Spezifische Wärme in der SU(2)-Eichtheorie

Diplomarbeit
Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Tim Scheideler

17. Februar 1995

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Die Naturkräfte im Standardmodell In der Physik untersucht man die Materie und deren Wechselwirkung miteinander. In der Elementarteilchenphysik ist man bemüht, die kleinsten Einheiten der Materie, die Elementarteilchen, zu finden und deren Wechselwirkung zu beschreiben. Die Erwartung ist, daß sich die Wechselwirkung einfacher Teilchen einfach beschreiben läßt und es einen Zusammenhang gibt zwischen der Beschreibung elementarer Kräfte und elementarer Teilchen.

In der Natur existieren vier grundlegende Kräfte: die Gravitation, die elektromagnetische Kraft, die schwache und die starke Kraft.

Historisch gesehen war die Entdeckung der Kräfte mit der Identifizierung der Teilchen, auf die sie wirken, eng verbunden. Thompson entdeckte das Elektron zu der Zeit, als Maxwell die elektrische mit der magnetischen Kraft vereinigte. Die schwache und die starke Kernkraft beobachtete man, als man in die mikrokopische Dimension vordrang in der diese Kräfte wirken: Die schwache Kraft bestimmt den Zerfall von Atomkernen. Bei der Wechselwirkung der Konstituenten der Kerne, Protonen und Neutronen, ist die starke Kraft relevant. Die gängigste Art die Theorie dieser drei Kräfte zusammenzufassen wird als das *Standardmodell* bezeichnet.

Die Materie ist aus zwei Arten von Teilchen aufgebaut: *Leptonen* und *Quarks*. Sie gehören zu der Gruppe der Fermionen (Spin $\frac{1}{2}\hbar$) und erweisen sich in allen Experimenten als strukturlos.

Zu den sechs Leptonen (griech. $\lambda\epsilon\pi\tau\omega$, zart) gehören das Elektron und seine beiden schwereren Brüder, das Myon und das Tauon, sowie ihre drei entsprechenden Neutrinos. Elektron, Myon und Tauon sind elektrisch geladen und unterliegen der elektromagnetischen und der schwachen Wechselwirkung. Diese beiden Naturkräfte wurden als Verallgemeinerung der Quantenelektrodynamik (QED), der Theorie der elektromagnetischen Wechselwirkung , zu der Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung zusammengefaßt.

Die Hadronen (griech. $\alpha\delta\rho\omega\sigma$, stark) sind aus sechs Quarks aufgebaut. Die Quarks wechselwirken elektromagnetisch, schwach und stark miteinander. Die starke Wechselwirkung wird durch die Quantenchromodynamik (QCD) beschrieben. Die Theorie der QCD wurde in Analogie zu der QED entwickelt, aber im Gegensatz zur

QED ist die QCD keine gut berechenbare Theorie. Beispielsweise ist das Verhalten der *laufenden Kopplung* ein aktuelles Forschungsgebiet, denn die „Kopplungskonstante“ der starken Kraft hängt vom Abstand ihrer Quellen ab.

Die Gravitation steht ein wenig abseits, da ihre Kopplungskonstante im Vergleich mit den Kopplungskonstanten der drei anderen Kräfte so verschwindend klein ist. Sie spielt in dem mikroskopischen Maßstab der Teilchenphysik keine Rolle. Es gibt auch keine spezielle fermionische Quelle, welche Gravitationsladung trägt, alle Materie unterliegt schlichtweg der Gravitation.

Die vier Naturkräfte besitzen eine entscheidende Gemeinsamkeit: Sie beruhen auf dem Prinzip der *lokalen Eichinvarianz*. Betrachten wir dazu die Elektrodynamik. Die Veränderung des elektrostatischen Potentials V ist eine globale Transformation, sie ist verbunden mit der Ladungserhaltung. Die globale Invarianz ist jedoch nicht ausreichend, um die Maxwell'sche Dynamik zu erzeugen. Maxwell's Vervollständigung des Ampere'schen Gesetzes kann ausgedrückt werden durch die Tatsache, daß eine *lokale* Änderung in dem elektrostatischen Potential V ausgeglichen werden kann durch eine lokale Änderung in dem magnetischen Vektorpotential $\vec{A}$. Diese Forderung nach lokaler Eichinvarianz verbindet elektrische und magnetische Effekte miteinander.

