Gluon-Korrelationsfunktionen bei endlicher Temperatur und endlichem Impuls

Diplomarbeit an der Fakultät für Physik der Universität Bielefeld

vorgelegt von Matthias Heß

2. Juni 1999

Inhaltsverzeichnis

Zielsetzung

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein Computerprogramm entwickelt und implementiert, das zur Überführung von QCD-Gittereichkonfigurationen in die Landau-Eichung dient. Die Konfigurationen sind reine Eichkonfigurationen in der SU(3) Variante der Theorie. Auf diesen Konfigurationen werden elektrische und magnetische Massen der Gluonen bei endlicher Temperatur und endlichem Impuls aus den Gluon-Korrelationsfunktionen bestimmt.

In Zusammenarbeit mit der Universität-Gesamthochschule Paderborn wird eine komplette physikalische Simulation als Metacomputing Anwendung entwickelt. Dazu werden die Parallelrechner der Universität Bielefeld und der Uni-GH Paderborn zu einem Metasystem miteinander verbunden.

Kapitel 1

Themeneinführung

1.1 QCD

1.1.1 Kontinuumstheorie

Die beste Beschreibung des Sektors der starken Wechselwirkung im Standardmodell liefert die Quantenchromodynamik (QCD). Sie beschreibt die starke Wechselwirkung zwischen den fundamentalen Bausteinen der Materie, den Quarks. Wie auch in der Quantenelektrodynamik (QED) werde die Kräfte durch den Austausch von Wechselwirkungsteilchen vermittelt — in der QCD heißen diese *Gluonen*. Anders als die Photonen in der QED tragen die Gluonen aber Ladung, was die Struktur und Phänomene der Theorie wesentlich prägt. Vor der Einführung des Han-Nambu Quark-Modells [1] gab es einen Widerspruch zwischen der Symmetrie von bestimmten baryonischen Zuständen, wie z.B. der Δ^{++}-Resonanz und der Spin-Statistik für Fermionen. Danach müssen Fermionen total anti-symmetrisch unter dem Austausch von Quantenzahlen ihrer Konstituenten sein (in Baryonen sind dies drei Quarks). Mit den bis dahin den Fermionen zugeordneten Quantenzahlen war die Δ^{++}-Resonanz aber symmetrisch unter diesem Austausch. Als Ausweg ist in dem o.g. Modell eine weitere Quantenzahl eingeführt worden, die später als *Farbladung* bezeichnet worden ist. Diese kann drei verschiedene Werte annehmen, die mit den drei Farben *rot (r)*, *grün (g)* und *blau (b)* bezeichnet werden. Entsprechend dem ladungsartigen Charakter dieser Quantenzahl gibt es auch die entsprechenden Ladungen für die Anti-Teilchen, die man einfach *anti-rot* $(\bar{r})$, *anti-grün* $(\bar{g})$ und *anti-blau* $(\bar{b})$ nennt. Mit der Farbladung ist die Symmetriegruppe $SU(3)$ verbunden, und der nicht-Abelsche Charakter dieser Gruppe hat einige bemerkenswerte Eigenschaften dieser Theorie zur Folge. Die Erweiterung der globalen Farbsymmetrie der Quarks auf eine lokale Symmetrie führte zur Einführung der Gluonen als Wechselwirkungsteilchen [2]. Da Teilchen mit einer Farbladung nicht direkt beobachtet worden sind, nahm man an, daß es nur farbneutrale Bindungszustände gebe. Dies bedeutet, daß die beobachtbare Materie aus Quarks zusammengestzt ist, deren Farbladungszahlen einen farbneutralen Gesamtzustand ergeben, z.B. ein rotes Quark und ein anti-rotes Quark oder ein rotes, grünes und blaues Quark[1]. Nach diesem Erklärungsansatz können Quarks nicht frei existieren, sondern sind in hadronischen Materiezuständen gebunden. Man spricht in diesem Zusammenhang von *confinement* der Theorie. Starke Hinweise auf dieses Phänomen geben Computersimulationen von der Art, wie sie in dieser Arbeit durchgeführt werden, so daß heute die Existenz von *confinement* weitestgehend akzeptiert ist. Eine weitere Eigenschaft, die auf den nicht-Abelschen Charakter der Farbladungsgruppe zurückzuführen ist, ist die asymptotische Freiheit. Damit bezeichnet man die Eigenschaft der Wechselwirkungsstärke, für kleine Abstände – oder analog für große Impulswerte – zu verschwinden. Für große Abstände da-

[1]Bei additiver Farbmischung führt dies zu einem weißen, also farbneutralem Zustand. Die Bezeichnung der Ladungsquantenzahlen in Analogie zur Farblehre hat also eine Berechtigung.

gegen steigt die Wechselwirkungsstärke stark an, was das *confinement* erklären könnte. Dies ist völlig konträr zur QED, wo Vakuumpolarisationseffekte dafür sorgen, daß die Wechselwirkungsstärke mit wachsendem Abstand geringer wird. Aus Analogie zur QED nennt man die Effekte, die zur asymptotischen Freiheit führen, auch Anti-Abschirmeffekte.

Das *confinement* erwartet man bei niedrigen Temperaturen und gewöhnlicher Kernmateriedichte. Mit steigender Temperatur – und damit steigenden Wechselwirkungsenergien – gibt es einen Phasenübergang zu einem neuen Materiezustand, in dem die Quarks und Gluonen nicht notwendigerweise in Hadronen gebunden sein müssen, sondern frei auftreten können. Dieser neue Zustand wird als *Quark-Gluon-Plasma* bezeichnet und Untersuchungen zeigen, daß der Übergang für ein verschwindendes chemisches Potential μ bei einer kritischen Temperatur $T_C \sim 150\mathrm{MeV}$ erwartet werden kann. Mit zunehmender Materiedichte überlappen sich die Quarks aus verschiedenen Hadronen, und aufgrund der asymptotischen Freiheit der QCD kann man auch in dieser Situation einen Übergang von den gebundenen Zustaänden zu den ungebundenen Zuständen erwarten, den *confinement-deconfinement* Übergang.

Physikalisch interessiert man sich neben der Thermodynamik auch für Größen wie die Eigenschwingung des Plasmas (Plasma-Frequenzen) oder Abschirmeffekte, allgemein für kollektive Eigenschaften des Plasmas. Eine mathematische Methode für die Untersuchung dieser Eigenschaften ist die *linear response theory* (siehe z.B. [3]). Dabei wird angenommen, daß sich das Plasma im Gleichgewicht befindet und man untersucht die Reaktion des Plasmas auf eine „kleine" Störung. Für die Plasmafrequenz z.B. wird das Plasma mit δ-Impulsen gestört und die dadurch induzierte Schwingung ermöglicht Aussagen über die Plasmafrequenz. In dieser Arbeit werden magnetische und elektrische Massen der Gluonen untersucht. Eine Möglichkeit diese zu bestimmen, ist die Analyse der Abschirmung des Potentials V von schweren Quarks. Oberhalb des Phasenübergangs zwischen den beiden Materiezuständen sollte das Potential ein abgeschirmtes Coulomb-Potential (Yukawa-Potential) sein, d.h. $V(R,T) = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi R} \mathrm{e}^{-m_{\mathrm{el}}(T)R}$ für $R \to \infty$. In der niedrigsten Ordnung einer störungstheoretischen Entwicklung ist $m_{\mathrm{el}}^2 \sim g^2 T^2 (N_c + \frac{N_f}{2})$. Die Natur der magnetischen Masse m_{magn} und die funktionale Abhängigkeit von der Temperatur sind auch in der Störungstheorie nicht bekannt, obwohl mehrere Ansätze in der Literatur diskutiert werden. In der niedrigsten Ordnung der Störungstheorie existiert keine magnetische Masse. Eine nicht verschwindende magnetische Masse kann aber als Regulator für Infrarot-Divergenzen in der Theorie dienen. Das Verständnis der Abschirmung im Quark-Gluon-Plasma kann auch Hinweise auf die Ursachen für *deconfinement* liefern.

Kollektive Moden oder Anregungen können durch eine Dispersionsrelation $\omega(q)$ charakterisiert werden. Diese Anregungen erscheinen als Polstellen eines Propagators mit definierten Quantenzahlen [3]. Eine andere Möglichkeit der Definition der elektrischen und magnetischen Masse ist daher durch die Polstellen des Gluon-Propagators gegeben, die allgemein in der komplexen Energieebene auftreten können. Im Ortsraum entspricht dieses – bei einfachen Polstellen – einem exponentiellen Abfall mit dem entsprechenden Residuum. Dieser Ansatz wird in dieser Arbeit verfolgt.

Mathematische Formulierung

Wie in anderen Feldtheorien ist auch in der QCD die Grundlage einer mathematischen Formulierung eine Feldgleichung, bzw. eine daraus abgeleitete Lagrangedichte, die in der QCD folgende Form hat:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F^a_{\mu\nu} F^{\mu\nu}_a + \sum_{\substack{f=1,\ldots,6 \\ \alpha,\beta=r,g,b}} \bar{\psi}^f_\alpha (i\gamma^\mu \partial_\mu + g_s \gamma^\mu A_\mu)^{\alpha\beta} \psi^f_\beta - \bar{\psi}^f_\alpha m_f \psi^f_\beta \tag{1.1}$$

wobei der Index f den Flavor-Inhalt des Fermion-Feldes (d.h. up, down, strange, charm, top, bottom), α die Farbladung des Anti-Fermionen-Feldes $\bar{\psi}$, β die Farbladung des Fermionfeldes ψ und a den Farbinhalt des Gluonfeldes A bezeichnet. Diese Lagrangedichte hat eine globale Flavor-Symmetrie, die bei Massegleichheit der Flavors einer $SU(N_f)$ Transformationsgruppe entspräche. Da der Flavor-Inhalt eines Feldes durch die starke Wechselwirkung nicht geändert wird, ist die globale Symmetrie keine wirkliche Einschränkung, sondern eher eine Bezeichnungsfrage. Dies ist für den Farbinhalt des Feldes anders. Hier stellt man die Forderung nach lokaler Symmetrie, d.h. die Lagrangedichte muß unverändert bleiben, wenn das Fermionfeld nicht global, sondern an einem Punkt x geändert wird. Um diese Bedingung an die Lagrangedichte zu erfüllen, ist es notwendig, die kovariante Ableitung $D_\mu = \partial_\mu - ig_s A_\mu$ einzuführen. Damit bleibt die Lagrangedichte unter der Transformation im Farbraum $\psi(x) \to g(x)\psi(x)$, $g(x) \in SU(3)$ der Fermionfelder invariant, falls sich $A_\mu(x)$ mit

$$A_\mu(x) \xrightarrow{g} g(x)A_\mu(x)g^{-1}(x) - \frac{i}{g_s}\partial_\mu g(x)g^{-1}(x) \tag{1.2}$$

transformiert. Analog zur QED ist A_μ das die starke Wechselwirkung vermittelnde Eichfeld und $F_{\mu\nu}$ der Eichfeldstärke-Tensor. Anders als in der QED sind diese Felder in der QCD aber nicht-Abelsch, was die Komplexität und Vielfalt der Phänomene in der QCD stark bestimmt. Das Feld $A_\mu(x)$ ist ein Element der Algebra $su(3)$, also eine Linearkombination $A^a_\mu(x)t^a$ von Generatoren t^a der $SU(3)$. Eine Darstellung der Generatoren t^a ist durch die Gell-Mann Matrizen λ^a gegeben: $t^a \equiv \frac{\lambda^a}{2}$. Der Index a läuft über die $N_C^2 - 1 = 8$ Generatoren der $SU(3)$. Der Feldstärke-Tensor ist durch $F^{\mu\nu,a} = \partial^\mu A^{\nu,a} - \partial^\nu A^{\mu,a} - g_s f^{abc} A^{\mu,b} A^{\nu,c}$ definiert und enthält durch den letzten Term auch Wechselwirkung der Gluonen untereinander.

Quantisierung

Zur Quantisierung der QCD bestehen grundsätzlich mehrere (äquivalente) Möglichkeiten. In der zweiten Quantisierung werden die Felder $A_\mu, \bar{\psi}, \psi$ durch Operatoren mit geeigneten *equal-time* Vertauschungsrelationen ersetzt. Für numerische Berechnungen eignet sich aber in der Regel die Quantisierung mittels Pfadintegral besser. Dies bietet zudem ein einfaches Verfahren, um Eichtheorien, wie sie hier untersucht werden, zu quantisieren.

Die Pfadintegralquantisierung beruht auf der Erweiterung des Pfadintegralformalismus der Quantenmechanik (wie er z.B. in [4] beschrieben ist) auf unendlich viele Freiheitsgrade, wie sie in der Feldtheorie auftreten. In der Quantenmechanik ist man an der Übergangsamplitude $\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle$ von einem Basiszustand $|q_i\rangle$ zur Zeit t_i in einen anderen Basiszustand $|q_f\rangle$ zur Zeit t_f interessiert. Diese Übergangsamplitude läßt sich formal als Pfadintegral schreiben:

$$\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = \int \frac{\mathcal{D}q\mathcal{D}p}{\hbar 2\pi} \exp\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t[p\dot{q} - H(p,q)]\} \tag{1.3}$$

Dabei ist $\mathcal{D}q\mathcal{D}p = \lim_{n\to\infty} \prod_{j=1}^n \mathrm{d}q_j \prod_{j=0}^n \frac{\mathrm{d}p_j}{2\pi}$ das formale Integrationsmaß des Pfadintegrals. Die Variable n gibt dabei die Anzahl der Zwischenzustände an, über die integriert wird. Die Zwischenzustände sind alternierend ein vollständiger Satz von Impulseigenzuständen bzw. Eigenzuständen zum Ortsraum-Operator. Physikalisch steht hinter dem Pfadintegral die Idee, daß die Funktionen $q(t)$ und $p(t)$ einen Pfad im Phasenraum definieren und die Übergangsamplitude $\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle$ das Ergebnis einer Summation über all diese Pfade mit dem Gewicht $\exp\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t[p(t)\dot{q}(t) - H(p(t), q(t))]\}$ ist. Falls der Hamiltonian des Systems quadratisch in p ist, läßt sich die Übergangsamplitude auch mit der klassischen Wirkung $S_{\text{class}} = \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t L(q(t), \dot{q}(t))$ schreiben: $\langle q_f t_f | q_i t_i \rangle = N \int \mathcal{D}q \exp\{\frac{i}{\hbar}S[q]\}$.

In der Feldtheorie muß dieser Formalismus erweitert werden, um nicht nur die unendlich vielen Freiheitsgrade, sondern auch das Erzeugen und Vernichten von Teilchen (oder allgemeiner Anregungszuständen) zu berücksichtigen. Die Erzeugung und Vernichtung von Teilchen wird nach Schwinger [5] durch Quellen und Senken von Teilchen beschrieben. Diese werden durch einen modifizierten Lagrangian L beschrieben: $L \to L + \hbar J(t)q(t)$ mit der Quelle J. Bei Anwesenheit der Quelle J ist die Vakuumübergangsamplitude $W[J] \propto \langle 0,\infty|0,-\infty\rangle^J$. Dies beschreibt den Übergang vom Vakuumzustand $|0,-\infty\rangle$ bei $t_i \to -\infty$ in den Vakuumzustand $|0,\infty\rangle$ bei $t_f \to \infty$ unter dem Einfluß der Quelle J. Zur Berechnung von $W[J]$ wird in der Arbeit von Abers und Lee [6] die Übergangsamplitude $\langle Q'T'|QT\rangle^J$ bei Anwesenheit der Quelle für eine Zeitspanne $[t', t]$ mit $T < t < t' < T'$ berechnet. Nach dem Superpositionsprinzip läßt sich dies als $\langle Q'T'|QT\rangle^J = \int \mathrm{d}q'\mathrm{d}q\langle Q'T'|q't'\rangle\langle q't'|qt\rangle^J\langle qt|QT\rangle$ schreiben, und mit dem Einführen von Energieeigenzuständen $|n\rangle$ und der Fortsetzung von T ins Imaginäre erhält man

$$\begin{aligned}\lim_{\substack{T'\to\infty\cdot\mathrm{e}^{-i\delta}\\ T\to-\infty\cdot\mathrm{e}^{-i\delta}}}\langle Q'T'|QT\rangle^J &= \langle Q'|0\rangle\exp[-\frac{i}{\hbar}E_0(T'-T)]\langle 0|Q\rangle \\ &\times\langle 0|\int \mathrm{d}q'\mathrm{d}q|q't'\rangle\langle q't'|qt\rangle^J\langle qt|0\rangle \\ &= \langle Q'|0\rangle\exp[-\frac{i}{\hbar}E_0(T'-T)]\langle 0|Q\rangle\langle 0,\infty|0,-\infty\rangle^J\end{aligned} \tag{1.4}$$

und man erhält als Ergebnis:

$$\langle 0,\infty|0,-\infty\rangle^J \propto \lim_{\substack{T'\to\infty\mathrm{e}^{-i\delta}\\ T\to-\infty\mathrm{e}^{-i\delta}}}\langle Q'T'|QT\rangle^J \tag{1.5}$$

Der $\lim_{\substack{T'\to\infty\mathrm{e}^{-i\delta}\\ T\to-\infty\mathrm{e}^{-i\delta}}}$ ist eine abkürzende Schreibweise dafür, daß die Zeitachse für die Integration in der komplexen Zeitebene um den Winkel $-\delta$ gedreht wird. Dadurch erreicht man die Elimination von energetisch höher angeregten Zuständen. Nur der energetisch niedrigste Zustand $|0\rangle$ mit der Energie E_0 wird dann berücksichtigt. Das Endergebnis ist dann:

$$W[J] = \int \mathcal{D}q\exp[\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t(L + \hbar J(t)q(t) + \frac{1}{2}i\varepsilon q^2)] \tag{1.6}$$

(Der Term $\frac{1}{2}i\varepsilon q^2$ ist eine Konsequenz der Elimination der energetisch höher angeregten Zustände, die genaue Herleitung steht in der zitierten Arbeit von Abers und Lee)

Dieser Formalismus läßt sich leicht auf eine skalare Feldtheorie mit skalarem Feld ϕ anwenden. Dazu wird das Pfadintegral in offensichtlicher Weise auf mehrere Freiheitsgrade ausgeweitet. Anstelle eines q führt man abzählbar viele Koordinaten ϕ_α ein, z.B. $\phi_\alpha(t) \equiv \frac{1}{\epsilon^3}\int_{V_\alpha}\mathrm{d}^3x\phi(\boldsymbol{x},t)$, d.h. ϕ_α ist das über das Volumen V_α gemittelte Feld und der Ortsraum wird in abzählbar viele solcher Volumina unterteilt. Mit dem Mittelwert $\dot{\phi}_\alpha(t)$ von $\frac{\partial\phi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}$ über das Volumen und den zu α benachbarten Zellen $\alpha \pm s$ läßt sich $W[J]$ als

$$W[J] = \int \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\pi\exp[i\int_{\infty}^{\infty}\mathrm{d}^4x\{\pi(x)\dot{\phi}(x) - \mathcal{H}(\pi(x),\phi(x)) + \frac{1}{2}i\varepsilon\phi^2(x) + J(x)\phi(x)\}] \tag{1.7}$$

schreiben. $\mathcal{H}$ ist die Hamiltondichte, die aus $H = \epsilon^3\sum_\alpha\mathcal{H}_\alpha$ folgt. $\pi(\boldsymbol{x},t)$ ist die Dichte des konjugierten Impulses von $\phi(\boldsymbol{x},t)$ und $\int\mathcal{D}\phi\mathcal{D}\pi$ ist wiederum eine Kurzschreibweise für den Grenzwert $\lim_{\substack{n\to\infty\\ \epsilon\to 0}}\int\prod_\alpha\prod_{j=1}^n\mathrm{d}\phi_\alpha(t_j)\prod_{j=0}^n\frac{\epsilon}{2\pi}\mathrm{d}\pi_\alpha(t_j)$. Außerdem ist in dieser Betrachtung $\hbar = 1$.

$W[J]$ ist das erzeugende Funktional für die allgemeine n-Punkt Green-Funktion $G^{(n)}(x_1,\ldots,x_n) = (-i)^n \frac{\delta^n W[J]}{\delta J(x_1)\cdots\delta J(x_n)}\Big|_{J=0} = \langle T(\phi(x_1)\cdots\phi(x_n))\rangle$, die allerdings auch Beiträge von *disconnected* Vakuumgraphen haben. Das erzeugende Funktional $Z[J]$ für *connected* Diagramme ist einfach (formal) $Z[J] = -i\ln W[J]$ und die n-Punkt *connected* Green-Funktion $G_C^{(n)}$ ist $G_C^{(n)}(x_1,x_2,\ldots,x_n) = (-i)^{(n-1)} \frac{\delta^n Z[J]}{\delta J(x_1)\cdots\delta J(x_n)}\Big|_{J=0} = \frac{(-i)^n}{W[J]}\frac{\delta^n W[J]}{\delta J(x_1)\cdots\delta J(x_n)}\Big|_{J=0}$. Wenn die Hamiltondichte quadratisch in π ist, kann die π Integration ausgeführt werden und das Ergebnis für das Pfadintegral ist

$$W[J] \sim \int \mathcal{D}\phi \exp\{i\int \mathrm{d}^4x[\mathcal{L}(\phi(x)) + J(x)\phi(x)]\} \tag{1.8}$$

Um Fermionfelder in diesem Formalismus einzuführen, benötigt man neben einer geeigneten Darstellung des Fermionfeldes auch geeignete Quellen für die Felder. In der kanonischen Quantisierung werden Fermionfelder $\psi(x)$ als anti-kommutierende Operatoren betrachtet. Im Pfadintegralformalismus berechnet man das Funktional über klassische Funktionen, sog. *c-numbers*. Für die Fermionfelder braucht man daher anti-kommutierende *c-numbers*. Diese Eigenschaft wird von Grassmann-Variablen erfüllt. Ohne die Gluonen erhält man das erzeugende Funktional W_0 für das freie Dirac-Feld, d.h die Lagrange-Dichte $\mathcal{L} = i\bar{\psi}\gamma^\mu\partial_\mu\psi - m\bar{\psi}\psi$ enthält keine Wechselwirkungsterme.

$$W_0[\bar{\eta},\eta] = \frac{1}{N}\int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi \exp\{i\int \mathrm{d}^4x[\bar{\psi}(x)(i\gamma\cdot\partial - m)\psi(x) + \bar{\eta}(x)\psi(x) + \bar{\psi}(x)\eta(x)]\} \tag{1.9}$$

mit den Grassmann-Feldern η und $\bar{\eta}$ als Quellterme für $\bar{\psi}$ bzw. ψ. Die Zweipunktfunktion $\tau^{(2)}(x_1,x_2)$ ergibt sich wiederum als Funktionalableitung des erzeugenden Funktionals nach den Quelltermen.

$$\tau^{(2)}(x_1,x_2) = -\frac{\delta^2 Z_0[\eta,\bar{\eta}]}{\delta\eta(x_1)\delta\bar{\eta}(x_2)}\Big|_{\eta=\bar{\eta}=0} \tag{1.10}$$

Übernimmt man den Formalismus für ein skalares Feld auch für Vektor-Bosonen, so erhält man bei Abwesenheit von äußeren Feldern mit der Lagrangedichte für die QCD für die Vakuumübergangsamplitude

$$W[0] = \int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi\mathcal{D}A\ \exp\{i\int \mathrm{d}^4x\ \mathcal{L}_{\mathrm{QCD}}[\bar{\psi},\psi,A]\} \tag{1.11}$$

und als Vakuumerwartungswert eines Operators $\Omega \equiv \Omega(\bar{\psi},\psi,A)$

$$\langle\Omega\rangle = \frac{1}{W[0]}\int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi\mathcal{D}A\,\Omega(\bar{\psi},\psi,A)\ \exp\{i\int \mathrm{d}^4x\ \mathcal{L}_{\mathrm{QCD}}[\bar{\psi},\psi,A]\} \tag{1.12}$$

In Analogie zur Quantenmechanik kann der Vakuumerwartungswert $\langle\Omega\rangle$ als das Ergebnis der Integration über alle (klassischen) Felder $\bar{\psi},\psi$ und A mit dem Gewicht $\exp\{i\int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}_{\mathrm{QCD}}[\bar{\psi},\psi,A]\}$ aufgefaßt werden.

1.1.2 QCD bei endlicher Temperatur

Um Feldtheorien bei endlicher Temperatur (d.h. in diesem Fall $0 < T < \infty$) zu betrachten, erweitert man analog zu dem im vorigen Abschnitt erläuterten Fall bei $T = 0$ den Formalismus der Quantenmechanik auf die Feldtheorie. In der statistischen Physik ist der Ausgangspunkt vieler Überlegungen neben der Zustandssumme Z auch der thermische Erwartungswert $\langle\Omega\rangle_{\text{therm}}$ einer Observablen Ω. Die Zustandssumme Z ist durch

$$Z(\beta_{\text{therm}}) = \text{Tr}\,\hat{\rho} = \text{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta_{\text{therm}}(\hat{H}-\sum_i \mu_i \hat{N}_i)} \tag{1.13}$$

gegeben. Dabei ist $\hat{H}$ der Hamiltonian des Systems, $\hat{N}_i$ ein erhaltener Anzahloperator und μ_i das zugehörige chemische Potential. Der Parameter β_{therm} ist definiert als $\beta_{\text{therm}} = \frac{1}{k_B T}$ mit der Boltzmann-Konstante k_B und der Temperatur T [2]. Der thermische Erwartungswert $\langle\Omega\rangle$ einer Observablen ist dann einfach

$$\langle\Omega\rangle_{\text{therm}} = \frac{1}{Z(\beta_{\text{therm}})}\text{Tr}\,\hat{\rho}\,\Omega \tag{1.14}$$

mit dem Dichteoperator $\hat{\rho}$. Da auch im folgenden kein endliches chemisches Potential betrachtet wird, wird der Term $\sum_i \mu_i \hat{N}_i$ nicht mehr berücksichtigt.

Führt man einen vollständigen Satz von Eigenzuständen ein, läßt sich die Zustandssumme als

$$Z(\beta_{\text{therm}}) = \int \mathrm{d}q\, \langle q|\mathrm{e}^{-\beta_{\text{therm}}\hat{H}}|q\rangle \tag{1.15}$$

schreiben. Der Operator $\mathrm{e}^{-\beta_{\text{therm}}\hat{H}}$ kann formal als Zeitentwicklungsoperator in der imaginären Zeit aufgefaßt werden, d.h. er entwickelt einen Zustand von $t = t_0$ nach $t = t_0 - i\beta_{\text{therm}}$ [3]. Dies erfordert es, daß die ursprünglich nur für reelle Zeiten definierten q zu imaginären Zeiten hin fortgesetzt werden. Für $t = 0$ entspricht dies der Wick-Rotation, d.h man transformiert die Variable t so, daß $t \to \mathrm{e}^{-i\Theta}t_\Theta$ und damit $\mathrm{d}t \to \mathrm{e}^{-i\Theta}\mathrm{d}t_\Theta$. Für Vektorfelder $A_\mu(\boldsymbol{x}, t)$ bedeutet dies, daß $A_0(\boldsymbol{x}, t) \to \mathrm{e}^{-i\Theta}A_0^\Theta(\boldsymbol{x}, t_\Theta)$. Für $\Theta = \frac{\pi}{2}$ erhält man die gewöhnlich verwendeten Transformationen $t \to -i\tau$, $A_0(\boldsymbol{x}, t) \to -iA_4^E(\boldsymbol{x}, \tau)$.

Die Größe $\langle q|\mathrm{e}^{-\beta_{\text{therm}}\hat{H}}|q\rangle$ kann wiederum als Pfadintegral geschrieben werden:

$$\langle q|\mathrm{e}^{-\beta_{\text{therm}}\hat{H}}|q\rangle = \int_{\substack{q'(0)=q\\ q'(\beta)=q}} \mathcal{D}q' \exp\{-\int_0^{\beta_{\text{therm}}} \mathrm{d}\tau' L^{(E)}\} \tag{1.16}$$

wobei $L^{(E)}$ die Euklidische Lagrange-Funktion ist, die von den transformierten q' und $\dot{q}'$ abhängt. Als Endergebnis erhält man für Z

$$Z(\beta_{\text{therm}}) = N \int_{q(\beta_{\text{therm}})=q(0)} \mathcal{D}q \exp\{-S^{(E)}[q, \dot{q}]\} \tag{1.17}$$

Die Erweiterung auf die Feldtheorie geschieht – wie gesagt – analog zu der im vorigen Kapitel ausgeführten Vorgehensweise. Für die QCD speziell erhält man

$$Z(\beta_{\text{therm}}) = N \int_{\text{therm}} \mathcal{D}\bar{\psi}^{(E)}\mathcal{D}\psi^{(E)}\mathcal{D}A^{(E)} \exp\{-\int_0^{\beta_{\text{therm}}} \mathrm{d}\tau \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{x}\mathcal{L}^{(E)}(A^{(E)}, \bar{\psi}^{(E)}, \psi^{(E)}) \tag{1.18}$$

[2] In vielen Betrachtungen zur Renormierungsgruppentheorie wird β_{therm} in den Hamiltonian gezogen und als Parameter von H betrachtet.

Die Kurzform $\int_{\text{therm}}$ zeigt dabei an, daß über in der imaginären Zeit periodische Eichfelder A und anti-periodische Fermionfelder $\bar{\psi}$ bzw. ψ integriert wird, d.h. $\psi(\boldsymbol{x}, 0) = -\psi(\boldsymbol{x}, \beta_{\text{therm}})$. $\mathcal{L}^{(E)}$ ist die Euklidische Lagrangedichte der QCD und durch

$$\mathcal{L}^{(E)} = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}F^{(E)}_{\mu\nu}F^{(E)}_{\mu\nu} + \bar{\psi}^{(E)}(\gamma^{(E)}_{\mu}D^{(E)}_{\mu} + M)\psi^{(E)} \tag{1.19}$$

gegeben. In dieser Form ist auf die farb- und *flavour*-Indizes verzichtet worden. Im folgenden wird zusätzlich die Kennzeichnung der Euklidischen Größen durch (E) unterdrückt.

1.1.3 Gluonpropagator in der Kontinuumstheorie

Propagatoren beschreiben allgemein die Ausbreitung einer Wellenfunktion oder eines Feldes. Daraus läßt sich die Wahrscheinlichkeit, bei gegebenem Anfangszustand eine definierten Endzustand zu finden, berechnen. Daher kann der Propagator auch als Korrelationsfunktion zwischen diesen Zuständen aufgefaßt werden. Für den Gluon-Propagator $D^{ab}_{\mu\nu}(x, y)$ gilt:

$$D^{ab}_{\mu\nu}(x, y) = \langle \mathrm{T} A^a_\mu(x) A^b_\nu(y) \rangle \tag{1.20}$$

(T ist in dieser Formel die Zeitordnung von x und y) Diese Definition kann als Grundlage sowohl für die Berechnung im Vakuum als auch für Berechnungen bei endlicher Temperatur T dienen. Durch die notwendige Fortsetzung der Felder zu imaginären Zeiten hin zur Beschreibung des Systems bei endlicher Temperatur ist die Struktur des Propagators aber komplexer als bei $T = 0$. So führt man – in Analogie zu Rechnungen bei $T = 0$ – den *imaginary time* oder Matsubara-Propagator $\Delta^{ab}_{\mu\nu}(x, y) = \langle \mathrm{T} A^a_\mu(\boldsymbol{x}, -i\tau) A^b_\nu(\boldsymbol{y}, -i\tau') \rangle$ ein, wobei sich die Zeitordnung T jetzt auf die imaginäre Zeit τ bezieht.

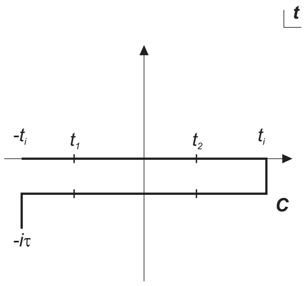


Abbildung 1.1: Integrationspfad im *real-time*-Formalismus. Entlang der Kontur C können Prozesse zwischen realen Zeiten t_1 und t_2 beschrieben werden.

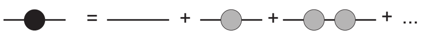


Abbildung 1.2: Selbstenergie-*string*. Der ausgefüllte Kreis repräsentiert den vollen Propagator. Leicht gefüllte Kreise entsprechen der Selbstenergie.

Dieser Propagator beschreibt keine realen Prozesse, da er ausschließlich die Entwicklung der Felder in der imaginären Zeit berücksichtigt. In dem zugrundeliegenden Pfadintegral der Zustandssumme liegt der Integrationspfad entsprechend auf der imaginären Zeitachse. Reale Prozesse werden entweder durch Fortsetzung auf die reelle Zeitachse oder im *real-time*-Formalismus beschrieben, in dem das Pfadintegral auf einer Kontur C berechnet wird, die die reelle Zeitachse beinhaltet.

