4-Link Plaquetteterm einen weiteren Loop mit linearer Ausdehnung zwei hinzuzunehmen. Im speziellen werden hier zwei Wirkungen betrachtet, bei der einen wird zum Plaquetteterm ein 6-Link Term, der symmetrisierte 2×1 Wilson-Loop, und bei der anderen ein 8-Link Term, der 2×2 Wilson-Loop, addiert.
Die nicht verschwindenden Koeffizienten dieser verbesserten Wirkungen lauten

$$\begin{aligned} I \equiv (1,2): \qquad & a_{1,1} = \frac{5}{3} \quad , \quad a_{1,2} = -\frac{1}{6} \\ I \equiv (2,2): \qquad & a_{1,1} = \frac{4}{3} \quad , \quad a_{2,2} = -\frac{1}{48} \end{aligned} \tag{3.17}$$

Die Wirkung $S^{(1,2)}$ wurde ursprünglich von Symanzik in [5] vorgeschlagen. Die Wirkung $S^{(2,2)}$ wurde bereits in [13] und [14] im Rahmen der nicht-relativistischen QCD diskutiert.

Es sei an dieser Stelle bemerkt, daß die Beschränkung auf planare, rechteckige Loops keinesfalls notwendig ist. Es lassen sich ebenso $\mathcal{O}(a^4)$ verbesserte Wirkungen konstruieren, deren Bestandteile ebenfalls von maximaler linearer Ausdehnung zwei sind, die aber aus symmetrischen Kombinationen *nicht*-rechteckiger, planarer Loops bestehen.

$\mathcal{O}(a^6)$ verbesserte Wirkungen.
Will man auch die Korrekturen der Ordnung a^4 beseitigen, so sieht man in der Entwicklung der verallgemeinerten Wirkung (3.15), daß es bis zu dieser Ordnung

vier linear unabhängige Terme gibt. Das bedeutet, daß man i. a. auch vier linear unabhängige Gitteroperatoren benötigt, um das Gleichungssystem für die Koeffizienten lösen zu können.
Beschränkt man sich auf planare Loops, so ist dieses Problem allein mit 6-Link und 8-Link Loops nicht lösbar.
Betrachtet man aber die Entwicklung (3.14) für quadratische Wilson-Loops ($k = l$), so fällt auf, daß die Vorfaktoren der unabhängigen Terme in jeder Ordnung a im selben Verhältnis auftreten.
Es reicht also aus, zwei weitere quadratische Loops zum Plaquetteterm zu addieren, um eine $\mathcal{O}(a^6)$ Verbesserung zu erhalten. Will man weiterhin eine möglichst lokale Wirkung, so ist diese durch eine Kombination von Plaquetteterm, 2×2 und 3×3 Wilson-Loops gegeben. Die von Null verschiedenen Koeffizienten der Wirkung $S^{(3,3)}$ lauten

$$I \equiv (3,3) : \qquad a_{1,1} = \frac{3}{2} \quad , \quad a_{2,2} = -\frac{3}{80} \quad , \quad a_{3,3} = \frac{1}{810} \quad . \tag{3.18}$$

Im Folgenden soll nun das Verhalten thermodynamischer Observabler im Hochtemperatur-Limes auf einem endlichen $N_\sigma^3 \times N_\tau$ Gitter untersucht werden. In Abschnitt 2.5 wurde gezeigt, daß thermodynamische Größen auf dem Gitter durch Erwartungswerte verschiedener Teile der Wirkung gegeben sind, das bedeutet, daß auch diese Observablen bis zur selben Ordnung verbessert sind wie die Wirkung. Es soll explizit gezeigt werden, daß eine $\mathcal{O}(a^n)$ verbesserte Wirkung im Hochtemperatur-Limes zu einer $\mathcal{O}((aT)^n)$ Verbesserung thermodynamischer Observabler führt.

Kapitel 4

Störungstheoretischer Hochtemperatur-Limes

Durch die Formulierung einer Kontinuumstheorie auf dem Gitter ergeben sich stets Abweichungen zum Verhalten im Kontinuum, die zum einen auf den endlichen Gitterabstand a (*ultraviolett Cut-off*) und zum anderen auf das endliche räumliche Gittervolumen $(N_\sigma \cdot a)^3$ (*infrarot Cut-off*) zurückgehen. In Kapitel 1 und Kapitel 3 wurde gezeigt, daß der ultraviolett Cut-off zu Abweichungen in Ordnungen des Gitterabstandes in der Wirkung führt.

Um den Einfluß dieser Cut-off-Effekte auf die Thermodynamik der $SU(N)$-Eichtheorie zu studieren, ist es sinnvoll, thermodynamische Größen wie Energiedichte und Druck zu betrachten. Die Cut-off-Effekte wirken sich dabei abhängig vom betrachteten Temperaturbereich unterschiedlich stark aus. Insbesondere in der Hochtemperatur-Phase bekommen die ultraviolett Cut-off-Effekte ein großes Gewicht. Dies ist darauf zurückzuführen, daß einerseits der endliche Gitterabstand im Ortsraum einem ultraviolett Cut-off im Impulsraum entspricht (s. Kap. 1), andererseits das System bei hohen Temperaturen von Moden hoher Impulse dominiert wird.

Wie in Kapitel 2 erläutert, erwartet man für den Hochtemperatur-Limes der $SU(N)$ Yang-Mills Theorie das Verhalten eines idealen Gluon-Gases. Insbesondere die Energiedichte ϵ/T^4 sollte im Limes $T \to \infty$ den Stefan-Boltzmann Wert $\epsilon_{\mathrm{SB}}/T^4 = (N^2-1)\pi^2/15$ annehmen. In numerischen Simulationen der $SU(N)$-Gittereichtheorie zeigt sich aber, daß die Energiedichte einen Hochtemperatur-Limes erreicht, der aufgrund des ultraviolett Cut-offs deutlich vom Idealen-Gas-Limes abweicht.
Wenn man die zeitliche Ausdehnung des Gitters N_τ vergrößert, werden diese Korrekturen geringer. Betrachtet man nämlich das System bei der selben physikalischen Temperatur, so ergibt sich wegen $a = (N_\tau T)^{-1}$ eine Verringerung des ultraviolett

Cut-offs.
Die Vermutung liegt nun nahe, daß mit verbesserten Wirkungen aufgrund der Reduzierung der $\mathcal{O}(a^2)$ Korrekturen auch die N_τ Abhängigkeit des Hochtemperatur-Limes verbessert und dieser schon bei kleinen Gittern gut approximiert wird. Die Abweichungen aufgrund der endlichen Werte von N_τ sollen nun im Folgenden in niedrigster Ordnung Störungstheorie untersucht werden.

4.1 Schwache-Kopplungs-Entwicklung der verallgemeinerten SU(N) Wilson-Wirkung

In der Gitterformulierung ist die Temperatur durch $T = (N_\tau a)^{-1}$ gegeben. Andererseits ist der Gitterabstand a durch die Kopplung g in der Weise bestimmt, daß $\lim_{g\to 0} a(g) = 0$. Bei festem N_τ entspricht also dem Hochtemperatur-Limes ($T \to \infty$) der Limes $g \to 0$, der sogenannte Schwache-Kopplungs-Limes.
Zur Untersuchung des Hochtemperatur-Limes der Energiedichte entwickelt man diese also nach der Kopplung g und betrachtet die niedrigste Ordnung.

Nach Gleichung (2.72) genügt es, die Differenz der Erwartungswerte von räumlicher und zeitlicher Wirkung störungstheoretisch zu berechnen

$$\begin{aligned}\frac{\epsilon}{T^4} &= \frac{6N}{g^2} N_\tau^4 \Big(\langle S_\sigma^I \rangle - \langle S_\tau^I \rangle \Big) + O(g^2) \\ &= 6(N^2-1) N_\tau^4 \Big(S_\sigma^{I,(2)} - S_\tau^{I,(2)} \Big) + O(g^2) \quad , \end{aligned} \tag{4.1}$$

wobei $S_\sigma^{I,(2)}$ und $S_\tau^{I,(2)}$ die $O(g^2)$ Entwicklungskoeffizienten der Erwartungswerte von räumlicher und zeitlicher Wirkung bezeichnen,

$$\begin{aligned}\langle S_\sigma^I \rangle &\equiv \frac{1}{3N_\sigma^3 N_\tau} \langle \sum_{x,\mu<\nu<4} S_{\mu,\nu}^I(x) \rangle = g^2 \frac{N^2-1}{4N} S_\sigma^{I,(2)} + O(g^4) \\ \langle S_\tau^I \rangle &\equiv \frac{1}{3N_\sigma^3 N_\tau} \langle \sum_{x,\mu=1,2,3} S_{\mu,4}^I(x) \rangle = g^2 \frac{N^2-1}{4N} S_\tau^{I,(2)} + O(g^4) \quad . \end{aligned} \tag{4.2}$$

Alle weiteren Terme in der Energiedichte sind $O(g^2)$, tragen also zur führenden Ordnung nicht bei [15].

Die Entwicklungskoeffizienten $S_\sigma^{I,(2)}$ und $S_\tau^{I,(2)}$ sollen nun ermittelt werden. Da

$$\left\langle S_{\mu,\nu}^I \right\rangle = \frac{1}{N_\sigma^3 N_\tau} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{l} a_{k,l} \left\langle \sum_x W_{\mu,\nu}^{k,l}(x) \right\rangle = \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{l} a_{k,l} W_{\mu,\nu}^{(k,l),(2)} + \mathcal{O}(g^4) \tag{4.3}$$

betrachtet man zunächst eine Entwicklung des symmetrisierten $k \times l$ Wilson-Loops

$$W^{k,l}_{\mu,\nu}(x) = 1 - \frac{1}{2N}\Big(\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr} L^{(k)}_{x,\mu} L^{(l)}_{x+k\hat{\mu},\nu} L^{(k)+}_{x+l\hat{\nu},\mu} L^{(l)+}_{x,\nu} + (k \leftrightarrow l)\Big) \quad . \tag{4.4}$$

Man ersetzt nun wieder die Linkvariablen durch[†]

$$U_{x,\mu} = e^{igA_\mu(x+\hat{\mu}/2)} \quad , \tag{4.5}$$

dabei sind die Felder A_μ am jeweiligen Linkmittelpunkt gegeben. Damit erhält man durch Entwicklung der Exponentialfunktion

$$\begin{aligned} &\sum_x W^{k,l}_{\mu,\nu}(x) \\ &= \frac{g^2}{4N} \mathrm{Tr} \sum_x \Big[A^{(k)}_\mu(x) - A^{(k)}_\mu(x+l\hat{\nu}) - \Big(A^{(l)}_\nu(x) - A^{(l)}_\nu(x+k\hat{\mu})\Big)\Big]^2 + (k \leftrightarrow l) \\ &\quad + \mathcal{O}(g^4) \quad , \end{aligned} \tag{4.6}$$

wobei

$$A^{(k)}_\mu(x) \equiv \sum_{j=0}^{k-1} A_\mu(x + (j+1/2)\hat{\mu}) \quad . \tag{4.7}$$

Nun transformiert man die Felder in den Impulsraum. Die Summe im Impulsraum wird dabei abgekürzt durch

$$\int_p = \frac{1}{N_\sigma^3 N_\tau} \sum_{(p\neq 0)} \quad , \tag{4.8}$$

wobei $p_\mu = (2\pi/N_\sigma)n_\mu$, $n_\mu = 0,\ 1, \ldots,\ N_\sigma - 1$ für $\mu = 1,\ 2,\ 3$ and $p_4 = (2\pi/N_\tau)n_4$, $n_4 = 0,\ 1, \ldots,\ N_\tau - 1$. Die Gittereichfelder haben dann die Impulsraumdarstellung,

$$A_\mu(x) = \int_p e^{ipx} A_\mu(p) \quad , \tag{4.9}$$

mit $A_\mu \equiv \frac{1}{2} A^a_\mu \lambda_a$.

[†]Im Gegensatz zu der Ersetzung $U_{x,\mu} = e^{ig\int_0^a \hat{\mu}A_\mu(x+y)\ dy}$ in Abschnitt 3.2 bezeichnen die Felder A_μ hier nicht die Kontinuumseichfelder. Die Ersetzung entspricht hier lediglich einer Darstellung der $SU(N)$ durch ihre Generatoren λ_a, denn $A_\mu \equiv A^a_\mu \lambda_a/2$. Die Zahl der Freiheitsgrade wird also nicht verändert.

Damit erhält man aus (4.6)

$$
\begin{aligned}
&\sum_x W^{k,l}_{\mu,\nu}(x) \\
&= \frac{g^2}{4N}\mathrm{Tr}\sum_x \left[\int_p e^{ipx}e^{ip_\mu/2}\Delta^{(k)}_\mu(p)\Delta^-_\nu(lp)A_\mu(p) - (k\leftrightarrow l,\mu\leftrightarrow\nu)\right]^2 \\
&\quad +(k\leftrightarrow l) + \mathcal{O}(g^4) \\
&= \frac{g^2}{4N}\mathrm{Tr}\sum_x \int_p\int_{p'}\Bigg[e^{i(p+p')x} \\
&\quad \cdot\Big(e^{i(p_\mu/2+p'_\mu/2)}\Delta^{(k)}_\mu(p)\Delta^{(k)}_\mu(p')\Delta^-_\nu(lp)\Delta^-_\nu(lp')A_\mu(p)A_\mu(p') \\
&\quad -e^{i(p_\mu/2+p'_\nu/2)}\Delta^{(k)}_\mu(p)\Delta^{(l)}_\nu(p')\Delta^-_\mu(lp)\Delta^-_\nu(kp')A_\mu(p)A_\nu(p')\Big) \\
&\quad +(k\leftrightarrow l,\mu\leftrightarrow\nu)\Bigg] + (k\leftrightarrow l) + \mathcal{O}(g^4) \quad ,
\end{aligned}
\tag{4.10}
$$

mit den Abkürzungen

$$
\begin{aligned}
\Delta^-_\mu(p) &= e^{ip_\mu}-1 \quad , \\
\Delta^{(k)}_\mu(p) &= \sum_{l=0}^{k-1} e^{ilp_\mu} \quad .
\end{aligned}
\tag{4.11}
$$

Nun kann man die Summe über x ausführen, da

$$\sum_x e^{i(p+p')x} = N_\sigma^3 N_\tau \;\delta_{(p+p'),0} \quad . \tag{4.12}$$

Wertet man weiterhin den Spuroperator aus, so bekommt man wegen $\mathrm{Tr}\lambda_a\lambda_b = 2\delta_{a,b}$

$$\sum_x W^{k,l}_{\mu,\nu}(x) = \frac{g^2}{4N}\sum_a\int_p \; A^a_\mu(-p)G^{k,l}_{\mu,\nu}(p)A^a_\nu(p) + \mathcal{O}(g^4) \tag{4.13}$$

mit

$$G^{k,l}_{\mu,\nu}(p) = N^{k,l}_{\mu;\nu}(p)\delta_{\mu,\nu} - M^{k,l}_{\mu,\nu}(p) \quad . \tag{4.14}$$

Der diagonale Bestandteil von $G^{k,l}_{\mu,\nu}$ ist dabei

$$
\begin{aligned}
N^{k,l}_{\mu;\nu}(p) &\equiv \frac{1}{2}\left(\Delta^{(k)}_\mu(p)\Delta^{(k)}_\mu(-p)\Delta^-_\nu(lp)\Delta^-_\nu(-lp) + (k\leftrightarrow l)\right) \\
&= \left(2\left[k + 2\sum_{j=1}^{k-1}(k-j)\cos(jp_\mu)\right]\sum_{\sigma=1}^{4}\sin^2(lp_\sigma/2)\right) + (k\leftrightarrow l)
\end{aligned}
\tag{4.15}
$$

und der nicht-diagonale Bestandteil ist[†]

$$\begin{aligned} M^{k,l}_{\mu,\nu}(p) &\equiv \frac{1}{2}\left(e^{i(p_\mu/2-p_\nu/2)}\Delta^{(k)}_\mu(p)\Delta^{(l)}_\nu(-p)\Delta^-_\nu(lp)\Delta^-_\mu(-kp)+(k\leftrightarrow l)\right) \\ &= \left(2\left[\sum_{i=1}^{k-1}\sin((2i+1)p_\mu/2)\right]\left[\sum_{j=1}^{k-1}\sin((2j+1)p_\nu/2)\right]\right) \\ &\quad +(k\leftrightarrow l) \quad . \end{aligned} \tag{4.16}$$

Für die Wirkung erhält man damit die Entwicklung

$$\begin{aligned} S^I_{\mu,\nu} &= \sum_x \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{l} a_{k,l}\, W^{k,l}_{\mu,\nu}(x) \\ &= \frac{g^2}{4N}\int_p \left(\sum_a A^a_\mu(-p)G^I_{\mu,\nu}(p)A^a_\nu(p)\right) + \mathcal{O}(g^4) \quad , \end{aligned} \tag{4.17}$$

mit

$$G^I_{\mu,\nu}(p) = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{l} a_{k,l}\, G^{k,l}_{\mu,\nu}(p) \quad . \tag{4.18}$$

Eichfixierung.
Um die Erwartungswerte (4.1) zu berechnen, muß nun noch das Haar'sche Maß DU auf ein Maß transformiert werden, das die Gittereichfelder $A_\mu(p)$ enthält. Diese Transformation führt zunächst auf die Jakobi-Determinante, die man durch logarithmieren in die Wirkung ziehen kann.
Des weiteren muß die Integration so ausgeführt werden, daß nur über Äquivalenzklassen bezüglich der Eichtransformationen integriert wird. Dies führt zu einem Eichfixierungsterm, der die Eichung der Felder festlegt und zur *Faddeev-Popov-Determinante*, die man ebenfalls durch logarithmieren zu einer effektiven Wirkung hinzuziehen kann.
Damit kann man das Maß schreiben

$$\begin{aligned} DU\ e^{-S_G[U]} &= DA\ D\bar{c}\ Dc\ e^{-S_{\text{eff}}[A,\bar{c},c]} \quad , \\ S_{\text{eff}}[A,\bar{c},c] &= S_G[A]+S_{GF}[A]+g^2S_{Ma\ss}[A]+g^2S_{FP}[A,\bar{c},c] \quad . \end{aligned} \tag{4.19}$$

Dabei bezeichnen c und $\bar{c}$ die Faddeev-Popov-Geistfelder.