Die Generalisierung einer globalen Invarianz zu einer lokalen erzeugt grundsätzlich ein neues, kompensierendes Feld und die Wechselwirkung der Felder miteinander. Die Forderung nach lokaler Eichinvarianz erweist sich als fruchtbare Beschreibung von Dynamik im allgemeinen. Dynamische Theorien, die auf dem Prinzip der lokalen Invarianz beruhen, heißen *Eichtheorien.*

Die erste Theorie, die diesem Gedanken folgend entwickelt wurde, ist die Theorie der Nicht-abelschen Eichfelder von Yang und Mills (1954). Sie ist die Grundlage für die Beschreibung der schwachen und starken Wechselwirkung. Utiyama zeigte 1956, daß sich diese Gedanken auch auf die spezielle Relativitätstheorie anwenden lassen, um die allgemeine Relativitätstheorie herzuleiten.

Feldtheorie auf dem Gitter Bei der störungstheoretischen Berechnung von Prozessen der Teilchenphysik wird man mit dem Problem der Zähmung ultravioletter Divergenzen konfrontiert, wenn man die Ebene der Baumgraphen verläßt und versucht Schleifendiagramme zu berechnen. Zu große Impulse entsprechen zu kleinen Abständen. Um die divergenten Integrale zu handhaben, kann man einen maximalen Impuls vorgeben, oder äquivalent einen minimalen Abstand.

Eine Möglichkeit, das Problem der Divergenzen zu behandeln, ist die Diskretisierung des Raum-Zeit-Kontinuums. Die Felder befinden sich dann auf einer diskreten Menge von Punkten. Auf den Verbindungslinien zwischen den Punkten sind die Eichfelder plaziert. Bei der Rechnung auf dem Raum-Zeit-Gitter ist dieser Abstand durch den Gitterabstand a per se gegeben, und damit auch der maximale Impuls $p \simeq \hbar/a$. Dies war die grundlegende Motivation für Wilson [1], 1974 die *Gittereichtheorie* zu entwickeln.

Ein weiter Vorteil der Gittertheorie ist die Verbindung der Quantenfeldtheorie

(QFT) mit der statistischen Mechanik. Davon profitieren beide Fachgebiete und ein tieferer Einblick in die Physik wird ermöglicht: Hochtemperatur/starke Kopplungs-Entwicklung und Tieftemperatur/schwache Kopplungs-Entwicklung können zusammen mit numerischen Simulationen Licht in die Details der Phasenübergänge bringen.

Für die numerische Rechnung auf dem Gitter ist die kanonische Beschreibung der Quantenfeldtheorie nicht brauchbar, da diese Formulierung auf nicht-kommutativen Operatoren basiert. Feynman's Pfadintegralformulierung hingegen läßt sich für die Gittertheorie verwenden. Feynman entwickelte die Pfadintegralformulierung aus dem klassischen Wirkungsprinzip. Erwartungswerte lassen sich hiermit als Integral über Pfade im Konfigurationsraum schreiben (siehe dazu Kapitel 2.1).

Wie wird nun die lokale Eichinvarianz auf dem Gitter realisiert? Betrachten wir dazu das Isingmodell in zwei Dimensionen. Es beschreibt ein System von Spins $S_n \in \{-1, 1\}$, welche auf den Punkten $\{n\}$ eines zweidimensionalen Gitters liegen. Das System besitzt eine globale $\mathbf{Z}_2$ Invarianz, alle Spins können durch ihr Negatives ersetzt werden

$$S_n \longrightarrow -S_n \quad \text{, alle Punkte n,}$$

aber es besitzt keine lokale Invarianz. Wird ein einzelner Spin gekippt, verändert sich die Hamiltonfunktion

$$H = -J \sum_n S_n S_{n+1}$$

des Systems und damit der Erwartungswert einer Observablen. J ist die Konstante für die magnetische Kopplung.

Wegner formulierte 1971 das Eich-Isingmodell auf dem *dualen* Gitter, die Spins liegen nun auf den Verbindungslinien der Punkte. Vier Spins im Quadrat bilden eine *Plaquette*. Die Hamiltonfunktion wird umsummiert und als Summe der Plaquetten geschrieben:

$$H = \sum H_\square$$

$$H_\square = -J S^1 S^2 S^3 S^4 \quad ,$$

$S^1 S^2 S^3 S^4$ sind die vier Spins einer Plaquette.

Dieses Eich-Isingmodell besitzt eine lokale Eichinvarianz, es lassen sich die Spins an einem Punkt kippen, ohne daß die Hamiltonfunktion beeinflußt wird, wie in Abbildung 1.1 dargestellt. In jeder der vier an den Punkt n angrenzenden Plaquetten werden zwei Spins gekippt, damit bleibt der Erwartungswert der Plaquette unverändert. Durch die Einführung der Plaquetten auf dem dualen Gitter, erhält die Gittereichtheorie ein lokale Invarianz.