Aufgrund der periodischen Randbedingungen der Felder im Pfadintegral für endliche Temperatur sind die imaginären Frequenzen $i\omega$ im Impulsraum des Matsubara-Propagators diskret. Der volle Propagator $D^{ab}_{\mu\nu}$, der die Selbstwechselwirkungen der Felder A_μ beinhaltet, läßt sich durch die Schwinger-Dyson-Gleichung mit dem freien Propagator $D^{ab,F}_{\mu\nu}$ und dem Selbstenergie-Tensor $\Pi^{ab}_{\mu\nu}$ rekursiv ausdrücken:

$$D^{ab}_{\mu\nu}(K) = D^{ab,F}_{\mu\nu}(K) - iD^{ac,F}_{\mu\rho}(K)\Pi^{cd}_{\rho\sigma}(K)D^{db}_{\sigma\nu}(K) \tag{1.21}$$

Dies entspricht einem String aus Selbstenergien. K bezeichnet den 4-Impuls des Feldes. Da die Wechselwirkung den

Farbinhalt nicht ändert, ist der Propagator diagonal im Farbraum. Außerdem ist er nicht eichinvariant und daher abhängig von einer gewählten Eichung. Die Slavnov-Taylor-Identitäten geben Bedingungen an die Green-Funktionen – und damit auch an die Propagatoren – aus der Forderung nach lokaler Eichinvarianz an [7]. In einer kovarianten Eichung mit Eichparameter ξ erhält man für den Gluon-Propagator: $K_\mu K_\nu D^{\mu\nu}(K) = -\xi$. Bei endlicher Temperatur ist das Bezugssystem des betrachteten statistischen Systems ausgezeichnet und um eine Lorentz-kovariante Form der Propagatoren und Selbstenergien zu erhalten, führt man die 4-Geschwindigkeit u_μ des Systems ein. Die Gluon-Selbstenergie kann von den Tensoren $g^{\mu\nu}, K^\mu K^\nu, u^\mu u^\nu$ und $K^\mu u^\nu + u^\mu K^\nu$ abhängen. Gewöhnlich wählt man eine andere Basis $A^{\mu\nu}, B^{\mu\nu}, C^{\mu\nu}$ und $E^{\mu\nu}$ (siehe A.1). Aus den Slavnov-Taylor-Identitäten für die QED folgt für die Photon-Selbstenergie $K_\mu \Pi^{\mu\nu}_{\mathrm{QED}} = 0$, auch für endliche Temperatur. Für die QCD haben Braaten und Pisarski ([8] für *soft amplitudes* bzw. [9] für allgemeine Amplituden) eine konsistente Hochtemperatur-Störungstheorie entwickelt, die *hard thermal loop*-Näherung. In dieser Näherung wird von den *one-loop*-Diagrammen nur derjenige Teil berücksichtigt, der von Impulsen in der Größenordnung $|K| \sim T$ bestimmt wird. In dieser Näherung gilt wie für die QED $K_\mu \Pi^{\mu\nu}_{\mathrm{QCD}} = 0$, d.h. $\Pi^{\mu\nu} = \Pi_{\mathrm{T}} A^{\mu\nu} + \Pi_{\mathrm{L}} B^{\mu\nu}$ mit den eichvarianten Funktionen $\Pi_{\mathrm{T}}(K)$ und $\Pi_{\mathrm{L}}(K)$, die jeweils die transversale bzw. longitudinale Komponente der Selbstenergie angeben. Die Analogie zur QED kann noch weitergeführt werden, indem farbmagnetische und -elektrische Felder eingeführt werden. Diese werden als die entsprechenden Komponenten des Gluon-„Feldstärke"-Tensors $F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu - ig[A^\mu, A^\nu]$ definiert, d.h. $E_i^{(\mathrm{col})} = F_{0i}$ und $B_i^{(\mathrm{col})} = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}F_{jk}$.

Führt man den Vektor $\tilde{K}^\mu = (K^\mu K \cdot u - u^\mu K^2)/k$ ein, so ist im Ruhesystem des Plasmas $(u_\mu \equiv (1, \mathbf{0}))$ der Gluon-Propagator in einer kovarianten Eichung

$$\begin{aligned} D^{\mu\nu}(K) = &-\frac{1}{K^2 - \Pi_{\mathrm{T}}} A^{\mu\nu} \\ &+ \frac{\tilde{K}^\mu \tilde{K}^\nu}{K^2(K^2 - \Pi_{\mathrm{L}})} - \xi \frac{H^\mu H^\nu}{(K^2)^2(K^2 - \Pi_{\mathrm{L}})} \end{aligned} \tag{1.22}$$

mit $H^\mu = K^\mu \sqrt{K^2 - \Pi_{\mathrm{L}}} \pm \tilde{K}^\mu \sqrt{\Pi_{\mathrm{D}}}$, $k^2 = (K \cdot u)^2 - K^2$. Der Propagator hat also Polstellen für $K^2 \to \Pi_{\mathrm{T}}$ und $K^2 \to \Pi_{\mathrm{L}}$. Für $\Pi_{\mathrm{L}}(K_0 = 0, \boldsymbol{K} \to 0)$ erhält man die elektrische und für $\Pi_{\mathrm{T}}(K_0 = 0, \boldsymbol{K} \to \mathbf{0})$ die magnetische Abschirmmasse (*screening mass*). Rebhan [10] weist aber darauf hin, daß die Polstellen nur in niedrigster Ordnung der Störungstheorie durch $\Pi_{\mathrm{L}}(K_0 = 0, \boldsymbol{K} \to 0)$ bzw. $\Pi_{\mathrm{T}}(K_0 = 0, \boldsymbol{K} \to \mathbf{0})$ berechnet werden können, zu den eigentlichen Polstellen gibt es danach Korrekturen von $\mathcal{O}(g_s^4)$. Wird der Gluon-Propagator in der Basis $A^{\mu\nu}, B^{\mu\nu}, C^{\mu\nu}$ und $E^{\mu\nu}$ ausgedrückt, so sind nach einem Theorem von Kobes, Kunstatter und Rebhan [11] die Polstellen der Teile $A^{\mu\nu}$ und $B^{\mu\nu}$ in jeder Ordnung der Störungstheorie eichinvariant. Für eine kovariante Eichung bedeutet dies, daß die oben definierten Polstellen eichinvariant sind und so überhaupt eine physikalische Aussage aus den eichvarianten Gluon-Propagatoren gemacht werden kann, zumindest in der Störungstheorie.

Aus dem vollen Propagator im *real-time*-Formalismus erhält man für $K_0 \to K_0 + i\epsilon$ den retardierten Propagator, und die analytische Fortsetzung ergibt den Propagator $\Delta(i\omega, \boldsymbol{K})$, der in dieser Arbeit zur Bestimmung der magnetischen bzw. elektrischen Massen der Gluonen benutzt wird. [3] Die Fortsetzung auf imaginäre Frequenzen $i\omega$ geschieht durch die Ersetzung $K^0 \to ik_4$. Für eine endliche Temperatur T liefern die Randbedingungen der Felder im Pfadintegral der Zustandssumme eine Einschränkung der möglichen Werte für ω: $\omega = 2\pi T n, n \in \mathbb{Z}$. Unter dieser Transformation geht K^2

[3] Diese Massen sind aber keine physikalischen Massen, da sie eine falsche Dispersionsrelation erfüllen.

in $-(k_4^2 + \boldsymbol{k}^2)$ über, oder

$$K = \begin{pmatrix} K^0 \\ \boldsymbol{K} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} ik_4 \\ \boldsymbol{K} \equiv \boldsymbol{k} \end{pmatrix} = k \tag{1.23}$$

Wegen der Fortsetzungseigenschaft der Norm geht man von der Minkowski-Norm $(+---)$ zu einer Euklidischen Norm $(++++)$ über. Für den vollen Propagator $D_{\mu\nu}$ und die Selbstenergie $\Pi_{\mu\nu}$ läßt sich ein ähnlicher Ansatz wie für den *real-time* Formalismus auch im Euklidischen finden (siehe A.2).

$$\begin{aligned} D^{-1}_{\mu\nu}(k) &= aA^{(E)}_{\mu\nu} + bB^{(E)}_{\mu\nu} + cC^{(E)}_{\mu\nu} + eE^{(E)}_{\mu\nu} \\ \Pi_{\mu\nu}(k) &= \Pi_A A^{(E)}_{\mu\nu} + \Pi_B B^{(E)}_{\mu\nu} + \Pi_C C^{(E)}_{\mu\nu} + \Pi_E E^{(E)}_{\mu\nu} \end{aligned} \tag{1.24}$$

Im Anhang wird $D_{\mu\nu}(k)$ in Abhängigkeit von den Entwicklungskoeffizienten von $\Pi_{\mu\nu}$ berechnet. Unter der Verwendung der Ward-Identität $k_\mu k_\nu D_{\mu\nu} = \xi$ für eine kovariante Eichung erhält man

$$D_{\mu\nu}(k) = \frac{1}{\Pi_A + k^2} A^{(E)}_{\mu\nu} + [\frac{1}{\Pi_B + k^2} + \frac{\Pi_C^2 \xi}{2(\Pi_B + k)^2 k^2}] B^{(E)}_{\mu\nu} - \frac{\Pi_C \xi}{(\Pi_B + k^2)k^2} C^{(E)}_{\mu\nu} + \frac{\xi}{k^2} E^{(E)}_{\mu\nu} \tag{1.25}$$

Für den Fall der Landau-Eichung ($\xi = 0$) reduziert sich dieser Ausdruck auf

$$D_{\mu\nu}(k) = \frac{1}{\Pi_A + k^2} A_{\mu\nu} + \frac{1}{\Pi_B + k^2} B_{\mu\nu} \tag{1.26}$$

(Die Indizes (E) werden auch im folgenden unterdrückt, da nur die Euklidische Formulierung weiter betrachtet wird.) Aus der Tensorstruktur von A, B, C und E läßt sich entnehmen, daß Π_A den transversalen und Π_B den longitudinalen Anteil der Selbstenergie in der Landau-Eichung bestimmt. Für $k_4 = 0$ und $\boldsymbol{k} \to 0$ stimmen sie mit Π_T bzw. Π_L überein. Die Landau-Eichung bietet außerdem die Möglichkeit, den Propagator aus zwei Funktionen D_{00} und $D_T = \sum_i D_{ii}$ zu rekonstruieren. Für Π_A und Π_B erhält man im Limes $k_4 = 0$, $\boldsymbol{k} \to 0$: $\Pi_A = \frac{2}{D_T}$ und $\Pi_B = \frac{1}{D_{00}}$.

Die Kenntnis des Gluon-Propagators benötigt man für die *linear response* Analyse, mit der das Abschirmverhalten des Plasmas untersucht wird. Die Grundidee ist dabei, die Plasmaeigenschaften anhand der Reaktion auf eine kleine Ablenkung aus dem Gleichgewicht zu bestimmen. Für die Analyse des Abschirmverhaltens von farbmagnetischen und -elektrischen Feldern wird die Reaktion auf ein kleines, äußeres, statisches Feld untersucht. Der Vergleich des ungestörten Systems mit dem resultierenden Feld bei Anwesenheit der äußeren Felder ermöglicht Aussagen über das Abschirmverhalten des Plasmas [12].

Auch für relativistische Systeme, wie sie hier betrachtet werden, gilt eine Art von Heisenberg-Gleichung für die Zeitentwicklung eines Operators $Y(\boldsymbol{x}, t)$: $\partial_0 Y(x) = i[H(t), Y(x)]$ mit dem Hamiltonian H des Systems. Bei Anwesenheit einer Störung $H^{\text{ext}}(t)$ kann die Änderung von Y in jedem Zustand $|q\rangle$ in niedrigster Ordnung in H^{ext} durch

$$\delta\langle q|Y(x)|q\rangle = i\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \, \langle q|[H^{\text{ext}}(t'), Y(x)]|q\rangle \tag{1.27}$$

berechnet werden. Es wird dabei angenommen, daß die Störung zur Zeit t_0 „aktiviert" wird. Für den thermischen Erwartungswert $\delta\langle Y\rangle_{\text{therm.}}$ gilt

$$\delta\langle Y(x)\rangle_{\text{therm.}} = i\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t' \, \mathrm{Tr}\{\hat{\rho_G}[H^{\text{ext}}(t'), Y(x)]\} \tag{1.28}$$

Mit $\hat{\rho_G}$ wird der Zustandsdichteoperator für das Plasma im Gleichgewichtszustand bezeichnet.

Besteht die Störung in einem äußeren, statischen farbelektrischen Feld $\mathcal{E}_i^a(x)$ ist $H^{\rm ext}(t) = \int {\rm d}^3x\mathcal{H}^{\rm ext}(x)$ mit der Hamilton-Dichte $\mathcal{H}^{\rm ext}(x) = E_j^a(x)\mathcal{E}_j^a(x)$, ist das induzierte farbelektrische Feld im Plasma

$$\delta\langle E_i^a(x)\rangle = i\int_{t_0}^{t}\int {\rm d}^3x'\mathcal{E}_j^b(x'){\rm Tr}\{\hat{\rho_G}[E_j^b(x'),E_i^a(x)]\} \tag{1.29}$$

Sind die Bedingungen für die *linear response* Analyse erfüllt – ist also das äußere Feld klein genug um die Rechnung in niedrigster Ordnung durchführen zu können – so erhält man ein effektives farbelektrisches Feld $\mathcal{E}_i^a(k)_{\rm eff} = \frac{1}{1+\Pi_{00}(0,\boldsymbol{k})/k^2}\mathcal{E}_i^a(k) = \varepsilon(k)\mathcal{E}_i^a(k)$. Das äußere Feld wird mit der dielektrischen Funktion $\varepsilon(k)$ abgeschirmt.

Für zwei statische Quarks mit Ladungen Q_1 und Q_2, die zusätzlich in das Plasma gebracht werden, erhält man als störendes, äußeres Feld $\mathcal{E}(x) = \mathcal{E}_1(x-x_1)+\mathcal{E}_2(x-x_2)$ mit dem von Quark 1 verursachten Feld $\mathcal{E}_1$ und dem entsprechenden zusätzlichen Feld von Quark 2. Die Quarks befinden sich an den Orten x_1 bzw. x_2. Die freie Energie, oder das Potential zwischen den Quarks, ist dann durch

$$V(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x_2},T) = Q_1\cdot Q_2\int\frac{{\rm d}^3q}{(2\pi)^3}\frac{\mathcal{E}(\boldsymbol{q})_{\rm eff}}{\boldsymbol{q}^2}{\rm e}^{-i\boldsymbol{q}(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2)} \tag{1.30}$$

gegeben. Dabei ist $\mathcal{E}(\boldsymbol{q})_{\rm eff}$ wiederum das effektive farbelektrische Feld im Plasma, das durch die Störung $\mathcal{E}(x)$ verursacht wird. Für $R\equiv|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|\gg T^{-1}$ stammen die dominanten Beiträge zum Integral aus dem Bereich $\boldsymbol{q}\sim\boldsymbol{0}$ und für große R erhält man ein Yukawa-Potential $V(R,T) = \frac{Q_1Q_2}{4\pi R}{\rm e}^{-m_{\rm el}R}$ wobei $m_{\rm el}^2 = \Pi_{00}(0,\boldsymbol{k}\to 0)$ ist. Daher nennt man $m_{\rm el}$ auch elektrische Abschirmmasse.

1.1.4 Quark-Potential

Die freie Energie einer Anordnung von schweren Quarks und Anti-Quarks kann auch auf eine andere Weise ausgedrückt werden. Dazu wird der Polyakovloop-Operator $\Omega(\boldsymbol{x})$ betrachtet, der durch folgenden Ausdruck definiert wird:

$$\Omega(\boldsymbol{x}) = {\rm T}\exp[-ig\int_0^{\beta_{\rm therm}}{\rm d}\tau A_4(\boldsymbol{x},\tau)] \tag{1.31}$$

Die Zeitordnung T bezieht sich hier auf die imaginäre Zeit τ. Mit dem *lokalen Polyakovloop* $L(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{N_C}{\rm Tr}\Omega(x)$ gilt für die freie Energie $F_{N_q,N_{\bar q}}$ von N_q Quarks und $N_{\bar q}$ Anti-Quarks [13]

$${\rm e}^{-\beta_{\rm therm}F_{N_q,N_{\bar q}}} = {\rm Tr}[{\rm e}^{-\beta_{\rm therm}H}L(\boldsymbol{x}_1)\cdots L(\boldsymbol{x}_{N_q})L^\dagger(\boldsymbol{x}'_1)\cdots L^\dagger(\boldsymbol{x}_{N_{\bar q}})] \tag{1.32}$$

wobei die Spur über Zustände des Eichfeldes zu nehmen ist, da die Quarks als fest an den Orten $\boldsymbol{x}_i$ bzw. die Anti-Quarks als fest an den Positionen $\boldsymbol{x}'_j$ angesehen werden. Der Operator Ω beschreibt die Veränderung des Farbinhaltes der Quark-Felder in der imaginären Zeit zwischen 0 und $\beta_{\rm therm}$ bei Anwesenheit des Eichfeldes A. Die freie Energie F_q eines statischen Quarks ist demzufolge durch den Ausdruck ${\rm e}^{-\beta_{\rm therm}F_q} = \langle L\rangle$ mit $L = \lim_{V\to\infty}\frac{1}{V}\int_V{\rm d}^3x\,L(\boldsymbol{x})$ oder $F_q = -\frac{1}{\beta_{\rm therm}}\ln\langle L\rangle$ bestimmt. Für ein verschwindendes $\langle L\rangle$ ist F_q unendlich und der Zustand mit einem statischen, schweren Quark kann physikalisch nicht realisiert werden. Andererseits bedeutet ein endliches $\langle L\rangle$, daß die Existenz eines solchen Zustandes möglich ist.

Bei endlicher Temperatur wird nur über solche Eichfelder A integriert, die periodisch in der imaginären Zeit sind. Daher sind nur solche Eichtransformationen g zulässig, die diesen Sachverhalt nicht ändern. Auch nach einer Eichtransformation g muß gelten: $A^g_\mu(\boldsymbol{x},0) = A^g_\mu(\boldsymbol{x},\beta_{\text{therm}})$. Die zulässigen Eichtransformationen g müssen daher folgender Bedingung genügen: $g(\boldsymbol{x},0) = C \cdot g(\boldsymbol{x},\beta_{\text{therm}})$. C ist ein Element des Zentrums $Z(N_C)$ der Eichgruppe. Für die $SU(3)$ speziell haben die Elemente des Zentrums die Form $C = \mathrm{e}^{i\frac{2\pi}{3}j}$, $j = 0,1,2$. Der Polyakovloop L transformiert sich unter den Zentrumstransformationen mit $L(\boldsymbol{x}) \xrightarrow{C} CL(\boldsymbol{x})$. Die Eichfeldwirkung ist aber invariant unter diesen Transformationen. Sie besitzt eine $Z(3)$-Symmetrie. Bei nicht verschwindendem $|\langle L\rangle| = L_0$, $L_0 > 0$, wird einer der möglichen Grundzustände des Gluonsystems ausgewählt, die durch $\langle L\rangle = L_0 \cdot \mathrm{e}^{i\frac{2\pi}{3}n}$, $n = 0,1,2$ unterschieden werden. Daher ist $\langle L\rangle$ ein Ordnungsparameter, der eine spontane Symmetriebrechung für $L_0 > 0$ – und damit einen Phasenübergang des Systems – anzeigt. Da für $L_0 > 0$ Zustände mit einzelnen Quarks existieren können, nicht aber für $L_0 = 0$, wird $\langle L\rangle$ als Ordnungsparameter für den *confinement/deconfinement* Übergang angesehen.

Quantenzustände von Mehrteilchensystemen, wie dem hier betrachteten Fall von N_q Quarks und $N_{\bar{q}}$ Anti-Quarks, können durch Quantenzahlen charakterisiert werden, die aus den irreduziblen Darstellungen der Basiszustände des Mehrteilchensystems folgen. Für ein System mit jeweils einem Quark und einem Anti-Quark heißt dies, daß irreduzible Darstellungen der Basis des Tensorproduktes $\overline{SU(N_C)} \otimes SU(N_C)$ betrachtet werden müssen. Für $N_C = 3$ gilt aber $\bar{3} \otimes 3 = 1 \oplus 8$ (Die Zahlen beziehen sich dabei auf die Dimensionen der jeweiligen Darstellungsräume, d.h man findet ein- und achtdimensionale irreduzible Darstellungen für das Tensorprodukt). Vielfach unterscheiden sich die unterschiedlichen Zustände des Systems, die zu den verschiedenen Darstellungen gehören, durch ihre Energie. Man kann deshalb das Farb-Singulett-Potential V_1 und das Farb-Oktett-Potential V_8 einführen, die jeweils die Energie eines Quark-Anti-Quark Paares im Abstand R enthalten. In [14] wird gezeigt, daß für das Singulett-Potential V_1 gilt:

$$\mathrm{e}^{-\beta_{\text{therm}} V_1(R)} = \langle \mathrm{Tr}\Omega(R)\Omega^\dagger(0)\rangle \tag{1.33}$$

und

$$\langle L(R)L^\dagger(0)\rangle = \frac{1}{N_C^2}\exp(-\beta_{\text{therm}}V_1(R)) + \frac{N_C^2-1}{N_C^2}\exp(-\beta_{\text{therm}}V_8(R)) \tag{1.34}$$

Die Potentiale V_1 und V_8 sind eichvariant, d.h. zu ihrer Berechnung muß eine Eichung fixiert werden. Das farbgemittelte Potential V_{av} erhält man aus der Beziehung $\mathrm{e}^{-\beta_{\text{therm}}V_{\text{av}}(R)} = \langle L(R)L^\dagger(0)\rangle$ und ist eichinvariant.

Das Singulett-Potential wird von einem Ein-Gluon-Austausch dominiert und für $T > T_C$ erhält man folgende Form:

$$V_1(R) \sim \frac{\mathrm{e}^{-m_{\text{el}}R}}{R^d}, \quad d = 1 \tag{1.35}$$

1.1.5 Eichfixierung

In der Pfadintegralformulierung stellen die Eichfreiheitsgrade ein Problem dar, da in dem Integral über die Eichfelder physikalisch äquivalente Felder überabzählbar oft berücksichtigt werden, so daß das Integral divergiert.

Zur Lösung dieses Problems führt man weitere Bedingungen an die Eichfelder ein, die das Feld in jedem Eichorbital $\Omega_A = \{A^g \in \mathcal{G} \mid \exists g \in \mathcal{G} \quad \text{mit} \quad A \xrightarrow{g} A^g\}$ eindeutig festlegen. Die Bedingung an die Felder A_μ läßt sich durch eine Funktion F in der Algebra $su(3)$ der Felder ausdrücken: $F[A_\mu] = 0$ oder in Komponenten $F^a(A_\mu) = 0$ ($F[A_\mu] = \sum_a F^a(A_\mu)t^a$). Man integriert über die Felder, die die Eichbedingung erfüllen. Dieses Verfahren ist von Fadeev und Popov [15] eingeführt worden.

Um die Eichbedingung invariant in das Pfadintegral einzufügen, benötigt man die *Fadeev-Popov-Determinante* $\Delta_{\mathrm{FP}}(A)$. Z wird damit

$$Z = (\int \mathcal{D}\Omega) \int \mathcal{D}A_\mu \Delta_{\mathrm{FP}}(A)\delta(F[A_\mu])\mathrm{e}^{i\int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}[A_\mu]} \tag{1.36}$$

Das Integral $\int \mathcal{D}\Omega$ über die Eichgruppe enthält die Integration über eichäquivalente Felder und wird abgespalten. Man definiert i.d.R. Z neu:

$$Z = \int \mathcal{D}A_\mu \Delta_{\mathrm{FP}}(A)\delta(F[A_\mu])\mathrm{e}^{i\int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}[A_\mu]} \tag{1.37}$$

Implizit ist in dieser Betrachtung angenommen worden, daß F^a ein Funktional ist. Für eine infinitesimale Transformation $U(\omega) = \exp(i\omega^a(x)t^a) = \mathbb{1} + i\omega^a(x)t^a + \mathcal{O}(\omega^2)$ ist

$$F^a[A^\omega] = F^a[A] + \frac{\partial F^a}{\partial A^b_\mu}\delta A^b_\mu = F^a[A] + \frac{\partial F^a}{\partial A^b_\mu}(D_\mu\omega)^b \tag{1.38}$$

Daraus folgt (s. Lehrbücher wie z.B. [4])

$$\Delta_{\mathrm{FP}}(A) \sim \det(\frac{\delta F^a(x)}{\delta\omega^b(y)})|_{\omega=0} = \det M \tag{1.39}$$

Allgemeiner kann man eine Eichbedingung der Form $F[A] = C$ betrachten, in der C unabhängig von A ist. Daher bleibt die Fadeev-Popov-Determinante unter dieser allgemeinen Eichbedingung unverändert. Darüber hinaus kann man Z auch in einer bestimmten Art neu normieren: Man führt den Faktor $\int \mathcal{D}C \exp[\frac{-i}{2\xi}\int \mathrm{d}^4x C_a^2(x)] = \mathrm{const.}$ ein und erhält so

$$\begin{aligned} Z &= N\int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}C \Delta_{\mathrm{FP}}[A]\delta(F[A]-C)\exp[i(\int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}[A_\mu] - \sum_a \frac{1}{2\xi}C_a^2(x))] \\ &= N\int \mathcal{D}A_\mu \Delta_{\mathrm{FP}}[A]\exp[i(\int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}[A_\mu] - \frac{1}{2\xi}F[A]^2)] \end{aligned} \tag{1.40}$$

Um Feynman-Regeln aufstellen zu können, ist es sinnvoll, einen effektiven Lagrangian $\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}$ einzuführen: Mit Grassmann Feldern $\bar\eta$ und η läßt sich die Determinante einer Matrix M schreiben

$$\det M = \int \mathcal{D}\eta\mathcal{D}\bar\eta\, \mathrm{e}^{-i\int \mathrm{d}^4x\bar\eta^a(x)M_{ab}(x,y)\eta^b(y)} \tag{1.41}$$

Damit ist

$$Z = \int \mathcal{D}A_\mu\mathcal{D}\eta\mathcal{D}\bar\eta\, \mathrm{e}^{i\int \mathrm{d}^4x\mathcal{L}_{\mathrm{eff}}(A_\mu,\eta,\bar\eta)} \tag{1.42}$$

mit $\mathcal{L}_{\mathrm{eff}} = \mathcal{L} - \frac{1}{2\xi}F^2 - \bar\eta^a M_{ab}\eta^b = \mathcal{L} + \mathcal{L}_{\mathrm{fixing}} + \mathcal{L}_{\mathrm{ghost}}$. In einer kovarianten Eichung transformieren sich die $F^a[A]$ kovariant. Vielfach wählt man die Form $F[A] = \partial^\mu A_\mu$, und man erhält für $\xi = 1$ die *Feynman*-Eichung und für $\xi \to 0$ die hier benutzte *Landau*-Eichung. In dieser gilt folglich $\partial^\mu A_\mu = 0$. Der *ghost*-Term der Lagrange-Dichte hat in der Landau-Eichung die Form $\mathcal{L}_{\mathrm{ghost}} = -\bar\eta^a M_{ab}\eta^b = -\bar\eta^a(\delta^{ab}\Box - f^{abc}(\partial^\mu A^c_\mu + A^c_\mu\partial^\mu))\eta^b$.

Obwohl Fermionenfelder durch Grassmann-Variablen beschrieben werden, handelt es sich bei den Feldern $\bar{\eta}$ und η nicht um wirkliche Fermionen, da $\bar{\eta}^a(\boldsymbol{x}, 0) = \bar{\eta}^a(\boldsymbol{x}, \beta)$ und $\eta^b(\boldsymbol{x}, 0) = \eta^b(\boldsymbol{x}, \beta)$ gilt, sie also keine anti-periodischen Felder sind, und sie einer falschen Statistik gehorchen. $\bar{\eta}$ und η werden daher als *Fadeev-Popov-Geistfelder* bezeichnet. Sie sorgen dafür, daß die Unitarität der Theorie nicht verletzt wird [4]. Danach werden Geist-Felder als „mathematisches Artefakt" angesehen, und es wird ihnen keine physikalische Bedeutung zugebilligt. Dies zeigt sich daran, daß die Geistfelder nicht als äußere Linie in Feynman-Graphen auftreten.

Für nicht-Abelsche Eichtheorien gibt es eichäquivalente Felder mit derselben Eichbedingung $F[A] = F[A^g] = 0$ [16]. Für $g(x)$ mit $\partial_\mu g^{-1}[\partial_\mu A_\mu, g] = 0$ ist $F[A] = F[A^g]$. Dabei ist $A^g_\mu(x) = g^{-1}(x)A_\mu(x)g(x) + g^{-1}(x)\partial_\mu g(x)$. Solche Transformationen existieren, falls das Geist-Feld einen masselosen Bindungszustand hat. Den Raum der Konfigurationen kann man in topologisch verschiedene Sektoren unterteilen, die jeweils durch eine unterschiedliche Anzahl von gebundenen Zuständen der Geist-Felder charakterisiert werden. Es können dann äquivalente Eichfelder in den verschiedenen Sektoren existieren, die man als *Gribov-Kopien* bezeichnet. Diese sind über die obige Bedingung miteinander verknüpft.

1.2 Gitterregularisierung der QCD

1.2.1 Gitterregularisierung

In der bisher dargelegten Beschreibung des Pfadintegralformalismus ist nicht geklärt, ob der Grenzwert tatsächlich existiert; handelt es sich dabei doch um die Integration von überabzählbar vielen Freiheitsgraden. Um dennoch Aussagen aus der Theorie zu gewinnen, ist es in einem ersten Schritt nötig, die Theorie zu regularisieren, d.h. man definiert endliche Ausdrücke, die den „unendlichen" Feynman-Integralen entsprechen, so, daß es ein wohldefiniertes Verfahren zur Grenzwertbildung gibt, in dem die ursprünglichen Werte der Feynman-Integrale wieder erhalten werden. Gebräuchliche Regularisierungsverfahren sind z.B. die Methoden nach Pauli-Villars, dimensionale Regularisierung und die in dieser Arbeit verwendete Gitterregularisierung. Während die beiden erstgenannten Verfahren auf störungstheoretischen Ansätzen basieren, hat das letztgenannte den Vorteil, auf Bereiche der Theorie anwendbar zu sein, die nicht oder nur mit großen Aufwand störungstheoretisch untersucht werden können.

Um die Anzahl der Freiheitsgrade zu reduzieren, wird das (Euklidische) Raum-Zeit-Kontinuum mit einer abzählbaren Punktmenge diskretisiert, d.h. die Felder $\psi(x)$ werden auf Punkte in einem Gitter G beschränkt:

$$G = \{x \in \mathbb{R}^4 \mid x = \sum_{\mu=1}^{4} n_\mu a_\mu \hat{\mu};\ n_\mu \in \mathbb{Z};\ \mathbb{R} \ni a_\mu > 0\} \tag{1.43}$$

Dabei ist $\hat{\mu}$ ein Einheitsvektor in die (kartesische) μ-Richtung. In vielen Fällen beschränkt man sich auf $\quad a_\mu = a \quad \forall\mu = 1, \ldots, 4 \quad$, und die Gitterpunkte werden eindeutig durch a und $n = (n_1, \ldots, n_4)$ bestimmt.

In einem zweiten Schritt muß man ein Verfahren finden, das den oben erwähnten Grenzwertprozeß, den sog. Kontinuumslimes (hier $a \to 0$), ermöglicht, so daß die physikalischen Größen endlich bleiben. Dies ist ein Teilaspekt der *Renormierungsgruppentheorie*. Einen Überblick über diese Theorie findet man z.B. in [17].

Die Einführung der Gitterstruktur im Ortsraum entspricht einer Einschränkung der möglichen

Impulse. Dies sei anhand der eindimensionalen Fouriertransformation verdeutlicht:

$$F[f](p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mathrm{d}x \, \mathrm{e}^{-ip\cdot x} f(x) \tag{1.44}$$

wird durch die Gitterstruktur periodisch. (Eine genauere Erklärung wird im Abschnitt Fourier-Transformation gegeben.)

$$\begin{aligned} F[f](p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_n \mathrm{e}^{-ip\cdot an} f(an) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_n \mathrm{e}^{-i(p+\frac{2\pi}{a})an} f(an) \\ &= F[f](p + \frac{2\pi}{a}) \end{aligned} \tag{1.45}$$

Die möglichen Impulswerte können dadurch auf die 1. Brillouin-Zone $p \in [-\frac{\pi}{a};\ \Lambda \equiv \frac{\pi}{a}]$ beschränkt werden.

Der größtmögliche Impulswert Λ wird als *cut-off* bezeichnet, und der Limes $\Lambda \to \infty$ entspricht dem Limes $a \to 0$.