An (4.19) sieht man, daß in niedrigster Ordnung g außer der Eichwirkung S_G nur der Eichfixierungsterm S_{GF} beiträgt. In dieser Ordnung liefert das Integral über die Geistfelder also keinen Beitrag.

[†] $M^{k,l}_{\mu,\nu}$ hat auch nicht-verschwindende Elemente auf der Diagonalen ($\mu=\nu$). Wegen der Identität $\Delta^{(k)}_\mu(p)\Delta^-_\mu(lp) = \Delta^{(l)}_\mu(p)\Delta^-_\mu(kp)$ gilt $M^{k,l}_{\mu,\mu} = N^{k,l}_{\mu;\mu}$, so daß diese Terme sich in der Matrix $G^{k,l}_{\mu,\nu}$ gegenseitig aufheben.

Der Eichfixierungsterm S_{GF} läßt sich in folgender Form kovariant definieren:

$$S_{GF}[A] = \frac{1}{2}\int_p \sum_{a,\mu,\nu} A_\mu^a(-p)\ \xi g_\mu^I(p) g_\nu^I(p)\ A_\nu^a(p) \quad . \tag{4.20}$$

Es sei bemerkt, daß die Wahl der Terme $g_\mu^I(p)$ beliebig ist. Erwartungswerte Eichinvarianter Operatoren müssen unabhängig von dieser Wahl sein.

In niedrigster Ordnung g erhält man also für die effektive Wirkung aus (4.17) und (4.20)

$$S_{\text{eff}}^{I,(0)} = \frac{1}{2}\int_p \sum_{a,\mu,\nu} A_\mu^a(-p)\ \Delta_{\mu,\nu}^I(p)\ A_\nu^a(p) \quad , \tag{4.21}$$

mit dem *inversen Propagator*

$$\Delta_{\mu,\nu}^I(p) = G_{\mu,\nu}^I(p) + \xi g_\mu^I(p) g_\nu^I(p) \quad . \tag{4.22}$$

Daraus folgt die Zustandssumme im Schwachen-Kopplungs-Limes

$$Z = \int \prod_{p,\mu,a} dA_\mu^a(p) e^{-S_{\text{eff}}^{I,(0)}[A]} \quad . \tag{4.23}$$

Für Zweipunktfunktionen kann man nun die Integration über die Gittereichfelder ausführen, da die Wirkung quadratisch in den Feldern ist

$$\begin{aligned} \left\langle A_\mu^a(-p) A_\nu^a(p) \right\rangle &= \frac{1}{Z}\int \prod_{p',\sigma,b} dA_\sigma^b(p')\ A_\mu^a(-p) A_\nu^a(p)\ e^{-S_{\text{eff}}^{I,(0)}[A]} \\ &= N_\sigma^3 N_\tau {\Delta_{\mu,\nu}^I}^{-1}(p) \quad , \end{aligned} \tag{4.24}$$

so daß man auch den Entwicklungskoeffizienten in $\mathcal{O}(g^2)$ der Erwartungswerte der $k \times l$ Wilson-Loops aus (4.13) berechnen kann

$$\begin{aligned} W_{\mu,\nu}^{(k,l),(2)} & \\ &= \frac{g^2}{4N}\int_p \sum_a \left[N_{\mu,\nu}^{k,l} \left\langle A_\mu^a(-p) A_\mu^a(p) \right\rangle + N_{\mu,\nu}^{k,l} \left\langle A_\nu^a(-p) A_\nu^a(p) \right\rangle - 2M_{\mu,\nu}^{k,l} \left\langle A_\mu^a(-p) A_\nu^a(p) \right\rangle \right] \\ &= \frac{g^2}{4N}(N^2-1)\int_p N_{\mu,\nu}^{k,l} {\Delta_{\mu,\mu}^I}^{-1}(p) + N_{\nu,\mu}^{k,l} {\Delta_{\nu,\nu}^I}^{-1}(p) - 2M_{\mu,\nu}^{k,l} {\Delta_{\mu,\nu}^I}^{-1}(p) \quad . \end{aligned} \tag{4.25}$$

Und schließlich bekommt man

$$\begin{aligned} S_\sigma^{I,(2)} &= \frac{1}{3}\sum_{\mu<\nu<4} S_{\mu,\nu}^{I,(2)} = \frac{4N}{3g^2(N^2-1)} \sum_{\mu<\nu<4} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{l} a_{k,l}\ W_{\mu,\nu}^{(k,l),(2)} \quad , \\ S_\tau^{I,(2)} &= \frac{1}{3}\sum_{\mu=1}^{3} S_{\mu,4}^{I,(2)} = \frac{4N}{3g^2(N^2-1)} \sum_{\mu=1}^{3} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{l} a_{k,l}\ W_{\mu 4}^{(k,l),(2)} \quad . \end{aligned} \tag{4.26}$$

Um die Terme unter der Impulssumme in (4.25) in geschlossener Form als Funktion der Impulse zu erhalten, wurde die Inversion der Matrix $\Delta^I_{\mu,\nu}(p)$ in einem Mathematica-Programm ausgeführt. Dabei wurde die Unabhängigkeit aller Resultate von der Wahl der Eichfixierungsfunktion $g^I_\mu(p)$ und des Eichfixierungsparameters ξ explizit überprüft.

Die Entwicklungskoeffizienten in (4.26) können dann in folgender Form geschrieben werden

$$S^{I,(2)}_{\mu,\nu} = \int_p \frac{R^I_{\mu,\nu}(p)}{R^{I,d}(p)} \quad . \tag{4.27}$$

Dabei sind die Eichfixierungsterme für die verschiedenen Wirkungen so gewählt, daß die Funktionen $R^I_{\mu,\nu}(p)$ und $R^{I,d}(p)$ von möglichst einfacher Form sind. Die expliziten Resultate sind für die Wirkungen $I = (1,1)$, $I = (1,2)$, $I = (2,2)$ und $I = (3,3)$ in Anhang B aufgeführt.

Es sollen nun die Cut-off-Effekte im Hochtemperatur-Limes der Energiedichte, die mit den störungstheoretischen Ausdrücken (4.27) berechnet werden können, diskutiert werden.

4.2 Cut-off-Effekte in der Wilson-Wirkung

Für die Plaquette-Wirkung wurde die Eichfixierungsfunktion $g_\mu = 2s_\mu$ gewählt, wobei von nun an die abkürzende Schreibweise $s_\mu \equiv \sin(p_\mu/2)$ verwendet wird. Dies entspricht in niedrigster Ordnung a der Impulsraumdarstellung von $\partial_\mu A_\mu$ auf dem Gitter. Mit der Feynman-Eichung $\xi = 1$ wird der Propagator diagonal

$$\Delta_{\mu,\nu}(p) = D(p)\delta_{\mu,\nu} \quad \text{mit} \quad D(p) = 4\sum_{i=1}^{4} s_i^2 \quad . \tag{4.28}$$

Damit erhält man für die Energiedichte im Hochtemperatur-Limes, wie auch in [16] hergeleitet

$$\frac{\epsilon}{T^4} = 6(N^2-1)N_\tau^4 \int_p \frac{s_1^2 - s_4^2}{D(p)} \quad . \tag{4.29}$$

Es soll zunächst die Abhängigkeit des Hochtemperatur-Limes der Energiedichte vom ultraviolett Cut-off, also die N_τ-Abhängigkeit, im thermodynamischen Limes ($N_\sigma \to \infty$) untersucht werden. Die Effekte durch das endliche räumliche Volumen sollen im nächsten Abschnitt diskutiert werden.

Den thermodynamischen Limes erhält man, indem man die Summe über die räumlichen Impulse durch ein Integral ersetzt

$$\frac{1}{N_\sigma^3} \sum_{p_1,p_2,p_3} \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d^3p \quad . \tag{4.30}$$

Die Summe über die zeitlichen Impulse p_4 kann explizit ausgeführt werden [17]. Das Ergebnis ist

$$\frac{\epsilon}{T^4} = 4(N^2-1)N_\tau^4 \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d^3p \, \frac{\omega}{\sqrt{1+\omega^2}} \frac{1}{\exp(N_\tau x)-1} \quad , \tag{4.31}$$

mit $x = 2\ln(\omega + \sqrt{1+\omega^2})$ und $\omega^2 = s_1^2 + s_2^2 + s_3^2$. Die rechte Seite von (4.31) kann nun nach $1/N_\tau$ entwickelt werden [16]. Bis zur Ordnung $1/N_\tau^4$ findet man

$$\frac{\epsilon}{T^4} = (N^2-1)\frac{\pi^2}{15}\left[1 + \frac{10}{21}\frac{\pi^2}{N_\tau^2} + \frac{1}{3}\frac{\pi^2}{N_\tau^4} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N_\tau^6}\right)\right] \quad . \tag{4.32}$$

Daran wird deutlich, daß der Hochtemperatur-Limes der Energiedichte in der Tat auf Gittern mit großer zeitlicher Ausdehnung im thermodynamischen Limes den Stephan-Boltzmann-Wert gut approximiert. Die Korrekturen hierzu sind jedoch $\mathcal{O}(N_\tau^{-2})$.
In Abbildung 4.1 werden die volle N_τ-Abhängigkeit von ϵ/T^4 aus (4.31) sowie die Beiträge bis $\mathcal{O}(N_\tau^{-2})$ und $\mathcal{O}(N_\tau^{-4})$ aus (4.32) verglichen.
Es zeigt sich, daß schon bei $N_\tau \geq 6$ der führende Korrekturterm in (4.32) mehr als 70% der gesammten Korrekturen ausmacht.

4.3 Cut-off-Effekte mit verbesserten Wirkungen

Mit den störungstheoretischen Berechnungen in Abschnitt 4.1 ist es nun möglich, auch die endlichen Cut-off-Effekte im Hochtemperatur-Limes der Energiedichte bei den verbesserten Wirkungen zu untersuchen. Insbesondere soll diskutiert werden, ob die verbesserten Wirkungen auch eine Verbesserung der Thermodynamik im Hochtemperatur-Limes zur Folge haben, was die zentrale Frage dieser Arbeit ist.

Da wir für die untersuchten verbesserten Wirkungen keine Eichfixierungsterme finden konnten, die die inversen Propagatoren $\Delta^I_{\mu,\nu}$ diagonalisieren, läßt sich Gleichung (4.29) nicht direkt verallgemeinern. Vielmehr erhält man mit den in Anhang B definierten Funktionen $R^I_{\mu,\nu}(p)$ und $R^{I,d}(p)$ aus (4.27) für den führenden Term in der störungstheoretischen Entwicklung der Energiedichte

$$\frac{\epsilon}{T^4} = \frac{3}{2}(N^2-1)N_\tau^4 \int_p \frac{R^I_\sigma(p) - R^I_\tau(p)}{R^{I,d}(p)} \quad , \tag{4.33}$$

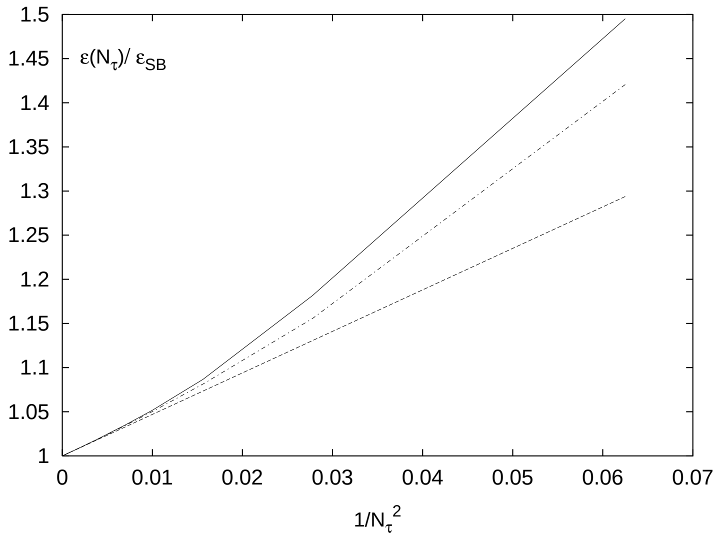


Abbildung 4.1: Hochtemperatur-Limes der Energiedichte eines $SU(N)$ Gluon-Gases bei endlichem Cut-off, $aT = 1/N_\tau$, in Einheiten des Kontinuumwertes ϵ_{SB} (durchgezogene Linie). Die gestrichelte Linie zeigt die Beiträge bis $\mathcal{O}(N_\tau^{-2})$ und die gestrichelt-gepunktete die Beiträge bis $\mathcal{O}(N_\tau^{-4})$ zu diesem Verhältnis.

mit

$$\begin{aligned} R^I_\sigma &= \frac{1}{3}(R^I_{1,2} + R^I_{1,3} + R^I_{2,3}) \quad , \\ R^I_\tau &= \frac{1}{3}(R^I_{1,4} + R^I_{2,4} + R^I_{3,4}) \quad . \end{aligned} \tag{4.34}$$

Mit (4.33) wurde nun die Energiedichte für verschiedene $N_\sigma^3 \times N_\tau$ Gitter berechnet, indem die endlichen Impulssummen numerisch ausgeführt wurden. Wir haben dabei Gitter mit $N_\sigma/N_\tau = 4$ und $N_\sigma/N_\tau = 6$ betrachtet. Die Ergebnisse für die Plaquette-Wirkung sowie die verschiedenen verbesserten Wirkungen sind in Tabelle 4.1 zusammengefaßt.

Wie ein Vergleich der Werte bei festem N_τ für die Verhältnisse $N_\sigma/N_\tau = 4$ und $N_\sigma/N_\tau = 6$ zeigt, gibt es neben den ultraviolett Cut-off-Effekten auch infrarot Cut-off-Effekte, die in der Größenordnung von 1% liegen.
Um die reinen ultraviolett Cut-off-Effekten zu analysieren, muß man das System wiederum für unendliches räumliches Volumen, also im thermodynamischen Limes, betrachten und die Summen über die räumlichen Impulse durch Integrale ersetzen. Für die verbesserten Wirkungen wurde jedoch keine Möglichkeit gefunden, die Integration analytisch auszuführen, wie für die Wilson-Wirkung im vorherigen Abschnitt, da die Integranden wesentlich komplexer sind. Deshalb wurden die Integrale

Tabelle 4.1: Abweichungen vom Stephan-Boltzmann-Wert des Hochtemperatur-Limes der Energiedichte auf Gittern endlichen räumlichen Volumens mit zeitlicher Ausdehnung N_τ für die standard Plaquette-Wirkung und verschiedene verbesserte Wirkungen.

	$\epsilon(N_\tau, N_\sigma)/\epsilon_{\rm SB}$							
	$N_\sigma = 4N_\tau$				$N_\sigma = 6N_\tau$			
N_τ	I=(1,1)	I=(1,2)	I=(2,2)	I=(3,3)	I=(1,1)	I=(1,2)	I=(2,2)	I=(3,3)
4	1.4833	0.9747	1.0758	1.0325	1.4917	0.9830	1.0842	1.0408
6	1.1697	0.9857	1.0001	0.9962	1.1780	0.9940	1.0085	1.0046
8	1.0748	0.9884	0.9919	0.9893	1.0832	0.9968	1.0002	0.9977
10	1.0398	0.9884	0.9897	0.9884	1.0482	0.9967	0.9981	0.9968
12	1.0229	0.9883	0.9889	0.9882	1.0312	0.9966	0.9973	0.9966

Tabelle 4.2: Abweichungen vom Stephan-Boltzmann-Wert des Hochtemperatur-Limes der Energiedichte auf Gittern unendlichen räumlichen Volumens mit zeitlicher Ausdehnung N_τ für die standard Plaquette-Wirkung und verschiedene verbesserte Wirkungen. In der letzten Zeile stehen die Koeffizienten des führenden Korrekturterms definiert in Gleichung (4.35). Die Zahlen in Klammern sind die Differenz zwischen c^I bei $N_\tau = 32$ und dem extrapolierten Wert.