Phasenübergänge Um die Natur eines thermodynamischen Systems zu verstehen ist es sinnvoll sich die Übergänge zwischen den Phasen anzusehen. Betrachten wir dazu das Beispiel des Wassers, die Phasen sind die Aggregatzustände. Innerhalb einer reinen Phase erscheint das Wasser homogen, hingegen läßt sich beim Gefrieren die Wasserstoffbrückenbildung gut beobachten.

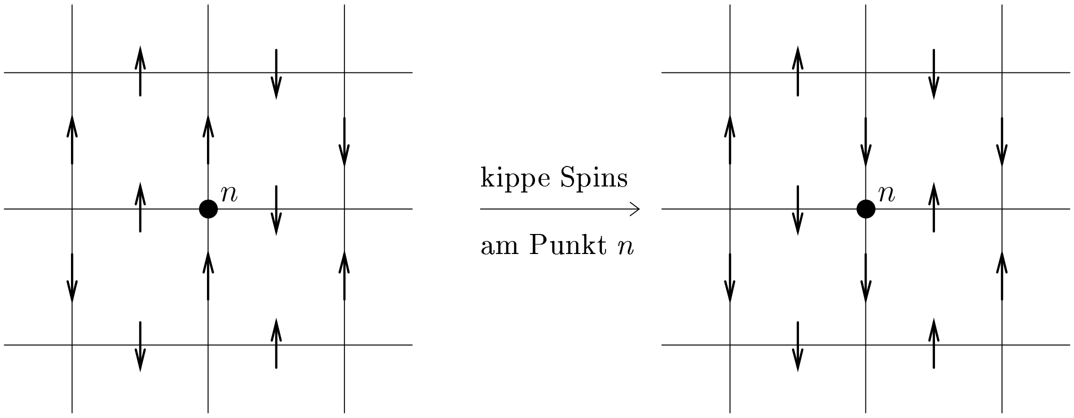

Abbildung 1.1: Lokale Spintransformation im Eich-Isingmodell

Geht ein System von einer Phase in einer andere Phase über, so verändert sich die *Nahordnung* der Materie. Wie aber läßt sich der Punkt eines Phasenüberganges bestimmen, ohne die Nahordnung mikroskopisch zu betrachten? Beim Schmelzen von Eis zu Wasser führt man Wärmeenergie zu, ohne das sich die Temperatur des Eis-Wasser-Gemisch ändert. Sie bleibt definitionsgemäß bei 0°C. In der Thermodynamik wird die spezifische Wärme einer Substanz bei einer Temperatur definiert, als die Wärmezufuhr pro Temperaturänderung. Am Schmelzpunkt hat die spezifische Wärme eine Singularität. Allgemein kann man zum Auffinden eines Phasenübergangs nach einer Singularität in der spezifischen Wärme suchen, denn ein nicht analytisches Verhalten der inneren Energie ist charakteristisch für einen Phasenübergang.

In einem Modell mit endlich vielen Teilchen (Freiheitsgraden) findet man statt einer Singularität nur einen Peak, weil eine Summe aus endlich vielen Werten nur einen endlichen Wert liefern kann. Dieser Peak muß jedoch mit der Größe des Gitters wachsen, wenn es sich in dem Modell um einen echten Phasenübergang handeln soll. Zur Bestimmung der Observablen im Kontinuum verwendet man das *Finite Size Scaling.*

Gruppentheorie Nachdem man in Beschleunigern diverse Hadronen entdeckt hatte, beobachtete man, daß die Teilchen ihren Eigenschaften gemäß in Gruppen zusammengefaßt werden können. So lag die Vermutung nahe, daß die Hadronen aus kleineren Teilchen, den Partonen, zusammengesetzt sind. Später erkannte man, daß die hadronische Materie aus Quarks und Gluonen, den Trägern der starken Wechselwirkung, zusammengesetzt ist. Bis heute sind sechs Quarks theoretisch vorhergesagt und im Experiment gefunden worden.