1.2.2 Kontinuumslimes

Eine Feldtheorie ist durch eine Lagrangedichte spezifiziert, die neben den Feldern und deren Ableitungen auch Parameter wie Kopplungskonstanten oder Massenparameter enthält. Mit dieser Lagrangedichte können – im Prinzip – alle physikalischen Observablen berechnet werden, und die Ergebnisse hängen in der Regel von den Parametern der Theorie ab. Berechnet man aber die Observablen mit einem störungstheoretischen Ansatz, so existieren vielfach divergente Feynman-Diagramme, und Aussagen sind dann nicht mehr möglich. Dieses Problem ist ein fundamentales Problem der Formulierung der Theorie.

Die Regularisierungsschemata führen weitere Parameter ein, die die Regularisierung beschreiben. Im Fall der dimensionalen Regularisierung ist dies die Abweichung ε von der gewünschten Dimension d der Theorie, d.h., es wird eine Theorie mit der Dimension $d - \varepsilon$ betrachtet. Der natürliche Parameter der Gitterregularisierung ist der Gitterabstand a. Mit dem Bilden des Grenzwertes $a \to 0$ erhält man die ursprüngliche Theorie zurück. Um in diesem Prozeß nicht die ursprünglich auftretenden Divergenzen zu erhalten, werden die ursprünglichen Parameter der Theorie nicht mehr als fest angesehen, sondern sie werden „renormiert".

In einem multiplikativen Renormierungsschema einer ϕ^4-Theorie[4] werden z.B. die Masse m_B, die Kopplungskonstante g_B und die Felder ϕ_B der ursprünglichen Theorie in folgender Weise umdefiniert (siehe z.B. [18]): $\phi_B = Z_\phi^{1/2}(a)\phi$, $g_B = Z_\phi^{-2}(a)Z_g(a)g$, $m_B^2 = Z_\phi^{-1}(a)Z_m(a)m^2$. Dabei sind $Z_i(a)$ Renormierungskonstanten (für festes a) und ϕ, g und m die renormierten Parameter der Theorie. Die $Z_i(a)$ werden dann so gewählt, daß physikalische Größen[5] für $a \to 0$ endlich bleiben und von a unabhängig sind. Die $Z_i(a)$ absorbieren im Limes $a \to 0$ die Divergenzen der ursprünglichen „nackten" Theorie. Die Wahl der Z_i ist nicht eindeutig, verschiedene Renormierungsschemata (in diesem Fall unterschiedliche Z_i) lassen sich über Renormierungsgruppengleichungen ineinander transformieren. Renormierbare Theorien zeichnen sich dadurch aus, daß bei einer Wahl von endlich vielen Z_i alle physikalischen Größen endlich bleiben.

[4] für andere Theorien gilt ähnliches. Der Einfachheit halber wird aber meistens eine ϕ^4-Theorie betrachtet.

[5] das meint genauer die Ausdrücke in der Theorie, die physikalische Größen beschreiben sollen

Für die n-Punkt-Vertex-Funktion $\Gamma^{(n)}$ erhält man z.B. $\Gamma_B^{(n)}(p_1,\dots,p_n;m_B,g_B,a) = Z_\phi^{-\frac{n}{2}}(m,g,a)\cdot$ $\Gamma^{(n)}(p_1,\dots,p_n;m,g,a)$, wobei m und g nach den oben angegebenen Transformationsvorschriften auch durch m_B und g_B ausgedrückt werden können. Also $Z_\phi^{\frac{n}{2}}(m_B,g_B,a)\Gamma_B^{(n)}(p_1,\dots,p_n;m_B,g_B,a) =$ $\Gamma^{(n)}(p_1,\dots,p_n;m,g,a)$. Wie gesagt sind die Z_i so gewählt, daß $\Gamma^{(n)}$ unabhängig von a für $a\to 0$ wird, oder $\Gamma^{(n)}(p_1,\dots,p_n;m,g,a) = \Gamma^{(n)}(p_1,\dots,p_n;m,g) + C(a)$ für den angegebenen Grenzwert. $C(a)$ ist ein Korrekturterm für endliches a, der auch als *Skalenverletzung* bezeichnet wird. Nimmt man an, daß man sich in einem a-Bereich befindet, in dem die Skalenverletzung nicht relevant ist, so gilt

$$a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}a}Z_\phi^{\frac{n}{2}}(m_B,g_B,a)\Gamma_B^{(n)}(p_1,\dots,p_n;m_B,g_B,a) = 0 \tag{1.46}$$

oder

$$\{a\frac{\partial}{\partial a} - \beta_{\mathrm{LAT}}\frac{\partial}{\partial g_B} + n\gamma_{\mathrm{LAT}}\}\Gamma_B^{(n)}(p_1,\dots,p_n;m_B,g_B,a) = 0 \tag{1.47}$$

(Für festes m und g sind m_B und g_B von a abhängig.) In der Gleichung sind $\beta_{\mathrm{LAT}} = -a\frac{\partial g_B}{\partial a}|_g$ und $\gamma_{\mathrm{LAT}} = \frac{1}{2}a\frac{\partial \ln Z_\phi}{\partial a}|_g$. Gleichung 1.47 beschreibt, wie sich die nackte n-Punkt Vertex-Funktion bei festen renormierten Parametern mit dem Regularisierungsparameter a ändert. Sie liefert außerdem eine Vorschrift, wie g_B und Z_ϕ mit a variiert werden müssen, damit die renormierten Parameter und damit auch die $\Gamma^{(n)}$ (letztendlich also die physikalische Theorie) fest bleiben – abgesehen von einer eventuellen Skalenverletzung. Man kann zeigen, daß β_{LAT} nur von g_B abhängt und nicht explizit von a, woraus ein Zusammenhang zwischen g_B und a hergeleitet werden kann. Politzer [19], Gross und Wilczek [20] haben gezeigt, daß β_{LAT} für nicht Abelsche Eichtheorien negativ ist. Eine 2-*loop* Entwicklung bis zur Ordnung g^5 liefert:

$$\beta_{\mathrm{LAT}}(g) = -\beta_0 g^3 - \beta_1 g^5 + \mathcal{O}(g^7) \tag{1.48}$$

Für die QCD für $N_f = 0$ sind $\beta_0 = \frac{11N_c}{48\pi^2}$ und $\beta_1 = \frac{34}{3}(\frac{N_c}{16\pi^2})^2$, und sie sind unabhängig von der Eichung und vom Renormierungsschema. Integration der Differentialgleichung $\beta_{\mathrm{LAT}}(g) = -a\frac{\partial g}{\partial a}$ unter Verwendung der 2-*loop* Formel für β_{LAT} liefert das Ergebnis (siehe z.B. [21])

$$a = \Lambda_{\mathrm{LAT}}^{-1}\exp(-\frac{1}{2\beta_0 g_B^2})(\beta_0 g_B^2)^{-\frac{\beta_1}{2\beta_0^2}}(1+\mathcal{O}(g_B^2)) \tag{1.49}$$

mit der dimensionsbehafteten Integrationskonstanten Λ_{LAT}, die man aus

$$\Lambda_{\mathrm{LAT}} = \lim_{a\to 0}\frac{1}{a}\exp(-\frac{1}{2\beta_0 g_B^2})(\beta_0 g_B^2)^{-\frac{\beta_1}{2\beta_0^2}} = \lim_{a\to 0}\frac{1}{a}R(g_B^2) \tag{1.50}$$

erhält.

Da in der Regel $c = k_B = \hbar = 1$ (k_B ist die Boltzmannkonstante, keine nackte Größe!) gesetzt wird, ist die einzige physikalische Dimension die Länge, und alle Größen können in Längeneinheiten oder in inversen Längeneinheiten, die einer Massen- oder Energiedimension entsprechen, angegeben werden. Das Einführen des Gitters setzt den Gitterabstand a als mögliche Einheit fest, d.h. eine Größe Θ mit der Dimension $[\Theta] = M^{d_\Theta}$ hat ein dimensionsloses Gitteräquivalent $\hat{\Theta}_a$, das durch $\Theta =$ $(\frac{1}{a})^{d_\Theta}\hat{\Theta}_a$ definiert ist. In der obigen Betrachtung entspricht Θ einer renormierten Größe, d.h. für $a\to$

0 soll sie unabhängig von a und endlich sein. Der in dem Limes erhaltenen Wert soll der physikalische Wert der entsprechenden Größe sein.

Die Art von Gittersimulationen, wie sie hier durchgeführt wird, stützt sich auf die nackte Theorie, genauer auf die nackten Parameter und Felder der Theorie. Das bedeutet, daß Größen wie $\Gamma_B^{(n)}$ auf dem Gitter betrachtet werden. Es muß dann die Verbindung zu der renormierten Theorie hergestellt werden, die eine Beschreibung der physikalischen Observablen enthält. Die Korrelationslänge $\hat{\xi}$ der Gittertheorie, d.h. der simulierten nackten Theorie, ist $\frac{\xi}{a}$ und divergiert für $a \to 0$. Die Gittertheorie muß also im Limes $a \to 0$ gegen eine kritische Theorie mit (nackter) Kopplungskonstante $g_B^\star$ gehen: $\hat{\xi}(g_B) \xrightarrow[g_B \to g_B^\star]{} \infty$. Aus der β_{LAT}-Funktion läßt sich ersehen, daß $g_B^\star = 0$ sein muß, da ein negatives β zu einem UV-Fixpunkt bei $g_B = 0$ führt und $a \to 0$ einem UV-Grenzwert entspricht. Die entsprechende, renormierte Kontinuumstheorie kann aber durchaus eine nicht verschwindende renormierte Kopplungskonstante besitzen, so daß auch wechselwirkende Theorien simuliert werden können.

Um die Beziehung von in der Gitterregularisierung berechneten, dimensionslosen Größen zu physikalischen Observablen herzustellen, benutzt man die Tatsache, daß Λ_{LAT} nicht nur konstant im Kontinuumslimes ist, sondern auch mit einer Massendimension behaftet ist. Damit hat man eine Skala der Theorie zur Verfügung, in der physikalische Massen M_i angegeben werden können: $M_i = C_i \Lambda_{\mathrm{LAT}}$. Die dimensionslose Gittergröße $\hat{M}_i = aM_i$ verändert sich mit g_B[6].

$$aM_i = C_i R(g_B^2) \tag{1.51}$$

Im *Skalenbereich* verhält sich jede Massengröße auf diese Weise; es gilt auch $aM_j = C_j R(g_B^2)$, so daß das physikalische Verhältnis $\frac{M_i}{M_j} = \frac{C_i}{C_j}$ in dem Skalenbereich aus den Gittergrößen berechnet werden kann.

Absolute Größen können nur mit Kenntnis des Gitterabstandes a und der Z_i auf dem Gitter berechnet werden, wenn außerdem die Skala Λ_{LAT} bekannt ist. Wie oben erwähnt, reicht die Forderung nach a-Unabhängigkeit der renormierten Größe im Limes $a \to 0$ nicht aus, um das Renormierungsschema eindeutig festzulegen. Man benötigt zusätzliche Bedingungen wie z.B. das Festlegen der Werte von n-Punkt-Funktionen an einem bestimmten Punkt und einen Abgleich der Theorie mit experimentell bestimmten Werten. An einem Punkt muß der Wert gewisser physikalischer Größen der Theorie durch experimentell bestimmte Werte festgelegt werden. In der Gittertheorie, wie sie hier betrachtet wird, kann man z.B. die ρ-Masse m_ρ oder den linearen Teil des Potentials zwischen schweren Quarks, die *string tension*, zum Festlegen der Skala verwenden.

1.2.3 Diskretisierung der QCD

Wie im Abschnitt über die Fourier-Transformation dargelegt ist, ist die Diskretisierung im wesentlichen ein Abtasten (*sampling*) einer kontinuierlichen Größe, hier der entsprechenden Felder. Operationen wie Integration und Differentiation müssen dann durch Größen auf dem Gitter approximiert werden:

$$\int \mathrm{d}^D x\, f(x) \longrightarrow a^D \sum_n f(na) \tag{1.52}$$

$$\partial_\mu f(x) \longrightarrow \frac{1}{a}(f(na + \hat{\mu}a) - f(na)) \tag{1.53}$$

[6] Die Änderung einer Größe mit g_B kann nach den vorherigen Überlegungen zu β_{LAT} auch als Änderung mit a aufgefaßt werden.

Die Motivation bei der Einführung von Gitteräquivalenten zu Kontinuumsgrößen ist der Versuch, ein „gutes" Konvergenzverhalten der Gittergrößen gegen die Kontinuumsgrößen für $a \to 0$ zu erhalten. Daher sind die oben aufgeführten Vorschriften nur beispielhaft. Jede Vorschrift mit dieser Eigenschaft ist eine gültige Möglichkeit, die Gitteräquivalente zu definieren.

Die Gittertheorie soll möglichst viele der Symmetrieeigenschaften der Kontinuumstheorie erben. Eine naive Wirkung, die man durch Anwenden der angegebenen Diskretisierungsvorschriften auf die Kontinuumstheorie erhält, erfüllt diese Anforderungen in der Regel nicht. Da die Wirkung nur für $a \to 0$ gegen die Kontinuumswirkung konvergieren soll, kann man aber durch geeignete Wahl von für $a \to 0$ verschwindender Terme die Abweichungen von den Symmetrieeigenschaften der Kontinuumstheorie reduzieren.

Wie eingangs erwähnt, ist eine der geforderten Eigenschaften der QCD die lokale Eichinvarianz, die man auch in der Gitterformulierung beibehalten will. Eine Konsequenz aus der Forderung nach lokaler Eichinvarianz in der Kontinuumstheorie ist die Einführung der kovarianten Ableitung $D_\mu = \partial_\mu + ig_s A_\mu(x)$. Diese muß auf dem Gitter durch Differenzen von Feldern an verschiedenen Gitterpunkten ersetzt werden, und das Gitteräquivalent des in der Kontinuumstheorie auftretenden Terms $\bar{\psi}(x) D_\mu \psi(x)$ ist nicht mehr eichinvariant.

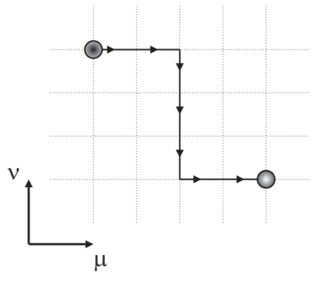
Der Lösungansatz besteht darin, nur die Fermionfelder auf das Gitter zu setzen und die Eichfelder weiterhin im Kontinuum zu lassen. Anstelle der Eichfelder betrachtet man das Linienintegral $U(C) = \mathrm{P}\exp\{-ig\int_C \sum_\mu \mathrm{d}x_\mu A_\mu(x)\}$, das beschreibt, wie sich der *colour*-Inhalt eines Fermionfeldes entlang des Weges C bei Anwesenheit des Eichfeldes $A_\mu(x)$ verändert. Auf dem Gitter wählt man den Pfad von $x + \hat{\mu}a$ nach x und erhält das Integral $U_\mu(x) = \mathrm{P}\exp\{-ig\int_{x+\hat{\mu}a}^{x} \mathrm{d}x_\mu A_\mu(x)\}$.

$U_\mu(x)$ ist also eine Größe auf der Verbindungslinie von x nach $x + \hat{\mu}a$ und wird daher als *Link-Variable* bezeichnet. Unter einer Transformation g der Kontinuumsfelder ψ transformiert sich die Link-Variable mit

$$U_\mu(x) \longrightarrow g(x) U_\mu(x) g^{-1}(x + \hat{\mu}a). \tag{1.54}$$

Damit gibt es zur Konstruktion einer eichinvarianten Wirkung zwei unabhängige, grundlegende Objekte [22]:

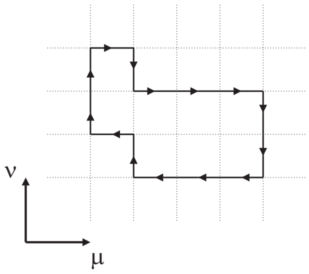
(i)



Einen *string* aus pfadgeordneten Link-Variablen, der von einem Fermion und einem Anti-Fermion abgeschlossen wird.

$$\mathrm{Tr}\,\bar{\psi}(x) U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}a) \cdots U_\rho(y - \hat{\rho}a) \psi(y) \tag{1.55}$$

(ii)



Geschlossene Schleifen (*loops*)

$$\mathrm{Tr}\, U_\mu(x)U_\nu(x+\hat{\mu}a)\cdots U_\rho(x-\hat{\rho}a) \qquad (1.56)$$

Für SU($N \geq 3$) ist ein *loop* komplex. Der Wechsel des Umlaufsinns entspricht einer Ladungskonjugation der Felder. Da man in der Wirkung reellwertige Größen haben möchte, mittelt man über einen Loop und sein ladungskonjugiertes Pendant:

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\,\{\frac{1}{2}(&U_\mu(x)U_\nu(x+\hat{\mu}a)\cdots U_\sigma(x-\hat{\sigma}a)\\ &+U_\sigma^\dagger(x-\hat{\sigma}a)U_\rho^\dagger(x-\hat{\sigma}a-\hat{\rho}a)\cdots U_\nu^\dagger(x+\hat{\mu}a)U_\mu^\dagger(x))\}\\ &\qquad\qquad = \mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}\,\{U_\mu(x)U_\nu(x+\hat{\mu}a)\cdots U_\sigma(x-\hat{\sigma}a)\}\end{aligned}$$

In dieser Arbeit wird die *quenched approximation* zur vollen QCD betrachtet. Dies bedeutet, daß die dynamischen Freiheitsgrade der Fermionen unterdrückt werden. Dadurch werden Vakuum-Polarisationseffekte von Quark-Loops vernachlässigt [23].

Die Ausintegration der fermionischen Freiheitsgrade führt auf die Wirkung $S = S_G(U) - \mathrm{Tr}\ln M$ mit dem Anteil $S_G(U)$ der Eichfelder. Mit $\det M = \mathrm{e}^{\mathrm{Tr}\ln M}$ steht damit die Fermiondeterminante $\det M$ in der Zustandssumme. In der hier benutzten *quenched approximation* wird $\det M = 1$ gesetzt, was der Einführung statischer, schwerer Quarks entspricht. In dieser Näherung muß ein Gitteräquivalent zu der Eichfeldwirkung gefunden werden und damit ein Äquivalent für die Dynamik und Selbstwechselwirkung der Eichfelder. Da Fermionenfelder in dieser Wirkung nicht auftreten, muß das Gitteräquivalent der Eichwirkung aus geschlossenen Schleifen zusammengesetzt werden, um die Eichinvarianz der Kontinuumswirkung beizubehalten. Die Gewichte der einzelnen Schleifen müssen so gewählt werden, daß die Gitterwirkung für $a \to 0$ gegen die Kontinuumswirkung Tr $F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}$ strebt.

Die einfachste Gitterwirkung ist die Standard-Wilson-Wirkung: Sie besteht aus der Summe der Plaketten $U_{\mu\nu}(x) = U_\mu(x)U_\nu(x+\hat{\mu}a)U_\mu^\dagger(x+\hat{\nu}a)U_\nu^\dagger(x) \equiv \Box_{\mu\nu}(x)$:

$$S(U) = \beta \sum_{x,\mu<\nu} \{1 - \frac{1}{N_c}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}\,\Box_{\mu\nu}(x)\} \qquad (1.57)$$

Der Parameter β bestimmt die Kopplungsstärke und ist definiert als $\beta = \frac{2N_c}{g_s^2}$. Diese Wirkung hat Korrekturen zu der eigentlich angestrebten Kontinuumswirkung von $\mathcal{O}(a^2)$.

Um die Korrekturen zur Kontinuumswirkung zu verringern, wird in dieser Arbeit für die numerischen Simulationen die Wirkung

$$S = \beta \sum_{x,\mu<\nu} \frac{5}{3}(1 - \frac{1}{N_c}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}\,\Box_{\mu\nu}(x)) - \frac{1}{6}(1 - \frac{1}{2N_c}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}\,(\Box\!\Box_{\mu\nu}(x) + \begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix}_{\mu\nu}(x)) \qquad (1.58)$$

oder die sog. (1x2)-Wirkung verwendet. Diese hat Korrekturen von $\mathcal{O}(a^4)$. Der letzte Term ist eine Kurzschreibweise für die symmetrisierten *loops* mit der Ausdehnung 1×2. Diese Form der Wirkung geht auf einen Ansatz von Weisz und Wohlert [24], [25] und [26] zur Verbesserung der Wirkung zurück.

Die letzte auf das Gitter umzusetzende Größe aus dem Kontinuum ist das Integrationsmaß DA. Dieses soll ebenfalls auf eine eichinvariante Art geschehen. Wie schon erwähnt, übernehmen in der

Gitterregularisierung die Link-Variablen U_μ die Rolle der Eichfelder, so daß ein geeignetes Maß DU gefunden werden muß.

Die U_μ sind Elemente der *colour*-SU(3) und hier wird die Fundamentaldarstellung der $SU(3)$ benutzt, d.h.

$$U_\mu(x) = \mathrm{e}^{i\sum_c \phi_\mu^c(x)\frac{\lambda^c}{2}} \qquad \lambda^c, \quad c = 1, \ldots, 8 \quad \text{Gell-Mann Matrizen} \tag{1.59}$$

Wie man sich klar macht (oder in [27] nachliest) kann das Pfadintegral aufgespalten werden in ein Integral über die Links und ein Integral über die Gruppe $SU(3)$ für jeden Link, d.h.

$$DU = \prod_{x,\mu}\{\Omega(\phi_\mu(x))\prod_c \mathrm{d}\phi_\mu^c(x)\} \tag{1.60}$$

Der Faktor $\Omega(\phi_\mu(x)) = \sqrt{\det g(\phi_\mu(x))}$ ist dabei eine Folge der verwendeten Parametrisierung der $SU(3)$. Die Metrik g_{ab} auf der Gruppen-Mannigfaltigkeit kann als $g_{ab}(\phi_\mu(x)) = \frac{1}{2}(M^\dagger(\phi_\mu(x))M(\phi_\mu(x))_{ab}$ geschrieben werden — mit $M_{ab}(\phi_\mu(x)) = -i\{(\mathbb{1} - U_\mu^\dagger(x))[\sum_c \phi_\mu^c \frac{\lambda^c}{2}]^{-1}\}_{ab}$. Wie üblich kann die Determinante auch als $\exp(\mathrm{Tr}\ln g(\phi_\mu(x)))$ geschrieben werden und damit erhält man einen weiteren Term $\exp(-S_{\mathrm{meas}[\phi]})$, der in die Wirkung gezogen werden kann.

$$DU = \prod_{x,\mu}\{\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{meas}}[\phi]}\prod_c \mathrm{d}\phi_\mu^c(x)\} \tag{1.61}$$

Da es sich bei der $SU(3)$ um eine kompakte Gruppe handelt, kann man ein rechts- wie linksinvariantes Maß für die Gruppenintegration finden — das sog. Haar-Maß — wodurch die Eichinvarianz des Maßes insgesamt gewährleistet wird. Für das Gruppenmaß macht man sich die Tatsache zunutze, daß sich die Gruppe $SU(2)$ regulär in $SU(3)$ einbetten läßt. Ein Element $\gamma \in SU(3)$ läßt sich daher als $\gamma = \gamma'\beta$ schreiben, wobei $\gamma' \in SU(2)$ (eingebettet in $SU(3)$) und $\beta \in SU(3)/SU(2)$, d.h. ein Element aus dem *coset-space* ist. Die Elemente γ' können mittels der Pauli-Matrizen σ_i durch $\gamma' = \xi_0\mathbb{1} + \sum_{i=0}^3 \xi_i\sigma_i$ und $\sum_{i=1}^3 \xi_i^2 = 1$ parametrisiert werden. Das Maß in dieser Parametrisierung für Elemente der $SU(2)$ ist $\mathrm{d}\mu(\gamma') = \pi^{-2}\mathrm{d}^4\xi\delta(\xi^2 - 1)$ mit $\xi \equiv (\xi_0, \boldsymbol{\xi})$.

Das Haar-Maß reduziert sich daher auf das Maß auf $SU(2)$ und das Maß auf dem *coset-space* $SU(3)/SU(2)$, der zu einer 5 dim. Einheitskugel äquivalent ist [28]. Die Einbettung der $SU(2)$ in die $SU(3)$ benutzt man in den numerischen Simulationen [29].

1.2.4 Gluon-Propagator auf dem Gitter

Zur Untersuchung des Gluon-Propagators benutzt man die Korrelationsfunktion der Eichfelder $A_\mu(x)$:

$$D_{\mu\nu}^{ab}(x,y) = \langle A_\mu^a(x)A_\nu^b(y)\rangle \tag{1.62}$$

Die A_μ müsses aus den in der Gitterformulierung benutzten *Link*-Variablen berechnet werden. In der niedrigsten Ordnung der Entwicklung von U_μ gilt:

$$U_\mu(x) = \mathbb{1} - ig\int_{x+\hat{\mu}a}^{x} \mathrm{d}x'_\mu A_\mu(x') + \mathcal{O}(g^2) \tag{1.63}$$

und für

$$-\int_{x+\hat{\mu}a}^{x} \mathrm{d}x'_\mu A_\mu(x') = \int_{x}^{x+\hat{\mu}a} \mathrm{d}x'_\mu A_\mu(x') = A_\mu(x)a + \frac{1}{2}\partial_\mu A_\mu(x)a^2 + \mathcal{O}(a^3) \tag{1.64}$$

Nach 1.63 und 1.64 ist $U_\mu(x) = \mathbb{1} + igaA_\mu(x) + \mathcal{O}(g^2, a^2)$. Mit $U_\mu(x) - U_\mu^\dagger(x) = 2igaA_\mu(x)$ läßt sich $A_\mu(x)$ näherungsweise aus $U_\mu(x)$ berechnen:

$$A_\mu(x) = \frac{1}{2iga}(U_\mu(x) - U_\mu^\dagger(x)) - \frac{1}{6iga}\mathrm{Tr}\,(U_\mu(x) - U_\mu^\dagger(x)) \tag{1.65}$$

Der letzte Term wird als Korrektur benötigt, um die Entwicklung für $A_\mu(x)$ in die Algebra $su(3)$ zu projezieren. Damit ist $A_\mu(x)$ zwangsläufig nur an diskreten Punkten definiert. Da die Korrelationsfunktion translationsinvariant ist, führt man die Größe

$$D_{\mu\nu}^{ab}(x) \equiv \langle A_\mu^a(x) A_\nu^b(0) \rangle \tag{1.66}$$

ein. Im Impulsraum ist dies

$$D_{\mu\nu}^{ab}(q) = \int \mathrm{d}x \langle A_\mu^a(x) A_\nu^b(0) \rangle \mathrm{e}^{-iqx} = \langle A_\mu^a(q) A_\nu^b(-q) \rangle \tag{1.67}$$

Die Umsetzung des thermischen Erwartungswertes $\langle A_\mu^a(x) A_\nu^b(0) \rangle$ auf das Gitter geschieht durch Verkürzung der (imaginären) Zeitachse, so daß man ein Gitter mit $N_\sigma^3 \times N_\tau, N_\tau < N_\sigma$ erhält. Damit ist

$$\langle A_\mu^a(x) A_\nu^b(0) \rangle = \frac{1}{Z(\beta_{\text{therm.}})} \int_{\text{therm.}} \mathcal{D}U \mathrm{e}^{-\sum_{\boldsymbol{x}} \sum_{\tau=0}^{N_\tau} S_G[U]} A_\mu^a(x) A_\nu^b(0) \tag{1.68}$$

mit $x = (\boldsymbol{x}, \tau)$. $\int_{\text{therm.}} \mathcal{D}U$ bedeutet, daß über Feldkonfigurationen $U = \{U_\mu(x) \in SU(3) \mid x \in G \wedge U_\mu(\boldsymbol{x}, 0) = U_\mu(\boldsymbol{x}, N_\tau)\}$ integriert wird [7]; man identifiziert

$$T \equiv \frac{1}{N_\tau a} \tag{1.69}$$

mit der (physikalischen) Temperatur.

In einer kovarianten Eichung mit Eichparameter ξ hat der freie Gluon-Propagator bei $T = 0$ die Form:

$$D_{\mu\nu}^{ab}(q) = (\delta_{\mu\nu} - \frac{q_\mu q_\nu}{q^2})\delta^{ab} D(q^2) + \xi \frac{q_\mu q_\nu}{q^2} \frac{1}{q^2} \delta^{ab} \tag{1.70}$$

wobei $D(q^2) = \frac{1}{3}([\sum_\mu \frac{1}{N_c^2 - 1} \sum_a D_{\mu\mu}^{aa}(q)] - \frac{\xi}{q^2})$.

Für den Propagator $D^{(0)}$ eines masselosen, skalaren Bosons erhält man durch die Beschränkung der Impulse auf die 1. Brillouin-Zone in der *tree-level*-Entwicklung anstelle von $D^{(0)}(q) = \frac{1}{q^2}$ die Form

$$D^{(0)}(q) = \frac{1}{4\sum_\mu (\frac{1}{a} \sin \frac{qa}{2})^2} \tag{1.71}$$

Durch die Beschränkung der möglichen Gitterpunkte auf ein endliches Volumen kann q ebenfalls nur diskrete Werte annehmen: $q_\mu = \frac{2\pi}{aN_\mu} k_\mu, k_\mu = -\frac{N_\mu}{2}, -\frac{N_\mu}{2} + 1, \ldots, \frac{N_\mu}{2} - 1$. Daher wird der Gitterimpuls

$$\hat{q}_\mu = 2 \sin \frac{\pi}{N_\mu} k_\mu \tag{1.72}$$

[7] In den Simulationen werden zusätzlich periodische Randbedingungen in den Raumrichtungen verwendet, um Artefakte aus dem endlichen Volumen $V = N_\sigma^3 \times N_\tau$ zu verringern.

eingeführt. Mit dieser Form der Impulse erhält man auch auf dem Gitter die Form $D^{(0)}(\hat{q}) = \frac{1}{\hat{q}^2}$. Diese Überlegungen für ein skalares Boson lassen sich auf die Gluonen, d.h. auf Vektor-Bosonen, übertragen.