	$\epsilon(N_\tau)/\epsilon_{\rm SB}$			
N_τ	I=(1,1)	I=(1,2)	I=(2,2)	I=(3,3)
4	1.495186	0.986568	1.087709	1.044357
6	1.181566	0.997528	1.011994	1.008095
8	1.086700	1.000309	1.003752	1.001199
10	1.051708	1.000253	1.001582	1.000320
12	1.034756	1.000150	1.000780	1.000110
c^I	0.4762	0.044 (2)	0.178 (2)	0.394 (19)

numerisch mit dem *Gauß-Legendre-Verfahren* approximiert. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4.2 aufgelistet.

Wie sich zeigt, führen die verbesserten Wirkungen schon auf Gittern mit kleiner zeitlicher Ausdehnung zu einer drastischen Reduzierung der Abweichungen vom Kontinuumswert ϵ_{SB}/T^4. So betragen diese bei $N_\tau = 6$ für alle von uns betrachteten verbesserten Wirkungen weniger als 1.2%, ein Wert, der für die Wilson-Wirkung erst für $N_\tau \geq 20$ unterschritten wird.
Insbesondere für die verbesserte Wirkung $S^{(1,2)}$ sind die Abweichungen für alle $N_\tau \geq 4$ kleiner als 1.5%, was der Plaquette-Wirkung mit nahezu 50% Abweichung bei $N_\tau = 4$ gegenüberzustellen ist. Diese $\mathcal{O}(a^4)$ verbesserte Wirkung führt auf kleinen Gittern ($N_\tau = 4, 6, 8, 10$) sogar zu geringeren Abweichungen als die $\mathcal{O}(a^6)$ verbesserte Wirkung $S^{(3,3)}$.

Wie im vorhergehenden Abschnitt dargestellt, sind die Abweichungen der Energiedichte für die standard Wilson-Wirkung $\mathcal{O}((aT)^2)$. Für die verbesserten Wirkungen kann man nun erwarten, daß diese Abweichungen entsprechend der Verbesserung erst bei einer höheren Ordnung $N_\tau^{-\alpha}$ beginnen, wobei $\alpha = 4$ für die beiden $\mathcal{O}(a^4)$ verbesserten Wirkungen $S^{(1,2)}$ und $S^{(2,2)}$ und $\alpha = 6$ für die $\mathcal{O}(a^6)$ verbesserte Wirkung $S^{(3,3)}$ ist,

$$\frac{\epsilon(N_\tau)}{T^4} = (N^2-1)\frac{\pi^2}{15}\left[1 + c^I\left(\frac{\pi}{N_\tau}\right)^\alpha + \mathcal{O}(N_\tau^{-(\alpha+2)})\right] \quad . \tag{4.35}$$

Um dieses Verhalten zu bestätigen, haben wir ϵ/T^4 für Gitter mit zeitlicher Ausdehnung bis $N_\tau \leq 32$ berechnet. Durch Lösen der Gleichung (4.35) nach c^I bei festem N_τ, erhält man einen Schätzwert

$$c^I(N_\tau) = \left[\frac{\epsilon}{\epsilon_{SB}} - 1\right]\left(\frac{N_\tau}{\pi}\right)^\alpha \quad . \tag{4.36}$$

Dieser Schätzwert sollte für große N_τ wie N_τ^{-2} gegen den Entwicklungskoeffizienten c^I konvergieren, falls die Annahme (4.35) richtig ist. In Abbildung 4.2 ist $c^I(N_\tau)$ für die verschiedenen Wirkungen aufgetragen, dabei bestätigt sich das vermutete Skalenverhalten.

Durch eine Extrapolation nach $N_\tau \to \infty$ unter Berücksichtigung der N_τ^{-2} Korrektur ergeben sich die Koeffizienten c^I, die in Tabelle 4.2 aufgeführt sind. Als Fehler ist die Differenz zwischen Extrapolationswert c^I und dem letzten Schätzwert $c^I(N_\tau = 32)$ angegeben.

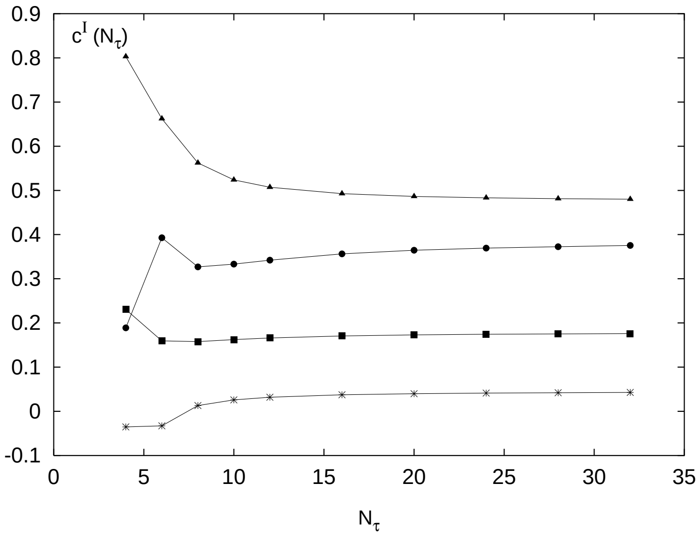


Abbildung 4.2: Schätzwert für den Koeffizienten c^I der führenden Cut-off-Korrektur, der in Gleichung (4.36) definiert ist. Dabei ist $\alpha = 2$ für die standard Wilson-Wirkung (Dreiecke), $\alpha = 4$ für $I = (1,2)$ (Kreuze), $I = (2,2)$ (Kreise) und $\alpha = 6$ für $I = (3,3)$ (Quadrate). Im Limes $N_\tau \to \infty$ führt dieser Schätzwert zu den Koeffizienten c^I, die in Tabelle 4.2 angegeben sind.

Kapitel 5

Monte-Carlo-Simulation und Resultate

Im vorhergehenden Kapitel wurde das Verhalten der Energiedichte und des Druckes einer $SU(N)$-Gittereichtheorie mit verbesserten Wirkungen im Limes hoher Temperatur mit der Methode der Gitterstörungstheorie bestimmt. Dabei wurden die thermischen Erwartungswerte der entsprechenden in Abschnitt 2.5 hergeleiteten Gitteroperatoren in niedrigster Ordnung der Kopplung g entwickelt.
In diesem Kapitel soll nun die Thermodynamik mit verbesserten Wirkungen bei endlichen Temperaturen insbesondere im Bereich des Phasenübergangs untersucht werden. Bei der Bestimmung des thermischen Erwartungswertes eines Gitteroperators $\mathcal{O}$,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{n,\mu} dU_\mu(n)\ \mathcal{O}[U]\ e^{-S_G[U]} \quad , \tag{5.1}$$

ist man unweigerlich mit der Berechnung eines sehr hochdimensionalen Integrals über die Konfiguration der Linkvariabeln U konfrontiert. Um beispielsweise diese Integration für ein $24^3 \times 4$ Gitter auszuführen müßte über 1769472 reelle Parameter integriert werden. Die analytische Berechnung ist also praktisch ausgeschlossen.
Bei den üblichen numerischen Integrationsverfahren wie der Trapezregel oder der Simpson-Regel steigt der Rechenaufwand bei gleichbleibender Genauigkeit der Approximation exponentiell mit der Dimension des Integrals an, so daß sie ebenfalls nicht in Frage kommen.

Zur Berechnung derartiger Integrale wurden numerische Verfahren entwickelt, die wegen ihrer statistischen Natur als *Monte-Carlo-Verfahren* bezeichnet werden. Diese sollen im Folgenden erläutert werden.

5.1 Monte-Carlo-Integration

Einfaches Monte-Carlo.
Die Methode der *Monte-Carlo-Integration* basiert auf der folgenden Beobachtung. Ist X eine im Intervall $[0,1]$ gleichverteilte Zufallsvariable, so ist $f(X)$ eine erwartungstreue Schätzung für das Integral $\int_0^1 f(x)\ dx$. Betrachtet man also n unabhängige Realisierungen $x_i \in [0,1]$ dieser Verteilung, so erhält man

$$\int_0^1 f(x)\ dx \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i) \quad , \tag{5.2}$$

wobei der Fehler der Schätzung proportional zu $\frac{1}{\sqrt{n}}$ ist. Da dieses Konvergenzverhalten unabhängig von der Dimension des Integrals ist, ist dieses Verfahren bei hochdimensionalen Integralen den üblichen numerischen Verfahren überlegen.

Importance Sampling.
Eine Verbesserung dieses *einfachen Monte-Carlo's* erreicht man mit dem sogenannten *Importance Sampling*. Die Idee dabei ist, daß man die Verteilung der Zufallszahlen x_i so wählt, daß möglichst viele Werte in die Bereiche fallen in denen der Integrand f groß ist, die Verteilung also den Integranden bereits gut approximiert. Ist p nun eine Approximation der Funktion f, so ist nun wegen

$$\int_0^1 f(x)\ dx = \int_0^1 \frac{f(x)}{p(x)} p(x)\ dx = \int_0^1 F(x)\ dP(x) \quad , \tag{5.3}$$

$$\text{mit} \quad F(x) = \frac{f(x)}{p(x)} \ ; \ P(x) = \int_0^x p(\tau)\ d\tau \ , \ P(1) = 1 \quad , \tag{5.4}$$

eine Schätzung mit verringerter Varianz gegeben durch

$$\int_0^1 f(x)\ dx \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} F(u_i) \quad , \tag{5.5}$$

wobei die u_i nun die Wahrscheinlichkeitsverteilung P aufweisen.

Metropolis-Methode.
Nun kommen wir wieder auf das Problem der Berechnung von Erwartungswerten in der Gittereichtheorie zurück. Zieht man den Normierungsfaktor $\frac{1}{Z}$ unter das Integral,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int \prod_{n,\mu} dU_\mu(n)\ \mathcal{O}[U]\ \frac{e^{-S_G[U]}}{Z} \quad , \tag{5.6}$$

so fällt auf, daß wegen der Exponentialfunktion der Hauptbeitrag nur von einem kleinen Bereich des Konfigurationsraums stammt. Es ist also sinnvoll Importance Sampling mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P[U] = \frac{e^{-S_G[U]}}{Z} \tag{5.7}$$

durchzuführen. Gelingt es also Zufallskonfigurationen $U_i = \{U_\mu(n)\}_i$ mit der Verteilung (5.7) zu generieren, so muß zur Berechnung des Erwartungswertes eines Operators nur noch über $\mathcal{O}(U)$ gemittelt werden. Diese Verteilung zu erzeugen ist aber nicht ohne weiteres möglich, zumal der Nenner Z der Verteilungsfunktion das Integral über alle Konfigurationen selbst enthält.

Eine Idee dieses Problem zu umgehen liefert die Ergodentheorie. Diese besagt, daß für ein statistisch mechanisches System im thermodynamischen Gleichgewicht das Ensemblemittel einer Observabeln gleich dem zeitlichen Mittel dieser Größe ist, wenn man das System seiner dynamischen Entwicklung überläßt und die Beobachtungszeit groß ist.
In Analogie dazu erzeugt man bei der *Metropolis-Methode* eine Abfolge von Konfigurationen U_i, die mit wachsender Schrittzahl die richtige Verteilung realisieren. Dies geschieht in einem *Markov-Prozess*, dessen Fixpunkt P[U] ist und der ergodisch ist, der also alle möglichen Konfigurationen mit einer Wahrscheinlichkeit größer Null erreicht.
Beginnend mit einer Startkonfiguration U_0 werden in der Markovkette sukzessive Konfigurationen $U_1, U_2, \ldots$ aus der jeweils Vorhergehenden mit einer Übergangswahrscheinlichkeit

$$\tilde{P}(U_i \longrightarrow U_{i+1}) \tag{5.8}$$

erzeugt.
Da die Startkonfiguration möglicherweise weit vom Maximum der Verteilung, also vom thermodynamischen Gleichgewicht, entfernt ist, ist zunächst eine Anzahl von Schritten notwendig, in denen die Markovkette ihrem Fixpunkt zustrebt, dieses bezeichnet man als *Thermalisieren.* Nach dem Thermalisieren erhält man dann den Erwartungswert (5.6) aus dem „zeitlichen“ Mittel über N Elemente der Kette

$$\langle \mathcal{O} \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathcal{O}(U_i) \tag{5.9}$$

mit einem statistischen Fehler proportional $1/\sqrt{N}$.

Eine hinreichende Bedingung dafür, daß der Fixpunkt des Markovprozesses die gewünschte Wahrscheinlichkeitsverteilung $P[U]$ ist, stellt das sogenannte *Detailed Balance* dar

$$P[U]\tilde{P}(U \longrightarrow U') = P[U']\tilde{P}(U' \longrightarrow U) \quad . \tag{5.10}$$

An dieser Stelle zeigt sich der Vorteil der Metropolis-Methode, denn Detailed Balance läßt sich ohne die Kenntnis der Zustandssumme Z erreichen. Mit (5.7) lautet die Bedingung

$$e^{-S_G[U]}\tilde{P}(U \longrightarrow U') = e^{-S_G[U']}\tilde{P}(U' \longrightarrow U) \quad . \tag{5.11}$$

Das Problem ist nun darauf reduziert, eine Übergangsvorschrift $U \longrightarrow U'$ zu definieren, die (5.11) erfüllt.

Es haben sich verschiedene Algorithmen etabliert, die dieses leisten und in der Regel auf einem sogenannten *lokalen Update* basieren, bei dem jeweils nur ein einzelner Link verändert wird. Dies hat den Vorteil, daß jeweils nur der Teil der Wirkung in (5.11) berücksichtigt werden muß, der den zu verändernden Link enthält. Dieser lokale Update-Schritt ist der Gestalt, daß sowohl Detailed Balance als auch die lokale Ergodizität erfüllt sind. Führt man nun an jedem Link des Gitters einen lokalen Update aus (sog. *Sweep*), so hat auch dieser *globale Update* diese Eigenschaften.

Der erste Algorithmus dieser Art stammt von Metropolis et al. (1953), der sog. *Metropolis Algorithmus*, speziell für $SU(3)$ gibt es aber effektivere Algorithmen. Wir verwenden für den lokalen Update den sogenannten *Heatbath-Algorithmus* in Verbindung mit dem *Overrelaxation-Algorithmus*, der die Korrelation der gebildeten Konfigurationen herabsenkt. Diese Algorithmen sowie deren Implementierung werden in Abschnitt 5.3 erläutert.

Fehleranalyse mit der Jackknife-Methode.
Da die Konfiguration nach einem Update nicht unabhängig zur Vorhergehenden ist, diese also korreliert sind, verliert die naive Schätzung für den Erwartungswert und die Varianz der Verteilung einer Observablen ihre Gültigkeit. Eine Fehlerschätzung die die Korrelation der Daten berücksichtigt, liefert die *Jackknife-Methode*. Dabei unterteilt man die Daten in N gleichlange Blöcke und bildet N reduzierte Datensätze bei denen jeweils einer der Blöcke weggelassen wird. Ist nun T der Mittelwert einer Observablen O auf dem Ausgangsdatensatz und T_i die Mittelwerte auf den reduzierten Datensätzen, so ist eine verbesserte Schätzung des Erwartungswertes und des Fehlers gegeben durch

$$\bar{O} \approx \bar{J} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} J_i \tag{5.12}$$

$$\Delta O \approx \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}(J_i - \bar{J})^2}{N(N-1)}} \quad , \tag{5.13}$$

wobei

$$J_i = NT - (N-1)T_i \quad . \tag{5.14}$$

5.2 Numerische Resultate

In dem nun folgenden Abschnitt sollen die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation, die für die beiden $\mathcal{O}(a^4)$ verbesserten $SU(3)$-Wirkungen $S^{(2,2)}$ und $S^{(1,2)}$ und die $\mathcal{O}(a^6)$ verbesserte Wirkung $S^{(3,3)}$ durchgeführt wurden, dargestellt werden. Insbesondere soll untersucht werden, ob die in Kapitel 4 störungstheoretisch für den

Hochtemperatur-Limes ermittelten Verringerungen der endlichen Cut-off-Effekte in der Energiedichte und dem Druck sich auch bei endlichen Temperaturen ($g > 0$) wieder finden. Dazu wird ein Vergleich mit Monte-Carlo-Daten für die standard Plaquette-Wirkung aus [4] durchgeführt.

Bei der Untersuchung dieser Verbesserungen haben wir uns im wesentlichen auf die Wirkung $S^{(2,2)}$ konzentriert und diese auf einem $24^3 \times 4$ Gitter sowohl bei sehr großen Kopplungen $\beta = 10.0,\ 15.0,\ 20.0$ als auch bei Kopplungen im Bereich des Phasenübergangs $\beta = 4.3, \ldots,\ 5.6$ simuliert. Daraus wird die kritische Kopplung β_c gewonnen wie in Abschnitt 5.2.1 dargestellt. Die Messungen bei großen Kopplungen sollen in Abschnitt 5.2.3 der Berechnung der Energiedichte in niedrigster Ordnung g dienen, um das Konvergenzverhalten gegen die störungstheoretischen Resultate zu untersuchen.
Weiterhin wurden für diese Wirkung auch Monte-Carlo-Rechnungen bei $T = 0$ auf einem 24^4 Gitter für $\beta = 4.3, \ldots,\ 5.6$ durchgeführt, um die Temperaturskala $T/T_c(\beta)$ aus der sogenannten *Saitenspannung* zu ermitteln (Abschnitt 5.2.2) und um den Druckverlauf nicht-störungstheoretisch zu bestimmen (Abschnitt 5.2.4).