Für die Beschreibung der Hadronen ist die Gruppentheorie unverzichtbar. Es stellt sich die Frage, welche Gruppe für die Beschreibung der starken Wechselwirkung geeignet ist. Die SU(2) besitzt zwar die benötigte nicht-abelsche Eigenschaft, kann aber nur zwei Sorten Quarks (im engl. *flavours*) beschreiben. Außerdem gibt es zu der fundamentalen (zweidimensionalen) Darstellung keine adjungierte Darstellung der SU(2), eine Beschreibung von Antiteilchen ist nicht möglich. Mit der nächst größeren Gruppe, der SU(3), lassen sich alle sechs Quarks und ihre Antiteilchen beschreiben. Diese Flavourgruppe bezeichnet man mit $SU_f(3)$, sie ist aber keine exakte Symmetrie, da die Quarks unterschiedliche Massen besitzen.

In der QCD wird der Ladungsbegriff erweitert, das Analogon zur Ladung ist *Farbe*. Jedes Quark kommt in drei verschieden Ausführungen vor, mit den *Farbladungen* rot, grün oder blau. Deshalb wird es durch drei Quantenfelder beschrieben. Deren Theorie ist invariant unter SU(3) Transformationen im Farbraum. Diese SU(3) Symmetrie wird mit $SU_c(3)$ bezeichnet. Im Gegensatz zu gewöhnlichen Ladungsträgern kommen Quarks und Gluonen jedoch nie als frei Teilchen vor. Man sagt, die Quarks und Gluonen sind auf das Innere der Hadronen beschränkt (engl. *confined*). Im Rahmen der $SU_c(3)$ Theorie läßt sich diese Beobachtung beschreiben, in dem man fordert das nur Singletzustände zugelassen sind. Im folgenden soll immer diese Farbsymmetrie gemeint sein, wenn von SU(2) oder SU(3) gesprochen wird. Diesen Bindungsmechanismus (engl. *Confinement*) zu erklären, ist eine der wesentlichen Aufgaben der Elementarteilchenphysik. Besonders interessant ist die Frage, ob das Confinement bei allen Kopplungen, das heißt bei allen Abständen, aufrechterhalten bleibt. Ergebnisse aus der Theorie der Renormierungsgruppe lassen vermuten, daß für abelsche Eichtheorien, wie die QED, die Confinement-Phase von einer Deconfinement-Phase durch einen Phasenübergang getrennt werden. Für nicht-abelsche Eichtheorien gibt es, zumindestens in vier Dimensionen, diesen Phasenübergang nicht.

In meiner Diplomarbeit soll dieses Phänomen in vereinfachter Weise untersucht werden. Zum einen betreibe ich reine Eichtheorie. Die Quarks sind nicht vorhanden, oder anders gesehen, sie sind unendlich schwer und bleiben immer auf demselben Gitterpunkt. Betrachtet wird nur die Dynamik der Eichfelder. Die Hoffnung ist, daß das Hinzufügen von einigen Sorten Fermionen den Mechanismus des Confinements nicht verändert. Anstelle der SU(3) simuliere ich die SU(2), da sie einfacher zu handhaben ist und die beiden Gruppen prinzipell das gleiches Verhalten zeigen. In einen bestimmten Bereich der Kopplung tritt ein Anstieg der spezifischen Wärme auf, welcher auf einen Phasenübergang hindeutet. Verschiedene Autoren haben sich in den letzten Jahren unterschiedlich zu diesem Thema geäußert. Das Ziel meiner Diplomarbeit ist die Klärung der Frage, ob es sich bei dem Peak der spezifischen Wärme

- um einen Phasenübergang handelt, dann würde man erwarten, daß der Peak der spezifischen Wärme sich mit dem Gittervolumen ändert
- oder ob derartige Effekte aufgrund des endlichen Volumens auftreten. Insbesondere auf kleineren Gittern wären diese Effekte zu beobachten, da praktisch ein System endlicher Temperatur vorliegt, bei dem man den Deconfinement-Phasenübergang vorfindet.

Kapitel 2

Gittereichtheorie

2.1 Die Pfadintegralformulierung

Neben der kanonischen Formulierung der Quantenmechanik gibt es im wesentlichen noch die Pfadintegralformulierung. Sie wurde 1948 von Feynman vorgestellt und zu einem sehr wichtigen Werkzeug der Hochenergiephysik, denn sie eröffnet eine Möglichkeit, die QFT nicht-störungstheoretisch zu behandeln. Damit werden quantenmechanische Größen auf dem Computer berechenbar. Man kann zwar die hochdimensionalen Integrale nicht direkt ausrechnen, aber man kann das Integral mittels der Monte-Carlo-Integration approximieren, in dem man die wesentlich beitragenden Anteile berechnet.