Eine für die Untersuchung der magnetischen und elektrischen Massen nützliche Größe ist die gemischte Form des Propagators ($D_{\mu\mu} = \frac{1}{8}\sum_a D^{aa}_{\mu\mu}$)

$$G_{\mu\mu}(q_1, q_2, z, q_4) = \int \mathrm{d}\tilde{x} \mathrm{e}^{-i\tilde{q}\tilde{x}} D_{\mu\mu}(x_1, x_2, z, \tau) \tag{1.73}$$

mit $\tilde{q} = (q_1, q_2, q_4)$ und $\tilde{x} = (x_1, x_2, \tau)$. In dieser Form geschrieben, erwartet man einen exponentiellen Abfall des Propagators mit der magnetischen bzw. elektrischen Masse für $q_1 = q_2 = q_4 = 0$ [30]. Mit $G_{\mu\mu}(z) \equiv G_{\mu\mu}(0, 0, z, 0)$ ist

$$\frac{1}{2}(G_{11}(z) + G_{22}(z)) \sim \mathrm{e}^{-m_m(T)z}; \qquad G_{44}(z) \sim \mathrm{e}^{-m_{el}(T)z} \tag{1.74}$$

Auf dem Gitter hat man – bedingt durch die periodischen Randbedingungen der Felder – die Form

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(G_{11}(z) + G_{22}(z)) &\sim \mathrm{e}^{m_m(T)z} + \mathrm{e}^{-m_m(T)(N_z - z)} \\ &\sim \cosh(m_m(T)(z - \frac{N_z}{2})) \\ G_{44}(z) &\sim \cosh(m_{el}(T)(z - \frac{N_z}{2})) \end{aligned} \tag{1.75}$$

In der Landau-Eichung ist $G_3(z)$ konstant. Die Massen m_i sind dabei temperaturabhängig, und für die niedrigste Ordnung der störungstheoretischen Entwicklung erhält man mit der Anzahl N_f der *flavour*-Freiheitsgrade

$$m^2_{\mathrm{el}}(T) = \frac{1}{3}g^2T^2(N_c + \frac{N_f}{2}) \tag{1.76}$$

1.2.5 Eichfixierung auf dem Gitter

Für die Überführung der Gitterkonfigurationen in die Landau-Eichung wird das Funktional $F^{\text{kont.}}_A[g] = \|A^g\|^2 = \int \mathrm{d}^4x \mathrm{Tr}\,(A^g_\mu(x))^2$ als Ausgangspunkt gewählt und dessen Wert durch Variation der Eichtransformationen $g(x)$ minimiert. Die Eichtransformationen $g(x)$ sind wieder Elemente einer $SU(3)$ und lassen sich folglich als $g(x) = \exp(i\omega(x)) = \exp(i\omega^a(x)t^a)$ schreiben. Falls $F^{\text{kont.}}_A[g]$ stationär ist, d.h. $\frac{\partial F^{\text{kont.}}_A[g]}{\partial\omega(x)} = 0$, erfüllt A^g_μ die Landau-Eichbedingung $\sum_\mu \partial_\mu A_\mu = 0$. Für „kleine" Änderungen von $g(x)$, die durch $g'(x) = g(x)\mathrm{e}^{i\omega(x)}$, $\omega(x) = \omega^a(x)t^a$ und $\omega^a(x)$ „klein" gegeben sind, findet man bis zur zweiten Ordnung in ω:

$$F^{\text{kont.}}_A[g'] = F^{\text{kont.}}_A[g] - 2i\int \mathrm{d}^4x \mathrm{Tr}\,(A^g_\mu(x)\partial_\mu\omega(x)) - \int \mathrm{d}^4x \mathrm{Tr}\sum_a \omega^a(x)(O[A^g]\omega)^a(x) + \mathcal{O}(\omega^3) \tag{1.77}$$

Der Operator $O[A^g]$ ist der Fadeev-Popov Operator in der Landau-Eichung. Für die Umsetzung des Funktionals auf das Gitter ersetzt man A_μ durch die *Link*-Felder U_μ und erhält

$$F_U[g] = \frac{g^2a^2}{N_C 4V}\sum_x\sum_\mu \mathrm{Tr}(A^g_\mu)^2(x) = 1 - \frac{1}{N_C 4V}\sum_{\mu,x}\mathrm{ReTr}U^g_\mu(x) \tag{1.78}$$

Dieses Funktional wird für die Konstruktion der Eichfixierungsalgorithmen auf dem Gitter verwendet. Eine Gitternäherung für $\sum_\mu \partial_\mu A_\mu(x)$ ist $\sum_\mu \Delta(x)$ mit $\Delta(x) = \{U_\mu(x+\hat{\mu}a) - U^\dagger_\mu(x+\hat{\mu}a) - U_\mu(x) + U^\dagger_\mu(x)\} - \frac{1}{3}\{\mathrm{Tr}\{U_\mu(x+\hat{\mu}a) - U^\dagger_\mu(x+\hat{\mu}a) - U_\mu(x) + U^\dagger_\mu(x)\}$. Die Landau-Eichbedingung ist dann erfüllt, wenn

$$\Theta \equiv \frac{1}{VN_C} \sum_x \mathrm{Tr}\Delta(x)\Delta^\dagger(x) \tag{1.79}$$

0 ist. Genau wie in der Kontinuumstheorie gibt es auch in der Gitterformulierung das Problem der Gribov-Kopien [31], d.h. es können mehrere lokale Minima des Funktionals $F_U[g]$ existieren. Für den Gluon-Propagator haben Untersuchungen ergeben, daß Gribov-Kopien zu vernachlässigen sind [32], da ihr Einfluß in der Größenordnung der numerischen Ungenauigkeit ist.

1.2.6 Gitterumsetzung des Polyakovloops

Zur Berechnung der Abschirmmassen aus dem Quark-Potential braucht man ein Gitteräquivalent $\Omega^{(\mathrm{lat})}$ zum Polyakovloop-Operator Ω (Glg. 1.31). Nach den Überlegungen der vorigen Abschnitte und der Umsetzung der A_μ auf das Gitter ist

$$\Omega^{(\mathrm{lat})}(\boldsymbol{x}) = \prod_{\tau=1}^{N_\tau} U_4(\boldsymbol{x}, \tau) \tag{1.80}$$

bzw.

$$L^{(\mathrm{lat})}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{N_c}\mathrm{Tr}\Omega^{(\mathrm{lat})}(\boldsymbol{x}) \tag{1.81}$$

Die Endlichkeit des betrachteten Volumens und die Randbedingungen der U_μ-Felder führen auch für die Polyakovloops zu einer Abweichung von demjenigen Verhalten, welches man im Kontinuum (Glg. 1.35) erwartet. Auf dem Gitter erhält man

$$V_1(\hat{z}) = -T \ln \frac{\langle \mathrm{Tr}\Omega^{(lat)}(\hat{z})\Omega^{(\mathrm{lat})\,\dagger}(0)\rangle}{\langle|\Omega^{(\mathrm{lat})}|\rangle^2} \tag{1.82}$$

falls man das Potential in einer Raumrichtung $\hat{z}$ betrachtet. In diesem Fall muß $d = 1$ sein und für das Gitteräquivalent $\hat{\mu}_D = a \cdot \mu_D$ zur Debye-Masse μ_D muß gelten $\hat{\mu}_D = a \cdot m_{\mathrm{el}}$.

Die $\frac{1}{R}$ Abhängigkeit des Singulett-Potentials schränkt den Bereich ein, in dem Werte für μ_D extrahiert werden können, da der exponentielle Abfall mit μ_D nur für große R dominiert. Daher behilft man sich mit demselben Trick, wie für die Gluon-Korrelationsfunktionen und summiert über Hyperebenen, die zu einer Raumrichtung senkrecht stehen. Damit erhält man auch wieder eine gemischte Form $\Gamma^{(G)}(\hat{z}) \equiv \sum_{\hat{x},\hat{y}} \Gamma(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ der Polyakovloop-Korrelationsfunktion $\Gamma(\boldsymbol{r}) = \Omega^{(\mathrm{lat}}(\boldsymbol{r})\Omega^{(\mathrm{lat})\dagger}(\boldsymbol{0})$. Mit der gemischten Form der Korrelationsfunktion erhält man eine Form, die zur Extraktion der Masse μ_D besser geeignet ist:

$$\mathrm{e}^{-\hat{\mu}_D \hat{z}} \sim -\ln \frac{\langle \mathrm{Tr}\Gamma^{(G)}(\hat{z})\rangle}{\langle|\Omega^{(\mathrm{lat})}|\rangle^2} \tag{1.83}$$

Da in diesem Ausdruck eine $\frac{1}{R}$-Abhängigkeit nicht mehr enthalten ist, läßt sich daraus $\hat{\mu}_D$ schon bei kleineren $\hat{z}$ extrahieren.

1.3 Metacomputing

1.3.1 Idee

Ein anderer Aspekt dieser Arbeit ist die Implementierung eines geeigneten Simulationsprogrammes im Rahmen des Metacomputing-Projektes „Gigabit-Testbed Ostwestfalen-Lippe". Der Bedarf an Rechenkapazität bei der Simulation komplexer Systeme übersteigt vielfach die Grenzen einzelner Parallelrechner – unabhängig davon, ob es sich um massiv parallele Rechner (*massively parallel processing systems, MPP*) oder um parallele Vektorrechner (*parallel vector processors, PVP*) handelt. Eine Möglichkeit, die Grenzen der Rechenkapazität nach oben zu verschieben, ist der Zusammenschluß verschiedener Rechenresourcen zu einem Metasystem. Dieses System sollte sich dem Benutzer im Idealfall als eine transparente Rechnerumgebung präsentieren, und das Zusammenspiel der unterschiedlichen Resourcen wie Rechenknoten, Festplattenkapazität und Netzwerkinfrastruktur sollte von dem Metasystem vor dem Benutzer versteckt werden, so daß ihm ein homogenes System präsentiert wird. Eine kleine Übersicht über Metasysteme und Anwendungen findet man z.B. in [33]. Um von einem Metasystem profitieren zu können, benötigt man eine schnelle und verläßliche Netzwerkverbindung zwischen den einzelnen Computern, eine Software, die es ermöglicht, die Computer gemeinsam zu benutzen, und auch Algorithmen, die die Rechnerinfrastruktur ausnutzen können. So ist es wenig sinnvoll, einen kommunikationsintensiven Algorithmus auf mehrere Rechner zu verteilen, die über eine langsame Netzinfrastruktur miteinander gekoppelt sind. (Zur Netzinfrastruktur gehören neben der physikalischen Verbindung über Kupferkabel oder Lichtwellenleiter auch die entsprechenden Netzwerkprotokolle wie z.B. TCP/IP, die einen maßgeblichen Einfluß auf die gesamte Leistung der Netzinfrastruktur haben können.) [34]. Die beschriebenen Voraussetzungen sind für das Projekt gegeben, zu dem diese Arbeit einen Beitrag leisten soll. Eine Lichtleiter-Verbindung mit einer Kapazität von 622 MBit/s steht für die Verbindung zweier Parallelrechner zur Verfügung, und die QCD-Simulation zusammen mit der Eichfixierung der Konfigurationen bietet die algorithmische Voraussetzung zur Nutzung des so aufgebauten Metasystems. Die Quadrics QH2 ist speziell auf die Bedürfnisse von QCD-Gitterrechnungen hin entwickelt worden, aber deren interne Struktur eignet sich weniger für die Anwendung von schnellen Fourier-Transformationen. Die Rechenknoten sind in einer kubischen Struktur angeordnet und können ausschließlich mit ihren direkten Nachbarn Daten austauschen. Dies macht diese Art von Computern wenig geeignet für die Implementierung der Fourier-Transformation, die in dem Eichfixierungsteil der Simulation benötigt wird. Bei dem Rechner CC-48 von Parsytec verwendet man ein anderes Kommunikationsprinzip. Hier sind die einzelnen Rechenknoten über *Router* miteinander verbunden, an die sie über einen *high-speed link* mit 0,6 GBit/s angeschlossen sind. Das *Routing* von Daten, d.h. der Weg von einem Knoten zu einem anderen, wird hardwareseitig gesteuert, so daß effiziente Verbindungen zwischen allen Knoten bestehen und die Fourier-Transformation einfach zu implementieren ist. Der Ansatz für die Implementierung der QCD-Simulation besteht dann darin, Eichkonfigurationen auf der speziell dafür entwickelten Quadrics QH2 zu erzeugen, diese über die Leitung auf die Parsytec CC-48 zu transportieren und dort zu eichen und die Propagatoren auszurechnen. Im Idealfall erreicht man eine Pipeline mit drei Stufen: Erzeugen einer Eichkonfiguration, Transfer der Daten und Eichen der Konfiguration mit anschließendem Berechnen der Propagatoren. Ist die *Pipeline* gefüllt, können in jedem Schritt auf den geeichten Konfigurationen die Propagatoren gemessen werden, während gleichzeitig weitere Konfigurationen erzeugt werden.

1.3.2 Technische Einzelheiten

Zur Verständnis der Implementierungsdetails ist es zunächst notwendig, die Rechnerinfrastruktur genauer zu erläutern. Wie schon erwähnt sind die Quadrics-Computer speziell für den Einsatz zu QCD-Gittersimulationen entwickelt worden. Bei diesem Computern handelt es sich um *SIMD*-Maschinen. Die globale Steuerung übernimmt eine *central-processing unit (CPU)* und die Rechenknoten bestehen aus *floating-point units (FPU)* mit jeweils 25 MHz Taktfrequenz. Da diese jeweils zwei *floating point operations (FLOP)* pro Taktzyklus ausführen können, ergibt sich pro Knoten eine Rechenleistung von 50 MFLOPs. Die Knoten sind in einem periodisch geschlossenen, dreidimensionalen Gitter angeordnet. Für die I/O sind die Rechner über einen Transputer-Link (700 KByte/s) oder über einen HiPPi-Link (100 MByte/s) mit einem Front-End verbunden. Für diese Rechner ist die Programmiersprache TAO entwickelt worden, mit der die parallelen Eigenschaften der Maschinen gut handhabbar sind, die aber auch den Nachteil der Inkompatibilität mit anderen Rechnern mit sich bringt.

Der andere Rechner – ein Parsytec CC-48 – ist ein *MIMD*-Rechner und wird vielfach in Industrie und Wissenschaft für die automatische Mustererkennung eingesetzt. Jeder Rechenknoten besteht aus einem Motorola PowerPC MPC-604 Prozessor mit 133 MHz Taktfrequenz und einer Kommunikationseinrichtung für die *high-speed links*. Auf den Knoten kann entweder AIX oder ein Nano-Kernel als Betriebssystem laufen, der nur die wichtigsten Kontrollfunktionen beinhaltet, um möglichst viel an Rechenleistung der Prozessoren ausnutzen zu können. Die CC-48 kann direkt in eine vorhandene Netzinfrastruktur z.B. über ein Ethernet LAN mit Protokollen wie TCP/IP oder NFS eingebunden werden. Neben anderen Programmierbibliotheken wie *embedded PARIX (EPX)* existiert auch eine MPI-Implementation, die in dieser Arbeit verwendet wird. An der Universität-Gesamthochschule Paderborn ist das Kommunikations-Interface PLUS entwickelt worden, das die Kommunikation zwischen unterschiedlichen *message-passing*-Protokollen wie MPI oder PVM ermöglicht [35]. Dies ist auf der Software-Seite die Grundlage für die Kommunikation zwischen den beiden Parallelrechnern. Da es kein geeignetes *message-passing*-Protokoll auf den Quadrics-Rechnern gibt, muß hier zusätzlich ein Interface entwickelt werden, das die Anbindung der Quadrics-Programme an MPI ermöglicht. Zu diesem Zweck wird die Quadrics-eigene Bibliothek C+TAO bzw. deren Nachfolgeversion QAPI benutzt, mit der sich die Kommunikation zwischen dem Quadrics-Computer und seinem Front-End steuern läßt. Daraus ergibt sich das Schema für die eingesetzten Software-Bibliotheken (s. Abb. 1.3).

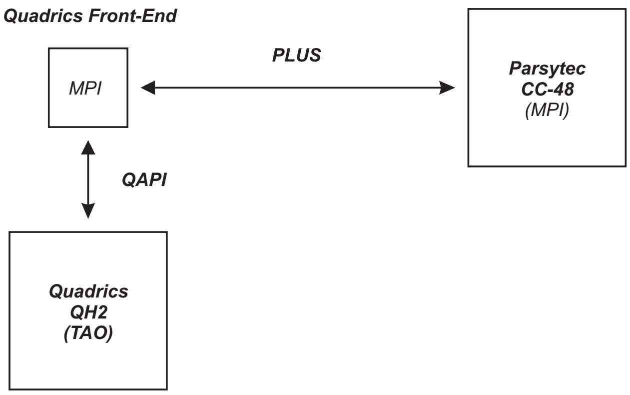


Abbildung 1.3: Verwendete Kommunikations-Pakete

1.3.3 Probleme

Um den Anforderungen an ein Metasystem gerecht zu werden, muß eine Benutzertransparenz geschaffen werden. Dies bedeutet eine einheitliche Verwaltung der Resourcen der beiden Rechner, d.h. Rechenleistung, Festplattenspeicher etc. Es ist allerdings noch kein geeignetes Verfahren entwickelt worden, um dies in zufriedenstellender Weise allgemein zu gewährleisten, obwohl Ansätze dazu existieren. Auch stellen sich praktische Probleme, wie z.B. die Regelung der Verantwortlichkeit bei der

Vergabe und Verwaltung von Rechenresourcen auf einem Metasystem. So sind Institutionen, die Parallelrechner betreiben, nur ungern dazu bereit, Verantwortlichkeiten für ihre Rechner aufzugeben oder auch nur zu teilen.

Die in dieser Arbeit entwickelte Metacomputing-Anwendung ist deshalb aus Mangel an einer gemeinsamen Resourcenverwaltung außerhalb des regulären Betriebes der QH2 und CC-48 getestet worden. Zu Produktionszwecken mußte das Metasystem wieder in zwei eigenständige Systeme getrennt werden. Die prinzipielle Funktionsfähigkeit dieses Ansatzes ist aber im Rahmen dieser Arbeit gezeigt worden.

Kapitel 2

Simulationen

2.1 Nicht-störungstheoretische Berechnung des Pfadintegrals

Der Ausgangspunkt der Berechnungen für endliche Temperatur ist die Zustandssumme Z in einer Euklidischen Pfadintegralformulierung

$$Z = \int_{\mathrm{therm.}} \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}\bar{\eta}\mathcal{D}\eta \ \exp\{-S_{\mathrm{E}}[A_\mu, \bar{\eta}, \eta]\}, \tag{2.1}$$

in der die Geistfelder und der Eichfixierungsterm unterdrückt worden sind und die Fermionfelder wie üblich durch Grassmann-Variablen $\bar{\eta}$ und η dargestellt werden. Mit der Einführung der Gitterregularisierung und eines endlichen Volumens $V = a^4 N_\sigma^3 \times N_\tau$ erhält man in der *quenched approximation*

$$Z = \int_{\mathrm{therm.}} \mathcal{D}U \exp\{-S_G[U]\} \tag{2.2}$$

mit der Wirkung S_G (siehe Glg. 1.58) Um den Erwartungswert

$$\langle \Omega \rangle_{\mathrm{therm.}} = \frac{1}{Z} \int_{\mathrm{therm.}} \mathcal{D}U \ \Omega(U) \exp\{-S_G[U]\} \tag{2.3}$$

zu berechnen, ist ein hochdimensionales Integral[1] numerisch zu bestimmen. Eine analytische Lösung ist aufgrund der Form der Wirkung S_G nicht möglich. Zur Berechnung des Integrals benutzt man Monte-Carlo-Methoden, die das Integral auf der Grundlage statistischer Methoden berechnen. Man versucht, eine Sequenz von *link*-Feldkonfigurationen U mit der Verteilung $\exp\{-S_G[U]\}$ zu erzeugen. Auf jeder dieser Konfigurationen $U^{(i)}$ kann dann der Wert $\Omega^{(i)}(U^{(i)})$ berechnet werden, und man erhält den thermischen Erwartungswert $\langle \Omega \rangle_{\mathrm{therm.}}$ durch Mittelwertbildung der $\Omega^{(i)}$. Die Theorie der *Markov-Ketten* liefert den Hintergrund für die Konstruktion eines Verfahrens zum Erzeugen einer derartigen Sequenz.

Eine Markov-Kette X ist ein diskreter stochastischer Prozeß $X = \{X_0, X_1, \dots\}$ mit der Eigenschaft, daß die Verteilung von X_{t+1} nur von X_t abhängt, d.h. für die bedingte Wahrscheinlichkeit gilt $P[X_{t+1} \in E \mid X_0, X_1, \dots, X_t] = P[X_{t+1} \mid X_t]$ für jede dem stochastischen Prozeß zugrundeliegende Menge E. Hier ist E mit der Menge der möglichen Konfigurationen U auf dem Gitter identisch. Der Übergangskernel ist eine Funktion $P(x, A)$ mit $P[X_{t+1} \in A \mid X_t = x] \ \forall x \in E$ und $A \subset E$. Dies kann man auf $P^t(x, A) = P[X_t \in A \mid X_0 = x]$ verallgemeinern. $P(x, \cdot)$ ist die Verteilung der Markov-Kette nach einem Schritt, wenn man mit x startet. Betrachtet man die Abhängigkeit von $P^t(x, A)$ von dem Startwert x, so findet man unter bestimmten Voraussetzungen, daß die Verteilung

[1] Auf einem Gitter der Ausdehnung $32^3 \times 4$ und $U_\mu(x) \in SU(3)$ hat man 2^{22} Freiheitsgrade

gegen eine statische Verteilung $\pi(A)$ geht, die unabängig von x und t ist, d.h. die Kette „verliert ihr Gedächtnis". Zur Berechnung des thermischen Erwartungswertes $\langle\Omega\rangle_{\text{therm.}}$ muß man einen geeigneten Übergangskernel finden, so daß $\pi(\cdot) = \exp\{-S_G[\cdot]\}$ ist.

Damit $P^t(x,\cdot)$ gegen eine solche stationäre Verteilung $\pi(\cdot)$ konvergiert, muß die Markov-Kette *irreduzibel*, *aperiodisch*, und *wiederkehrend* sein. Irreduzibel bedeutet, daß jedes $A \subset E$, $A \neq \varnothing$ ausgehend von jedem x erreicht werden kann. Aperiodisch bedeutet, daß der größte gemeinsame Teiler von $\{t > 0 \mid P^t(x,x) > 0\}$ gleich 1 ist für ein – und damit für alle – x. Dies ist gleichbedeutend mit der Tatsache, daß es keine feste Periode für das Wiederauftreten von x in der Kette gibt. Wiederkehrend ist die Eigenschaft einer irreduziblen Markov-Kette, jede Teilmenge A unendlich oft wieder zu erreichen, unabhängig vom Startwert x. Sind alle diese Eigenschaften erüllt, nennt man die Markov-Kette auch *ergodisch*. Für die stationäre Verteilung $\pi(\cdot)$ gilt dann $\pi(Y) = \int \mathrm{d}x\, P^t(X,Y)\pi(X)$. Eine rigorosere mathematische Darstellung von Markov-Ketten findet sich z.B. in [36] oder [37]. In diesem Abschnitt sollten nur Begriffe eingeführt werden, mit denen die Idee zum Erzeugen der Markov-Kette erklärt werden kann.

2.1.1 Hastings-Metropolis-Algorithmus

Die Idee von Hastings [38] – basierend auf dem Ansatz von Metropolis *et al.* [39] – besteht darin, in jedem Schritt t ausgehend von X_t einen Testzustand Y mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung $q(\cdot|X_t)$ zu wählen. Dieser Testzustand Y wird mit einer Wahrscheinlichkeit $\alpha(X_t,Y) = \min(1, \frac{\pi(Y)q(X_t|Y)}{\pi(X_t)q(Y|X_t)})$ akzeptiert, d.h. in die Markov-Kette aufgenommen ($X_{t+1} = Y$). Wird Y verworfen, so verbleibt X_t in der Kette ($X_{t+1} = X_t$). Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $q(\cdot|\cdot)$ kann jede beliebige Form haben und kann an die Verteilung $\pi(\cdot)$ angepaßt werden, um eine hohe Akzeptanzrate zu erreichen. Für den Übergangskernel folgt:

$$P(X_{t+1}|X_t) = \begin{cases} q(X_{t+1}|X_t)\alpha(X_t,X_{t+1}) & \text{falls } Y \text{ akzeptiert} \\ q(X_{t+1}|X_t)\alpha(X_t,X_{t+1}) + [1 - \int \mathrm{d}Y\, q(Y|X_t)\alpha(X_t,Y)] & \text{sonst} \end{cases} \tag{2.4}$$

Aus der Form für α folgt $\alpha(X_t,X_{t+1})\pi(X_t)q(X_{t+1}|X_t) = \alpha(X_{t+1},X_t)\pi(X_{t+1})q(X_t|X_{t+1})$ und man erhält die Gleichung für *detailed balance*: $\pi(X_t)P(X_{t+1}|X_t) = \pi(X_{t+1})P(X_t|X_{t+1})$, d.h., der Prozeß in der Markov-Kette mit diesem Übergangskernel ist reversibel. Integration bzgl. X_t liefert:

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}X_t\, \pi(X_t)P(X_{t+1}|X_t) &= \int \mathrm{d}X_t\, \pi(X_{t+1})P(X_t|X_{t+1}) \\ &= \pi(X_{t+1}) \int \mathrm{d}X_t\, P(X_t|X_{t+1}) = \pi(X_{t+1}) \end{aligned} \tag{2.5}$$

Dies bedeutet, daß $\pi(\cdot)$ tatsächlich die statische Verteilung bei dieser Wahl des Übergangskernels ist, d.h., daß der Algorithmus die gewünschte Verteilung $\pi(\cdot)$ erzeugt. Im ursprünglich von Metropolis entwickelten Verfahren wird $\alpha(X,Y) = \min(1, \frac{\pi(Y)}{\pi(X)})$ gesetzt, d.h die Testzustände Y werden mit einer trivialen Verteilung ausgewählt.

In einer Implementierung dieser Idee wird eine Testkonfiguration Y dadurch erzeugt, daß an einem Gitterpunkt x eine neue, zufällig gewählte *link*-Variable $U_\mu^{(n)}(x)$ erzeugt wird. Abhängig von dem Ergebnis des Vergleiches von alter Wirkung $\exp\{-S_G[X_t]\} \equiv \pi(X_t)$ und der Wirkung der Testkonfigurationen $\exp\{-S_G[Y]\} \equiv \pi(Y)$ wird Y gemäß der Wahrscheinlichkeit $\alpha(X_t,Y) = \min(1, \frac{\pi(Y)}{\pi(X_t)})$ akzeptiert. Dieses Verfahren wird für alle $x \in G$ wiederholt.

2.1.2 Heatbath-Algorithmus

Eine Verfeinerung des Metropolis-Algorithmus' besteht in einer geeigneten Wahl der Wahrscheinlichkeitsverteilung $q(\cdot|\cdot)$ der Testzustände. Für $q(\cdot|\cdot)$ wählt man im *heat-bath*-Algorithmus eine Form, die explizit unabhängig von der vorherigen Konfiguration X_t ist, d.h. $q(\cdot|X_t) = q(\cdot)\,\forall X_t$. Mit einer Dichte $\mathrm{d}q(Y) \sim \pi(Y)\mathrm{d}Y$ für diese Verteilung erreicht man, daß jedes neue Y akzeptiert wird und keine überflüssigen Berechnungen von $\pi(Y)$ wie im Fall des einfachen Metropolis-Algorithmus' nötig sind. Zu beachten ist, daß Y sich nur lokal von X_t unterscheidet und die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den einen *link*, der in einem Schritt geändert wird, von den anderen *links* abhängt. Die anderen *link*-Variablen bilden sozusagen ein Wärmereservoir für die Verteilung des neuen *links* $U_\mu^{(n)}$. (Daher auch der Name dieses Algorithmus'.)

Cabibbo und Marinari [29] haben ein Verfahren zur Erzeugung von $SU(3)$ Matrizen nach der Verteilung $\exp\{-S_G[U_\mu(x)]\}$ entwickelt, das in dem Konfigurationserzeugungsteil verwendet wird.

Sowohl im Metropolis- als auch im *heat-bath*-Algorithmus sind die Konfigurationen, die man nach einem *sweep* erhält, d.h. nach einem Durchlauf über alle Gitterpunkte, sehr stark mit der Ausgangskonfiguration korreliert.

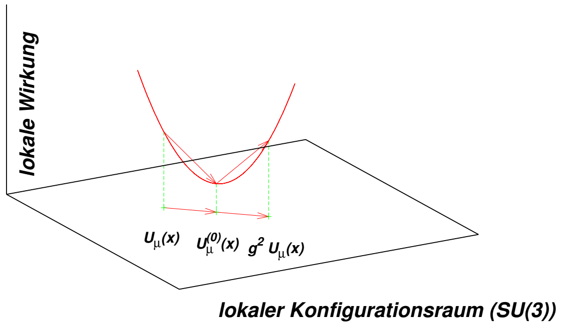


Abbildung 2.1: Erläuterung der *overrelaxation*. Ausgehend von $U_\mu(x)$ liefert die Transformation g^2 ein Element auf der gegenüberliegenden Seite des Wirkungsminimums.

Die Ursache hierfür liegt darin, daß sich die neu gewählten $U_\mu^{(n)}(x)$ nicht sehr von den vorherigen $U_\mu(x)$ unterscheiden. Im einfachen Metropolis-Algorithmus ist die Akzeptanzrate für ein solches Element am größten, und die Wahrscheinlichkeitsverteilung im *heat-bath*-Algorithmus sorgt ebenfalls dafür, daß Elemente in einem Gebiet um das Maximum der Verteilung bei der Auswahl bevorzugt werden. Creutz [40] hat die Methode der *overrelaxation* für QCD-Simulationen angepaßt. Zur Erklärung dieses Verfahrens ist es sinnvoll, die gewünschte Verteilung $\exp\{-S_G[U]\}$ in Abhängigkeit von einer *link*-Variablen $U_\mu(x)$ zu betrachten, d.h. $\exp\{-S_G[U_\mu(x)]\}$. Kennt man diejenige *link*-Variable $U_\mu^{(0)}(x)$, bei der $\exp\{-S_G[U_\mu(x)]\}$ ein Maximum hat, so führt die Transformation $g = U_\mu^{(0)}(x)U_\mu^{-1}(x)$ das Element $U_\mu(x)$ ins Maximum, d.h. $U_\mu(x) \xrightarrow{g} U_\mu^{(0)}$, und die Transformation g^2 bringt $U_\mu(x)$ auf die „andere" Seite des Maximums. Der *link* $U_\mu(x)$ wird in einem Schritt dieses Algorithmus' dann durch $U_\mu^{(n)}(x) = g^2 U_\mu(x) = U_\mu^{(0)}(x)U_\mu^{-1}(x)U_\mu^{(0)}(x)$ ersetzt. Da die Wirkung für das neue $U_\mu^{(n)}(x)$ dieselbe wie für $U_\mu(x)$ ist wird $U_\mu^{(n)}(x)$ akzeptiert. Durch diese Wahl von $U_\mu^{(n)}(x)$ hat man erreicht, daß sich $U_\mu(x)$ und $U_\mu^{(n)}(x)$ stark voneinander unterscheiden und die Konfigurationen vor und nach dem Durchlauf durch das Gitter weniger stark korreliert sind. Da sich die Wirkung nicht ändert, müssen aber *heat-bath* ähnliche Methoden zusätzlich benutzt werden, um die Ergodizitätsbedingung zu erfüllen.

2.2 Eichfixierungsalgorithmen

Wie bereits erwähnt, wird für die Fixierung der Landau-Eichung auf dem Gitter ein (lokales) Minimum des Funktionals

$$F_U[g] = 1 - \frac{1}{4N_C V}\sum_{\mu,x} \mathrm{ReTr}\, U_\mu^g(x) \quad \text{mit} \quad U_\mu^g(x) = g(x)U_\mu(x)g^\dagger(x+\hat{\mu}a) \tag{2.6}$$

gesucht. Die *Link*-Feldkonfiguration $U = \{U_\mu(x) \mid x \in G\}$ wird festgehalten und das Minimum durch Variation von $g = \{g(x) \mid x \in G\}$ bestimmt. In den Algorithmen wird g iterativ lokal variiert, d.h. in jedem Iterationsschritt $g^{(n)} \to g^{(n+1)}$ ist

$$g^{(n+1)}(x) = \begin{cases} g^{(n)}(x) & \text{für } x \neq y \\ g'(y) = R(y)g^{(n)}(y) & \text{für } x = y \end{cases} \tag{2.7}$$

Dies wird für alle Gitterpunkte y solange wiederholt, bis die Eichbedingung bis zu einer vorgegebenen Genauigkeit ϵ erfüllt ist, d.h. $\Theta < \epsilon$ (siehe Glg. 1.79). Für diese lokalen Algorithmen wird die Abhängigkeit von $F_U[g]$ von $g(y)$ betrachtet:

$$\begin{aligned} F_U[g(y)] &= 1 - \frac{1}{2\cdot 4N_C V}\sum_{\mu,x\neq y} \mathrm{Tr}\, U_\mu^g(x) - \frac{1}{2\cdot 4N_C V}\sum_{\mu,x\neq y-\hat{\mu}a} \mathrm{Tr}\,[U_\mu^g(x)]^\dagger \\ &\quad - \frac{1}{2\cdot 4N_C V}\sum_{\mu} \mathrm{Tr}\, g(y)\{U_\mu(y)g^\dagger(y+\hat{\mu}a) + U_\mu^\dagger(y-\hat{\mu}a)g^\dagger(y-\hat{\mu}a)\} \\ &= C - \frac{1}{2\cdot 4N_C V}\sum_{\mu} \mathrm{Tr}\, g(y)h(y) = C - \frac{1}{2\cdot 4N_C V}\sum_{\mu} \mathrm{Tr}\, w(y) \end{aligned} \tag{2.8}$$

Die *Los-Alamos*-Methode besteht darin, $g'(y)$ so zu wählen, daß $F_U[g'(y)]$ ein Minimum ist. Dies kann man durch $g'(y) = w^{-1}(y)g(y) = h^{-1}(y)$ erreichen. Eine Verbesserung der Konvergenz von $F_U[g]$ zum Minimum, d.h. eine Verbesserung der globalen Konvergenz erreicht man durch die *overrelaxation*-Methode. Anstatt direkt in ein lokales Minimum, d.h. ein Minimum von $F_U[g(y)]$ zu gehen, wählt man bewußt einen neuen Wert $g'(y)$, der nicht auf ein solches Minimum führt. Angewandt auf die Minimierung quadratischer Formen bedeutet dies, daß man über das lokale Minimum hinaus geht. Für die Landau-Eichung wählt man in der *overrelaxation*-Methode $g^{(n+1)}(y) = [w^{-1}(y)]^\omega g^{(n)}(y) = w^{\omega-1}(y)g^{(n)}(y)$ mit dem *overrelaxation*-Parameter ω, der steuert, wie weit über das Minimum hinaus gegegangen wird. Der Wert von ω für die bestmögliche Konvergenz muß empirisch bestimmt werden.