Mit den Wirkungen $S^{(1,2)}$ und $S^{(3,3)}$ wurden lediglich Simulationen bei großen Kopplungen auf Gittern der Ausdehnung $16^3 \times 4$ durchgeführt um ebenfalls einen Vergleich mit den störungstheoretischen Resultaten für den Hochtemperatur-Limes der Energiedichte anzustellen, was auch in Abschnitt 5.2.3 geschehen soll.

In Tabelle 5.1 findet sich eine Liste der für die verschiedenen Wirkungen und Gittergrößen simulierten Kopplungen, der Anzahl der Sweeps bei diesen Kopplungen, sowie der jeweiligen Quadrics-Rechner, auf denen das Programm ausgeführt wurde. Auf die Architektur der Rechner wird in Abschnitt 5.3.3 eingegangen.

Bei allen Rechnungen bestand ein Sweep jeweils aus einem globalen Heatbath-Schritt und vier globalen Overrelaxation-Schritten nach deren Ausführung die benötigten Gitteroperatoren gemessen wurden. Zum Thermalisieren wurden jeweils 500 Heatbath-Schritte bei den Kopplungen im Bereich des Phasenübergangs und 600 bei den großen Kopplungen durchgeführt. Als Startkonfiguration dienten unterhalb des kritischen Punktes Zufallskonfigurationen und oberhalb von β_c geordnete Konfigurationen, bei denen alle Links auf die Einheitsmatrix gesetzt werden.

5.2.1 Bestimmung der kritischen Kopplung β_c für $S^{(2,2)}$

Es soll nun zunächst die kritische Kopplung für die $SU(3)$-Eichtheorie mit der verbesserten Wirkung $S^{(2,2)}$ auf einem $24^3 \times 4$ Gitter aus den Monte-Carlo-Daten

Tabelle 5.1: Die mit den verbesserten $SU(3)$-Wirkungen $S^{(2,2)}$, $S^{(1,2)}$ und $S^{(3,3)}$ auf verschieden großen Gittern simulierten Kopplungen, sowie die Anzahl der Sweeps (1 Sweep entspricht 1 Heatbath- und 4 Overrelaxation-Schritten) bei diesen Kopplungen und der Typ des verwendeten Rechners.

	$S^{(2,2)}$				$S^{(1,2)}$		$S^{(3,3)}$	
	$N_\sigma = 24$ $N_\tau = 4$		$N_\sigma = 24$ $N_\tau = 24$		$N_\sigma = 16$ $N_\tau = 4$		$N_\sigma = 16$ $N_\tau = 4$	
β	Sweeps	Rechner	Sweeps	Rechner	Sweeps	Rechner	Sweeps	Rechner
4.300	10000	QH2	3000	QH2				
4.380	10000	QH2	3000	QH2				
4.393	10000	QH2						
4.396	25000	Q4	3200	QH2				
4.399	54000	Q4						
4.400	20000	QH2	3000	QH2				
4.406	10000	QH2	3000	QH2				
4.430	8000	Q4	3000	QH2				
4.450	10000	QH2	3350	QH2				
4.500	10000	QH2	3000	QH2				
4.550			3000	QH2				
4.600	10000	QH2	3000	QH2				
4.700			3000	QH2				
4.800	10000	QH2	3000	QH2				
5.000	10000	QH2	3000	QH2	5800	Q1		
5.200	10000	QH2	3000	QH2				
5.400	10000	QH2	3000	QH2				
5.600	10000	Q4	3000	QH2				
6.000	5100	Q4			19000	Q1	4700	Q1
10.000	5250	Q4			5800	Q1	2300	Q1
15.000	4000	Q4			21400	Q1	3500	Q1
20.000	4000	Q4			12000	Q1	3600	Q1

bestimmt werden. In Abschnitt 2.4 wurde erläutert, daß der Ordnungsparameter des Deconfinement-Phasenübergangs in der reinen $SU(3)$-Gittereichtheorie der Polyakov-Loop ist. Die beiden Phasen lassen sich danach unterscheiden, ob $|\langle L\rangle|$ gleich Null oder größer Null ist.
Auf einem Gitter mit endlichem räumlichem Volumen wird dieser Übergang aber durch Finite-Size-Effekte ausgewaschen, so daß der Polyakov-Loop keine Diskontinuität bei der kritischen Kopplung β_c aufweist, sondern nur einen raschen Anstieg, und sich die beiden Phasen nicht klar von einander trennen lassen. Streng genommen ist $|\langle L\rangle| \equiv 0$ für alle β auf endlichen Gittern. Dies äußert sich in der Monte-Carlo-Simulation darin, daß die Konfigurationen bei Kopplungen in der Nähe von β_c nicht in einer Phase verweilen, sondern in der Abfolge der Iterationen zwischen der symmetrischen Phase, in der der Polyakov-Loop $Z(3)$-symmetrisch um den Ursprung

der komplexen Ebene verteilt ist, und der gebrochenen Phase, in der der Polyakov-Loop nur um eine der drei Einheitswurzeln von $Z(3)$ streut, hin- und herspringt.
Bei der Simulation des $24^3 \times 4$ Gitters wurden die Polyakov-Loops nach dem Thermalisieren nach jedem Sweep berechnet und über das räumliche Gitter gemittelt. In Abbildung 5.1 ist $\langle |L| \rangle$ über der Kopplung β aufgetragen. Man erkennt, daß der Betrag des Polyakov-Loops einen starken Anstieg, jedoch keine Diskontinuität aufweist.

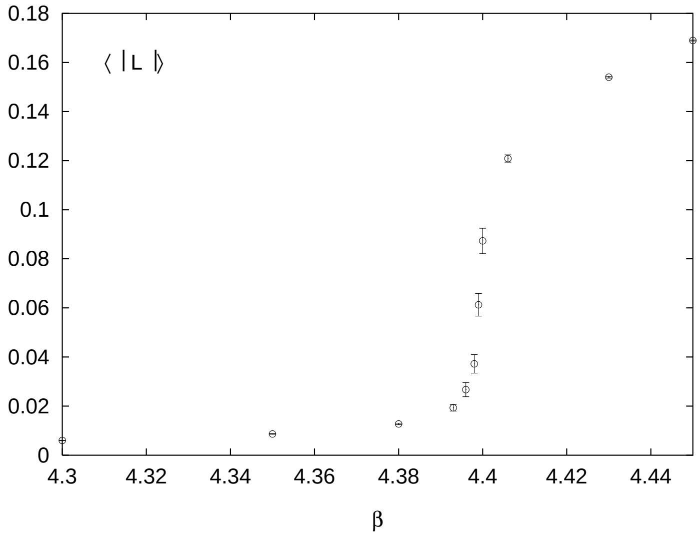


Abbildung 5.1: Betrag des Polyakov-Loops für die verbesserte Wirkung $S^{(2,2)}$ auf einem $24^3 \times 4$ Gitter im Bereich des Phasenübergangs.

Um den Punkt des Phasenübergangs zu ermitteln, ist es deshalb sinnvoller, die *Suszeptibilität* des Polyakov-Loops

$$\chi_L = N_\sigma^3(\langle |L|^2 \rangle - \langle |L| \rangle^2) \tag{5.15}$$

zu analysieren. Diese ist ein Maß für die Steigung von $\langle |L|^2 \rangle$ und hat ihr Maximum an der Stelle des Phasenübergangs β_c.
Es wäre praktisch sehr aufwendig, die Position dieses Maximums durch eine Art Intervallschachtelung der simulierten Kopplungen zu ermitteln.
Daher bedient man sich einer numerischen Methode, die die Interpolation der simulierten Daten unter Berücksichtigung der statistischen Verteilung der Zustände erlaubt, dies ist die sogenannte *Zustandsdichtenmethode* oder *Desity of States Method* (DSM) [18]. Die DSM beruht darauf, daß das Histogramm der Wirkung aus einer Monte-Carlo-Simulation mit sehr hoher Statistik bei einem β-Wert schon die gesamte thermodynamische Information enthält, da die Zustandsdichte unabhängig vom Wert der Kopplung ist. Man erhält damit die statistische Verteilung einer Observablen bei einer Kopplung β' durch reskalieren der Verteilung bei der simulierten

Kopplung β.
Eine Verbesserung dieses Verfahrens ist die *Multihistogrammethode*, bei der man die Zustandsdichte aus mehreren, sich überlappenden Wirkungshistogrammen bei benachbarten Kopplungen ermittelt und somit die geringe Statistik in den Randbereichen der einzelnen Verteilungen ausgleicht.

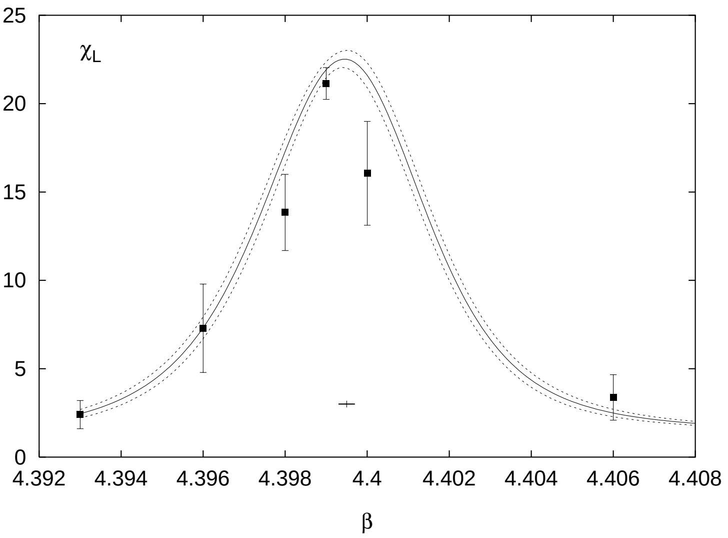


Abbildung 5.2: Die Suszeptibilität des Polyakov-Loops für die Wirkung $S^{(2,2)}$ auf einem $24^3 \times 4$ Gitter. Die durchgezogene Linie ist die DSM-Interpolation, die gestichelten Linien sind das Jackknife-Fehlerband. Grundlage der Interpolation sind die Daten bei den Kopplungen $\beta = 4.393,\ 4.396,\ 4.398\ ,4.399,\ 4.400,\ 4.406$. Der waagerechte Balken ist die Jackknife-Schätzung für die Stelle des Maximums $\beta_c = 4.3995(2)$ mit dem Jackknife-Fehler.

Mit der Multihistogrammethode wurde die Suszeptibilität des Polyakov-Loops aus den Monte-Carlo-Daten bei $\beta = 4.393,\ 4.396,\ 4.398\ ,4.399,\ 4.400$ und 4.406 interpoliert. In Abbildung 5.2 sind die interpolierte Kurve sowie die Monte-Carlo-Daten dargestellt. Die Fehler wurden jeweils aus einer Jackknife-Schätzung mit 15 Blöcken gewonnen. Diese Fehler sind dabei jedoch auf den Wertebereich der Observablen, also der Suszeptibilität, bezogen. Um eine Schätzung für den Erwartungswert und den Fehler von β_c zu erhalten, wurde die Interpolation auf den 15 Jackknife-Datensätzen einzeln durchgeführt, jeweils die Stelle des Maximums bestimmt und daraus anschließend die Jackknife-Schätzung für β_c sowie der Fehler berechnet.
Daraus ergibt sich für die kritische Kopplung auf dem $24^3 \times 4$ Gitter mit der Wirkung $S^{(2,2)}$

$$\beta_c = 4.3995(2) \quad . \tag{5.16}$$

5.2.2 Bestimmung der Temperaturskala T/T_c für $S^{(2,2)}$

Wie oben beschrieben, erhält man die Erwartungswerte thermodynamischer Observabler aus den Monte-Carlo-Rechnungen als Funktion der Kopplung β. Diese Kopplung ist keine physikalische Größe, sondern nur ein dimensionsloser interner Parameter in der Gitterformulierung.
Es besteht nun aber ein funktionaler Zusammenhang zwischen der Kopplung und dem Gitterabstand $a = a(\beta)$. Da die Temperatur nun ihrerseits durch die endliche Ausdehnung des Gitters in der imaginären Zeitrichtung bestimmt ist, $T = (N_\tau a)^{-1}$, kann man auf einem gegebenen Gitter auch eine Zuordnung zwischen der Kopplung und der physikalischen Temperatur bestimmen.
Da in der Gittereichtheorie nur dimensionslose Größen in Einheiten des Gitterabstands bestimmt werden können, ist man darauf beschränkt, dimensionslose Verhältnisse von dimensionsbehafteten physikalischen Größen zu ermitteln. Dies bedeutet, daß lediglich das Verhältnis T/T_c in Abhängigkeit von der Kopplung β bestimmt werden kann, wobei T_c die physikalische Übergangstemperatur bezeichnet.

Die Berechnung einer physikalischen Größe wie der *Saitenspannung* $\sqrt{\hat{\sigma}} = \sqrt{\sigma}a$ legt nun den Gitterabstand und somit auch die Temperatur fest, denn es gilt

$$\frac{T}{T_c}(\beta) = \frac{N_\tau a(\beta_c)}{N_\tau a(\beta)} = \frac{\sqrt{\hat{\sigma}}(\beta_c)}{\sqrt{\hat{\sigma}}(\beta)} \quad . \tag{5.17}$$

Es wurde also die Temperaturskala durch Berechnung der Saitenspannung in Einheiten des Gitterabstands bei verschiedenen Kopplungen ermittelt. Dazu wurden die zeitlichen Wilson-Loops $\hat{W}(\hat{R}, \hat{S})$ in einer Simulation mit der verbesserten Wirkung $S^{(2,2)}$ auf einem 24^4 Gitter bei verschiedenen β-Werten (s. Tabelle 5.1) alle 100 Sweeps berechnet. Es wurden alle ebenen Loops mit der zeitlichen Ausdehnung $\hat{S} = 1, 2, \ldots, 12$ und der räumlichen Ausdehnung $\hat{R} = 1, 2, \ldots, 12$, sowie die Loops mit diagonaler räumlicher Ausdehnung über zwei Raumrichtungen mit Abständen $\hat{R} = \sqrt{2}, 2\sqrt{2}, \ldots, 9\sqrt{2}$ berechnet und über das Gitter gemittelt.

In Abschnitt 2.4 wurde dargestellt, daß sich aus den Erwartungswerten zeitlicher Wilson-Loops auf einem Gitter bei Temperatur Null ($N_\tau = N_\sigma$) das Potential zwischen statischen Quarks ermitteln läßt. Mit wachsender zeitlicher Ausdehnung $\hat{S}$ der Wilson-Loops zeigen diese folgendes Verhalten

$$\hat{W}(\hat{R}, \hat{S}) \propto e^{-(\hat{V}_0 + \frac{\hat{\alpha}}{\hat{R}} + \hat{\sigma}\hat{R})\hat{S}} \quad . \tag{5.18}$$

Definiert man nun die sogenannten *lokalen Potentiale* durch

$$\hat{V}_{\hat{S}}(\hat{R}) = \log\left(\frac{\hat{W}(\hat{R}, \hat{S})}{\hat{W}(\hat{R}, \hat{S}+1)}\right) \quad , \tag{5.19}$$

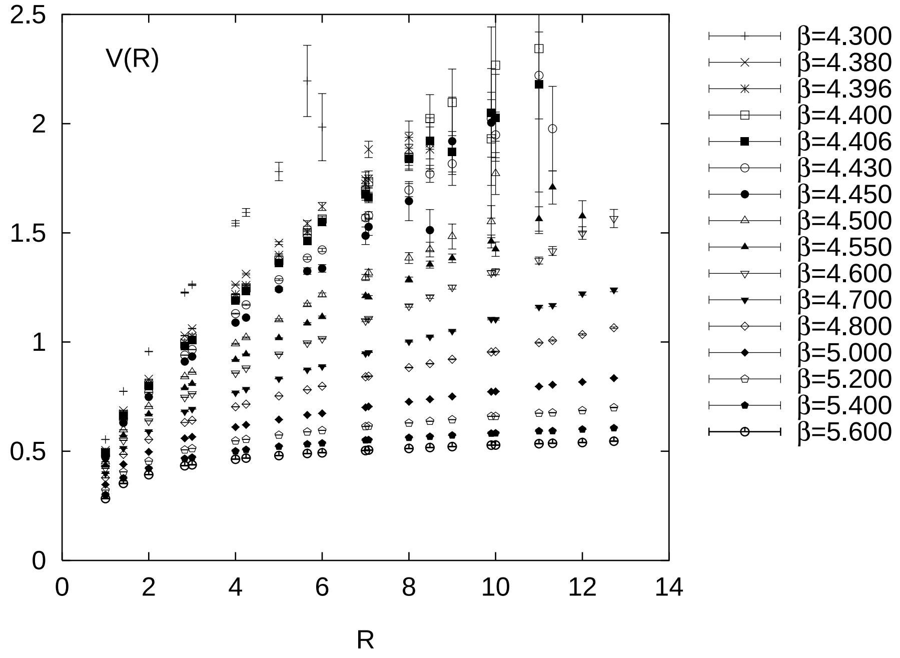


Abbildung 5.3: Die aus den Wilson-Loops ermittelten Potentiale auf einem 24^4 Gitter bei verschiedenen Kopplungen β. Bei den kleinen β-Werten wurden einige Punkte bei großem Abstand R weggelassen, da diese aufgrund sehr großer Fehler irrelevant sind.

so konvergieren diese für große zeitliche Ausdehnung $\hat{S}$ gegen das Potential

$$\hat{V}(\hat{R}) = \hat{V}_0 + \frac{\hat{\alpha}}{\hat{R}} + \hat{\sigma}\hat{R} \quad . \tag{5.20}$$

Aus den Erwartungswerten der Wilson-Loops wurden die lokalen Potentiale gemäß Gleichung (5.19) berechnet und die Fehler mit der Jackknife-Methode geschätzt. Diese weisen für kleine $\hat{S}$ einen schnellen Abfall auf und erreichen abhängig vom β-Wert und der räumlichen Ausdehnung ab einem $\hat{S}_{\text{min}}$ ein Plateau. Um $\hat{V}(\hat{R})$ zu bestimmen, wurden die lokalen Potentiale dann jeweils für $\hat{S} \geq \hat{S}_{\text{min}}$ mit einer Konstanten gefittet. Für die Kopplungen $\beta = 4.300, \ldots, 4.430$ wurde $\hat{S}_{\text{min}} = 3$, für $\beta = 4.450, \ldots, 5.000$ wurde $\hat{S}_{\text{min}} = 4$ und für $\beta = 5.200, \ldots, 5.600$ wurde $\hat{S}_{\text{min}} = 5$ gewählt. Die so gewonnenen Potentiale $\hat{V}(\hat{R})$ sind in Abbildung 5.3 dargestellt.