Die Pfadintegralformulierung folgt dem Prinzip der kleinsten Wirkung, welches aus der klassischen Mechanik bekannt ist. Sie berücksichtigt alle möglichen Pfade, welche ein Teilchen (Zustand) durch den Minkowski-Raum nehmen kann:

$$< q'|e^{iH(t'-t)}|q >= \int_q^{q'} Dq \;\; e^{iS[q]} \quad .$$

Dabei steht das Integrationsmaß Dq symbolisch für die Integration über alle Pfade im Zustandsraum. Durch das Gewichten der Pfade mit einer Phase heben sich unwahrscheinliche Pfade, Pfade mit großer Wirkung, gegenseitig auf. Die quantenmechanischen Fluktuationen werden damit in das Modell aufgenommen. Hauptsächlich tragen aber nur die Pfade bei, bei denen die Wirkung minimalisiert wird.

Um die Pfadintegrale auf dem Computer zu berechenbar zu machen, muß man die Zeit zu imaginären Werten fortsetzen:

$$iS[q] \underset{t\to -i\tau}{\longrightarrow} -S_E[q] \quad .$$

An die Stelle der oszillatorischen Dämpfung tritt nun eine exponentielle Dämpfung. Dieses Gewicht in der Euklidischen Formulierung kann mit dem Boltzmann-Faktor der statistischen Mechanik identifiziert werden, wenn die Wirkung eine reellwertige und nach unten beschränkte Funktion der Koordinaten ist. So schreibt sich die Zustandsumme mit der Euklidischen Wirkung S_E als

$$Z = \int Dq \; e^{-S_E[q]} \tag{2.1}$$

und der Erwartungswert eines Operators

$$\langle O(q)) \rangle = \frac{1}{Z} \int Dq \; O(q) \; e^{-S_E[q]} \quad . \tag{2.2}$$

2.2 Nicht-abelsche Eichfelder

> The difference between a neutron and a proton is then a purely arbitrary process. As usually conceived, however, this arbitrariness is subject to a following limitation: once one chooses what to call a proton, what a neutron, at one space-time point, one is then not free to make any choices at other space-time points.
>
> It seems that this is not consistent with the localized field concept that underlies the usual physical theories. In the present chapter we wish to explore the possibility of requiring all interactions to be invariant under *independent* rotations of the isotopic spin at all space-time points.
>
> Yang and Mills (1954)

2.2.1 Einführung der Eichfelder

Betrachten wir die Lagrangedichte des freien Dirac-Feldes

$$\mathcal{L} = \psi(i\partial\!\!\!/ - m)\bar{\psi} \quad , \tag{2.3}$$

deren Wellenfunktionen ψ N-komponentige Vektoren aus Dirac Feldern sind. Diese Gleichung ist invariant unter einer globalen SU(N)-Transformation:

$$\psi' = \exp(ig\tfrac{1}{2}\tau_k \cdot \alpha^k)\psi \quad , \tag{2.4}$$

dabei ist $\vec{\alpha}$ ein Vektor aus beliebigen reellen Zahlen und $\vec{\tau}$ sind die Generatoren der Gruppe. Um eine Transformation, die dem lokalen Feldkonzept entspricht, zu verwirklichen, müssen die Phasenparameter α^k Raum-Zeit-abhängig sein, also Funktionen von $x = (\mathbf{x}, t)$,

$$\psi' = \exp(ig\tfrac{1}{2}\tau_k \cdot \alpha^k(x))\psi \quad . \tag{2.5}$$

Es ist einsichtig, daß keine Wellengleichung für freie Teilchen kovariant unter dieser Transformation sein kann, da die Ableitung auf den Phasenfaktor wirkt. Durch die Substitution der Ableitung durch die kovariante Ableitung, koppelt man das freie Teilchen an äußere Felder,

$$D^\mu = \partial^\mu + ig\tfrac{1}{2}\tau^k \cdot W_k^\mu(x) \quad . \tag{2.6}$$

Die N^2-1 unabhängigen Eichfelder $\mathbf{W}^\mu(x) = (W_1^\mu(x), W_2^\mu(x), \ldots, W_{N^2-1}^\mu(x))$ heißen SU(N)-Eichfelder oder *Yang-Mills-Felder*. Damit die Forderung nach der lokalen Eichinvarianz erfüllt ist, muß folgende Gleichung gelten:

$$D^{\mu\prime}\ \psi' = \exp(ig\tfrac{1}{2}\tau_k \cdot \alpha^k(x)) D^\mu\ \psi \quad . \tag{2.7}$$