Einen anderen Ansatz für $g'(y)$ verfolgt die *steepest-descent*-Methode. Mit der Wahl $g'(y) = \exp[-i\alpha\sum_\mu \mathrm{Tr}(\partial_\mu A_\mu^g)(y)]$ erreicht man, daß man sich in dem zu durchsuchenden Konfigurationsraum in die Richtung des steilsten Abfalls von A^g bewegt. Der Parameter α steuert die Schrittweite in dieser Richtung. All diese Methoden haben das Problem, daß sie für Konfigurationenen in der Nähe der eichfixierten Konfiguration den Konfigurationsraum nur sehr langsam durchsuchen, d.h., Verbesserungen in der Genauigkeit, mit der die Eichfixierungsbedingung erfüllt wird, erfordern viele Iterationsschritte. Diese Eigenschaft der Algorithmen wird als *critical slowing down* bezeichnet. Man hofft aber, daß andere Methoden, wie *multi-grid*-Verfahren oder das in dieser Arbeit verwendete Fourier-beschleunigte Verfahren, weniger starkes *critcal slowing down* zeigen.

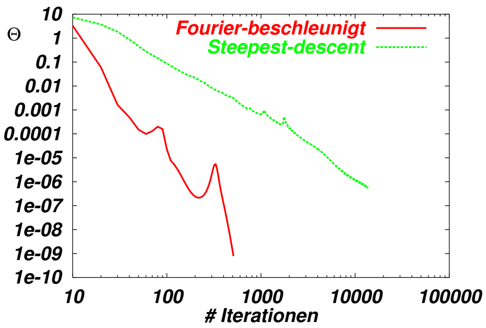


Abbildung 2.2: Vergleich von Fourier-beschleunigtem Algorithmus und steepest-descent-Methode – gemessen an der Anzahl der benötigten Iterationen bis zu einer Genauigkeit von $\epsilon = 10^{-9}$

In [41] wird für den Abelschen Fall gezeigt, daß die Fourier-Transformierte von $\partial_\mu A_\mu^{(n)}(x)$ sich für große n wie $F[\partial_\mu A_\mu^{(n)}(x)](p) \sim F[\partial_\mu A_\mu^{(0)}(x)]\exp(-\alpha p^2 n)$ verhält. Dies bedeutet, daß die verschiedenen Anteile von $\partial_\mu A_\mu(x)$ im Fourier-Spektrum unterschiedlich schnell gegen 0 für $n \to \infty$ gehen. Für große n dominiert die Komponente für p_{min} das gesamte Konvergenzverhalten. Die Grundidee des Fourier-beschleunigten Algorithmus' besteht darin, eine einheitliche Konvergenzgeschwindigkeit der einzelnen Komponenten des Fourier-Spektrums zu erzielen. Wählt man anstelle eines konstanten α ein impulsabhängiges $\alpha(p) = \alpha\frac{p^2_{\text{max.}}}{p^2}$, erhält man das Konvergenzverhalten $\exp(-\alpha p^2_{\text{max.}} n)$ für alle p, was dem maximalen exponentiellen Abfall entspricht. Diese einfachen Überlegungen gelten für nicht Abelsche Felder A_μ nicht mehr. In diesem Fall wird das Konvergenzverhalten von den Eigenwerten des Operators $\partial \cdot D$ (D ist die kovariante Ableitung) im Impulsraum bestimmt und nicht mehr von den Eigenwerten $-ip$ des Operators ∂. Da die kovariante Ableitung D die Eichfelder enthält, ist die Eigenwertstruktur des Operators im Impulsraum sehr viel komplexer. Man hofft aber, daß das Verhalten von $\partial \cdot D$ im Impulsraum sich nicht zu stark von ∂^2 unterscheidet und der Algorithmus für den Abelschen Fall sich auch für den nicht-Abelschen Fall verwenden läßt.

2.3 Fast-Fourier-Transformation

2.3.1 Diskretisierung der Fourier-Transformation

Im Hinblick auf die Implementierung des Fourier-beschleunigten Algorithmus' wird hier die diskrete, schnelle Fourier-Transformation (*discrete Fast-Fourier-transformation*) erläutert.

Ausgehend von der Definition der allgemeinen Fourier-Transformation einer Funktion $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$

$$F[f(x)](p) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \mathrm{e}^{-ip\cdot x} f(x) \tag{2.9}$$

kann man zeigen, daß die diskrete Transformation ein Spezialfall der allgemeinen Fourier-Transformation ist.

Vielfach muß man sich auf eine diskrete, endliche Menge von Werten der Funktion $f(x)$ beschränken, z.B. Meßwerte einer Größe oder – wie in dieser Arbeit – Felder auf einem diskreten, endlichen Gitter. Aus diesen Werten versucht man, die Fourier-Transformierte der kontiniuierlichen Funktion zu rekonstruieren. Die diskreten Werte werden als *samples* (oder Abtastsignale) der Funktion $f(x)$ aufgefaßt, d.h. sie sind das Ergebnis der Multiplikation von $f(x)$ mit einem Delta-Kamm $\Delta_a(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$. Im Impulsraum entspricht dies einem Faltungsprodukt

$$F[f(x)\Delta_a(x)] = F[f(x)] \star F[\Delta_a(x)] \tag{2.10}$$

Die Fourier-Transformierte von $\Delta_a(x)$ ist wiederum ein Delta-Kamm $\frac{2\pi}{a}\Delta_{\frac{2\pi}{a}}(p)$. Die Fourier-Transformierte von $f(x)\Delta_a(x)$ besteht daher aus Kopien von $F[f(x)]$ im Abstand $\frac{2\pi}{a}$. Wird a zu groß gewählt, überlappen sich diese Kopien und es tritt eine Bandüberlappung (*Aliasing*) auf. Das Abtasttheorem (*sampling theorem*) gibt Auskunft über den Wertebereich von a. Danach läßt sich eine Funktion $f(x)$ eindeutig aus ihren Abtastwerten $\hat{f}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(na)\delta(x-na)$ rekonstruieren, falls $a < \frac{1}{2p_c}$ und die Fourier-Transformierte der Funktion bandbegrenzt ist, d.h. $F[f(x)](p) \equiv 0 \quad \forall |p| > p_c$.

Um der Endlichkeit der gegebenen Werte Rechnung zu tragen, wird der Träger der Funktion f durch Multiplikation mit einer Fensterfunktion $q(x)$ eingeschränkt. Für $q(x)$ gibt es verschiedene Ansätze; der einfachste ist

$$q(x) = \begin{cases} 1 & \text{falls } -\frac{a}{2} < x < X_0 - \frac{a}{2} \\ 0 & \textit{sonst} \end{cases} \tag{2.11}$$

X_0 wird so gewählt, daß die N gegebenen Abtastwerte in das Fenster $(-\frac{a}{2}; X_0 - \frac{a}{2})$ fallen. Die Fourier-Transformierte dieser *windowed function* wird im Impulsraum mit $\Delta_b(p)$ abgetastet, was im Ortsraum einer Faltung mit der inversen Fourier-Transformierten $\frac{1}{b}\Delta_{\frac{2\pi}{b}}(x)$ entspricht. Nach diesen Überlegungen muß also folgender Ausdruck betrachtet werden:

$$F\{[f(x)\Delta_a(x)q(x)] \star \frac{1}{b}\Delta_{\frac{2\pi}{b}}(x)\}(p) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \left[\sum_{r=0}^{N-1} f(ra)\mathrm{e}^{-i2\pi\frac{k\cdot r}{N}}\right] \delta(p - \frac{2\pi}{X_0}k) \tag{2.12}$$

Der Ausdruck $[\cdots]$ ist periodisch in k mit Periode N. Die Fourier-Transformierte wird also durch

$$\tilde{F}(k\frac{2\pi}{X_0}) = \sum_{r=0}^{N-1} f(ra)\mathrm{e}^{-i2\pi\frac{k\cdot r}{N}} \qquad k = 0, \ldots, N-1 \tag{2.13}$$

bestimmt. Dies wird als *diskrete Fourier-Transformation* bezeichnet. Entsprechend ist die *inverse diskrete Fourier-Transformation* durch

$$f(ra) = \frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1} \tilde{F}\left(k\frac{2\pi}{X_0}\right)\mathrm{e}^{i2\pi\frac{k\cdot r}{N}} \tag{2.14}$$

gegeben.

Im folgenden wird die abkürzende Schreibweise $f(ra) \equiv f(r)$ und $\tilde{F}(\frac{2\pi}{X_0}k) \equiv F(k)$ benutzt. Die diskrete Fourier-Transformation ist damit:

$$F(k) = \sum_{r=0}^{N-1} f(r)\mathrm{e}^{-i\frac{2\pi}{N}r\cdot k} \tag{2.15}$$

Die N Werte $f(r)$ $(r = 0, \ldots, N-1)$ lassen sich zu einem Vektor $\boldsymbol{f} = (f(0), \ldots, f(N-1))$ und die Werte $F(k)$ zu $\boldsymbol{F} = (F(0), \ldots, F(N-1))$ zusammenfassen. Die Fourier-Transformation läßt sich damit schreiben als:

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{W} \cdot \boldsymbol{f} \tag{2.16}$$

mit

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} \omega_N^0 & \omega_N^0 & \cdots & \omega_N^0 \\ \omega_N^0 & \omega_N^1 & \cdots & \omega_N^{N-1} \\ \omega_N^0 & \omega_N^2 & \cdots & \omega_N^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_N^0 & \omega_N^{N-1} & \cdots & \omega_N^{(N-1)(N-1)} \end{pmatrix} \tag{2.17}$$

und $\omega_N = \mathrm{e}^{-i\frac{2\pi}{N}}$.

Ohne Verbesserungen erfordert die Fourier-Transformation N^2 komplexe Multiplikationen und $N(N-1)$ komplexe Additionen. Die Idee von Cooley-Tukey [42] besteht darin, die Matrix $\boldsymbol{W}$ geeignet zu faktorisieren, sodaß die Zahl der notwendigen Multiplikationen – die in erster Linie die Geschwindigkeit des Algorithmus' bestimmt – verringert wird.

2.3.2 Algorithmus von Cooley-Tukey

In diesem Abschnitt wird die Grundidee der Fast-Fourier-Transformation am Beispiel des Spezialfalles $N = 2^s$ erläutert. Dazu wird eine andere Schreibweise für r und k eingeführt.

$$\begin{array}{lllll} r & = & \sum_{t=0}^{s-1} 2^t r_t & \equiv (r_{s-1}, \ldots, r_0) & r_i = 0,1 \\ k & & & \equiv (k_{s-1}, \ldots, k_0) & k_i = 0,1 \end{array}$$

Die Fourier-Transformation ist damit:

$$F(k_{s-1}, \ldots, k_0) = \sum_{r_{s-1}=0}^{1} \cdots \sum_{r_0=0}^{1} \omega_N^{k \cdot r} f(r_{s-1}, \ldots, r_0) \tag{2.18}$$

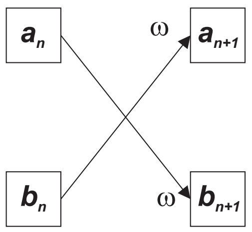
Es gilt

$$F(k_{s-1}, \ldots, k_0) = \sum_{r_{s-1}=0}^{1} \cdots \sum_{r_0=0}^{1} \omega_N^{2^{s-1} k_0 r_{s-1}} \cdots \omega_N^{(\sum_{t'=0}^{s-1} 2^{t'} k_{t'}) r_0} f(r_{s-1}, \ldots, r_0) \tag{2.19}$$

Diese Summation läßt sich aufspalten:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(k_0, r_{s-2}, \ldots, r_0) &= \sum_{r_{s-1}=0}^{1} \omega_N^{2^{s-1} r_{s-1} k_0} f(r_{s-1}, \ldots, r_0) \\ f^{(2)}(k_0, k_1, r_{s-3}, \ldots, r_0) &= \sum_{r_{s-2}=0}^{1} \omega_N^{2^{s-2} r_{s-2}(2k_1 + k_0)} f^{(1)}(k_0, r_{s-2}, \ldots, r_0) \\ F(k_{s-1}, \ldots, k_0) = f^{(s)}(k_0, \ldots, k_{s-1}) &= \sum_{r_0=0}^{1} \omega_N^{(\sum_{t'=0}^{s-1} 2^{t'} k_{t'}) r_0} f^{(s-1)}(k_0, \ldots, k_{s-2}, r_0) \end{aligned} \tag{2.20}$$

Damit hat man eine Faktorisierung der Matrix $\boldsymbol{W} = \prod_{i=1}^{s} \boldsymbol{W}_i$ gefunden, weil $\boldsymbol{f}^{(1)} = \boldsymbol{W}_1 \boldsymbol{f}^{(0)}$, $\boldsymbol{f}^{(2)} = \boldsymbol{W}_2 \boldsymbol{f}^{(2)}$, ..., $\boldsymbol{f}^{(s)} = \boldsymbol{W}_s \boldsymbol{f}^{(s-1)}$. Die Einträge des Ergebnisvektors sind allerdings in einer *bit-reversed* Reihenfolge, d.h. der Eintrag zu einem gegebenen k befindet sich in derjenigen Zeile des Ergebnisvektors, die durch die umgekehrte Reihenfolge der Dualdarstellung von k bestimmt ist. Graphisch läßt sich der Algorithmus von Cooley-Tukey durch den Signalfluß darstellen (hier am Beispiel für $N = 2^3 = 8$). Ein Element wird als *Butterfly* bezeichnet und ist die graphische Veranschaulichung der Rechnung



$$a_{n+1} = a_n + \omega b_n$$

$$b_{n+1} = a_n - \omega b_n$$

Für jeden *Butterfly* benötigt man eine Multiplikation und zwei Additionen und zur Berechnung der Fourier-Transformation braucht man $\frac{N}{2} \log_2 N$ *Butterflies*. Die Anzahl der Multiplikationen ist also von N^2 auf $\frac{N}{2} \log_2 N$ gesunken und dies verleiht diesem (und verwandten Algorithmen wie z.B. Sande-Tukey [43]) ihre enorme Bedeutung. Dieser Algorithmus läßt sich auch auf beliebige N verallgemeinern. Allerdings findet man in diesem Fällen keine so einfache Faktorisierung wie in dem hier vorgestellten und implementierten Fall. Eine Übersicht mit Implementierungshinweisen findet man z.B. in [44].

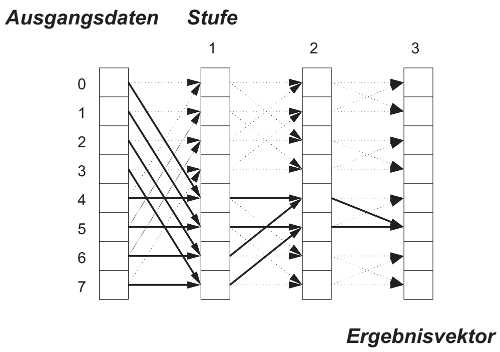


Abbildung 2.3: Signalfluß für Cooley-Tukey-Algorithmus. Fett gedruckte Pfeile stellen den Signalfluß für ein ausgewähltes Element des Ergebnisvektors dar.

2.3.3 Implementierung auf einem distributed memory system

Computersysteme mit verteiltem Speicher (*distributed memory systems*) zeichnen sich dadurch aus, daß der zur Verfügung stehende Speicher physikalisch auf unterschiedliche Rechenknoten verteilt ist. Der Zugriff eines Knotens auf Speicherbereiche eines anderen Knotens dauert daher länger als der Zugriff auf den eigenen lokalen Speicher. Zur Parallelisierung wird auf solchen Rechnern die einem Problem zugrunde liegende Datenmenge in geeigneter Weise auf die einzelnen Rechenknoten verteilt, so daß jeder Knoten nur über einen bestimmten Ausschnitt der Datenmenge verfügt. Werden Datenelemente von einem anderen Knoten benötigt, muß mit diesem über ein Austauschprotokoll kommuniziert werden. Auf der Software-Seite stehen dazu allgemeine Protokolle wie *PVM*, *MPI* oder herstellerspezifische Bibliotheken zur Verfügung. Als sehr verbreitetes und größtenteils standadisiertes Protokoll wird zur Implementierung des Eichfixierungsprogrammes in dieser Arbeit das *message passing interface (MPI)* verwendet [45].

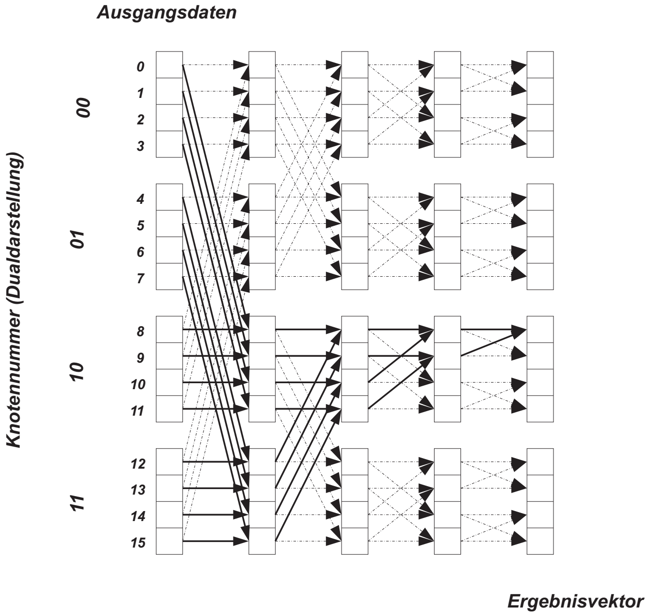


Abbildung 2.4: Signalfluß bei Rechnen über Knotengrenzen hinweg am Beispiel für 16 Datenelemente verteilt auf vier Knoten

Aus dem Signalfluß für den Cooley-Tukey-Algorithmus (Abb. 2.3) ist unmittelbar ersichtlich, daß zur Berechnung eines Elementes des Ergebnisvektors alle Ausgangsdaten benötigt werden. Die Effizienz einer Implementierung der FFT hängt daher wesentlich von der Topologie der Rechenknoten ab, da diese bestimmt, wie schnell die Daten von beliebigen Knoten ausgetauscht werden können. Der Signalfluß liefert aber auch die Idee der Parallelisierung. Nimmt man an, daß ein effizienter Datenaustausch zwischen beliebigen Knoten möglich ist und daß die Anzahl der Prozessoren $P = 2^p$ ist, so lassen sich die $N = 2^s$ Ausgangsdaten in Paketen von $M = 2^{n-p}$ auf die Knoten verteilen. Jedes Datum r der Ausgangsdaten läßt sich dann eindeutig durch seine Dualdarstellung $r = \sum_{t=0}^{s-1} 2^t r_t,\ r_i \in \{0,1\}$ (s.o.) angeben. Die Rechenknoten werden aufsteigend numeriert. Damit kann die Dualdarstellung r so interpretiert werden, daß die ersten p Bit $(r_{s-1}, \ldots, r_{s-p})$ als Nummer desjenigen Knoten interpretiert werden, auf dem das Datum liegt und $l \equiv (r_{s-p-1}, \ldots, r_0)$ als Index bezüglich der auf diesem Knoten gespeicherten, lokalen Daten dient.

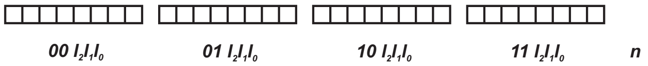


Abbildung 2.5: Datenverteilung auf die Prozessoren. Beispiel für $P = 4$ und $N = 32$

Die Festlegung dieser Art der Datenverteilung legt auch das Kommunikationsschema zwischen den Knoten fest (s. Abb. 2.4). Es sind p Kommunikationsschritte nötig. In jedem Schritt i findet ein Datenaustausch zwischen zwei Prozessoren statt, die sich in dem i. Bit des Knotenindex unterscheiden. Die beteiligten Prozessoren schicken dabei die obere Hälfte (d.h. lokale Daten mit $l_{s-p-1} = 1$) falls das i. Bit = 0 bzw. die untere Hälfte an den Prozessor mit der dualen Nummer, d.h. an denjenigen Prozessor, dessen Knotenindex im i. Bit im Vergleich mit dem eigenen Knotenindex invertiert ist. Beispielsweise schickt der Knoten mit dem Index $\alpha \equiv (\alpha_{p-1}, 0, \alpha_{p-3}, \ldots, \alpha_0)$ im zweiten Kommunikationsschritt die obere Hälfte seiner lokalen Daten an den Knoten mit Index $\beta \equiv (\alpha_{p-1}, 1, \alpha_{p-3}, \ldots, \alpha_0)$.

Nach jedem Schritt stehen auf jedem Knoten geeignet Daten zur Verfügung, so daß lokal die *butterflies* berechnet werden können. Zu beachten ist dabei, daß für jeden *butterfly* die richtigen Werte für ω verwendet werden müssen, die aber leicht aus dem globalen r berechnet werden können. Die letzten $s - p$ Schritte können lokal und ohne Kommunikation auf den einzelnen Knoten durchgeführt werden. Die Effizienz dieses Verfahrens hängt wesentlich von der Verfügbarkeit schneller Kommunikation zwischen beliebigen Knoten ab. Für Systeme, deren Knoten ausschließlich mit ihren nächsten Nachbarn kommunizieren, braucht man andere Herangehensweisen, die z.B. auf der Verteilung der Daten auf systolische Zellen beruhen [46].

Eine weitere Beschränkung der Effizienz besteht in der Reihenfolge, in der lokal auf die Daten zugegriffen wird. Der Transfer von Daten aus dem Hauptspeicher in die Recheneinheit des Prozessors geschieht in der Regel über einen Zwischenpuffer (*Cache*), auf den der Prozessor sehr schnell zugreifen kann. Der Zugriff auf Daten aus dem Hauptspeicher kann auf diese Weise von den eigentlichen Rechnungen mit diesen Daten entkoppelt werden. Die Nicht-Linearität der Zugriffe auf die Datenelemente in dem FFT-Algorithmus führt dazu, daß die Ergebnisse des vorherigen Rechenschrittes, die sich noch im Cache befinden, nicht weiterverwendet werden können, wenn die Datenmenge die Cache-Größe überschreitet, und direkte Hauptspeicherzugriffe nötig werden. Dies reduziert die gesamte Leistung des Algorithmus' (s. Abb. 2.6).

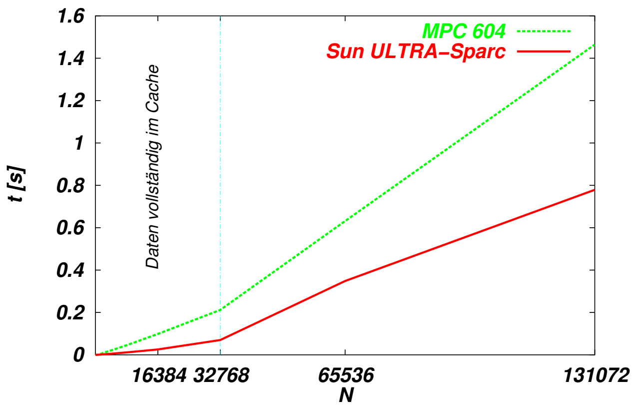


Abbildung 2.6: Zeit für die Fourier-Transformation von N Elementen auf verschiedenen Prozessoren. Beide haben eine Cache von 512 KByte, was $N = 32768$ entspricht. Man erkennt den Anstieg der Kurve bei diesem N

Kapitel 3

Ergebnisse

3.1 Vorbemerkungen

3.1.1 Durchführung der Simulation

Bei einer Kopplungsstärke $\beta = 6.0$ werden Eichfeldkonfigurationen zur Berechnung der Erwartungswerte der betrachteten Korrelationsfunktionen verwendet. Diese werden jeweils alle 100 *sweeps* bestimmt, um die statistische Unabhängigkeit der Konfigurationen weitestgehend sicherzustellen. Zum Erzeugen der Markov-Kette werden jeweils 4 *heat-bath updates* gefolgt von einem *overrelaxation* Schritt benutzt. Die Thermalisierung der Markov-Kette wird mit 800 Schritten vorgenommen. Bei Simulationen mit dynamischen Fermionen wird die $Z(3)$-Symmetrie explizit gebrochen und es treten nur solche Linkfeldkonfigurationen auf, die einen rellen Wert des Polyakovlooops L besitzen. Vor der Eichfixierung werden daher die Eichfelder einer $Z(3)$-Transformation unterworfen, wenn deren Polyakovloop nicht auf der rellen Achse liegt.

Die Eichfixierung selbst ist mit dem beschriebenen Fourier-beschleunigten Verfahren durchgeführt worden. Die Iterationen werden bei Werten für Θ (Glg. 1.79) abgebrochen, die kleiner als 10^{-9} sind. In dem Eichfixierungsalgorithmus wird $\alpha = 0,03125$ verwendet. Insgesamt wurden alle betrachteten Größen auf 740 Konfigurationen ermittelt und mittels Jackknife-Methode [47] sind die Mittelwerte und die Fehler bestimmt worden.

3.1.2 Bestimmung der Temperaturskala

Die Temperatur ist nach Gleichung 1.69 auf dem Gitter durch $T = \frac{1}{N_\tau a}$ gegeben und das Verhältnis zur kritischen Temperatur T_c ist folglich

$$\frac{T}{T_c} = \frac{1}{N_\tau a(\beta)} N_\tau a(\beta_\mathrm{c}) \tag{3.1}$$

Im Skalenbereich erwartet man für dieses Verhältnis einen Wert von $\frac{R(\beta_\mathrm{c})}{R(\beta)}$. Für β-Werte, wie sie in dieser Simulation benutzt worden sind, ist aber kein Skalenverhalten zu erwarten. Um trotzdem eine Abschätzung für die Temperatur zu gewinnen, wird ein zu [48] analoges Verfahren benutzt.

Man entwickelt den Erwartungswert $\langle S_G \rangle_0$ der Wirkung bei $T = 0$ in g_s^2, d.h. $\langle S_G \rangle_0 = \sum_{n=1}^{\infty} c_n g_s^{2n}$ und nimmt an, daß diese Entwicklung für den betrachteten g_s-Bereich konvergent ist. Dieser Erwartungswert wird in der Gittertheorie nicht-störungstheoretisch ausgerechnet und enthält – innerhalb des Konvergenzradius der Entwicklungsreihe – alle Ordnungen von g_s^{2n}. Für die Wilson-Wirkung ist in [49] nachgewiesen worden, daß durch die Einführung einer effektiven Kopplungskonstante $g_\mathrm{eff}^2 = \frac{\langle S_G \rangle_0}{c_1}$ die Skalenverletzung reduziert wird, d.h. in diesem Fall wird die Abweichung von $\frac{R(\beta_\mathrm{c})}{R(\beta)}$

vom Kontinuumswert $\frac{T}{T_c}$ für effektive Werte $\beta_{\text{eff}} = \frac{2N_c}{g_{\text{eff}}^2}$ reduziert. Die in der effektiven Kopplung g_{eff} zusammengefassten nicht-störungstheoretischen Beiträge in dem Wirkungserwartungswert kompensieren in diesem Fall die skalenverletzenden Terme in der β_{LAT}-Funktion bis zu einem gewissen Grad.

Der Ansatz für die Wilson-Wirkung wird auf die hier verwendete *tree-level-improved* (1,2)-Wirkung übertragen. Anstatt den Erwartungswert der Wilson-Wirkung zu betrachten, wird der Erwartungswert für die (1,2)-Wirkung verwendet. In [50] wird gezeigt, daß im *infinite volume* Limes ($V \to \infty$) der Entwicklungskoeffizient c_1 für alle verbesserten Wilsonwirkungen, wie die (1,2)-Wirkung, universell $c_1 = \frac{N_c^2-1}{8N_c}$ ist. Mit $\beta_{\text{eff}} = \frac{2N_c}{g_{\text{eff}}^2}$ bzw. $\beta_{\text{eff}} = \frac{2N_c c_1}{\langle S^{(1,2)}\rangle_0} = \frac{N_c^2-1}{4\langle S^{(1,2)}\rangle_0}$ heißt das für den Fall $N_c = 3$:

$$\beta_{\text{eff}} = \frac{2}{\langle S^{(1,2)}\rangle_0} \tag{3.2}$$

Für hohe physikalische Temperaturen zeigt die Energiedichte, daß der Erwartungswert der Wirkung bei $T = 0$ sich gut durch den Erwartungswert der Wirkung bei hohen Temperaturen annähern läßt. $\beta_{\text{eff},T} = \frac{2}{\langle S^{(1,2)}\rangle_T}$ ist eine gute Näherung für β_{eff} für ein symmetrisches (d.h. $T = 0$) Gitter.

Hier ist die Simulation bei $\beta = 6$ auf einem $32^3 \times 4$ Gitter durchgeführt worden. Für den Erwartungswert $\langle S^{(1,2)}\rangle$ der Wirkung ergibt die Simulation $\langle S^{(1,2)}\rangle = 0,36224(2)$ und damit $\beta_{\text{eff}} = 5,5212(4)$. Nach [51] ist der Wirkungserwartungswert für die kritische Kopplung $\beta_c = 4,0729(3)$ auf einem symmetrischen 16^4 Gitter $0,593737$, was $\beta_{\text{eff},c} = 3,368494$ entspricht. Das Verhältnis $\frac{T}{T_c}$ ist danach $10,7$. Für den Gitterabstand $a = \frac{1}{N_\tau T}$ ist mit $T_c = 266,3\text{MeV}$: $a = \frac{1}{4\cdot 10,7\cdot 266,3\text{MeV}} = 0,018\text{fm}$.

Es ist wichtig zu bemerken, daß dieses Verfahren lediglich eine grobe Abschätzung für die Temperatur erlaubt. Die ermittelte Größenordnung der Temperatur sollte aber korrekt sein.

3.1.3 Notation

Im folgenden soll kurz die zur Präsentation der Ergebnisse verwendete Notation erläutert werden. Für die Ortskoordinaten werden entweder x_μ, $\mu = 1, \ldots, 4$ oder x, y, z und t verwendet. Die entsprechenden Gitterkoordinaten werden mit $r_\mu = \frac{x_\mu}{a}$ gekennzeichnet. Komponenten von x oder r im Ortsraum werden durch römische Indizes i identifiziert. Im Impulsraum werden $q_\mu = 2\sin\frac{\pi k_\mu}{N_\mu}$ (mit den Gitter-Impulskomponenten $k_\mu = -\frac{N_\mu}{2}, \ldots, \frac{N_\mu}{2} - 1$, siehe Glg. 1.72) zur Kennzeichnung der Impulse des *tree-level*-Propagators des Eichfeldes verwendet. Physikalische Impulse sind dann durch $p_\mu = \frac{2\pi k_\mu}{N_\mu a}$ bestimmt.

Es werden drei verschiedene Formen des Propagators untersucht. Für die Propagatoren im Ortsraum und im Impulsraum wird die Kennzeichnung D verwendet. Welcher Raum betrachtet wird, ist aus dem Zusammenhang ersichtlich. Die Schreibweise D_{ii} steht für die Summation $\sum_{i=1}^{3} D_{ii}$ über die Raumkomponenten des Propagators. Die gemischte Form des Propagators wird mit $G_{\mu\mu}$ bezeichnet. G_{ii} ist eine Kurzform für $\sum_{i=1}^{2} G_{ii}$.

3.2 Gluonpropagator im Ortsraum

In diesem Abschnitt wird die Auswirkung der Anisotropie des Gitters auf die Gluon-Korrelationsfunktion im Ortsraum untersucht. Im Kontinuum ist die Korrelationsfunktion nur von $|\boldsymbol{x}| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$ und x_4 abhängig, da die Lorentz-Symmetrie durch die endliche Temperatur explizit verletzt wird. Die Einführung des Gitters bricht zusätzlich die verbleibende Rotationssymmetrie in den Raumkomponenten x_1, x_2 und x_3. In der Simulation verwendet man periodische Randbedingungen des *link*-Feldes U auf dem Gitter nicht nur in der Zeitrichtung, sondern auch in den Raumrichtungen. In der hier verwendeten Näherung für die Eichfelder A bedeutet dies, daß auch A denselben Randbedingungen genügen muß, d.h. $A_\mu(0) = A_\mu(X)$ für $X = \sum_i c_i N_i a\hat{\boldsymbol{i}}$, $\boldsymbol{c} \equiv (c_1, c_2, c_3) \in \{0; 1\}^3$ und den Einheitsvektor $\hat{\boldsymbol{i}}$ in i-Richtung. In den durch unterschiedliche c definierten Richtungen hat man folglich eine unterschiedliche Periodizität von A_μ und damit auch von den Korrelationsfunktionen der Felder. Die Anisotropie wird dadurch betont, wenn man keine Umdefinition der Abstände auf dem Gitter zwischen nicht durch einen *link* verbundenen Gitterpunkten vornimmt. Dieser Sachverhalt ist in den Abbildungen 3.1 und 3.2 für $\sum_i D_{ii}$ bzw. D_{44} veranschaulicht. Die Elemente auf der Achse sind durch $\boldsymbol{c} = (1, 0, 0)$ und Permutation der c_i, die Elemente auf der Flächendiagonale durch $\boldsymbol{c} = (1, 1, 0)$ und Permutation der c_i und die Elemente der Raumdiagonale durch $\boldsymbol{c} = (1, 1, 1)$ bestimmt. Es wurden jeweils Werte mit demselben $|r| = \sqrt{\sum_i r_i^2}$ für jede der drei ausgewählten Raumrichtungen zusammengefaßt, um zumindest für die Achsen- und Flächenelemente die Statistik zu erhöhen. Die Abbildungen zeigen deutlich die Abhängigkeit von der jeweiligen Richtung. Außerdem läßt sich innerhalb der Fehlergrenzen für jede Richtung ein symmetrischer Verlauf ablesen, den man für die Korrelationsfunktion im Ortsraum mit periodischen Randbedingungen bei endlichen Volumen erwartet.