Um aus den Potentialen den numerischen Wert der Saitenspannung bei den untersuchten Kopplungen zu extrahieren, fittet man die Potentiale mit einem Kleinste-Quadrate-Fit mit einer Fitfunktion von der Form (5.20). Mit diesem allgemeinen Ansatz mit drei Fitparametern zeigten sich jedoch sehr große Schwankungen in Abhängigkeit vom Fitbereich. Deshalb wurden die Potentiale mit einem zweiparametrigen Ansatz gefittet, bei dem der Koeffizient des coulombartigen Terms $\hat{\alpha} =$

$\pi/12$ gewählt wurde [19]. Dieser Wert stammt aus Berechnungen in der Stringtheorie und erwies sich als konsistent mit den Ergebnissen der dreiparametrigen Fits. Im Bereich kleiner räumlicher Abstände zeigen sich darüberhinaus Abweichungen vom $1/\hat{R}$ Verhalten, die auf den ultraviolett Cut-off zurückgehen. Um diese Abweichungen zu berücksichtigen wurde der Coulomb-Term in der Fitfunktion durch eine Gitter-Version

$$\left(\frac{1}{|\vec{R}|}\right)_L = \frac{4\pi}{N_\sigma^3}\sum_{\vec{k}^j}\frac{\cos(\vec{k}^j\vec{R})}{4\sum_{i=1}^3\sin^2((k^j)_i/2)} \quad \text{mit } (k^j)_i = \frac{2\pi}{N_\sigma}j_i \quad \text{für } i=1,2,3 \tag{5.21}$$

ersetzt.

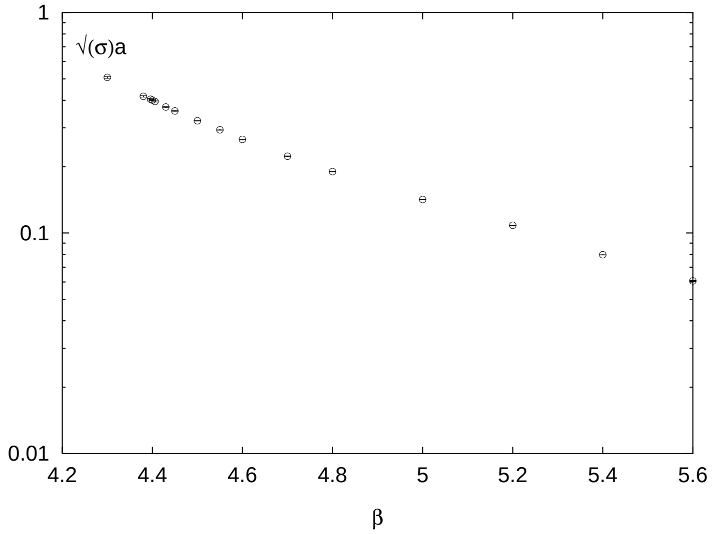


Abbildung 5.4: Die aus den zweiparametrigen Fits an die Potentiale ermittelte Saitenspannung $\sqrt{\hat{\sigma}}$ in Einheiten des Gitterabstands als Funktion der Kopplung.

Die Potentiale wurden mit der zweiparametrigen Fitfunktion gefittet, wobei die untere Grenze $\hat{R}_{\rm min}$ des Fitbereichs variiert wurde. Es zeigten sich dabei Schwankungen in der Saitenspannung im Bereich kleiner $\hat{R}_{\rm min}$ die sich aber bei größeren $\hat{R}_{\rm min}$, stabilisieren. Die Ergebnisse der Saitenspannung sind also in dem Bereich, wo der lineare Term im Potential dominiert, unabhängig vom Fitbereich. Der Wert und der Fehler für die Saitenspannung wurde dann über die Ergebnisse mit $\hat{R}_{\rm min} \geq \hat{R}^\star_{\rm min}$ gemittelt:

$$\hat{\sigma} = \left(\sum_{\hat{R}_{\rm min}\geq\hat{R}^\star_{\rm min}}\frac{\hat{\sigma}(\hat{R}_{\rm min})}{(\Delta\hat{\sigma}(\hat{R}_{\rm min}))^2}\right)\left(\sum_{\hat{R}_{\rm min}\geq\hat{R}^\star_{\rm min}}\frac{1}{(\Delta\hat{\sigma}(\hat{R}_{\rm min}))^2}\right)^{-1} \tag{5.22}$$

$$\Delta\hat{\sigma} = \left(\frac{1}{N}\sum_{\hat{R}_{\rm min}\geq\hat{R}^\star_{\rm min}}\frac{1}{(\Delta\hat{\sigma}(\hat{R}_{\rm min}))^2}\right)^{-\frac{1}{2}}. \tag{5.23}$$

Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.4 graphisch dargestellt und in Anhang A zusammengefaßt.

Aus der Saitenspannung am kritischen Punkt ($\beta_c \approx 4.400$) kann man nun auch die kritische Temperatur in Einheiten der physikalischen Saitenspannung berechnen. Mit

$$\sqrt{\hat{\sigma}}(\beta_c) = 0.4007(25) \tag{5.24}$$

erhält man

$$\frac{T_c}{\sqrt{\sigma}} = \frac{1}{N_\tau \sqrt{\hat{\sigma}}(\beta_c)} = 0.624(4) \quad . \tag{5.25}$$

Aus dem "experimentiellen" Wert $\sqrt{\sigma} = 420\text{MeV}$ ergibt sich somit für die kritische Temperatur in physikalischen Einheiten $T_c = 262(2)\text{MeV}$. Diese Abschätzung ist im Einklang mit dem Resultat aus [20].

Aus der Saitenspannung $\sqrt{\hat{\sigma}}$ kann man mit Hilfe von Gleichung (5.17) die Temperaturskala $T/T_c(\beta)$ berechnen. Diese ist ebenfalls in Anhang A tabelliert. Um die Zwischenwerte zu bestimmen wurden die Punkte mit einem kubischen Spline interpoliert, was in Abbildung 5.5 graphisch aufgetragen ist.

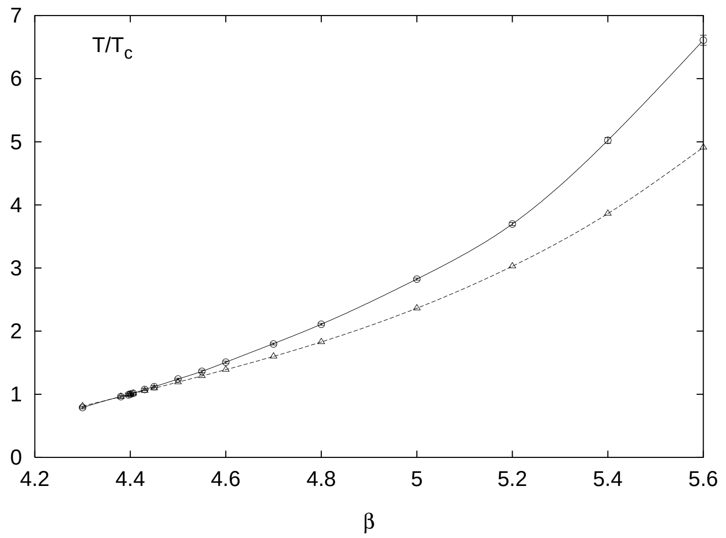


Abbildung 5.5: Temperaturskalen aus der Saitenspannung (Kreise) und aus der renormierten Kopplung (Dreiecke). Die durchgezogene bzw. gestrichelte Linie sind Interpolationen der Datenpunkte mit einem kubischen Spline.

Zudem wurde noch eine weitere Methode zur Bestimmung der Temperaturskala angewandt, die auf der störungstheoretischen 2-Loop Formel $a\Lambda_L = R(\beta)$ basiert, die im Limes schwacher Kopplung asymptotisch gilt. Dabei ist Λ_L eine universale Konstante und

$$R(\beta) = \left(\frac{\beta}{2Nb_0}\right)^{\frac{b1}{2b_0^2}} \exp\left[-\frac{\beta}{4Nb_0}\right] \quad , \tag{5.26}$$

wobei für $N_f = 0$, also für die reine Eichtheorie,

$$b_0 = \frac{11N}{48\pi^2} \quad , \quad b_1 = \frac{34}{3}\left(\frac{N}{16\pi^2}\right)^2 \quad . \tag{5.27}$$

In dem hier betrachteten Bereich ($g^2 \approx 1$) ist die Skalenrelation allerdings verletzt, die Abweichungen können jedoch dadurch kompensiert werden, daß man die *nackte Kopplung* β durch eine *renormierte Kopplung*

$$\beta_{\text{eff}} = \frac{(N^2-1)}{4\langle S^{(2,2)}\rangle_0} \tag{5.28}$$

ersetzt. Dabei bezeichnet $\langle S^{(2,2)}\rangle_0$ den Erwartungswert der Wirkung bei Temperatur Null. Dies hat sich als eine gute Näherung im Fall der Wilson-Wirkung erwiesen [4]. Die Temperaturskala erhält man daraus durch

$$\frac{T}{T_c} = \frac{R(\beta_{\text{eff},c})}{R(\beta_{\text{eff}})} \quad . \tag{5.29}$$

Zur Berechnung der renormierten Kopplung wurden die Erwartungswerte $\langle S^{(2,2)}\rangle_0$ in der Simulation auf dem 24^4 Gitter bestimmt, indem nach jedem Sweep die Plaquette sowie der 2×2 Wilson-Loop über die Konfiguration gemittelt wurde. Die Resultate sind in Anhang A tabelliert.

Die sich aus diesem störungstheoretischen Ansatz gemäß (5.29) ergebende Temperaturskala ist als gestrichelte Linie in Abbildung 5.5 aufgetragen. Es zeigen sich deutliche Abweichungen zu der Temperaturskala, die aus dem Verhalten einer physikalischen Observablen, der Saitenspannung, gewonnen wurde. Der Vorteil dieser zum Teil noch störungstheoretischen Methode liegt aber darin, daß sie mit wesentlich geringerem Aufwand verbunden ist und zu einer groben Analyse tauglich ist.

5.2.3 Energiedichte niedrigster Ordnung g

In Kapitel 4 wurden die störungstheoretischen Hochtemperatur-Limiten der Energiedichte für die drei betrachteten verbesserten Wirkungen berechnet. Dabei hat sich gezeigt, daß diese zu einer starken Reduzierung der durch ultraviolett Cut-off-Effekte bedingten Abweichungen vom Wert des idealen Gases führen.

Dieser Abschnitt soll zunächst nur dazu dienen, die störungstheoretischen Ergebnisse durch einen Vergleich mit Monte-Carlo-Daten für Kopplungen weit oberhalb von β_c zu untermauern. Dazu wird der Term niedrigster Ordnung g der Energiedichte studiert, welcher nach Gleichung (4.1) durch die Differenz der räumlichen und zeitlichen Anteile der Wirkung gegeben ist

$$\left(\frac{\epsilon}{T^4}\right)_0 = 3\beta N_\tau^4 \left(\langle S_\sigma^I \rangle - \langle S_\tau^I \rangle\right) \quad . \tag{5.30}$$

Mit allen drei verbesserten Wirkungen $S^{(1,2)}$, $S^{(2,2)}$ und $S^{(3,3)}$ sowie der standard Wirkung $S^{(1,1)}$ wurden dazu Monte-Carlo-Rechnungen bei $\beta = 6.0,\ 10.0,\ 15.0$ und 20.0 durchgeführt, wobei jeweils nach jedem Sweep die in der Wirkung vorkommenden Loops getrennt nach räumlicher und zeitlicher Orientierung über die Konfiguration gemittelt wurden. Für die Wirkungen $S^{(1,2)}$, $S^{(3,3)}$ und $S^{(1,1)}$ hatte das Gitter die Dimension $16^3 \times 4$ und für die Wirkung $S^{(2,2)}$ $24^3 \times 4$. Die Anzahl der jeweils ausgeführten Sweeps ist Tabelle 5.1 zu entnehmen.

Die simulierten Kopplungen liegen dabei in allen Fällen deutlich oberhalb der kritischen Kopplung $\beta_c = 5.6908(2)$ für I=(1,1) [21], $\beta_c = 4.07252(13)$ für I=(1,2) [22], $\beta_c = 4.3995(2)$ für I=(2,2) [aus dieser Arbeit] und $3.7 < \beta_c < 4.2$ für I=(3,3) [aus dieser Arbeit]*.

Tabelle 5.2: Energiedichte niedrigster Ordnung g aus der Differenz der Erwartungswerte räumlicher und zeitlicher Wirkung berechnet auf einem $24^3 \times 4$ Gitter für die Wirkung $I = (2,2)$ und auf $16^3 \times 4$ Gittern für die Wirkungen $I = (1,1)$, $I = (1,2)$ und $I = (3,3)$. In der letzten Zeile sind die störungstheoretischen Resultate im Limes $\beta \to \infty$ aus Kapitel 4 angegeben. Der Kontinuumswert beträgt $\epsilon_{\mathrm{SB}}/T^4 = 5.2638$.

	$(\epsilon/T^4)_0$			
β	(1,1)	(1,2)	(2,2)	(3,3)
6.0	7.359 (12)	5.706(57)	6.513 (74)	5.88 (12)
10.0	8.046 (102)	5.42 (10)	6.203 (90)	5.79 (16)
15.0	7.837 (63)	5.445(84)	5.982 (79)	5.58 (16)
20.0	7.806 (48)	5.18 (10)	5.860 (94)	5.56 (13)
∞	7.808	5.131	5.707	5.435

Die Resultate in Tabelle 5.2 zeigen, daß der störungstheoretische Wert in allen Fällen von oben angenähert wird. Für $\beta = 20$ betragen die Abweichungen weniger als 3%. Die störungstheoretischen Rechnungen sind also konsistent mit den Monte-Carlo-Simulationen.

*Diese Abschätzung stammt aus Simulationen mit der Wirkung I=(3,3) bei kleineren Kopplungen mit geringer Statistik, auf die hier nicht näher eingegangen werden soll. Aus der Berechnung des Polyakov-Loops ergeben sich die angegebenen Grenzen.

Es sei jedoch bemerkt, daß die untersuchte Größe für endliche β-Werte keine physikalische Observable ist und somit auch keine Rückschlüsse auf die Thermodynamik bei endlichen Temperaturen gezogen werden können. Eine Analyse der Auswirkungen der verbesserten Wirkung $S^{(2,2)}$ auf eine thermodynamische Observable, nämlich den Druck, bei endlicher Temperatur soll im folgenden Abschnitt vorgenommen werden.

5.2.4 Druck

Es soll nun betrachtet werden, inwieweit sich die Verminderung der ultraviolett Cut-off-Effekte durch Beseitigen der $\mathcal{O}(a^4)$ Korrekturen in der Wirkung $S^{(2,2)}$ auch bei endlichen β-Werten im Bereich des Phasenübergangs auswirken.