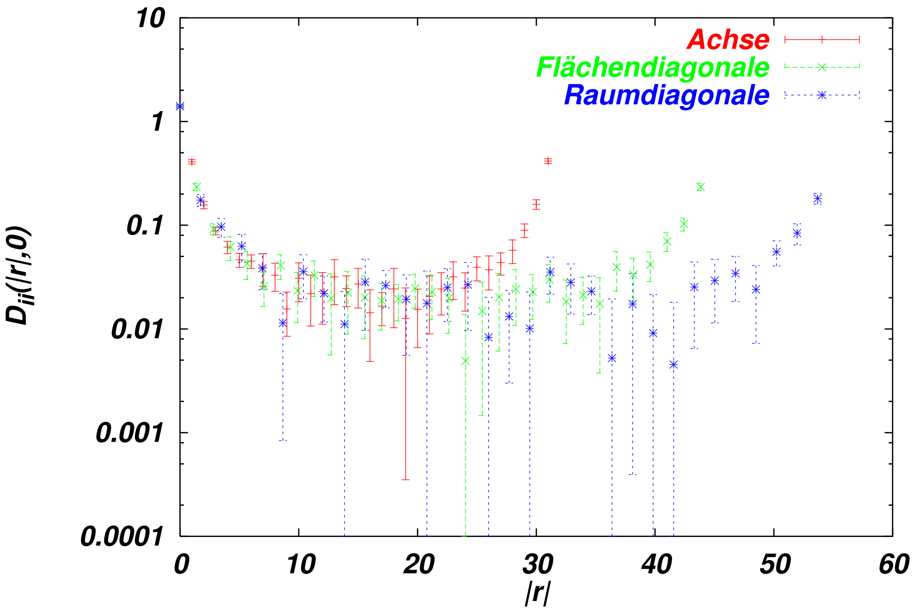


Abbildung 3.1: Gluon-Korrelationsfunktion D_{ii} im Ortsraum für verschiedene Raumrichtungen – logarithmisch aufgetragen über $|\boldsymbol{r}|$.

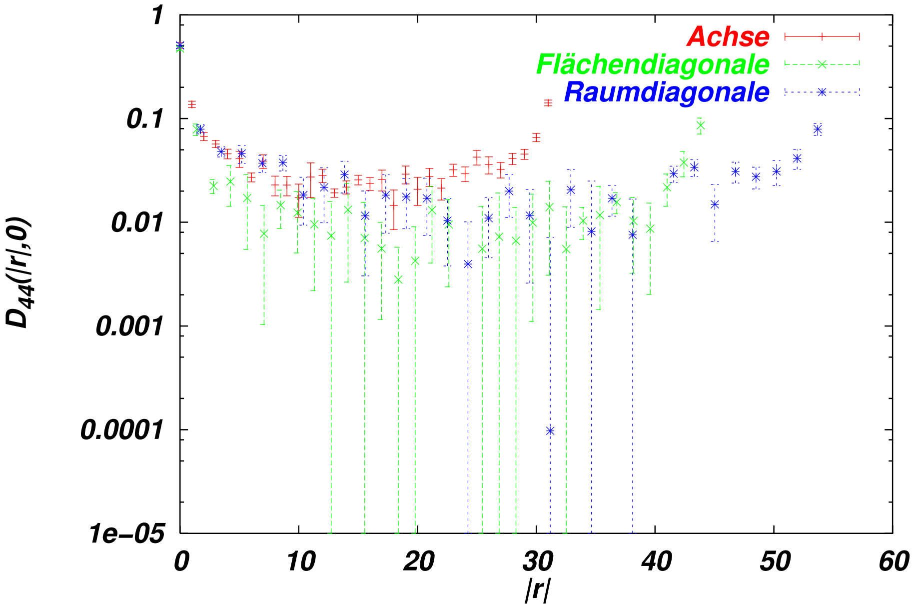


Abbildung 3.2: Gluon-Korrelationsfunktion D_{44} im Ortsraum für verschiedene Raumrichtungen – logarithmisch aufgetragen über $|\boldsymbol{r}|$.

3.3 Gemischte Form des Propagators

Eine weitere Größe, die aus den räumlichen Korrelationsfunktionen gewonnen werden kann, ist die über Hyperebenen aufsummierte Korrelationsfunktion $G_{\mu\mu}(z) = \sum_{z_\perp} D_{\mu\mu}(z_{\perp,1}, z_{\perp,2}, z, z_{\perp,4})$, in der über zu z senkrechten Hyperebenen summiert wird. Dies entspricht – wie schon erwähnt – der gemischten Darstellung der Korrelationsfunktion $G_{\mu\mu}(p_1, p_2, z, p_4)$ mit $G_{\mu\mu}(p_1, p_2, z, p_4) \sim \int \mathrm{d}\tilde{x} \mathrm{e}^{-i\tilde{p}\tilde{x}} G_{\mu\mu}(x)$ und $\tilde{p} \equiv (p_1, p_2, p_4) = 0$, $\tilde{x} \equiv (x_1, x_2, x_4)$. Die in der Simulation erhaltenen Ergebnisse für die allgemeinere Form der Korrelationsfunktion werden in den Abbildungen 3.3 und 3.4 präsentiert. Die endliche Temperatur sorgt für eine Auszeichnung der x_4-Richtung und damit der q_4-Komponente des Impulses. Daher wird nur über Daten mit demselben $|\boldsymbol{q}| = \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$ gemittelt. Die Komponenten q_i sind dabei die Impulskomponenten des *tree-level* Gluon-Propagators auf dem Gitter, wie sie in Glg 1.72 eingeführt worden sind.

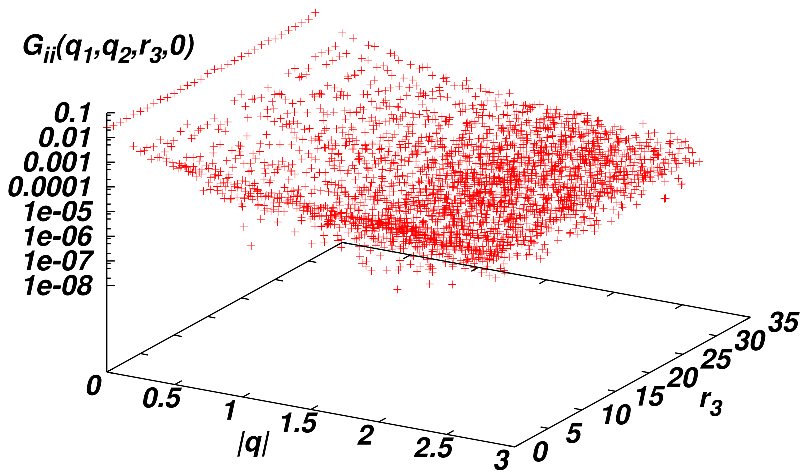


Abbildung 3.3: Gluon-Korrelationsfunktion G_{ii} in gemischter Darstellung. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist auf die Angabe der Fehler verzichtet worden.

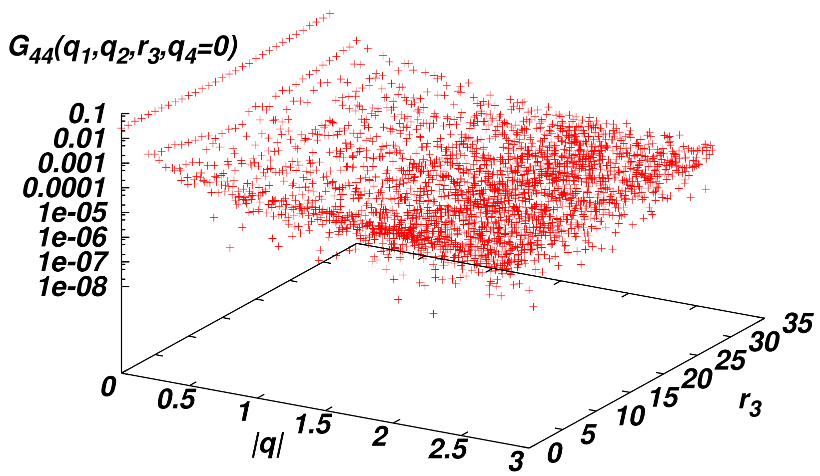


Abbildung 3.4: Gluon-Korrelationsfunktion in gemischter Darstellung. Zur besseren Unterscheidung kleiner Korrelationswerte sind die Werte logarithmisch aufgetragen. Auch hier sind die Fehler fortgelassen worden.

Um die Qualität der Landau Eichung zu überprüfen, betrachtet man $G_{33}(r_3)$, welches in der Landau-Eichung konstant sein soll. Das Resultat für diese Größe ist in Abb. 3.6 angegeben. Aufgrund der großen Fehler läßt sich aber keine Aussage über die Konstanz von $G_{33}(r_3)$ machen. Da aber eine Interpretation der eichvarianten Größen ohne eine Beurteilung der Qualität der Landau-Eichung nicht möglich ist, kann man zusätzlich die mittlere relative Abweichung von $G_{33}(r_3)$ pro Konfiguration von $\overline{G_{33}} \equiv \frac{1}{N_z}\sum_{r_3} G_{33}(r_3)$ betrachten, also die Größe $\Delta^{(rel)}G_{33} = \sum_{r_3} \frac{|G_{33}(r_3)-\overline{G_{33}}|}{|\overline{G_{33}}}$. Diese erlaubt Aussagen darüber zu treffen, wie stark die $G_{33}(r_3)$ auf einer Konfiguration voneinander abweichen und damit erhält man eine Aussage über die Laundau-Eichung auf einer Konfiguration. Für $\Delta^{(rel)}G_{33}$ ergibt die Simulation ein Erwartungswert von $0,008(5)$, d.h. die großen Fehler in der Analyse von $G_{33}(r_3)$ sind im wesentlichen statistische Schwankungen von $\overline{G_{33}}$. Die hier erzielte Qualität der Landau-Eichung ist gemessen an der oben beschriebenen Größe eine Größenordnung schlechter als die in einer anderen Arbeit [52] für $T = 0$ erzielte Qualität. In der zitierten Arbeit ist aber nur eine einzige Konfiguration aus der Markov-Kette betrachtet worden. Es ist aber eine wesentliche bessere Qualität erreicht worden als in [53], in der die Struktur des Gluonpropagators im Impulsraum bei $T = 0$ untersucht wird.

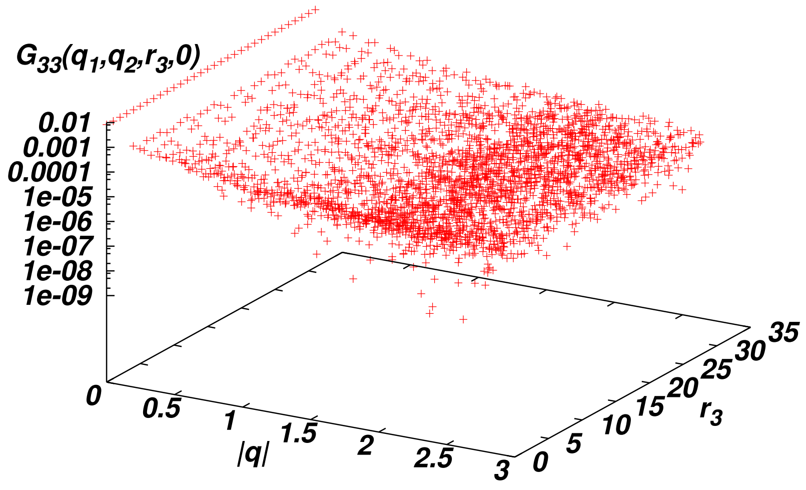


Abbildung 3.5: Gluon-Korrelationsfunktion in gemischter Darstellung. Hier ist G_{33} betrachtet worden, um die Qualität der Landau-Eichung zu prüfen.

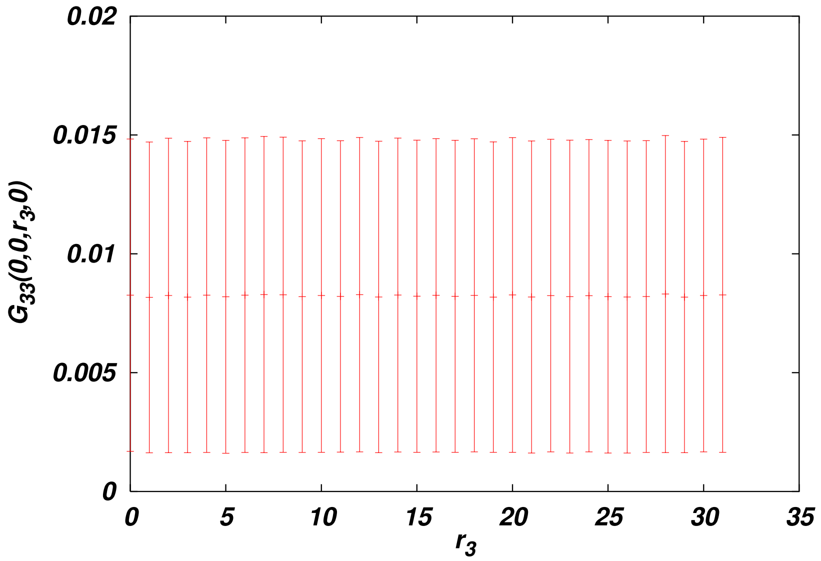


Abbildung 3.6: $(3,3)$-Korrelationsfunktion für den Impuls $\tilde{q} = (0,0,0)$ mit $\tilde{q} \equiv (q_1, q_2, q_4)$ (Ensemble-Mittelwert)

Sieht man die Eichung als hinreichend fixiert an, lassen sich aus der gemischte Form der Korrelationsfunktion die farbelektrischen und -magnetischen Massen extrahieren. Die Abbildungen 3.7 und 3.8 zeigen die Werte für $\sum_i G_{ii}(r_3)$ und $G_{44}(r_3)$. Nach Glg. 1.75 sollten die Größen $\sum_i G_{ii}(z)$ und $G_{44}(z)$ von z mit $\cosh(m_i(z - \frac{N_z a}{2}))$ abhängen. Um die Masse m_i zu erhalten wird folgender Ansatz für einen zweiparametrigen χ^2-Fit verwendet: $A\cosh(\hat{m}(\frac{z}{a} - \frac{N_z}{2})$. A ist dabei einer irrelevante Amplitude und $\hat{m}_i$ das Gitteräquivalent zur Masse m_{el} oder m_{magn}. Zur Abschätzung der Stabilität des Fits wird die Anzahl der für den Fit verwendeten Daten variiert. Da die Fehler der in der Simulation erhaltenen Werte in dem Fit berücksichtigt werden, wird als bestmögliche Schätzung für $\hat{m}_i$ derjenige Wert verwendet, bei dem man bei der Variation der Anzahl der Datenpunkte den geringsten Fehler erhält. Um die Schwankungsbreite von $\hat{m}_i$ anzugeben, werden in dem Ergebnis die Differenz zu dem maximalen und minimalen Wert mit aufgeführt. Für die elektrische Masse $\hat{m}_{\text{el}}$ erhält man aus den Fits einen Wert von $\hat{m}_{\text{el}} = 0,068(6)^{+0,016}_{-0,0}$ mit $\frac{\chi^2}{d.o.f} = 0.075$. Ausgedrückt in Einheiten der Temperatur erhält man für m_{el}: $\frac{m_{\text{el}}}{T} = 0,27(2)^{+0,064}_{-0,0}$. Das Ergebnis für die beste Abschätzung ist Abb. 3.7 zu entnehmen.

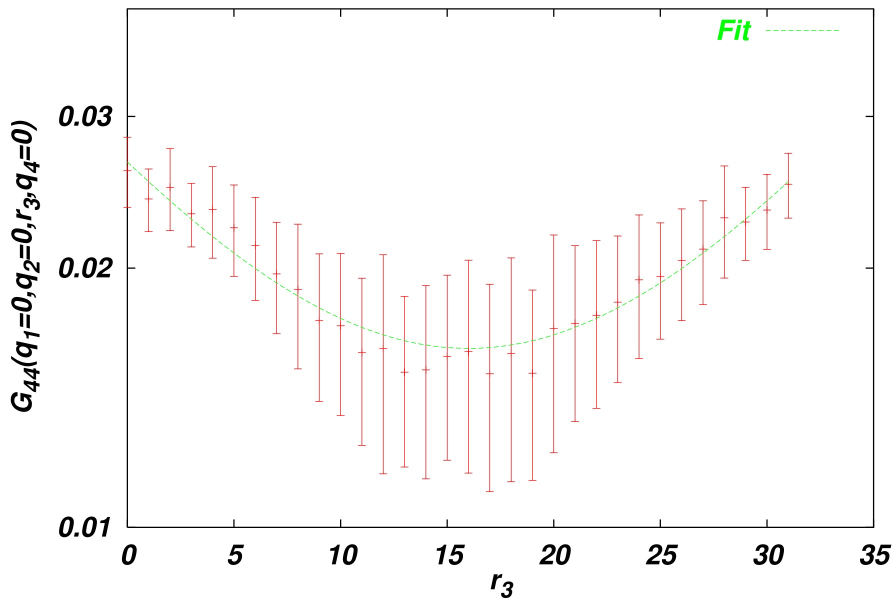


Abbildung 3.7: Gluon-Korrelationsfunktion $G_{44}(q_1 = 0, q_2 = 0, r_3, q_4 = 0)$ und ein Fit für die elektrische Abschirmmasse m_{el}

Das gleiche Verfahren mit den Daten von $\sum_i G_{ii}(z)$ durchgeführt liefert eine mit 0 verträgliche magnetische *screening*-Masse. Die in Abb. 3.8 gezeigten Daten sind aber mit zu großen Fehlern behaftet und daher ist eine Aussage über die magnetische Abschirmmasse nicht möglich.

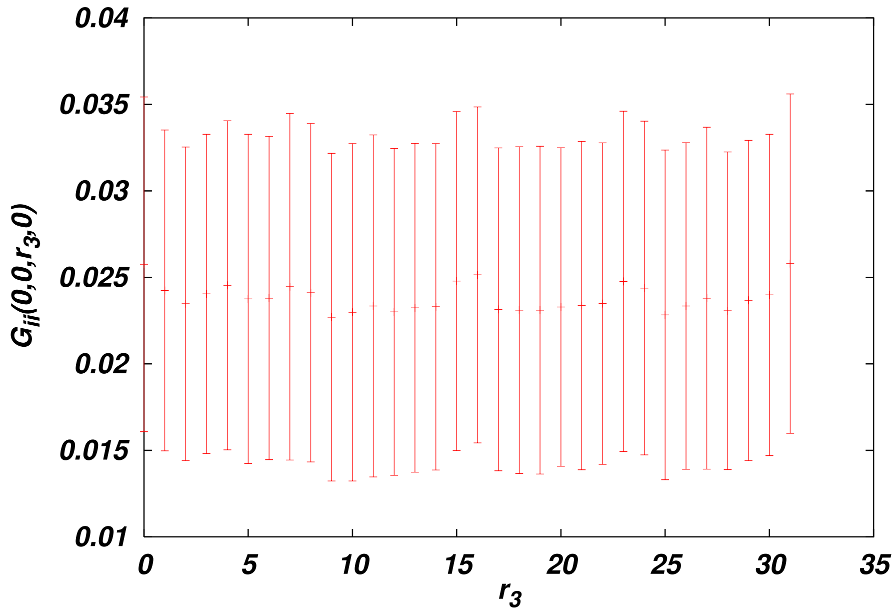


Abbildung 3.8: Gluon-Korrelationsfunktion $\sum_i G_{ii}(q_1 = 0, q_2 = 0, r_3, q_4 = 0)$ auf dem Gitter

3.4 Masse aus dem Singulett-Potential

Wie in Abschnitt 1.2.6 dargelegt, besteht eine andere Möglichkeit Aussagen über das Abschirmverhalten des Plasmas zu gewinnen, in der Betrachtung der Potentiale zwischen schweren Quarks. Zur Berechnung des Singulett-Potentials wird das Gitteräquivalent der Polyakovloopkorrelationsfunktion $\langle \mathrm{Tr}\ \Omega(R)\Omega^\dagger(0)\rangle$ verwendet. Wie auch bei den Korrerlationsfunktionen des Gluonfeldes im Ortsraum treten bei der Berechnung auf dem Gitter Artefakte wegen des endlichen Volumens auf. Auch für $\langle \mathrm{Tr}\ \Omega(R)\Omega^\dagger(0)\rangle$ erwartet man einen symmetrischen Verlauf auf dem Gitter.

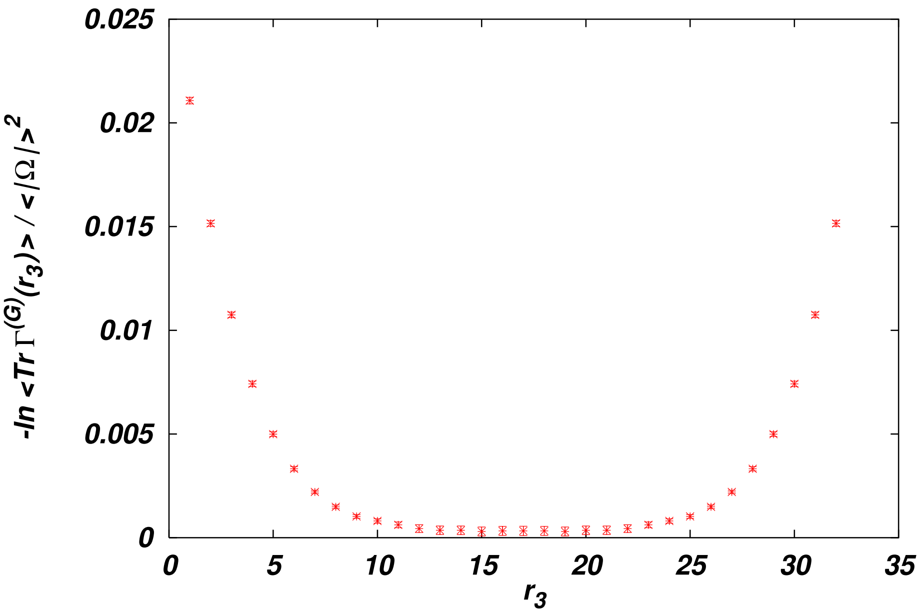


Abbildung 3.9: Polyakovloopkorrelationsfunktion in Gittereinheiten

Wie Abb. 3.9 zeigt, ist dies auch tatsächlich der Fall. Aufgrund der fehlenden Rotationsinvarianz werden nur Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit von z betrachtet, d.h. es wird $\langle \mathrm{Tr}\ \Omega(z)\Omega^\dagger(0)\rangle$ untersucht. In der *deconfinement*-Phase, in der diese Simulation durchgeführt wird, ist das Singulett-Potential durch

$$\mathrm{e}^{-\beta_{\mathrm{therm}} V_1(R)} = \frac{\langle \mathrm{Tr}\ \Omega(R)\Omega^\dagger(0)\rangle}{\langle|\Omega|\rangle^2} \tag{3.3}$$

bestimmt — mit der funktionalen Form

$$V_1(R) \sim \frac{1}{R^d}\mathrm{e}^{-\mu_D R} \tag{3.4}$$

und $d = 1$. Der Wert für μ_D wird mittels eines χ^2-Fits bestimmt, und um einen größeren r_3-Bereich für diesen Fit benutzten zu können, wird mit den Daten für die gemischte Form der Polyakovloop-Korrelationsfunktion $\Gamma^{(G)}$ ein Fit mit dem Ansatz

$$-\ln \frac{\mathrm{Tr}\ \Gamma^{(G)}(r_3)}{\langle|\Omega^{(\mathrm{lat})}|\rangle^2} = A \cdot \cosh(\hat{\mu}_D(r_3 - \frac{N_3}{2})) \tag{3.5}$$

durchgeführt, wobei A eine für diese Untersuchung unwichtige Amplitude ist und $\hat{\mu}_D$ das Gitteräquivalent zu μ_D ist. Die Fehlerabschätzung wird auf dieselbe Weise wie für die Berechnung der Masse aus den Gluon-Korrelationsfunktionen vorgenommen. Als Ergebnis des Fits findet man $\hat{\mu}_D = 0,368(2)^{+0,02}_{-0,04}$. Die Masse μ_D ausgedrückt in Einheiten der Temperatur ist folglich $\frac{\mu_D}{T} = 1,472(9)$.

In [54] ist in der $SU(2)$ eine Übereinstimmung für die Massen, die aus den Gluonkorrelationsfunktionen gewonnen werden, und den Massen, die aus dem Singulett-Potential extrahiert werden, festgestellt worden. Diesen Sachverhalt findet man hier nicht; er sollte aus theoretischen Überlegungen aber vorliegen. Da die aus dem Singulett-Potential bestimmte Masse aber in der Größenordnung mit denjenigen anderer Arbeiten (z.B. der oben zitierten Arbeit) übereinstimmt, scheint die Bestimmung der Masse aus den Gluonkorrelationsfunktionen einen zu niedrigen Wert zu liefern, den man für niedrige Temperaturen in der Confinement-Phase erwartet.

3.5 Gluonpropagator im Impulsraum

Die Bedeutung der Anisotropie, wie sie im Abschnitt über die Korrelationsfunktion im Ortsraum beschrieben worden ist, ist im Impulsraum nicht zu erwarten. Die periodischen Randbedingungen im Ortsraum sorgen im Impulsraum lediglich für eine Diskretisierung der möglichen Impulswerte. Um dennoch die Richtungsabhängigkeit der Korrelationsfunktion zu untersuchen, ist eine ähnliche Analyse, wie sie im Ortsraum vorgenommen worden ist, auch im Impulsraum durchgeführt worden. Wegen der Endlichkeit der Temperatur nimmt die q_4-Richtung wieder eine Sonderrolle ein. Daher ist bei der Betrachtung $q_4 = 0$ gesetzt und es werden nur die „räumlichen" Komponenten des Impulses betrachtet. Die Abbildungen 3.10 und 3.11 zeigen die Propagatoren in den bereits beschriebenen Richtungen — jetzt nur auf dem Impulsgitter. Für kleine Impulse ($|\boldsymbol{q}| < 1$) läßt sich innerhalb der Fehlergrenzen sowohl für $\sum_i D_{ii}$ als auch für D_{44} keine Abhängigkeit von der Richtung im Impulsgitter feststellen. Für größere $|\boldsymbol{q}|$ ist wegen der großen Fehler aber keine Aussage möglich. In einer ähnlichen Untersuchung der Struktur des Gluon-Propagators bei $T = 0$ [55] werden Richtungsabhängigkeiten für größere Impulse festgestellt. Daher werden dort für die Untersuchung des Propagators im Impulsraum nur Impulse betrachtet, die in einem Zylinder um die Gitterdiagonale liegen. Hier wird eine ähnliche Einschränkung gemacht, aber aufgrund der endlichen Temperatur wird ein Zylinder um die Raumdiagonale des Gitters betrachtet. Bei der Berechnung der Korrelationsfunktion wird über Werte gemittelt, die dasselbe $|\boldsymbol{q}| = \sqrt{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}$ und dasselbe q_4 haben und zusätzlich in einem Zylinder mit Radius $2\frac{\pi}{32}$ um die Raumdiagonale liegen. Die Abbildungen 3.12 und 3.13 zeigen die Ergebnisse für $q_4 = 0$.

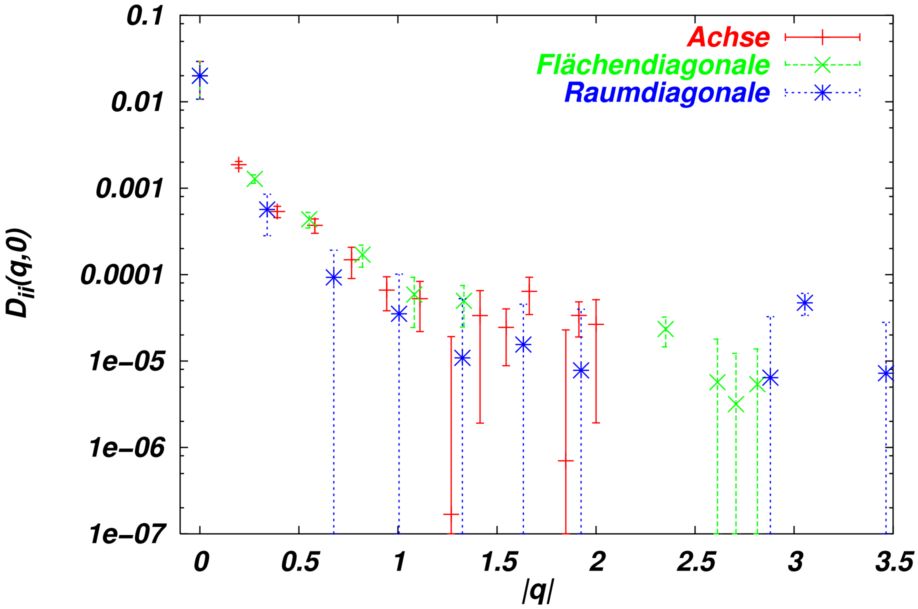


Abbildung 3.10: Gluon-Korrelationsfunktion D_{ii} für $q_4 = 0$. Zur Untersuchung von Gitter-Artefakten werden die *on axis* Elemente sowie die Elemente auf den Flächendiagonalen und der Raumdiagonale untersucht.

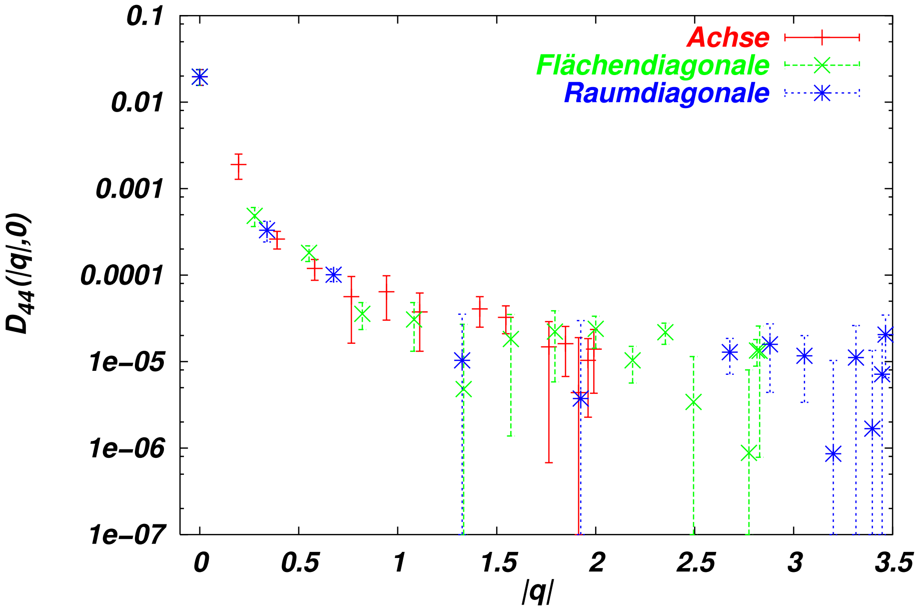


Abbildung 3.11: Gluon-Korrelationsfunktion D_{44} für $q_4 = 0$. Zur Untersuchung von Gitter-Artefakten werden die *on axis* Elemente sowie die Elemente auf den Flächendiagonalen und der Raumdiagonale untersucht.

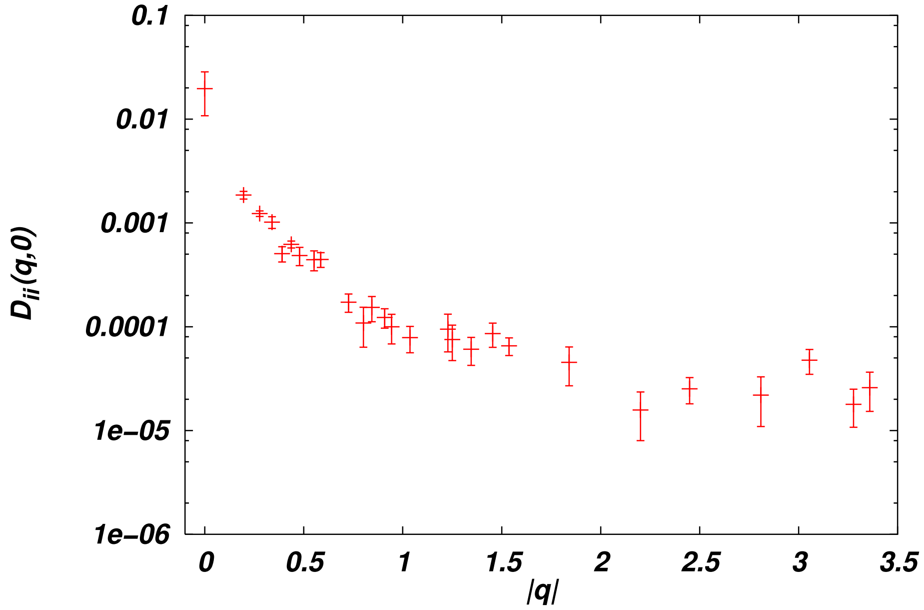


Abbildung 3.12: Gluon-Korrelationsfunktion $\sum_i D_{ii}$ für $q_4 = 0$ in Abhängigkeit von $|\boldsymbol{q}|$. Um die Wert für größere $|\boldsymbol{q}|$ unterscheiden zu können, ist die Korrelationsfunktion hier logarithmisch aufgetragen. Es wurden zusätzlich alle Datenpunkte mit einem relativen Fehler größer als $0,5$ unterdrückt.

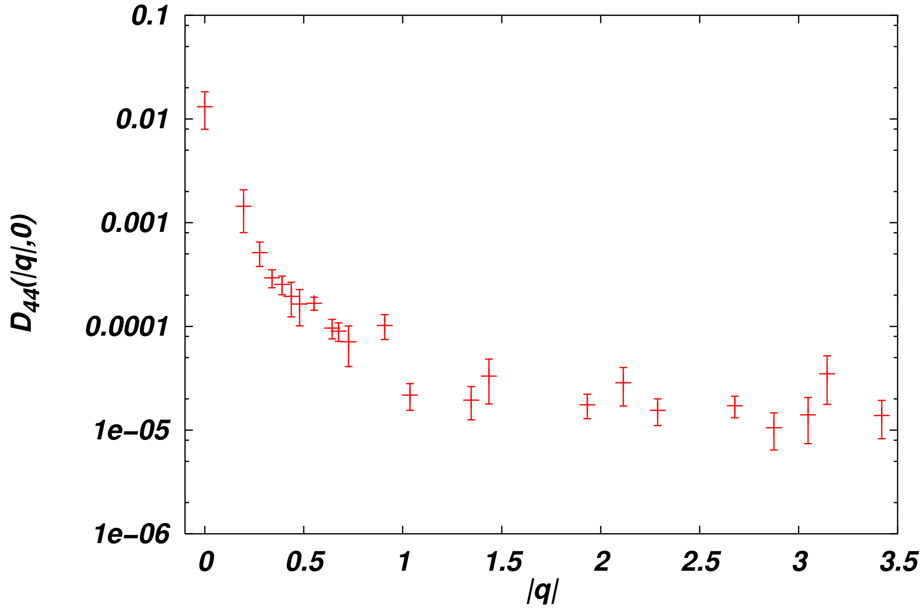


Abbildung 3.13: Gluon-Korrelationsfunktion D_{44} für $q_4 = 0$ in Abhängigkeit von $|\boldsymbol{q}|$. Hier sind Werte mit relativen Fehlern, die größer als $0,55$ sind, unterdrückt.

In den Abbildungen 3.14 und 3.15 sind die Ergebnisse für $q_4 = 2\sin(\frac{\pi}{2})$ dargestellt. Dies zeigt deutlich, daß für größere Matsubara-Frequenzen Signale bei der hier vorliegenden Statistik nicht von dem Rauschen getrennt werden können.

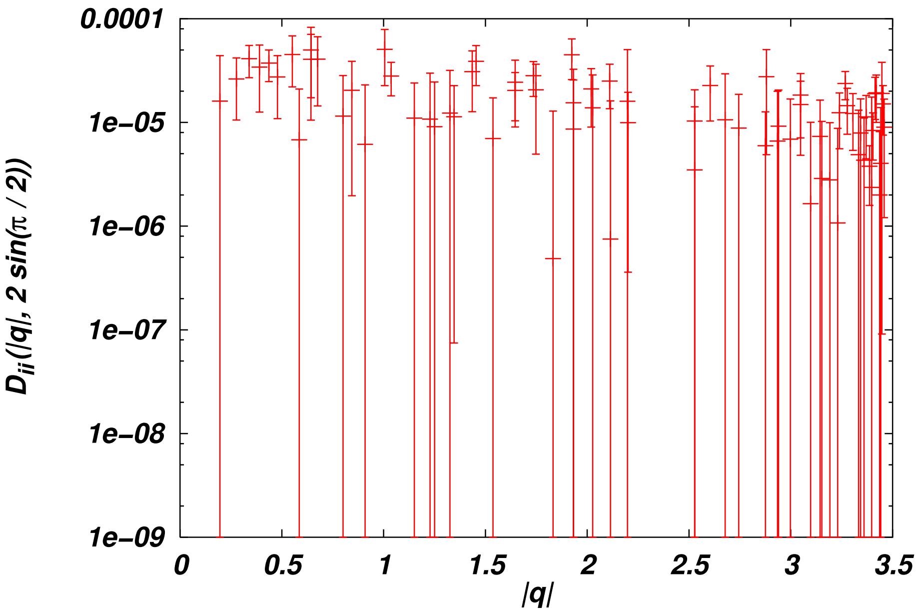


Abbildung 3.14: Gluon-Korrelationsfunktion D_{ii} für $q_4 = 2\sin\frac{\pi}{2}$

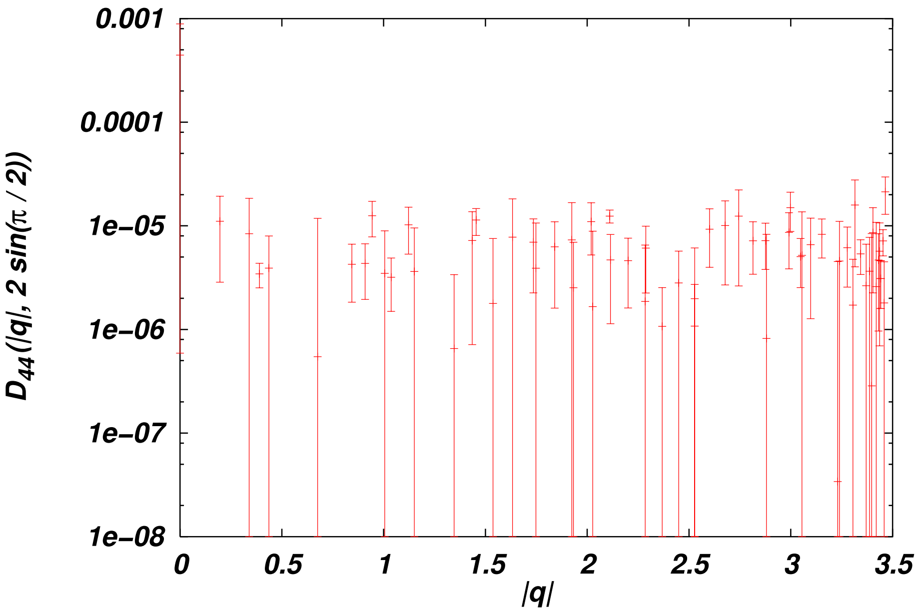


Abbildung 3.15: Gluon-Korrelationsfunktion D_{44} für $q_4 = 2\sin\frac{\pi}{2}$

Eine weitere Möglichkeit, die Größenordnung der *screening*-Massen abzuschätzen, liefert das Verhalten des Propagators im Impulsraum. Für ein massebehaftetes Boson hat der Propagator bei $T = 0$ die Form $D(p^2) = Z\frac{1}{p^2+m^2}$ mit dem Normierungsfaktor Z. Für $T = 0$ sollte es nach der niedrigsten Ordnung der störungstheoretischen Entwicklung weder elektrische noch magnetische Masse geben. Der Propagator für $T = 0$ ist IR-divergent. Daher werden in [55] und den darin enthaltenen Referenzen (1-2, 8, 12 und 21) verschiedene, infrarot-regulierte Propagatoren betrachtet. Bei endlicher Temperatur stellt sich dieses Problem aufgrund der erwarteten dynamischen Massengeneration nicht. Daher wird ein χ^2-Fit für $\sum_i D_{ii}$ bzw. D_{44} mit dem einfachen Ansatz durchgeführt. Die Fehlerbestimmung erfolgt auf die bereits beschriebene Weise.

Für die magnetische Masse erhält man aus den Fits einen Wert für das Gitteräquivalent vom m_{magn} von $\hat{m}_{\mathrm{magn}} = 0,07(1)^{+0,03}_{-0,0}$. Die elektrische Masse ist nach den Ergebnissen des Fits $\hat{m}_{\mathrm{el}} = 0,047(9)^{+0,008}_{-0,0}$. Hierbei ist aber zu beachtet, daß die Fits davon abhängig sind, ob der Wert für $q = 0$ berücksichtigt wird oder nicht. Für die angegebenen Werte der Massen sind die Werte für $q = 0$ berücksichtigt worden. Sie sind von derselben Größenordnung wie die elektrische Masse, die aus der gemischten Form des Propagators erhalten worden ist.

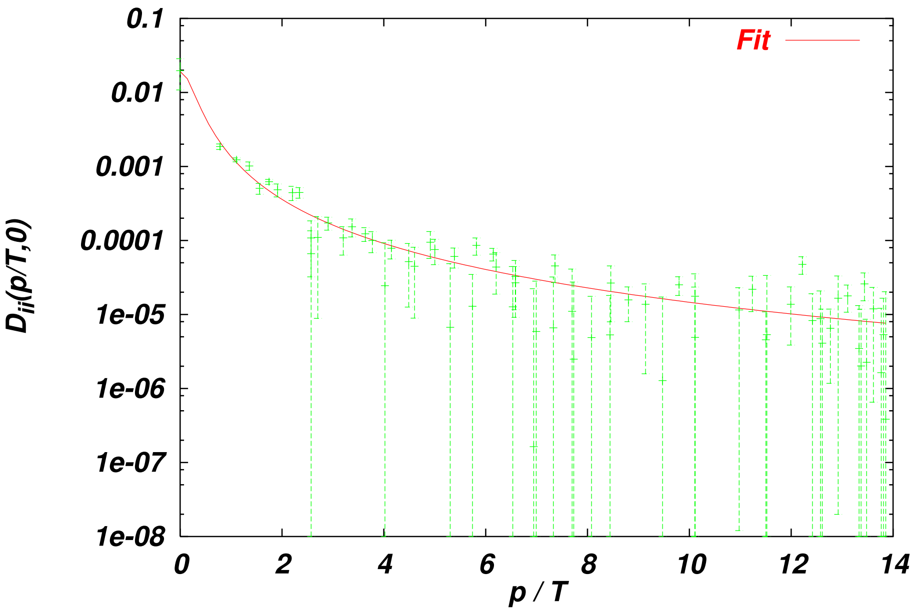


Abbildung 3.16: Gluon-Korrelationsfunktion D_{ii} mit $p_4 = 0$

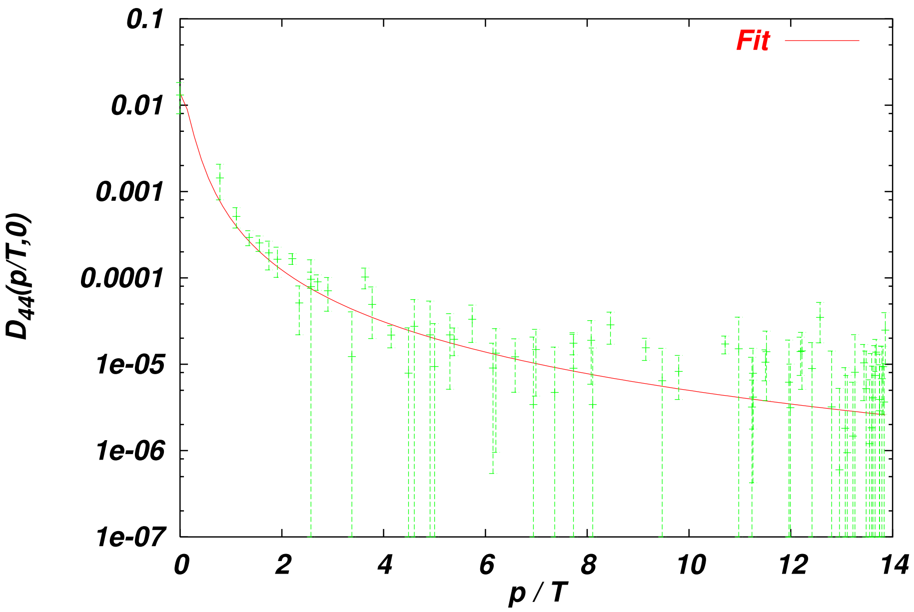


Abbildung 3.17: Gluon-Korrelationsfunktion D_{44} mit $p_4 = 0$

3.6 Diskussion der Ergebnisse

Auffällig ist zunächst die Tatsache, daß die betrachteten Gluon-Korrelationsfunktionen im Vergleich zum Singulett-Potential erheblich größere Fehler aufweisen. Dies erschwert, verläßliche Aussagen zu treffen, die aus theoretischen Überlegungen aus dem Verhalten der Korrelationsfunktionen zu gewinnen wären, wie z.B. die elektrische und magnetische Abschirmmasse.

Der Wert für die Debye *screening* Masse, die aus dem Singulett-Potential erhalten worden ist, stimmt in der Größenordnung mit denjenigen überein, die für $SU(2)$ bei $T \approx 15T_C$ gewonnen wurden [54]. In der zitierten Arbeit wird für die 1×2 Wirkung und $N_\tau = 4$ $\hat{\mu}_D$ mit $0,416(11)$ angegeben; in dieser Arbeit wurde bei $T \approx 10T_C$ ein Wert von $0,368(2)$ gefunden. Auch das Ergebnis einer $SU(3)$-Simulation [56] für $\frac{\mu_D}{T}$ für das dort betrachtete Verhältnis $\frac{T}{T_C} = 10,96$ liegt oberhalb des hier aus dem Singulett-Potential ermittelten Wertes. Die Größenordnungen beider Werte stimmen aber überein.

Die Ursachen für die Diskrepanz in der Bestimmung der elektrischen Masse aus den Gluon-Korrelationsfunktionen und dem Singulett-Potential ($0,068$ im Vergleich zu $0,37$ in Gittereinheiten) kann nicht endgültig erklärt werden. Die Bestimmung der Massen aus dem Gluon-Propagator im Impulsraum liefert ebenfalls zu kleine Werte für die Massen, $0,07(1)$ für die magnetische bzw. $0,047(9)$ für die elektrische Masse, jeweils in Gittereinheiten. Die Bestimmung der Massen aus den Gluon-Korrelationsfunktionen scheint also konsistent zu sein, auch wenn die Werte nicht innerhalb der Fehlergrenzen voneinander liegen. Dies wird zum einen auf die Unterschätzung der Fehler in den Fits zurückgeführt und zum anderen mit dem einfachen Fit-Ansatz für den Gluon-Propagator im Impulsraum erklärt, in dem implizit angenommen wird, daß der Selbstenergie-Tensor des Gluonenfeldes über den betrachteten Impulsbereich konstant ist.

Ein Fehler bei der Implementierung kann nicht ausgeschlossen werden, die vorgenommenen Tests (s. Anhang C) ergeben aber keinerlei Hinweise auf mögliches Fehlverhalten des Programms.

Für das Singulett-Potential haben die Sektoren des Polyakovloops, die durch die möglichen Werte $\mathrm{e}^{i\frac{2\pi}{3}\cdot n}$ unterschieden werden, einen großen Einfluß auf die Bestimmung der *screening*-Masse. Ist der Polyakovloop von Konfigurationen in der Markov-Kette nicht reell, so liefern diese einen zu großen Wert. Dies ist für die $SU(2)$ auch in [30] festgestellt worden. Durch die $Z(3)$-Rotation vor der Eichung wird dies aber behoben. Neben der Vermutung, daß die Statistik zur Berechnung der Gluon-Korrelationsfunktionen nicht ausreicht, besteht auch die Hypothese, daß die $Z(3)$-Rotation als Korrektur für die Gluon-Korrelationsfunktionen unzureichend ist, sondern von vornherein nur Konfigurationen mit reellem Polyakovloop verwendet werden dürfen. Daß auf dem Gitter berechnete Größen stark von dem Sektor des Polyakovloops der zugrundeliegenden Eichfeldkonfigurationen abhängen, zeigt auch eine Arbeit [57], in der der chiralen Phasenübergang untersucht wird. Da Fermionen in dieser Arbeit nicht berücksichtigt werden, sei für eine Erklärung des chiralen Phasenüberganges auf [23] verwiesen. In der angesprochenen Arbeit zeigt das chirale Kondensat für *quenched* Quarks in Abhängigkeit von dem Sektor des Polyakovloops (reell oder komplex) ein qualitativ unterschiedliches Verhalten. Das chirale Kondensat nimmt auch in der *deconfinement*-Phase einen nicht verschwindenden Wert an, falls der Polyakovloop komplex ist, obwohl dies in dieser Phase als Zeichen für *deconfinement* der Fall sein sollte. Das System hat für einen komplexen Polyakovloop und hohe Temperaturen trotzdem gewisse Eigenschaften, die bei tiefen Temperaturen erwartet werden, wie z.B. ein nicht verschwindendes chirales Kondensat.

Die geringe Masse, die in der hier vorliegenden Arbeit aus den Gluon-Korrelationsfunktionen erhalten wird, erwartet man ebenfalls bei niedrigen Temperaturen unterhalb des Phasenüberganges. Die $Z(3)$-Rotation scheint die Eigenschaften des Systems aber in dieser Hinsicht nicht zu ändern. Dies ist aber lediglich eine nicht näher untersuchte Vermutung, die sich auf die beschriebene Parallele stützt.

Kapitel 4

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein Computer-Programm entwickelt und implementiert, das QCD-Gittereichkonfigurationen in die Landau-Eichung überführt. Dies bestätigen Größen wie das Gitteräquivalent von $|\partial_\mu A_\mu|^2$ und die Konstanz von $G_{33}(z)$. Auch wird das eichabhängige Singulett-Potential richtig berechnet, welches auf ungeeichten Konfigurationen 0 sein sollte.

Bei der Bestimmung der *screening*-Massen sind Inkonsistenzen aufgetreten. Die Bestimmung der elektrischen Masse aus dem Singulett-Potential und aus den Gluon-Korrelationsfunktionen liefern deutlich unterschiedliche Ergebnisse. Die Ursache hierfür ist nicht geklärt worden. Aufgrund der geringen Statistik kann die magnetische Masse aus den Gluon-Korrelationsfunktionen nicht bestimmt werden.

Die Implementierung der Simulation als Metacomputing-Anwendung kann dagegen als Erfolg betrachtet werden. Obwohl nur im Test- und nicht im Produktionsbetrieb erprobt, konnte die Funktionsfähigkeit des Systems nachgewiesen werden.

Das naheliegendste Ziel für weitere Betrachtungen ist mit Sicherheit die Klärung der Ursachen für die Diskrepanzen in der Massenbestimmung. Dazu ist eine Erweiterung der Statistik nötig. Mit einer größeren Statistik kann dann die Abhängigkeit der Korrelationsfunktionen von den jeweiligen Polyakovloop-Sektoren untersucht werden. Dazu müssen Simulationen mit Konfigurationen durchgeführt werden, die ohne zusätzliche $Z(3)$-Rotation einen Polyakovloop in den jeweiligen Sektoren haben. Ein Vergleich der Ergebnisse aus den jeweiligen Sektoren kann Hinweise über die Abhängigkeit der Korrelationsfunktionen von dem Polyakovlopp-Sektor liefern.

Ein weiterer Untersuchungsgegenstand ist die Analyse der Struktur des Gluon-Propagators im Impulsraum. Wie in [55] beschrieben, müssen dazu Simulationen auf unterschiedlich großen Gittern vorgenommen werden, um Aussagen über die Kontinuumsextrapolation zu gewinnen. Dadurch wird die Betrachtung auch der infrarot-regulierten Propagatoren möglich, die man aus den Gluon-Korrelationsfunktionen bei endlicher Temperatur und endlichem Impuls erhält.

Anhang A

Euklidischer Gluonpropagator

A.1 Basisgrößen

In diesem Abschnitt werden einige Rechnungen zum Euklidischen Gluonpropagator präsentiert.

In einem thermischen System mit der 4-Geschwindigkeit u_μ gibt es vier Basistensoren. Für den *real-time* Formalismus werden die Tensoren

$$
\begin{aligned}
A^{(M),\mu\nu} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\delta^{ij} + \hat{k}^i \hat{k}^j \end{pmatrix}, \\
B^{(M),\mu\nu} &= \frac{1}{K^2} \begin{pmatrix} -k^2 & -k_0 k^n \\ -k^i k_0 & -k_0^2 \hat{k}^i \hat{k}^j \end{pmatrix}, \\
C^{(M),\mu\nu} &= \frac{1}{K^2} \begin{pmatrix} 2k_0 k & (k_0^2 + k^2)\hat{k}^j \\ \hat{k}^i (k_0^2 + k^2) & 2k_0 k \hat{k}^i \hat{k}^j \end{pmatrix}, \\
E^{(M),\mu\nu} &= \frac{1}{K^2} \begin{pmatrix} k_0^2 & k_0 k^j \\ k^i k_0 & k^i k^j \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{A.1}
$$

als Basistensoren verwendet. Der Übergang ins Euklidische liefert [12]

$$
\begin{aligned}
A^{(E)}_{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2} \end{pmatrix}, \\
B^{(E)}_{\mu\nu} &= \frac{1}{k^2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{k}^2 & -k_0 k_j \\ -k_0 k_i & k_0^2 \frac{k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2} \end{pmatrix}, \\
C^{(E)}_{\mu\nu} &= \frac{1}{\sqrt{2}|\boldsymbol{k}|k^2} \begin{pmatrix} 2\boldsymbol{k}^2 k_0 & (\boldsymbol{k}^2 - k_0^2) k_i \\ (\boldsymbol{k}^2 - k_0^2) k_i & -2k_0 k_i k_j \end{pmatrix}, \\
E^{(E)}_{\mu\nu} &= \frac{k_\mu k_\nu}{k^2}
\end{aligned}
\tag{A.2}
$$

Der inverse Propagator läßt sich in dieser Basis als

$$
D^{-1}_{\mu\nu} = aA_{\mu\nu} + bB_{\mu\nu} + cC_{\mu\nu} + eE_{\mu\nu} \tag{A.3}
$$

und die Selbstenergie als

$$
\Pi_{\mu\nu} = \Pi_A A_{\mu\nu} + \Pi_B B_{\mu\nu} + \Pi_C C_{\mu\nu} + \Pi_E E_{\mu\nu} \tag{A.4}
$$

darstellen. Für den Propagator $D_{\mu\nu}$ folgt mit $D^{-1}_{\mu\nu} D_{\mu\nu} = D_{\mu\nu} D^{-1}_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$ dann:

$$D_{\mu\nu} = \frac{1}{a} A_{\mu\nu} + \frac{2}{c^2 - 2bd}(-dB_{\mu\nu} + cC_{\mu\nu} - bE_{\mu\nu}) \tag{A.5}$$

Dabei hat man die Beziehungen zwischen A, B, C und E ausgenutzt:

$$\begin{aligned} A \cdot A &= A \\ B \cdot B &= B \\ C \cdot C &= \frac{1}{2}(B + E) \\ E \cdot E &= E \\ B \cdot A = C \cdot A = E \cdot A &= 0 \end{aligned} \tag{A.6}$$

A.2 Zusammenhang zwischen Propagator und Selbstenergie

Der Selbstenergietensor ist definiert als $\Pi_{\mu\nu} = D^{-1}_{\mu\nu} - (D^{(0)}_{\mu\nu})^{-1}$ mit dem freien Propagator $D^{(0)}_{\mu\nu}$. In einer kovarianten Eichung ist der freie Propagator

$$\begin{aligned} D^{(0)}_{\mu\nu} &= \frac{1}{k^2}(A_{\mu\nu} + B_{\mu\nu} + \xi E_{\mu\nu}) \\ (D^{(0)}_{\mu\nu})^{-1} &= k^2(A_{\mu\nu} + B_{\mu\nu} + \frac{1}{\xi} E_{\mu\nu}) \end{aligned} \tag{A.7}$$

Die Selbstenergie ausgedrückt durch die Entwicklungskoeffizienten a, b, c und e des inversen vollen Propagators in einer kovarianten Eichung mit Eichparameter ξ lautet demzufolge

$$\Pi_{\mu\nu} = (a - k^2)A_{\mu\nu} + (b - k^2)B_{\mu\nu} + cC_{\mu\nu} + (e - \frac{k^2}{\xi})E_{\mu\nu} \tag{A.8}$$

und für die Entwicklungskoeffizienten gilt

$$\Pi_A = (a - k^2), \qquad \Pi_B = b - k^2, \qquad \Pi_C = c, \qquad \Pi_E = e - \frac{k^2}{\xi} \tag{A.9}$$

Ward-Identitäten geben allgemein einen Zusammenhang zwischen Eichbedingungen und n-Punkt Funktionen. Für den Propagator in einer kovarianten Eichung hat man $k_\mu k_\nu D_{\mu\nu} = \xi$. Dies liefert eine Beziehung zwischen b, c und e

$$e = \frac{k^2}{\xi} + \frac{c^2}{2b} \tag{A.10}$$

so daß $\Pi_E = \frac{c^2}{2b}$ ist. Unter Ausnutzung der Ward-Identität ist der volle Propagator, ausgedrückt durch die Entwicklungskoeffizienten der Selbstenergie:

$$D_{\mu\nu} = \frac{1}{\Pi_A + k^2} A_{\mu\nu} + [\frac{1}{\Pi_B + k^2} + \frac{\Pi_C^2}{2(\Pi_B + k^2)^2 k^2}\xi] B_{\mu\nu} - \frac{\Pi_C}{(\Pi_B + k^2)k^2}\xi C_{\mu\nu} + \frac{\xi}{k^2} E_{\mu\nu} \tag{A.11}$$

Für die Landau-Eichung reduziert sich der Ausdruck auf

$$D_{\mu\nu} = \frac{1}{\Pi_A + k^2} A_{\mu\nu} + \frac{1}{\Pi_B + k^2} B_{\mu\nu} \tag{A.12}$$

A.3 Propagator aus zwei Funktionen

In der Landau-Eichung reicht die Kenntnis zweier Größen, um die gesamte Tensorstruktur des Propagators zu erfassen. Die Größen sind die $(0,0)$-Komponente des Propagators und die Spur über die räumlichen Diagonalelemente $\sum_i D_{ii}$. Für D_{00} in der Landau-Eichung ist nach A.12

$$D_{00} = \frac{1}{\Pi_A + k^2} A_{00} + \frac{1}{\Pi_B + k^2} B_{00} = \frac{1}{\Pi_B + k^2} \frac{\boldsymbol{k}^2}{k^2} \tag{A.13}$$

und analog

$$\begin{aligned} D_{ii} &= \frac{1}{\Pi_A + k^2} A_{ii} + \frac{1}{\Pi_B + k^2} B_{ii} \\ &= \frac{1}{\Pi_A + k^2} - \frac{k_i^2}{(\Pi_A + k^2)\boldsymbol{k}^2} + \frac{1}{\Pi_B + k^2} \frac{1}{k^2} \frac{k_0^2 k_i^2}{\boldsymbol{k}^2} \\ &= \frac{1}{\Pi_A + k^2}(1 - \frac{k_i^2}{\boldsymbol{k}^2}) + D_{00} \frac{k_0^2 k_i^2}{\boldsymbol{k}^2 \boldsymbol{k}^2} \end{aligned} \tag{A.14}$$

Die Spur ist dann einfach

$$\sum_i D_{ii} = \frac{2}{\Pi_A + k^2} + D_{00} \frac{k_0^2}{\boldsymbol{k}^2} \tag{A.15}$$

Im folgenden wird nun die Abhängigkeit der Nicht-Diagonal-Elemente des Propagators von D_{00} und $\sum_i D_{ii}$ angegeben.

$$D_{0i} = D_{i0} = -\frac{1}{\Pi_B + k^2} \frac{1}{k^2} k_0 k_i = -D_{00} \frac{k_0 k_i}{\boldsymbol{k}^2} \tag{A.16}$$

$$\begin{aligned} D_{ij} &= -\frac{1}{\Pi_A + k^2} \frac{k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2} + \frac{1}{\Pi_B + k^2} \frac{1}{k^2} \frac{k_0^2 k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2} \\ &= \big[\frac{1}{2} D_{00} \frac{k_0^2}{\boldsymbol{k}^2} - \frac{1}{2} \sum_l D_{ll}\big] \frac{k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2} + D_{00} \frac{k_0^2 k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2 \boldsymbol{k}^2} \\ &= \frac{3}{2} D_{00} \frac{k_0^2 k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2 \boldsymbol{k}^2} - \frac{1}{2} \sum_l D_{ll} \frac{k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2} \end{aligned} \tag{A.17}$$

Für die Abschirmmassen ist der Limes $k_0 = 0$, $\boldsymbol{k} \to 0$ relevant. In diesem Limes sind

$$\begin{aligned} D_{00}(k_0 = 0, \boldsymbol{k} \to 0) &= \frac{1}{\Pi_B} \\ \sum_i D_{ii}(k_0 = 0, \boldsymbol{k} \to 0) &= \frac{2}{\Pi_A} \end{aligned} \tag{A.18}$$

Anhang B

Aspekte der Programmimplementierung

B.1 Konzept

Ergebnisse, wie sie im Abschnitt 3.1 erläutert wurden, sind das Resultat von Computersimulationen. Die Qualität der dazu verwendeten Programme wird in erster Linie von den Ergebnissen und den im nächsten Abschnitt untersuchten Laufzeiten bestimmt. Es existieren aber noch wichtige andere Aspekte einer Programmimplementation, die in diesem Teil etwas beleuchtet werden sollen.

Gängige Paradigmen in der Softwareentwicklung favorisieren eine Unterteilung des Programmes in Einzelstücke (*components*), die bei Bedarf verändert oder ausgetauscht werden können, ohne die anderen Teile zu beeinflußen. Dazu ist eine wohldefinierte Schnittstelle zwischen den einzelnen Teilen erorderlich. In der hier entwickelten Metacomputing-Anwendung befinden sich die einzelnen Komponenten nicht nur auf einem einzelnen Rechner sondern sind über zwei Rechner verteilt, die zusätzlich nicht binärkompatibel sind, d.h. Programme des einen Rechner sind auf dem anderen nicht lauffähig. Zusätzlich stehen nicht nur die beschriebene QH2 der Firma Quadrics zur Verfügung, sondern weitere Modelle dieser Firma, die sich durch Anzahl und Topologie der Rechenknoten unterscheiden. Ein weiteres Ziel der Implementierung ist daher gewesen, eine einheitliche Schnittstelle für diese Rechner zu schaffen, so daß sich der Benutzer um Einzelheiten wie die erwähnte Knotentopologie (und damit das – für die Quadrics-Rechner – unterschiedliche I/O-Format) nicht zu kümmern braucht. Dies ist ein erster Schritt zu einer einheitlichen Benutzerschnittstelle, wie sie in Metacomputing-Anwendungen im Idealfall gefordert wird.

Da die Reihenfolge, in der die Knoten der Quadrics I/O betreiben, von der Hardware festgelegt wird, muß dies in dem Programmteil auf der CC-48 berücksichtigt werden, weil die Daten auch in entsprechender Form über die Leitung verschickt werden. Bei der Entwicklung des Programmteils für die CC-48 wurde ebenfalls darauf geachtet, daß dieser Teil nicht nur auf besagtem Rechner sondern auf den unterschiedlichsten Plattformen, die *MPI* unterstützen, lauffähig ist. So ist der Programmteil z.B. auf den Plattformen *SCI Cluster PSC1*, einer *Cray T3D* und *Cray J90* mit Erfolg gelaufen. Auch hier müssen unterschiedliche Knoten-Topologien berücksichtigt werden. Das *MPI* bietet aber hierfür unterstützende Funktionalität.

Die Landau-Eichung mit Fourier-Beschleunigung ist bei weitem nicht die einzige Möglichkeit der Eichung von Eichfeldern. So gibt es – wie beschrieben – mehrere Verfahren zur Landau-Eichung und darüber hinaus sind vielfach auch andere Eichungen wie axiale Eichungen oder λ-Eichung von Interesse. Im Sinne der *component*-Programmierung ist das Programm so entwickelt worden, daß es sich um die verschiedenen Verfahren leicht erweitern läßt. Auch eine Ausdehnung auf andere Arten von QCD-Gittersimulationen ist mit den vorhandenen Programmstrukturen ohne erheblichen Aufwand möglich. Auch dies ist der Orientierung an dem beschriebenen Paradigma zuzuschreiben. Dort wo die Performance eine wichtige Rolle spielt, muß natürlich auf allgemeine Ansätze verzichtet werden. Es ist aber gelungen, die notwendigen Spezialisierungen in den allgemeinen Kontext einzubetten.