Wie in Abschnitt 2.5 dargestellt, kann man den Druck nicht-störungstheoretisch aus den Erwartungswerten der Wirkung bei endlicher Temperatur und bei Temperatur Null bestimmen

$$\frac{p}{T^4}\Big|_{\beta_0}^{\beta} = 3N_\tau^4 \int_{\beta_0}^{\beta} d\beta' \ \left\{ \left\langle S_\sigma^{(2,2)} + S_\tau^{(2,2)} \right\rangle_{\beta',\infty} - \left\langle S_\sigma^{(2,2)} + S_\tau^{(2,2)} \right\rangle_{\beta',N_\tau} \right\} \quad . \qquad (5.31)$$

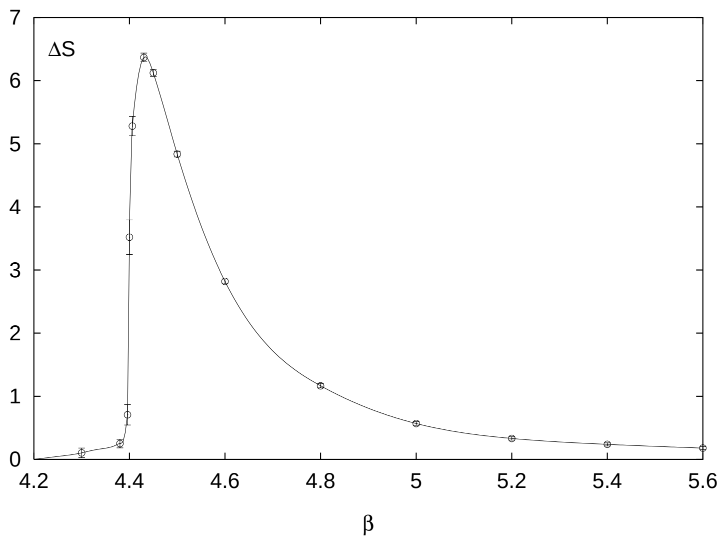


Abbildung 5.6: Differenzen der Wirkungen bei $T = 0$ (24^4 Gitter) und endlicher Temperatur ($24^3 \times 4$ Gitter) für die Wirkung I=(2,2). Die durchgezogene Linie ist eine kubische Spline-Interpolation, wobei der zusätzliche Punkt $\Delta S(4.200) = 0.0$ eingefügt wurde.

Dazu wurden Simulationen bei Temperatur Null auf einem 24^4 Gitter und bei endlicher Temperatur auf einem $24^3 \times 4$ Gitter bei den Kopplungen $\beta = 4.300$, 4.380, 4.396, 4.400, 4.406, 4.430, 4.450, 4.500, 4.600, 4.800, 5.000, 5.200, 5.400, 5.600 durchgeführt und die Bestandteile der Wirkung, also die Plaquette und der 2×2 Wilson-Loop, nach jedem Sweep über die Konfiguration gemittelt. Die Anzahl der ausgeführten Sweeps findet man in Tabelle 5.1.

Zunächst wurden die Differenzen der Wirkungen,

$$\Delta S = 3N_\tau^4 \left\langle S_\sigma^{(2,2)} + S_\tau^{(2,2)} \right\rangle_{\beta,(24^4)} - \left\langle S_\sigma^{(2,2)} + S_\tau^{(2,2)} \right\rangle_{\beta,(24^3\times 4)} \quad , \tag{5.32}$$

bei jeweils dem selben β-Wert auf dem 24^4 Gitter und dem $24^3 \times 4$ Gitter berechnet. Die Punkte wurden mit einem kubischen Spline interpoliert, um eine Integration der Funktion zu ermöglichen. Dabei wurde ein zusätzlicher Punkt per Hand eingefügt, $\Delta S(4.200) = 0.0$, da hier die Wirkungsdifferenz innerhalb der Fehler als Null betrachtet werden kann und somit die Integrationskonstante $p(\beta_0)$ entfällt. Die Resultate sowie die Spline-Interpolation sind in Abbildung 5.6 aufgetragen.

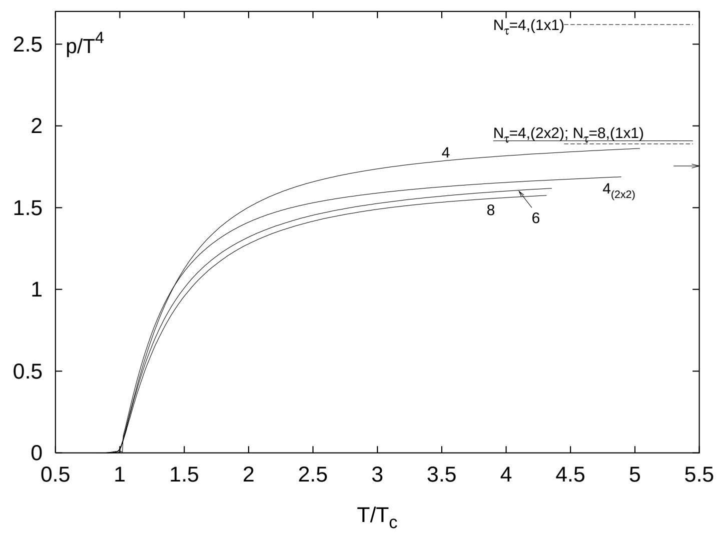


Abbildung 5.7: Druckverläufe für die Plaquette-Wirkung bei $N_\tau = 4{,}6{,}8$ und die verbesserte Wirkung $I = (2,2)$ bei $N_\tau = 4$ aufgetragen gegen die Temperaturskala aus der renormierten Kopplung. Die waagerechten, gestrichelten Linien sind die Hochtemperatur-Limiten des Drucks für die Plaquette-Wirkung bei $N_\tau = 4$ bzw. $N_\tau = 8$, die waagerechte, durchgezogene Linie ist der Hochtemperatur-Limes des Drucks für die Wirkung $I = (2,2)$ bei $N_\tau = 4$. Der waagerechte Pfeil kennzeichnet den Idealen-Gas-Limes im Kontinuum ($N_\tau \to \infty$).

Man erhält nun den Druckverlauf durch numerische Integration der Spline-Interpolation mit der Trapezregel. Um den Druck als Funktion der physikalischen Temperatur zu bestimmen, muß man noch die Skala in der Kopplung β mit der in Abschnitt 5.2.2 ermittelten Temperaturskalen $T/T_c(\beta)$ reskalieren. Entsprechend der beiden

Temperaturskalen ergeben sich daraus die in den Abbildungen 5.7 und 5.8 dargestellten Druckverläufe. Zum Vergleich sind dort auch die Druckkurven aus Simulationen mit der standard Wirkung auf Gittern der Ausdehnung 32×4, 6 und 8 aus [4] über den jeweils entsprechend ermittelten Temperaturskalen aufgetragen. Dieser Vergleich bietet sich an, da die Hochtemperatur-Limiten des Druckes für die verbesserte Wirkung $S^{(2,2)}$ bei $N_\tau = 4$ und die Plaquette-Wirkung bei $N_\tau = 8$ praktisch identisch sind.

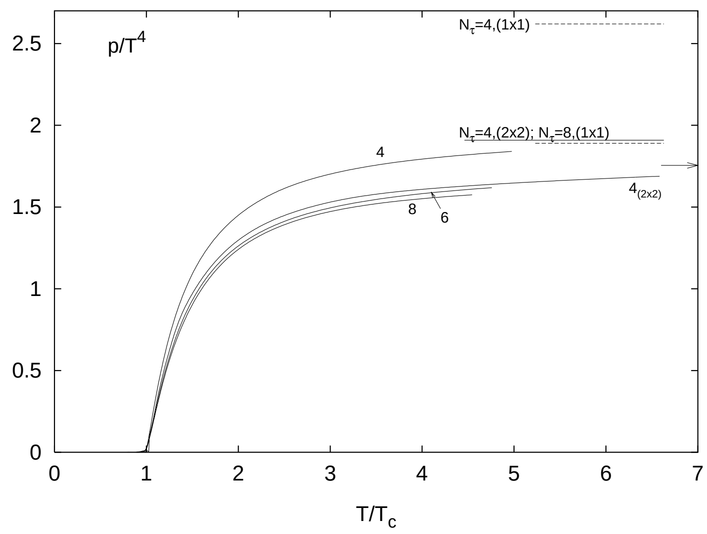


Abbildung 5.8: Druckverläufe für die Plaquette-Wirkung bei $N_\tau = 4{,}6{,}8$ und die verbesserte Wirkung $I = (2,2)$ bei $N_\tau = 4$ aufgetragen gegen die Temperaturskala aus der Saitenspannung. Die waagerechten, gestrichelten Linien sind die Hochtemperatur-Limiten des Drucks für die Plaquette-Wirkung bei $N_\tau = 4$ bzw. $N_\tau = 8$, die waagerechte, durchgezogene Linie ist der Hochtemperatur-Limes des Drucks für die Wirkung $I = (2,2)$ bei $N_\tau = 4$. Der waagerechte Pfeil kennzeichnet den Idealen-Gas-Limes im Kontinuum.

Zunächst zeigen sich qualitative Unterschiede zwischen den beiden Temperaturskalen in Bezug auf den Druckverlauf im Bereich des kritischen Punktes. Das deutet darauf hin, daß die aus dem störungstheoretischen Ansatz über die renormierte Kopplung ermittelte Temperaturskala in diesem Bereich eine zu grobe Näherung für die Betrachtung dieser Observablen ist.
Aus diesem Grund soll im folgenden auf den Druckverlauf mit der am Phasenübergang zuverlässigeren, nicht-störungstheoretisch genäherten Temperaturskala aus der Messung der Saitenspannung eingegangen werden (Abb. 5.8).

Der Vergleich der Druckkurven für die standard Wirkung und die verbesserte Wirkung zeigt, daß die Elimination der $\mathcal{O}(a^4)$ Korrekturen in der Wirkung nicht nur zu einer Reduktion der ultraviolett Cut-off-Effekte im Hochtemperaturbereich, sondern auch in der Nähe des Phasenübergangs führen. So weist der Druck aus der verbesserten Wirkung im gesamten betrachteten Temperaturbereich einen Verlauf auf, der mit dem aus der Plaquette-Wirkung berechneten Druckverlauf bei doppelter zeitlicher Ausdehnung des Gitters vergleichbar ist.

5.3 Algorithmen und Hardware

An dieser Stelle sollen die verwendeten Algorithmen sowie deren Implementierung auf den Quadrics-Parallelrechnern beschrieben werden.

Die Hauptelemente der Programme sind die Hauptroutine, Initialisierungsroutine (zur Initialisierung der Zufallszahlengeneratoren und der Startkonfiguration), Ein- und Ausleseroutine (für die Daten, die Konfigurationen und den Zufalls-Seed), die Update-Routinen, sowie verschiedene Meßroutinen (zur Messung der jeweils untersuchten Operatoren).
Das Herzstück der Algorithmen sind dabei die Routinen zur Erzeugung der Konfiguration. Hier wurden zwei verschiedene Update-Routinen, der Pseudo-Heatbath-Algorithmus und den Overrelaxation-Algorithmus eingesetzt. Diese werden in den beiden folgenden Abschnitten beschrieben.

5.3.1 Heatbath-Algorithmus

In Abschnitt 5.1 wurde die Methode der Monte-Carlo-Integration eingeführt und gezeigt, daß die Integration über den Konfigurationsraum darauf zurückgeführt werden kann, die Konfiguration iterativ mit einer Übergangswahrscheinlichkeit, die das sogenannte Detailed Balance erfüllt, zu verändern, wobei die Linkvariablen nacheinander in einem lokalen Update erneuert werden.
Der Heatbath-Update beruht nun auf der Beobachtung, daß sich die Eichwirkung zweier Konfigurationen K und K', die sich nur in einem Link U bzw. U' unterscheiden, nur in dem Teil ändert, der diesen Link enthält. Für die verallgemeinerte Wilson-Wirkung ist dies die Summe über alle Loops, die zu der Wirkung beitragen und die den Link U enthalten.
Man kann nun diesen Teil der Wirkung separieren,

$$S(K) \;=\; -\beta \sum_{U_{\mu\nu}^{k,l},\ \mathrm{mit}\ U\in U_{\mu\nu}^{k,l}} \frac{1}{2N} a_{k,l} \mathrm{Re\ Tr}\ U_{\mu\nu}^{k,l} + C$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{\beta}{2N} \sum_{U_{\mu\nu}^{k,l},\ \text{mit}\ U \in U_{\mu\nu}^{k,l}} a_{k,l} \mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}(U \cdot \tilde{U}_{\mu\nu}^{k,l}) + C \\
&= -\frac{\beta}{N} \mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}(U \cdot R) + C \quad , \qquad (5.33)
\end{aligned}
$$

wobei $\tilde{U}_{\mu\nu}^{k,l}$ das geordnete Produkt der restlichen Links des Wilson-Loops $U_{\mu\nu}^{k,l}$ ist, die im folgenden als *verallgemeinerte Staple* bezeichnet werden.
Hätte man nun eine Übergangswahrscheinlichkeit von

$$P(K \longrightarrow K') = \frac{1}{\kappa} e^{-\frac{\beta}{N}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}(U' \cdot R)} \qquad (5.34)$$

und für die Rückrichtung

$$P(K' \longrightarrow K) = \frac{1}{\kappa} e^{-\frac{\beta}{N}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}(U \cdot R)} \quad , \qquad (5.35)$$

so wäre

$$
\begin{aligned}
& e^{-S(K)} \cdot e^{-\frac{\beta}{N}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}(U' \cdot R)} = e^{-S(K')} \cdot e^{-\frac{\beta}{N}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}(U \cdot R)} \\
\Leftrightarrow\ & e^{-S(K)} \cdot P(K \longrightarrow K') = e^{-S(K')} \cdot P(K' \longrightarrow K) \qquad (5.36)
\end{aligned}
$$

und Detailed Balance sowie die Ergodizität wären gegeben.

Für den Fall der $SU(3)$ wurde eine Möglichkeit gefunden, eine solche Übergangswahrscheinlichkeit zu generieren, der sogenannten Pseudo-Heatbath-Algorithmus, der auf Cabibbo und Marinari zurückgeht [23]. Der Update der $SU(3)$-Matrix wird dabei auf den Update in den $SU(2)$-Untergruppen zurückgeführt, die durch die drei Möglichkeiten der Einbettung

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 1 \\ a_{21} & a_{22} & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} , \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & a_{11} & a_{12} \\ 1 & a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} , \begin{pmatrix} a_{11} & 1 & a_{12} \\ 1 & 1 & 1 \\ a_{21} & 1 & a_{22} \end{pmatrix} \qquad (5.37)$$

definiert sind.
Man generiert nun nacheinander für zwei verschiedene (2×2)-Unterstrukturen $SU(2)$-Matrizen α_1 und α_2 und definiert den neuen Link dann durch

$$U' = A_2 \cdot A_1 \cdot U \quad , \qquad (5.38)$$

wobei sich A_1 und A_2 durch die entsprechende Einbettung von α_1 bzw. α_2 in $SU(3)$ ergeben. Die beiden $SU(2)$-Matrizen müssen mit der Verteilung

$$dP(\alpha_i) = e^{\frac{\beta}{2}\mathrm{ReTr}\ (\alpha_i \cdot r_i)}\ d\alpha_i \qquad (5.39)$$

gewählt werden, wobei r_1 die entsprechende Untermatrix von $U \cdot R$ und r_2 die entsprechende andere Untermatrix von $A_1 \cdot U \cdot R$ ist.

Ein Algorithmus, der $SU(2)$-Matrizen mit der Verteilung (5.39) erzeugt, stammt von Creutz [24] und wurde später von Kennedy und Pendleton verbessert [25]. Das Problem reduziert sich dabei auf die Bestimmung eines Vektors $\vec{a}$ mit zufälliger Orientierung und das ziehen einer Zufallszahl a_0 mit der Verteilung

$$P(a_0) \approx \sqrt{1-a_0^2}\, e^{da_0} \quad ,\text{mit} \quad d = \beta\sqrt{\det\ r_i} \quad . \tag{5.40}$$

Dazu generiert man zunächst Zufallszahlen mit der Verteilung

$$P(a_0) \approx \sqrt{1-a_0}\ \Theta(1-a_0)e^{da_0} \tag{5.41}$$

und berücksichtigt den zusätzlichen Wurzelfaktor, indem man a_0 nur annimmt, wenn für eine gleichverteilte Zufallszahl z

$$2z^2 \leq 1 + a_0 \tag{5.42}$$

gilt.

5.3.2 Overrelaxation-Algorithmus

Wie oben gezeigt, erfüllt der Heatbath-Algorithmus alle Voraussetzungen dafür, daß die damit in der Markov-Kette erzeugten Konfigurationen nach genügend vielen Iterationen die richtige Boltzmann-Verteilung annehmen.
Da jedoch in einem Update-Schritt jeweils nur ein Link in Abhängigkeit von den umgebenden Links erneuert wird, ist die neue Konfiguration nach einem Sweep über alle Links nicht unabhängig von der vorhergehenden. Dies führt dazu, daß auf zwei aufeinanderfolgenden Konfigurationen gemessene Operatoren stark korreliert sind. Diese sogenannten *Autokorrelationen* sorgen dafür, daß der Phasenraum nur langsam durchschritten wird, so daß eine sehr große Anzahl von Iterationen notwendig ist um eine zuverlässige Approximation der Verteilung zu liefern.