B.2 Benutzerschnittstelle

Da QCD-Simulationen kaum im interaktiven Betrieb durchgeführt werden, ist die Schnittstelle auf den *batch*-Betrieb hin entwickelt worden. Die zur Simulation notwendigen Parameter werden daher in einer Datei zusammengefaßt. Zur Erleichterung der Klassifizierung und Verwaltung der Ergebnisse ist die Datei aus Klartext aufgebaut, den ein Mensch lesen kann (*human readable code*).

Die Daten, die man für die Simulationen auf Parallelrechnern benötigt, können grob in vier Bereiche aufgeteilt werden. Die verwendete Knotentopologie des Parallelrechners, die Eingabeoptionen für die Daten, die bearbeitet werden sollen (dies sind in diesem Fall die erzeugten Konfigurationen), die Optionen für die Ausgabe, die hier bestimmen, welche Observablen gemessen werden sollen, und die eigentlichen Simulationsparameter. Dieser Aufteilung folgt das Parameterfile (s.u. für ein Beispiel). Erweiterungen auf andere Eichfixierungsalgorithmen oder andere Arten von QCD-Simulationen bestehen in der Ergänzung der jeweiligen Abschnitte. Diese Parameterfiles können auch als Ausgangsbasis zur automatischen Speicherung der Ergebnisse in Datenbanken dienen.

Es folgt ein Beispiel für den Aufbau des Parameterfiles. Dieses Beispiel kann in der hier vorliegenden Form von dem Programm gelesen werden — vorausgesetzt, die Umgebungsvariablen '${INPUTDIRECTORY}' und '${OUTPUTDIRECTORY}' sind gesetzt.

```
# Dies ist ein Beispiel für ein parameterfile


# Beschreibung der Topology des Rechners. Diese wird als ein
# vierdimensionales Gitter angesehen. Ein Eintrag '0' für eine
# Richtung bedeutet dabei, daß MPI die Anzahl der Knoten in
# dieser Richtung festlegen soll. Im Beispiel unten ist nur die
# '\tau'-Richtung mit einem Rechenknoten festgelegt.

[Topology]
Nodes              : 0x0x0x1


# Einstellungen zur Simulation. In diesem Abshcnitt wird festgelegt,
# wie groß das Simulationsgitter ist, welche Art der Eichung benutzt
# werden soll, wie viele Iterationsschritte gemacht werden sollen etc.

# 'ConfSeries' legt fest, welche Konfigurationen bearbeitet werden
# sollen. Die Zahlen werden an den Konfigurationsnamen angehängt, der
# im Abschnitt [Input] oder [Output] festgelegt wird.
# Im Beispiel unten werden also die Konfigurationen 'taoconf_6',
# 'taoconf_10' bis einschließlich 'taoconf_25' und 'taoconf_30',
# 'taoconf_32' und 'taoconf_34' bearbeitet

[Simulation]
Lattice            : 32x32x32x4
```

```
Gauge              : Landau
Method             : Fourier
ConfSeries         : 6,(10-25),(30-35):2
MaxIterations      : 1400


# Festlegung der Eingabeparameter. Hier wird der Rohname der Kon-
# figurationen festgelegt, an den -- wie beschrieben -- die Nummern
# angehängt werden.
# Es folgen Einstellungen, wo die Konfigurationen zu finden sind (Directory)
# und mit welcher Maschine sie erzeugt worden sind (Machine)
# Fehlt der Konfigurationsname (Configuration) so muß hier der Parameter
# 'Hostname' gesetzt werden, der festlegt mit welchem Rechner über
# PLUS kommuniziert werden soll.

[Input]
Configuration      : taoconf_
Directory          : ${INPUTDIRECTORY}
Machine            : QH1


# Hier wird angegeben, welche Daten und Ergebnisse gesichert werden
# sollen.  Wird 'Configuration' angegeben, wird die geeichte Konfiguration
# gespeichert. Werden die anderen Parameter angegeben, so werden die ent-
# sprechenden Daten unter diesem Dateinamen in dem angegeben Directory
# gespeichert. Wie oben werden auch hier die Werte von Umgebungsvariablen
# durch ihre Werte ersetzt. In dem Beispiel unten werden die Daten
# in einem Format geschrieben, welches die Quadrics QH2 ohne weiteres
# verabeiten kann.

[Output]
Configuration      : new_conf_
Directory          : ${OUTPUTDIRECTORY}
Machine            : QH2
Propagator         : propagator_
PartialPropagator : part_prop_
SpatialPropagator : spat_prop_
Theta              : theta_
```

B.3 Performance Details

Zur Beurteilung der gemessenen Programmlaufzeiten werden noch einmal die Daten eines Prozessors der CC-48 angegeben:

Taktrate	133 Mhz
Peak-Performance	266 MFLOP/s (*floating point operations per second*)

Für eine Fouriertransformation des gesamten *link*-Feldes, das $N = 32^3 \times 4 \times 4\ SU(3)$-Matrizen enthält, benötigt man $9 \cdot \frac{N}{2} \log_2 N = 44826624$ *butterflies*. Jeder *butterfly* besteht aus 10 *FLOPs*. Da das *link*-Feld symmetrisch auf die N_{proc} Knoten verteilt wird, müssen auf jedem Knoten $\frac{44826624}{N_{\text{proc}}}$ *FLOPs* zur Berechnung der Fourier-Transformation ausführen.

In einer parallelen Implementation kann man drei Bereiche identifizieren, die zur Berechnung notwendig sind: (i) der reine Rechenteil, der auf jedem Knoten die *butterflies* berechnet, (ii) die Kommunikation zwischen den Knoten und (iii) der dazu notwendige Verwaltungsaufwand. Da die Kommunikation im wesentlichen den Austausch von ganzen Datenblöcken zwischen jeweils zwei Prozessoren umfasst, besteht der Verwaltungsaufwand in der Zwischenspeicherung eines Blockes, um ein Überschreiben eines Blockes durch die Daten des anderen Prozessors zu verhindern, bevor der erste Prozessor seine Daten verschickt hat.

Es wurden folgende Zeiten gemessen:

Bereich	Anzahl Prozessoren	Zeit [s]
(i)	4	0.967 (für 112 066 560 FLOPs)
	8	0.4798 (für 56 033 280 FLOPs)
(ii)	4	0.274
	8	0.202
(ii) + (iii)	4	1.072
	8	0.892

Tabelle B.1: Gemessene Zeiten für die im Text erklärten Bereiche (i), (ii) und (iii)

Gemessen an der Peak-Performance jedes einzelnen Rechenknotens heißt das, daß die in dieser Arbeit vorgenommene Implementierung auf der CC-48 folgende Performance erreicht:

Bereich	Anzahl Prozessoren	Prozent Peak
(i)	4	43
	8	44
(i)+(ii)	4	34
	8	31
(i)+(ii)+(iii)	4	21
	8	15

Tabelle B.2: Leistungsdaten gemessen an der maximal möglichen Anzahl von Operationen pro Sekunde

Für die Eichfixierung wurde in der Simulation eine dreidimensionale, gitterförmige Anordnung der Rechenknoten mit jeweils n_x, n_y bzw. n_z Knoten in jeder Richtung benutzt. Aufgrund der verwendeten Ausdehnung des untersuchten Gitters von $N_\tau = 4$ ist es nicht sinnvoll, in dieser Richtung mehrere Knoten zu verwenden. Das Schema für die *butterflies* läßt sich leicht auf mehrere Dimensionen übertragen. Insgesamt benötigt man $\log_2 n_x + \log_2 n_y + \log_2 n_z$ Kommunikationsschritte bei der Berechnung der Fourier-Transformation. Dies bezieht sich wiederum auf den hier verwendeten Spezialfall $n_x = 2^{a_x}$, $n_y = 2^{a_y}$ und $n_z = 2^{a_z}$, $a_i \in \mathbb{N}$. Jeder Knoten verschickt in jedem dieser Schritte die Hälfte seiner Datenmenge (siehe Implementierung auf einem distributed memory system).

Die gemessenen Kommunikationszeiten entsprechen einem Durchsatz von 16 MB/s für vier bzw. 11 MB/s für acht Knoten.

Anhang C

Programmtests

Das Entwicklen von Software (*software engineering*) kann grob in vier miteinander interagierende Bereiche unterteilt werden: Spezifikation, Design, Verifikation und Management (siehe Lehrbücher wie z.B. [58]). Die Spezifikation als abstrakte Beschreibung der Software bildet dabei die Grundlage für das Design und letzlich die Implemetierung der Software. Vielfach verwendet man formale Spezifikationstechniken, die das Zusammenspiel mit der Implementierung wesentlich vereinfachen können. Außerdem sorgen sie für die Konsistenz der Spezifikation in verschiedenen Detailstufen. Ein wesentlicher Bestandteil der Software-Entwicklung ist die Verifikation und Validation. Hier wird das Software-Produkt darauf geprüft, daß die Spezifikation eingehalten wird (Verifikation) und daß auch tatsächlich das Produkt entwickelt wird, das gewünscht wird (Validation). Die Validation entspricht also einem Überprüfen der Spezifikation.

Bei der Entwicklung des Eichfixierungsprogrammes in dieser Arbeit wurde versucht, trotz fehlender *CASE (Computer Added Software Engineering)*-Werkzeuge, viele der Prinzipien des Software-Engineerings und Anregungen dazu (z.B. aus [59]) zu verwenden.

Die Korrektheit eines Programmes läßt sich bis auf einfache Ausnahmen nicht beweisen. Daher müssen verschiedene Tests Indizien für die Korrektheit des Produktes liefern. Im folgenden sollen daher die wichtigsten Tests beschrieben werden, die zur Überprüfung der Implementierung verwendet wurden.

C.1 Topologie der Knoten

C.1.1 Verteilung der Daten

Wie schon im Abschnitt über die Implementierung der FFT auf Systemen mit verteiltem Speicher erwähnt, werden die dem Problem zugrundeliegenden Daten auf die einzelnen Rechenknoten verteilt. Für den hier betrachteten Fall bedeutet dies, daß die Linkfeldkonfigurationen U auf die Knoten verteilt werden. Da die *MPI*-Spezifikation keine Aussage über die Ein- und Ausgabefähigkeiten der einzelnen Rechenknoten macht, wird das I/O auf einem einzelnen Knoten, dem *root*-Knoten, durchgeführt. Dieser interagiert mit dem Dateisystem (d.h. Festplatte oder Bandlaufwerk) oder mit dem Quadrics-*front-end* über das PLUS-Protokoll. Diesem Knoten wird weiterhin die Aufgabe übertragen, die Daten geeignet auf die anderen Knoten zu verteilen oder Daten von diesen Knoten zu empfangen, die aus Kompatibilitätsgründen als nicht I/O-fähig angenommen werden.

Um das Verteilen einer von der Quadrics erzeugten Linkfeldkonfiguration auf die einzelnen Rechenknoten zu testen, wird eine Linkfeldkonfiguration generiert, die in jeder Linkvariable eine eindeutige Identifikation der globalen Gitterposition und der Ausrichtung enthält (Natürlich sind die Elemente $U_\mu(x)$ dieser Konfiguration keine Elemente der $SU(3)$ mehr). Bei einer Gitterausdehnung von

$N_\sigma^3 \times N_\tau$ wird der Realteil von $(U_\mu(x,y,z,t))_{i,i}$ mit dem Wert $3 \cdot (x + N_\sigma y + N_\sigma^2 z + n_\sigma^3 t + N_\sigma^3 N_\tau \mu) + i$ belegt. Diese Konfiguration wird dann mit dem zu testenden Programmteil auf der CC-48 aus einer Datei oder über die Leitung zwischen den Rechnern in Bielefeld und Paderborn gelesen. Jeder Knoten der CC-48 kann aus seiner Position in der gitterförmigen Knotenanordnug und den lokalen Koordinaten l_x, l_y, l_z, l_t und μ die globale Position eines lokalen Elementes $U_\mu(l_x, l_y, l_z, l_t)$ bestimmen und mit dem vorgegebenen Einträgen dieses U_μ vergleichen.

Bei beliebigen Anordnungen der Knoten der CC-48 sind diese Tests erfolgreich verlaufen, so daß die Korrektheit der Datenverteilung angenommen werden darf.

C.1.2 Anordnung der Knoten und Kommunikation

Für die Berechnung der Eichtransformation nach Glg 1.54, wie sie in dem Eichfixierungsteil verwendet wird, und der zur Berechnung von Θ benötigten Größe $\Delta_\mu(x)$, ist an den Grenzen in μ-Richtung Kommunikation zu den Nachbarknoten in dieser Richtung nötig — falls diese exsistieren. Die Elemente $g^\dagger(x + \hat{\mu}a)$ bzw. $U_\mu(x + \hat{\mu}a)$ liegen dabei auf demjenigen Knoten, mit einer um eins größeren Koordinate in der Gitteranordnung der Knoten. Die Daten, die der Knoten mit der Koordinate i zur Berechnung der o.g. Größen benötigt, liegen also auf dem Knoten mit der Koordinate $i+1$. Die Kommunikation ist in dem Programm so implementiert, daß jeweils ganze Scheiben an die entsprechenden Knoten versendet werden.

Als Ausgangsbasis für den Test auf die Richtigkeit der Kommunikation dient die im vorigen Abschnitt definierte Linkfeldkonfiguration. Nach dem Erhalt der Scheibe kann man auf dem Knoten i die globalen Positionen berechnen, die in der Scheibe enthalten sein müssen und mit den tatsächlich empfangenen Werten vergleichen. Für beliebige Richtungen μ, beliebige Knotenanordnungen und unter der Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen konnte der korrekte Datenaustausch verifiziert werden. Dies ist gleichzeitig auch ein Test der Knotengeometrie, da dadurch die richtigen Nachbarschaftsbeziehungen überprüft werden.

C.2 Korrektheit der FFT-Implementierung

Da die Fast-Fourier-Transformation ein zentraler Baustein des Programmes ist – sie wird sowohl in der Eichfixierungsroutine als auch bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen im Impulsraum verwendet – werden die vorgenommenen Tests zur Korrektheit der Implementierung hier erläutert.

Die Tests beruhen zum einen darauf, daß man die Fourier-Transformation einiger einfacher Funktionen explizit berechnen kann, und zum anderen auf bestimmten Eigenschaften der Transformation, wie z.B. der Tatsache, daß symmetrische, periodische, reelle Funktionen eine reelle Fourier-Transformation haben.

Nachdem sichergestellt ist, daß die Daten richtig auf die Knoten verteilt werden, kann man Konfigurationen erzeugen, die einer bestimmten Funktion entsprechen, z.B. der Funktion $\Theta(x) - \Theta(x - L)$ (Θ ist dabei die Stufenfunktion). Die Einträge der $U_\mu(x)$ sind dabei 0 bis auf diejenigen $U_\mu(x)$ mit $x_i \in [0; L]$, die auf 1 gesetzt werden. Das Ergebnis der Fast-Fourier-Transformation in einer beliebigen Richtung i wird mit einem expliziten, d.h. nicht Fourier-beschleunigten, Algorithmus verglichen. Als zusätzliche Bestätigung wird dieses Ergebnis anhand der erwarteten Fourier-Transformation überprüft. Beide Tests sind erfolgreich und geben so Indizien für die Korrektheit der Implementierung auf einer beliebigen Anzahl von Knoten. Darüberhinaus wurde eine Konfiguration erzeugt, die eine symmetrische, reelle Verteilung von Werten enthält, d.h. $U_\mu(x,y,z,t) = U_\mu(N_\sigma - x, y, z, t)$. Die Werte sind dabei bis auf die Symmetrieeigenschaften zufällig. Für diesen Test ergaben die Programmläufe mit verschiedenen Knotenanordnungen eine reellwertige Fourier-Transformation – bis auf Rechenungenauigkeiten in der Größenordung von 10^{-9} – so daß von der Richtigkeit der Implementierung der Fourier-Transformation ausgegangen werden kann.

C.3 Eichfixierung

Derjenige Programmteil, in dem die Eichfixierung durchgeführt wird, muß im wesentlichen zwei Dinge erfüllen. Zum einen muß das Gitteräquivalent Θ von $|\partial_\mu A_\mu|$ unter eine vorgegeben Grenze ϵ gedrückt werden, und zum anderen dürfen sich eichinvariante Größen bei diesem Prozeß nicht ändern. Das Verhalten von Θ ist bereits im Abschnitt über Eichfixierungsalgorithmen erläutert worden (s. Abb. 2.2), soll aber durch die folgende Tabelle untermauert werden.

Iterationsschritt	Θ
0	$14,1988$
10	$3,33343$
20	$0,05931$
$\vdots$	$\vdots$
100	$2,08453 \cdot 10^{-5}$
110	$8,81094 \cdot 10^{-6}$
$\vdots$	$\vdots$
200	$3,33840 \cdot 10^{-9}$
210	$1,07598 \cdot 10^{-9}$
220	$4,12227 \cdot 10^{-10}$

Tabelle C.1: Ausschnitt aus den Werten für Θ bei der Eichung einer Konfiguration

Indizien für die Richtigkeit der Implementierung der Θ-Funktion liefert der Vergleich mit einer ähnlichen Untersuchung für $SU(3)$-Eichfelder [41] und der Vergleich des Wertes von $\Theta = 14,2$, den man für eine ungeeichte Konfiguration erwartet, mit dem Anfangswert von Θ für die ungeeichte Konfiguration aus obiger Tabelle.

Die Eichinvarianz ist mit Hilfe des Plakett-Erwartungswertes und des Erwartungswertes für den Polyakov-Loop überprüft worden. In beiden Fällen unterscheiden sich die Werte für diese Größen vor und nach der Eichung nur durch Rechenungenauigkeiten in der Größenordnung von 10^{-8}. Außerdem stimmen die Werte mit denjenigen überein, die von dem Konfigurationserzeugungsprogramm auf der Quadrics berechnet werden. Ein weiterer Test der Eichfixierung besteht in der Analyse des gemischten Propagators $G_{33}(0,0,z,0)$, wie er im Ergebnisteil durchgeführt wurde. Auch daraus läßt sich ersehen, daß die Eichfixierung korrekt durchgeführt wird.

C.4 Berechnung der Korrelationsfunktion

Für die Durchführung des letzten Testes zur Eichfixierung im vorigen Abschnitt ist die richtige Berechnung der Korrelationsfunktion eine Voraussetzung. Da diese auch als Observable der Simulation benutzt werden, um daraus physikalische Informationen zu extrahieren, soll hier näher auf die durchgeführten Tests eingegangen werden.

In einem ersten Schritt wird dazu auf einer geeichten Linkfeldkonfiguration das entsprechende A_μ mit einem unabhängigen Programm berechnet. Dieses ist zu diesem Zweck auf einer *single processor*-Maschine neu geschreiben worden und benutzt keine Teile aus der parallelen Implementierung. Das so erhaltene A_μ wird mit dem von dem eigentlichen Programm berechneten A_μ verglichen, indem die Unterschiede zwischen beiden Eichfeldkonfigurationen Eintrag für Eintrag für das gesamte Gitter aufsummiert werden. Für die aufsummierte Abweichung erhält man auf einer ausgewählten Linkfeldkonfiguration einen Wert von $6,6 \cdot 10^{-3} + 0i$, was einer durchschnittlichen Abweichung der Matrixeinträge in der Größenordnung von 10^{-9} entspricht. Dies heißt, daß die A_μ richtig berechnet werden. In einem nächsten Schritt wird dann ein unabhängiges Programm erstellt, das ebenfalls die Korrelationsfunktion $\mathrm{Tr}\langle A_\mu(x) A_\mu(0)\rangle$ berechnet. Das Ergebnis stimmt mit den Korrelationsfunktionen, die auf der CC-48 berechnet werden, bis auf Rechenungenauigkeiten in der Größenordnung von 10^{-7} pro Element der Korrelationsfunktionen überein.

Als ein weiter Test nicht nur für die Korrelationsfunktion, sondern auch für die gesamte Eichfixierung, ist diese einmal in einfacher und einmal in doppelter Genauigkeit durchgeführt worden – ausgehend von derselben Linkfeldkonfiguration des Quadrics-Programmes. Es sind dann die aus beiden Simulationsvorgängen erhaltenen Korrelationsfunktionen miteinander verglichen worden. Für die über das gesamte Gitter aufsummierte Abweichung der Elemente der Korrelationsfunktion erhält man einen Wert von $0,0895 + 6 \cdot 10^{-4}i$. Dies entspricht einer durchschnittlichen Abweichung von $1,7 \cdot 10^{-7} + 1 \cdot 10^{-9}i$ pro Element. Aufgrund der Größe der aufsummierten Abweichung sind auch die relativen Abweichungen untersucht worden. Bei einer maximalen relativen Abweichung von $0,48$ für die Realteile erhält man für die aufsummierte relative Abweichung einen Wert von $6,87 + 2 \cdot 10^{14}i$ oder eine durchschnittliche relative Abweichung von $1,3 \cdot 10^{-5}$ der Realteile. Der große relative Unterschied in den imaginären Teilen ist eine Folge davon, daß diese Einträge in der Nähe der 0 sind, d.h. in den Größenordnungen von 10^{-9} für einfach genaue Zahlen und 10^{-17} für doppelt genaue Zahlen. Die maximale relative Abweichung tritt bei Werten von $-2,7 \cdot 10^{-7} + i$ für die einfach genaue bzw. $-5,14 \cdot 10^{-7} + 0i$ für die doppelt genaue Korrelationsfunktion auf.

Diese Untersuchungen legen es nahe, daß die Simulationsergebnisse nur in Wertebereichen, die größer als 10^{-6} sind, irrelevante numerische Ungenauigkeiten enthalten. Zur weiteren Überprüfung der Aussagefähigkeit der Resultate aus der Simulation sind daher die Zwischengrößen, wie U_μ und A_μ, analysiert worden. Die Einträge von sowohl U_μ als auch A_μ bewegen sich dabei in der Größenordnung von 10^{-1} bis 10^{-2}. Vereinzelt treten Größenordnungen von 10^{-3} auf.

Es bleibt also festzustellen, daß die in dieser Simulation auftretenden numerischen Ungenauigkeiten in den Ergebnissen eine Größenordnung von 10^{-7} haben.

Literaturverzeichnis

[1] HAN, M. Y. und Y. NAMBU. *Phys. Rev.*, 139 B:1006, 1965.

[2] FRITZSCH, H., M. GELL-MANN und H. LEUTWYLER: *Advantages of the Color Octet Gluon Picture*. Phys. Lett., 47B:365, 1973.

[3] BELLAC, MICHEL LE: *Thermal Field Theory*. Cambridge University Press, 1996.

[4] RYDER, LEWIS H.: *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, 1985.

[5] SCHWINGER, J.: *Particles, Sources and Fields*. Addison-Wesley, 1970.

[6] ABERS, E. S. und B. W. LEE: *Gauge Theories*. Phys. Rep., C 9(1):1–141, 1973.

[7] WELDON, H.: *Structure of the gluon propagator at finite temperature*. Annals Phys., 271:141 – 156, 1999.

[8] BRAATEN, E. und R. D. PISARSKI: *Soft Amplitudes in Hot Gauge Theories: A General Analysis*. Nucl. Phys., B 337:569, 1990.

[9] BRAATEN, E. und R. D. PISARSKI: *Deducing Hard Thermal Loops from Ward Identies*. Nucl. Phys., B 339:310, 1990.

[10] REBHAN, A. K.: *Nonabelian Debye screening in one-loop resummed perturbation theory*. Nucl. Phys., B 430:319, 1994.

[11] KOBES, R., G. KUNSTATTER und A. REBHAN. *Phys. Rev. Lett*, 64:1, 1990.

[12] KAJANTIE, K. und J. KAPUSTA: *Behaviour of Gluons at High Temperature*. Ann. Phys., 160:477–513, 1985.

[13] MCLERRAN, LARRY D. und BENJAMIN SVETITSKY: *Quark Liberation at High Temperature: A Monte Carlo study of SU(2) gauge theory*. Phys. Rev., D 24,2:450, 1981.

[14] NADKARNI, S.: *Non-Abelian Debye screening. II. The singlet potential*. Phys. Rev., D 34:3904, 1986.

[15] FADEEV, L. D. und V. N. POPOV. *Phys. Lett.*, 25B:29, 1967.

[16] GRIBOV, V. N. *Nucl. Phys.*, B 139:1, 1978.

[17] FISHER, M. E. *Rev. Mod. Phys.*, 70:653, 1998.

[18] LEADER, ELLIOT und ENRICO PREDAZZI: *An introduction to gauge theories and modern particle physics*. Cambridge University Press, 1996.

[19] POLITZER, H. D. *Phys. Rev. Lett.*, 26:1346, 1973.

[20] GROSS, D. und F. WILCZEK. *Phys. Rev. Lett.*, 26:1343, 1973.

[21] GUPTA, R.: *Scaling, The Renormalization Group and Improved Lattice Actions*. In: CREUTZ, M. (Herausgeber): *Quantum Fields on the Computer*. World Scientific, 1992.

[22] WILSON, K. G.: *Confinement of Quarks*. Phys. Rev., D 10:2445, 1974.

[23] GUPTA, R.: *Introduction to Lattice QCD*. hep-lat/9807028.

[24] WEISZ, P.: *Continuum Limit Improved Lattice Action for Pure Yang-Mills Theory (I)*. Nucl. Phys., B 212:1, 1983.

[25] WEISZ, P. und R. WOHLERT: *Continuum Limit Improved Lattice Action for Pure Yang-Mills Theory (II)*. Nucl. Phys., B 236:397, 1984.

[26] WEISZ, P. und R. WOHLERT: *ERRATUM zu [25]*. Nucl. Phys., B 247:544, 1984.

[27] ROTHE, HEINZ J.: *Lattice Gauge Theories*. World Scientific, 2 Auflage, 1997.

[28] FUCHS, J. und CHRISTOPH SCHWEIGERT: *Symmetries, Lie Algebras and Representations*. Cambridge University Press, 1997.

[29] CABIBBO, N. und E.MARINARI. *Phys. Lett.*, 119 B:387, 1982.

[30] RANK, J.: *Eichabhängige Korrelationsfunktionen in der Hochtemperaturphase der reinen SU(2)-Gittereichtheorie*. Diplomarbeit, Universität Bielefeld, 1995.

[31] MARINARI, E., C. PARRINELLO und R. RICCI. *Nucl. Phys. B*, 362:487, 1991.

[32] CUCCHIERI, A.: *Gribov Copies in the Minimal Landau Gauge: the Influence on Gluon and Ghost Propagators*. hep-lat/9705005, 1997.

[33] GRIMSHAW, ANDREW, ADAM FERRARI, GREG LINDAHL und KATHERINE HOLCOMB: *Metasystems*. Comm. of the ACM, 41(11):46, 1998.

[34] GABRIEL, E., M. RESCH, T. BEISEL und R. KELLER: *Distributed computing in a heterogenous computing environment*. In: ALEXANDROV, V. und J. DONGARRA (Herausgeber): *Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface*. Springer, 1998.

[35] REINEFELD, A., J. GEHRING und M. BRUNE: *Communication across parallel message-passing environments*. Journal of Systems Architecture, 44, 1997.

[36] NUMMELIN, E.: *General Irreducible Markov-Chains and Non-negatiove Operators*. Cambridge University Press, 1984.

[37] MEYN, S. P. und R. L. TWEEDIE: *Rates of convergence for Hastings and Metropolis algorithms*. Technischer Bericht Department of Statistics, Colorado State University.

[38] HASTINGS, W. K.: *Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications*. Biometrika, 57:97, 1970.

[39] METROPOLIS, N., A. W. ROSENBLUTH, M. N. ROSENBLUTH, A. H. TELLER und E. TELLER: *Equations of state calculations by fast computing machine*. J. Chem. Phys., 21:1087, 1953.

[40] CREUTZ, M.: *Overrelaxation and Monte Carlo simulation*. Phys. Rev., D 36:515, 1987.

[41] DAVIES, C. T. H. *Phys. Rev. D*, 37:1581, 1988.

[42] COOLEY, JAMES W. und JOHN W. TUKEY: *An Algorithm for the Machine Calculation of Complex Fourier Series*. Mathematics of Computation, 19(90):297–301, 1965.

[43] GENTLEMAN, W. M. und G. SANDE: *Fast Fourier Transforms—For Fun and Profit*. In: *Fall Joint Computer Conference*, Band 29 der Reihe *AFIPS Conference Proceedings*, Seiten 563–578. Spartan Books, Washington, D.C., 1966.

[44] FRIGO, MATTEO und STEVEN G. JOHNSON: *The Fastest Fourier Transform in the West*. Technischer BerichtMIT-LCS-TR-728, Massachusetts Institute of Technology, 1997.

[45] ANONYMOUS: *MPI: A Message-Passing Interface Standard*. The International Journal of Supercomputer Applications and High Performance Computing, 8(3/4):159–416, Fall/Winter 1994.

[46] LIPPERT, T., K. SCHILLING, FEDERICO TOSCHI, SVEN TRENTMAN und RAFFAELE TRIPICCIONE: *FFT for the APE Parallel Computer*. Int. J. Mod. Phys., C8:1317, 1997.

[47] QUENOUILLE, M. H.: *Notes on bias in estimation*. Biometrika, 43:353, 1956.

[48] FINGBERG, J., U. M. HELLER und F. KARSCH. *Nucl. Phys.*, B 392:493.

[49] BALI, G. S. und K. SCHILLING: *Running coupling and the Λ parameter from SU(3) lattice simulations*. Phys. Rev., D 47:661, 1993.

[50] BEINLICH, B., F. KARSCH und E. LAERMANN: *Improved Actions for QCD Thermodynamics on the Lattice*. Nucl. Phys., B 462:415, 1996.

[51] PEIKERT, A.: *Latente Wärme und Oberflächenspannung in der SU(3) Gittereichtheorie mit verbesserten Wirkungen*. Diplomarbeit, Universität Bielefeld, 1997.

[52] MARENZONI, P., G. MARTINELLI und N. STELLA: *The gluon propagator on a large volume, at $\beta = 6.0$*. Nucl. Phys., B 455:339, 1995.

[53] BERNARD, C., C. PARRINELLO und A. SONI: *Lattice study of the gluon propagator in momentum space*. Phys. Rev., D 49:1585, 1994.

[54] HELLER, U. M., F. KARSCH und J. RANK: *The Gluon Propagator at High Temperature: Screening, Improvement and Non-Zero Momenta*. Phys. Rev., D 57:1438, 1998.

[55] LEINWEBER, DEREK B., JON IVAR SKULLERUD, ANTHONY G. WILLIAMS und CLAUDIO PARRINELLO: *Asymptotic Scaling and Infrared Behavior of the Gluon Propagator*. hep-lat/9811027.

[56] GAO, MINGSHEN: *Debye screening in the QCD gluonic plasma*. Phys. Rev., D 41:626, 1990.

[57] CHANDRASEKHARAN, S. und N. CHRIST: *Dirac Spectrum, Axial Anomaly and the QCD Chiral Phase Transition*. Nucl. Phys., B (Proc. Suppl.) 47:527, 1996.

[58] SOMMERVILLE, IAN: *Software Engineering*. Addison-Wesley, 1993.

[59] BLEUL, ANDREAS und DR. JÖRN LOVISCACH: *Programmieren nach Plan*. c't, 19:166, 1998.

Abbildungsverzeichnis

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Priv.-Doz. Dr. Edwin Laermann, unter dessen Anleitung und Betreuung diese Arbeit durchgeführt wurde. Er hat mir die Möglichkeit eröffnet, mich im Rahmen einer Diplomarbeit mit dieser faszinierenden Materie auseinanderzusetzen. Weiterhin möchte ich mich bei Herrn Dr. Marcus Dirks bedanken, mit dem ich viele Diskussionen geführt habe, die mich einem Verständnis nicht nur derjenigen Dinge näher gebracht haben, die Untersuchungsgegenstand dieser Arbeit sind, sondern auch vieler weitergehender Aspekte dieses Themenbereiches. Für die vielen konkreten Antworten meiner Fragen zur Gittersimulation der QCD bin ich Herrn Dipl.-Phys. Andreas Peikert zu großem Dank verpflichtet.

Ich möchte mich darüber hinaus bei all denen aus der Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. Frithjof Karsch bedanken, die die Geduld für Diskussionen über verschiedene Bereiche der Physik mit mir aufgebracht haben, auch wenn diese nicht immer im direkten Zusammenhang mit ihrer eigenen Arbeit standen.

Erklärung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit mit keinen weiteren als den im Literturverzeichnis angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

Matthias Heß