Der *Overrelaxation-Algorithmus* dient dazu, diese Korrelationen aufzubrechen und somit auch große Schritte durch den Phasenraum zu ermöglichen. Die Idee dazu stammt von Creutz (1987)[26] und basiert darauf, die Konfigurationen in der Weise zu ändern, daß die Wirkung dabei nicht verändert wird. Bildlich gesprochen versucht man dabei, einen möglichst großen Schritt auf der Fläche konstanter Wirkung zu gehen.
Betrachtet man nun eine $SU(N)$-Wirkung von der Form

$$S(K) = -\frac{\beta}{N}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}(U\cdot R) + C \quad , \tag{5.43}$$

so erreicht man dies, indem man den Link U durch

$$U' = U_0 U^{-1} U_0 \tag{5.44}$$

ersetzt, wobei U_0 die $SU(N)$-Matrix ist, die die Wirkung minimiert unter der Bedingung, daß die Wirkung durch die Ersetzung nicht geändert wird.

Im Fall von $SU(2)$ ist die Summe der verallgemeinerten Staple R proportional zu einer $SU(2)$-Matrix $\bar{R} = (\sqrt{\det(R)})^{-1} \cdot R \in SU(2)$. Daraus ergibt sich eine einfache Wahl für U_0,

$$U_0 = \sqrt{\det(R)} \cdot R^{-1} \quad . \tag{5.45}$$

Im Fall der hier betrachteten $SU(3)$-Eichtheorie kann man dieses Verfahren in den $SU(2)$-Untergruppen ausführen.

Da der Algorithmus mikrokanonisch ist, verwenden wir eine Kombination aus *Heatbath-* und *Overrelaxation-Algorithmus*, um die Verteilung mit möglichst großer Effektivität zu generieren, zum Thermalisieren ist es dagegen sinnvoller allein den Heatbath-Update zu benutzen.

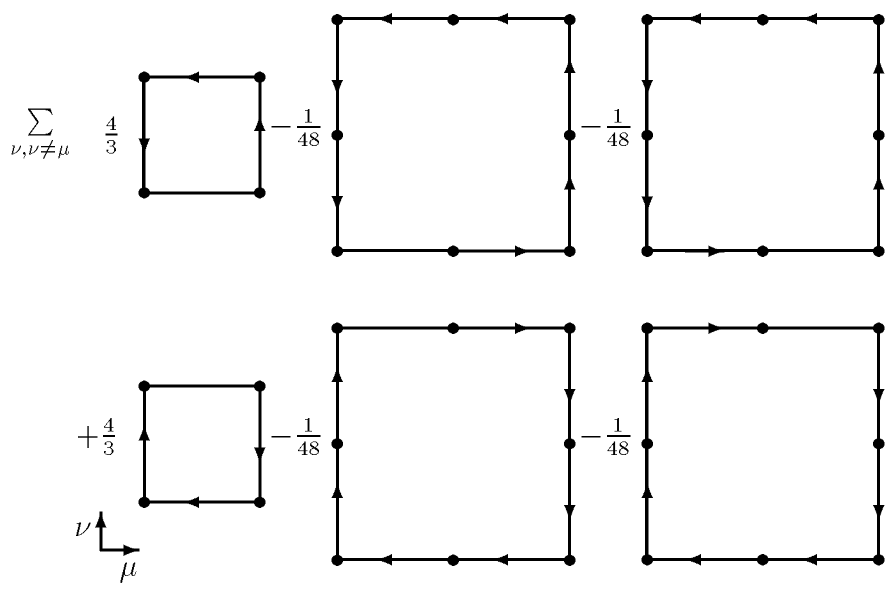
5.3.3 Implementierung auf dem Quadrics-Parallelrechner

Die Quadrics-Parallelrechner wurden ursprünglich speziell für Gittersimulationen in der QCD entworfen. Sie arbeiten nach dem SISAMD-Prinzip (*Single Instruction Single Address Multiple Data*), was bedeutet, daß alle Prozessoren parallel den gleichen Programm-Code abarbeiten. Die Adressen werden dabei zentral für alle Prozessoren von der CPU berechnet und verwaltet. Lediglich für die reellen Zahlen und die daraus gebildeten Datentypen besitzt jeder Prozessor einen eigenen Speicher von 4 MByte und eine FPU (*Floating Point Unit*), die bei einer Taktfrequenz von 25 MHz eine Normaloperation (Multiplikation mit anschließender Addition) pro Takt ausführen kann.

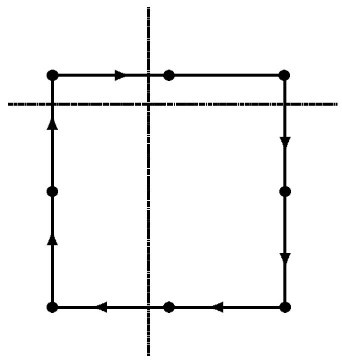
Die für unsere Simulationen verwendeten Rechner sind der Q1 mit 8 Prozessoren (*Knoten*), der Q4 mit 32 Knoten und der QH2 mit 256 Knoten, die jeweils in der Geometrie eines Quaders mit periodischen Randbedingungen angeordnet sind und die Topologien $2 \times 2 \times 2$ (Q1), $2 \times 8 \times 2$ (Q4) bzw. $8 \times 8 \times 4$ (QH2) aufweisen. Die Knoten bilden also selbst schon ein Gitter, wie es in der physikalischen Anwendung simuliert wird. Jeder Prozessor kann dabei auf den reellen Speicher seiner 6 nächsten Nachbarn zugreifen.
Das Prinzip der Parallelisierung besteht nun darin, ein großes Gitter auf die einzelnen Knoten zu verteilen, so daß jeder Prozessor nur ein wesentlich kleineres Gitter zu berechnen hat. Im Programm-Code, der in der eigens entwickelten Sprache *TAO* verfasst wird, drückt sich dies darin aus, daß sich dieser stets auf das lokale Gitter eines Knotens bezieht und lediglich in der Berechnung der Adressen der Zugriff auf den Speicher eines benachbarten Knotens festgelegt wird.

Der Parallelrechner besitzt dann die größte Effektivität, wenn die zu berechnenden Objekte möglichst auf das lokale Gitter eines Knotens beschränkt sind, so daß die Kommunikation zwischen den Knoten gering ist. Noch aufwendiger ist das Verschieben von Information zwischen zwei nicht benachbarten Knoten, also beispielsweise über Eck, da dieses in mehreren Schritten durch Kommunikation zwischen Nachbarknoten geschehen muß.
Besonderes Gewicht liegt dabei auf den Update-Routinen, da diese einen Großteil der Rechenzeit benötigen. Sowohl für den Heatbath- als auch den Overrelaxation-Update ist die Berechnung der verallgemeinerten Staple erforderlich. Für die Plaquette-Wirkung handelt es sich dabei um lokale Größen mit einer Ausdehnung von einer Gittereinheit, die also relativ selten die Kommunikation mit einem Nachbarknoten oder gar das Verschieben über zwei Knotengrenzen hinweg erfordern, wenn man die Linkvariablen $U_\mu(x)$ auf jeweils dem Knoten speichert, dessen lokales Gitter den Punkt x enthält.

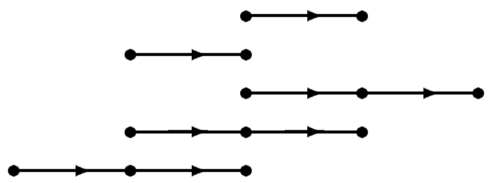
Es wird nun deutlich, warum bei der Konstruktion der verbesserten Wirkungen in Kapitel 3 die Lokalität der eingehenden Operatoren als Kriterium Berücksichtigung fand. Dennoch ist man bei der Simulation mit verbesserten Wirkungen mit der Berechnung von Operatoren größerer Ausdehnung konfrontiert.
Im Fall der Wirkung $S^{(2,2)}$ besteht die Summe der verallgemeinerten Staple aus folgenden Beiträgen



Liegt nun der Link, welcher erneuert werden soll, am Rand des lokalen Gitters, so ist die Information, die für die Berechnung der verallgemeinerten Staple benötigt wird, nicht auf den betrachteten Knoten und seine nächsten Nachbarn beschränkt. Ein solcher Fall ist in der folgenden Abbildung dargestellt.



Durch einen einfachen Trick ist es aber gelungen, die Kommunikation bei der Berechnung der verallgemeinerten Staple auf die zwischen nächsten Nachbarn zu beschränken. Dazu speichert man die Linkvariablen nicht nur einfach, wie oben beschrieben, sondern bildet noch weitere Kopien der Konfiguration, indem man zum einen die Links anders lokalisiert und zum anderen die für die Berechnung der verallgemeinerten Staple benötigten Produkte zweier benachbarter Links als eigenes Feld speichert. Insgesamt werden vier Kopien benötigt.



$$\begin{aligned}
U_\mu^{(1)}(x) &= U_\mu(x)\\
U_\mu^{(2)}(x) &= U_\mu(x-\hat{\mu})\\
U_\mu^{(3)}(x) &= U_\mu(x)U_\mu(x+\hat{\mu})\\
U_\mu^{(4)}(x) &= U_\mu(x-\hat{\mu})U_\mu(x)\\
U_\mu^{(5)}(x) &= U_\mu(x-2\hat{\mu})U_\mu(x-\hat{\mu})
\end{aligned}$$

Durch die Speicherung dieser Kopien erhöht sich die Effektivität des Algorithmus, durch zweierlei Effekte. Zum einen ist zur Berechnung der verallgemeinerten Staple höchstens der Zugriff auf benachbarte Knoten notwendig und zum anderen ist die Anzahl der $SU(3)$-Multiplikationen im Vergleich zu einer einfachen Speicherung der Konfiguration erheblich verringert. Dieser Vergleich ist für die simulierten Wirkungen in Tabelle 5.3 aufgeführt.

Diese Verwendung der Kopien $U^{(i)}$ reduziert darüberhinaus auch den Rechenaufwand in den Meßroutinen für die in der Wirkung vorkommenden Operatoren.

Ein Nachteil dieser Methode besteht aber in dem um das fünffache größeren Speicherbedarf, denn dieser führt zu einer deutlichen Einschränkung der maximal möglichen Gittergröße. So besitzt jeder Knoten eine Speicherkapazität von 1 MWort. Da nun eine $SU(3)$-Matrix 18 Worten entspricht, sind im Fall der Wirkung $S^{(2,2)}$ 360 Worte reeller Speicher pro Gitterpunkt erforderlich. Ein hyperkubisches lokales Gitter ist damit auf eine Größe von $7 \times 7 \times 7 \times 7$ beschränkt.

Tabelle 5.3: Vergleich der benötigten $SU(3)$-Multiplikationen pro Link-Update mit einfacher Speicherung der Konfiguration und mehrfacher Speicherung mit Produkten von Links bei den simulierten Wirkungen.

	# $SU(3)$-Multiplikationen / Link-Update	
Wirkung	ohne Kopien	mit Kopien
(1,1)	12	12
(1,2)	84	62
(2,2)	84	50
(3,3)	264	118

Da ein Großteil der Rechenzeit auf die Update-Routinen entfällt, ist die zum Vergleich des Rechenaufwands bei den verschiedenen Wirkungen interessante Größe die für einen Link-Update auf einem Knoten benötigte Rechenzeit.
Ein Maß für den Grad der Nutzung der Rechenleistung des Parallelrechners ist der in den Update-Routinen erreichte Anteil an der *Peak-Performance*, also an der maximal möglichen Rechenleistung der FPU.
Diese Größen sind für die verschiedenen Wirkungen im Fall eines lokalen $8^3 \times 4$ Gitters in Tabelle 5.4 zusammengestellt.

Tabelle 5.4: Vergleich der benötigten Rechenzeit pro Link-Update sowie des erreichten Anteils an der Peak-Performance auf einem lokalen $8^3 \times 4$ Gitter für die simulierten Wirkungen.

Wirkung	Peak-Performance	HB-Update pro Link	OR-Update pro Link
(1,1)		189.9 μs	96.6 μs
(1,2)	55.06 %	600.0 μs	508.7 μs
(2,2)	45.89 %	525.5 μs	442.0 μs
(3,3)	55.34 %	968.4 μs	884.9 μs

Zusammenfassung

Das Hochtemperaturverhalten der Thermodynamik einer SU(N) Gittereichtheorie wird duch Moden großer Impulse dominiert. Daher führen ultraviolett Cut-off-Effekte zum Abweichungen vom Idealen-Gas-Limes in thermodynamischen Größen wie Energiedichte und Druck.

In dieser Arbeit wurden drei tree-level verbesserte Wirkungen in Hinblick auf ein verbessertes Ultraviolett-Verhalten der SU(N)-Thermodynamik untersucht.

Eine störungstheoretische Berechnung der Hochtemperatur-Limiten der Energiedichte hat gezeigt, daß verbesserte Wirkungen zu einer deutlichen Reduzierung der Abweichungen vom Idealen-Gas-Limes ϵ_{SB} führen.
Während im Fall der standard Wilson-Wirkung die Cut-off-Effekte bei $N_\tau = 4$ nahezu 50% betragen und mit $\mathcal{O}(N_\tau^{-2})$ verschwinden, sind diese für die untersuchten verbesserten Wirkungen schon bei $N_\tau = 4$ auf wenige Prozent reduziert. Weiterhin sind für die verbesserten Wirkungen die niedrigsten Ordnungen der Cut-off-Abhängigkeit beseitigt. So ist diese Abhängigkeit $\mathcal{O}(N_\tau^{-\alpha})$ für die betrachteten $\mathcal{O}(a^\alpha)$ verbesserten Wirkungen.

Um die Auswirkungen verbesserter Wirkungen auf die Cut-off-Effekte bei endlichen Temperaturen auch im Bereich des Phasenübergangs zu studieren, wurde eine Monte-Carlo-Simulation mit der $\mathcal{O}(a^4)$ verbesserten SU(3) Wirkung $S^{(2,2)}$ durchgeführt.
Dabei wurde zunächst die Temperaturskala bestimmt, zum einen mit einem störungstheoretischen Ansatz aus der renormierten Kopplung und zum anderen nicht-störungstheoretisch durch Messung der Saitenspannung. Ein Vergleich der beiden Skalen zeigt, daß die störungstheoretische Näherung für diese Wirkung und diese Gittergröße nicht geeignet ist.
Für die kritische Temperatur in Einheiten der Saitenspannung ergab sich $T_c/\sqrt{\sigma} = 0.624(4)$, was mit dem Resultat aus der standard Wirkung innerhalb der Fehler übereinstimmt.
Weiterhin wurde der Druckverlauf für die verbesserte Wirkung bei $N_\tau = 4$ ermittelt und mit Monte-Carlo-Daten für die standard Wirkung bei $N_\tau = 4, 6, 8$ verglichen.

Die Cut-off-Effekte sind dabei auch bei endlichen Temperaturen stark verringert. Der Druckverlauf mit der verbesserten Wirkung bei $N_\tau = 4$ ist vergleichbar mit dem der standard Wirkung bei $N_\tau = 6$, sogar im Bereich des Phasenübergangs.

Anhang A

Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen

Tabelle A.1: Erwartungswerte von räumlicher Plaquette (P_σ), zeitlicher Plaquette (P_τ), räumlichem 2×2 Wilson-Loop ($(2,2)_\sigma$) und zeitlichem 2×2 Wilson-Loop ($(2,2)_\tau$) gemessen auf einem $24^3 \times 4$ Gitter mit der verbesserten Wirkung $S^{(2,2)}$.

β	P_σ	P_τ	$(2,2)_\sigma$	$(2,2)_\tau$
4.200	0.5038573 (240)	0.5038838 (235)	0.0764703 (231)	0.0765272 (231)
4.300	0.5340256 (228)	0.5340658 (220)	0.1047224 (274)	0.1048521 (271)
4.350	0.5475871 (212)	0.5476295 (219)	0.1196778 (291)	0.1198251 (299)
4.380	0.5549507 (206)	0.5550105 (204)	0.1283226 (285)	0.1285627 (301)
4.386	0.5563511 (201)	0.5564267 (210)	0.1300155 (301)	0.1302963 (362)
4.393	0.5580423 (299)	0.5581169 (355)	0.1320858 (460)	0.1324434 (714)
4.396	0.5588308 (582)	0.5589541 (750)	0.1330975 (956)	0.1336194 (1668)
4.398	0.5594870 (790)	0.5596551 (992)	0.1339901 (1310)	0.1347563 (2233)
4.399	0.5602137 (976)	0.5605138 (1248)	0.1351044 (1657)	0.1364840 (2858)
4.400	0.5609906 (1109)	0.5614462 (1400)	0.1363027 (1846)	0.1384098 (3239)
4.406	0.5630526 (565)	0.5637658 (667)	0.1392037 (942)	0.1424876 (1436)
4.430	0.5685065 (225)	0.5694956 (242)	0.1462476 (338)	0.1509642 (465)
4.450	0.5722919 (162)	0.5733786 (167)	0.1510093 (251)	0.1563636 (299)
4.500	0.5806421 (138)	0.5818828 (142)	0.1613467 (218)	0.1677264 (250)
4.600	0.5949840 (122)	0.5963513 (116)	0.1792703 (196)	0.1867960 (213)
4.800	0.6189629 (107)	0.6203766 (105)	0.2103392 (187)	0.2190883 (193)
5.000	0.6391509 (94)	0.6405610 (93)	0.2379200 (182)	0.2473628 (187)
5.200	0.6567893 (87)	0.6581751 (84)	0.2631464 (180)	0.2730668 (176)
5.400	0.6724866 (82)	0.6738252 (82)	0.2865598 (177)	0.2967831 (176)
5.600	0.6866043 (79)	0.6879055 (75)	0.3083603 (176)	0.3188098 (171)
6.000	0.7110965 (98)	0.7123236 (99)	0.3479532 (243)	0.3586438 (228)
10.000	0.8351517 (53)	0.8359022 (51)	0.5845937 (166)	0.5937617 (163)
15.000	0.8920637 (41)	0.8925623 (40)	0.7143812 (141)	0.7213841 (135)
20.000	0.9196848 (29)	0.9200582 (29)	0.7824288 (108)	0.7880373 (105)

Tabelle A.2: Erwartungswerte des Betrags des Polyakov-Loops ($|L|$) und der Suszeptibilität des Polyakov-Loops (χ_L) gemessen auf einem $24^3 \times 4$ Gitter mit der verbesserten Wirkung $S^{(2,2)}$.

β	$\|L\|$	χ_L
4.200	0.00393 (3)	0.0598 (9)
4.300	0.00598 (59)	0.1361 (31)
4.350	0.00865 (12)	0.2816 (66)
4.380	0.00127 (30)	0.6634 (458)
4.386	0.00193 (135)	1.1645 (2410)
4.393	0.00267 (288)	2.4054 (7977)
4.396	0.00372 (378)	7.2915 (25006)
4.398	0.00612 (461)	13.8426 (21556)
4.399	0.00873 (511)	21.1412 (9000)
4.400	0.01208 (149)	16.0564 (29375)
4.406	0.01539 (33)	3.3763 (12889)
4.450	0.01689 (19)	0.5965 (184)
4.500	0.01937 (14)	0.4426 (74)
4.600	0.02269 (11)	0.3669 (63)
4.800	0.02742 (9)	0.3131 (56)
5.000	0.03113 (9)	0.2861 (46)
5.200	0.03431 (8)	0.2762 (42)
5.400	0.03711 (8)	0.2612 (48)
5.600	0.03963 (8)	0.2522 (42)

Tabelle A.3: Erwartungswerte von Plaquette ((1,1)) und 2×2 Wilson-Loop ((2,2)), sowie die Temperaturskalen (T/T_c) zum einen bestimmt aus der Stringtension ($\sqrt{\hat{\sigma}}$) und zum anderen mit dem β_{eff}-Schema aus dem Erwartungswert der Wirkung (S_0) gemessen auf einem symmetrischen 24^4 Gitter mit der verbesserten Wirkung $S^{(2,2)}$.

β	$(1,1)$	$(2,2)$	$\sqrt{\hat{\sigma}}$	T/T_c	S_0	T/T_c
4.300	0.5339935 (158)	0.1046663 (187)	0.50763 (462)	0.789 (22)	0.6026892 (207)	0.812
4.380	0.5548540 (141)	0.1281680 (201)	0.41642 (307)	0.962 (21)	0.5753648 (184)	0.961
4.396	0.5585358 (142)	0.1326097 (207)	0.40414 (281)	0.991 (21)	0.5705483 (186)	0.992
4.400	0.5594429 (125)	0.1337288 (186)	0.40065 (258)	1.000 (20)	0.5693621 (163)	1.000
4.406	0.5607444 (152)	0.1353173 (226)	0.39500 (234)	1.014 (19)	0.5676599 (199)	1.011
4.430	0.5657813 (120)	0.1415497 (182)	0.37258 (189)	1.075 (18)	0.5610739 (156)	1.057
4.450	0.5697339 (116)	0.1465140 (182)	0.35758 (143)	1.120 (16)	0.5559072 (151)	1.096
4.500	0.5788005 (100)	0.1581334 (164)	0.32282 (81)	1.241 (14)	0.5440604 (130)	1.193
4.550	0.5868698 (94)	0.1686445 (160)	0.29386 (141)	1.363 (20)	0.5335204 (122)	1.290
4.600	0.5942173 (89)	0.1783151 (161)	0.26569 (88)	1.508 (17)	0.5239251 (116)	1.390
4.700	0.6073657 (77)	0.1958714 (140)	0.22303 (52)	1.796 (16)	0.5067597 (100)	1.600
4.800	0.6190540 (72)	0.2117421 (143)	0.18990 (34)	2.110 (15)	0.4915060 (94)	1.829
5.000	0.6395434 (63)	0.2403893 (119)	0.14184 (25)	2.824 (18)	0.4647836 (82)	2.363
5.200	0.6572899 (57)	0.2661707 (120)	0.10836 (23)	3.697 (23)	0.4416586 (74)	3.028
5.400	0.6730114 (51)	0.2898629 (109)	0.07976 (25)	5.022 (46)	0.4211903 (66)	3.862
5.600	0.6871407 (50)	0.3118669 (107)	0.06060 (25)	6.610 (79)	0.4028096 (65)	4.912

Anhang B

Ergebnisse der Störungstheoretischen Hochtemperatur-Entwicklung

In diesem Anhang werden die Resultate der Schwachen-Kopplungs-Entwicklung der standard Wilson-Wirkung und der verbesserten Wirkungen $I = (1,2)$, $I = (2,2)$ und $I = (3,3)$ in niedrigster Ordnung, die in Kapitel 4 diskutiert wurde, in expliziter Form aufgeführt.
Es wird dabei die Abkürzung $s_\mu \equiv \sin(p_\mu/2)$ und

$$\begin{aligned} D_\mu(p) &= \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{l} a_{k,l} \sum_{\nu=1}^{4} N_{\mu;\nu}^{k,l}(p) \\ &= 2\sum_{l=1}^{n}\sum_{k=1}^{l} a_{k,l}\Big(\Big[k + 2\sum_{j=1}^{k-1}(k-j)\cos(jp_\mu)\Big]\sum_{\nu=1}^{4}\sin^2(lp_\nu/2) \\ &\qquad +(k \leftrightarrow l)\Big) \end{aligned} \tag{B.1}$$

verwandt.

Der Entwicklungskoeffizient, $S_{\mu,\nu}^{I,(2)}$, für die verbesserten Wirkungen kann geschrieben werden als

$$S_{\mu,\nu}^{I,(2)} = \int_p \frac{R_{\mu,\nu}^{I}(p)}{R^{I,d}(p)} \quad . \tag{B.2}$$

Die Eichfixierungsterme wurden so gewählt, daß die Resultate von möglichst einfacher Form sind

$$I = (1,1) \quad : \quad g_\mu = 2\, s_\mu$$

$$
\begin{aligned}
I = (1,2) &\quad : \quad g_\mu = 2\,(s_\mu + \frac{2}{3}\,s_\mu^3) \\
I = (2,2) &\quad : \quad g_\mu = 2\,(s_\mu + s_\mu^3) \\
I = (3,3) &\quad : \quad g_\mu = 2\,(s_\mu + \frac{1}{3}s_\mu^3 + \frac{16}{45}s_\mu^5) \quad .
\end{aligned} \tag{B.3}
$$

Mit dieser Wahl findet man die im folgenden aufgeführten Ausdrücke für die Funktionen $R^I_{\mu,\nu}$ und $R^{I,d}$, die auch in den in Abschnitt 4.1 hergeleiteten Hochtemperatur-Limes der Energiedichte in (4.33) eingehen.
Dabei wird die Konvention verwandt, daß alle vorkommenden Indizes paarweise verschieden sind. Permutationen von Indizes, die zu identischen Ausdrücken führen, werden nur einmal aufgeführt. Summen über Permutationen von Indizes werden stets explizit ausgeschrieben. Es wird die Komponente der Wirkung in der (μ,ν)-Ebene betrachtet. Die beiden verbleibenden Richtungen des vierdimensionalen Gitters werden mit (i,j) bezeichnet. Wenn Indizes sowohl die Werte (μ,ν) als auch die Werte (i,j) annehmen können, werden diese mit $k,\ l,\ m$ und n bezeichnet.

$I = (1,1)$:

$$
\begin{aligned}
R^{(1,1)}_{\mu,\nu} &= s_\mu^2 + s_\nu^2 \\
R^{(1,1),d} &= \sum_{k=1}^{4} s_k^2
\end{aligned} \tag{B.4}
$$

$I = (1,2)$:

$$
\begin{aligned}
R^{(1,2)}_{\mu,\nu} &= \frac{4}{3}(3 + s_\mu^2 + s_\nu^2) \\
&\qquad \Big(D_i D_j (s_\mu g_\mu + s_\nu g_\nu)^2 + (D_\mu s_\mu^2 + D_\nu s_\nu^2)(D_i g_j^2 + D_j g_i^2) \Big) \\
R^{(1,2),d} &= \sum_{k=1}^{4} g_k^2 D_l D_m D_n
\end{aligned} \tag{B.5}
$$

$I = (2,2)$:

$$
\begin{aligned}
R^{(1,2)}_{\mu,\nu} &= \frac{4}{3}(3 + s_\mu^2 + s_\nu^2 - s_\mu^2 s_\nu^2) \\
&\qquad \Big(D_i D_j (s_\mu g_\mu + s_\nu g_\nu)^2 + (D_\mu s_\mu^2 + D_\nu s_\nu^2)(D_i g_j^2 + D_j g_i^2) \Big) \\
R^{(2,2),d} &= \sum_{k=1}^{4} g_k^2 D_l D_m D_n
\end{aligned} \tag{B.6}
$$

$I = (3,3)$:

$$
\begin{aligned}
R^{(3,3)}_{\mu,\nu} \;=\; & 4\Big(1+\frac{1}{3}(s_\mu^2+s_\nu^2)+\frac{8}{45}(s_\mu^4+s_\nu^4)+\frac{1}{9}s_\mu^2 s_\nu^2-\frac{64}{135}s_\mu^2 s_\nu^2(s_\mu^2+s_\nu^2)+\frac{128}{405}s_\mu^4 s_\nu^4\Big) \\
& \Big[D_i D_j(s_\mu g_\mu+s_\nu g_\nu)^2+(D_\mu s_\mu^2+D_\nu s_\nu^2)(D_i g_j^2+D_j g_i^2) \\
& +\frac{256}{18225}(D_\mu s_\mu^2+D_\nu s_\nu^2)A_{i,j}B_{j,i} \\
& -\frac{256}{18225}\Big(D_i s_j^2(A_{\mu,j}+A_{\nu,j})(B_{\mu,j}+B_{\nu,j})+D_j s_i^2(A_{\mu,i}+A_{\nu,i})(B_{\mu,i}+B_{\nu,i})\Big) \\
& -\frac{4096}{225}s_i^2 s_j^2(s_j^2-s_i^2)^2\Big(s_\mu^2(s_\mu^2-s_i^2)(s_\mu^2-s_j^2)+s_\nu^2(s_\nu^2-s_i^2)(s_\nu^2-s_j^2)\Big)^2\ \Big] \\
R^{(3,3),d} \;=\; & \sum_{k=1}^{4} g_k^2 D_l D_m D_n+\frac{256}{18225}\sum_{k=1}^{3}\sum_{l=k+1}^{4} D_k D_l A_{n,m}B_{m,n} \\
& -\frac{4096}{225}\sum_{k=1}^{4} D_k s_l^2 s_m^2 s_n^2(s_m^2-s_l^2)^2(s_m^2-s_n^2)^2(s_l^2-s_n^2)^2
\end{aligned}
\tag{B.7}
$$

Dabei werden zusätzlich die Abkürzungen verwandt

$$
\begin{aligned}
A_{k,l} &= s_k^2(s_k^2-s_l^2)(s_k^2 s_l^2+3(s_k^2+s_l^2)) \\
B_{k,l} &= s_k^2(s_k^2-s_l^2)(-405+120(s_k^2+s_l^2)+184 s_k^2 s_l^2)\quad .
\end{aligned}
\tag{B.8}
$$

Literaturverzeichnis

[1] H. J. Rothe, *Lattice gauge theories - an introduction*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong (1992).

[2] I. Montvay, G. Münster, *Quantum fields on a lattice*, Cambridge University Press (1994).

[3] K.G. Wilson, Phys. Rev. D 10 (1974) 2445.

[4] G. Boyd, J. Engels, F. Karsch, E. Laermann, C. Legeland, M. Lütgemeier und B. Petersson, Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 4169.

[5] K. Symanzik, Nucl. Phys. B226 (1983) 187 und Nucl. Phys. B226 (1983) 205.

[6] Y. Iwasaki und T. Yoshié, Phys. Lett. 131B (1984) 159;
S. Itoh, Y. Iwasaki und T. Yoshié, Phys. Lett. 147B (1984) 141.

[7] P. Hasenfratz und F. Niedermayer, Nucl. Phys. B414 (1994) 785.

[8] T. DeGrand, A. Hasenfratz, P. Hasenfratz und F. Niedermayer, Nucl. Phys. B454 (1995) 587 und Nucl. Phys. B454 (1995) 615.

[9] B. Beinlich, F. Karsch und E. Laermann, *Improved Actions for QCD Thermodynamics on the Lattice*, BI-TP 95/33 (1995); CERN-TH 95-253; hep-lat/9510031, erscheint in Nucl. Phys. B.

[10] J. Cleymans, R. V. Gavai und E. Suhonen, Phys. Rep. 130, No. 4 (1986) 217.

[11] L.D. McLerran und B. Svetitski, Phys. Rev. D24 (1981) 450.

[12] F. Karsch, Nucl. Phys. B205 (1982) 285.

[13] G.P. Lepage, L. Magnea, C. Nakhleh, U. Magnea und K. Hornbostel, Phys. Rev. D46 (1992) 4052.

[14] C.J. Morningstar, Phys. Rev. D48 (1993) 2265.

[15] F. Karsch, in: Advanced Series on Directions in High Energy Physics - Vol.6 (1990) 61, “Quark Gluon Plasma” (Edt. R.C. Hwa), Singapore 1990, World Scientific. World Scientific, Singapore.

[16] J. Engels, F. Karsch und K. Redlich, Nucl. Phys. B 435 (1995) 295.

[17] H.T. Elze, K. Kajantie und J. Kapusta, Nucl. Phys. B304 (1988) 832.

[18] M. Falconi, E. Marinari, M.L. Paciello, G. Parisi und B. Taglienti, Phys. Lett. 108B (1982) 331; E. Marinari, Nucl. Phys. B235 (1984) 123;
G. Bhanot, S. Black, P. Carter und R. Salvador, Phys. Lett. 183B (1986) 331;
A.M. Ferrenberg und R.H. Swendson, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2635; 63 (1989) 1195.

[19] M. Lüscher, K. Symanzic und P. Weisz, Nucl. Phys. B173 (1980) 365.

[20] G. Boyd, J, Engels, F. Karsch, E. Laermann, C. Legeland, M. Lütgemeier und B. Petersson, *Thermodynamics of SU(3) lattice gauge theory*, BI-TP 96/04 (1996); hep-lat/9602007, erscheint in Nucl. Phys. B.

[21] Y. Iwasaki, K. Kanaya, T. Yoshié, T. Hoshino, T. Shirakawa, Y. Oyanagi, S. Ichii und T. Kawai, Phys. Rev. D 46 (1992) 4657.

[22] G. Cella, G. Curci, A. Viceré und B. Vigna, Phys. Lett. B333 (1994) 457.

[23] N. Cabibbo und E. Marinari, Phys. Lett. B9 (1982) 387.

[24] M. Creutz, Phys. Rev. D21 (1980) 2308.

[25] A.D. Kennedy und B.J. Pendleton, Phys. Lett. B156 (1985) 393.

[26] M. Creutz, Phys. Rev. D36 (1987) 515.

[27] G. Cella, G. Curci, R. Tripiccione und A. Viceré, Phys. Rev. D49 (1994) 511.

[28] M. G. Perez und P. van Baal, Nucl. Phys. B413 (1994) 535.

[29] J. Engels, F. Karsch und H. Satz, Nucl. Phys. B205 [FS5] (1982) 239.

[30] U. Heller und F. Karsch, Nucl. Phys. B251 [FS13] (1985) 254.

[31] P. Weisz, Nucl. Phys. B212 (1983) 1; P. Weisz und R. Wohlert, Nucl. Phys. B236 (1984) 397 und Nucl. Phys. B247 (1984) 544.

[32] Y. Iwasaki K. Kanaya, S. Sakai und T. Yoshié, Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) 42 (1995) 502.

[33] L. Dolan und R. Jackiw, Phys. Rev. D9 (1974) 3320.

[34] M. Alford, W. Dimm, G.P. Lepage, G. Hockney und P.B. Mackenzie, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 42 (1995) 787.