Es ist ausreichend, nur eine infinitesimale SU(N)-Transformation mit dem lokalen Parameter $\eta(x)$ zu betrachten. Da die SU(N) Gruppen (mehrfach) zusammenhängend sind, läßt sich jede Drehung aus Elementen nahe der Eins zusammensetzen. Kennt man das Verhalten der infinitesimalen Transformation, so kennt man auch das der gesamten Gruppe. Durch die Gleichung (2.7) in infinitesimaler Form

$$\begin{aligned} D^{\mu\prime}\ \psi' &= (\partial^\mu + ig\tfrac{1}{2}\tau^k \cdot W_k^{\mu\prime})[1 + ig\tfrac{1}{2}\tau^k \cdot \eta(x)_k^\mu]\psi \\ &= [1 + ig\tfrac{1}{2}\tau^k \cdot \eta(x)_k^\mu](\partial^\mu + ig\tfrac{1}{2}\tau^k \cdot W_k^\mu)\psi \quad , \end{aligned} \tag{2.8}$$

wird eine Forderung an die Transformation gestellt, durch die das Transformationsgesetz

$$\mathbf{W}^\mu \to \mathbf{W}'^\mu = \mathbf{W}^\mu + \delta\mathbf{W}^\mu \tag{2.9}$$

eindeutig bestimmt wird [2, Seite 265]:

$$\delta W_i^\mu = -\partial\eta_i(x) - g f_{ijk}\eta_j(x) W_k^\mu(x) \quad . \tag{2.10}$$

Die f_{ijk} sind die Strukturkonstanten der Gruppe SU(N), wobei $i, j, k = 1, \ldots, \mathrm{N}^2-1$. Neben dem aus der klassischen Elektrodynamik bekannten Anteil $-\partial\eta_i(x)$ gibt es den Wechselwirkungsanteil durch die Eichfelder. Sie formen eine N^2-1-multiplett Darstellung der SU(N). δW_i^μ ist eine Funktion aller Komponenten von $\mathbf{W}$, deshalb wechselwirken die Eichfelder miteinander. Man sagt, die Yang-Mills-Felder tragen „Farbladungs“-Freiheitsgrade. Eine nicht-abelsche Theorie kann deshalb niemals ein freie Theorie sein.

2.2.2 Der Feldstärketensor

Im Feldstärketensor der SU(N) findet sich ebenfalls diese Selbstwechselwirkung. Betrachten wir dazu die Wellengleichung für ein freies, masseloses Vektorfeld $\mathbf{W}^\mu$

$$\Box\mathbf{W}^\mu - \partial^\mu\partial^\nu\mathbf{W}_\nu = 0 \quad . \tag{2.11}$$

Setzt man die für das Eichprinzip benötigte kovariante Ableitung ein, so erhält man

$$D^2\mathbf{W}^\mu - D^\mu D^\nu\mathbf{W}_\nu = 0 \quad . \tag{2.12}$$

Dieses Verfahren ist nicht eindeutig: Vertauscht man in (2.11) die Indizes, was die Gleichung in keiner Weise ändert, so erhält man die *nicht* äquivalente Gleichung

$$D^2\mathbf{W}^\nu - D^\nu D^\mu\mathbf{W}_\mu = 0 \quad , \tag{2.13}$$

denn die Differenz der Gleichungen verschwindet nicht [2, Seite 271]:

$$(D^\mu D^\nu - D^\nu D^\mu)\mathbf{W}_\nu = ig\tau^k(\partial^\mu W_k^\nu - \partial^\nu W_k^\mu - g f_{kij} W_i^\mu W_j^\nu)\mathbf{W}_\nu \quad . \tag{2.14}$$

Dies läßt sich auch als Operatorgleichung schreiben

$$(D^\mu D^\nu - D^\nu D^\mu) = ig\tau \cdot \mathbf{F}^{\mu\nu} \quad , \tag{2.15}$$

mit dem *Feldstärketensor* (hier nun speziell für die SU(2))

$$\mathbf{F}^{\mu\nu} = \partial^\mu \mathbf{W}^\nu - \partial^\nu \mathbf{W}^\mu - g\mathbf{W}^\mu \times \mathbf{W}^\nu \quad . \tag{2.16}$$

Dieser Feldstärketensor ist die Verallgemeinerung des klassischen Feldstärketensors der Elektrodynamik. Wie bei der Transformationsgleichung für die Eichfelder besteht die nicht-abelsche Erweiterung wieder aus einem Wechselwirkungsterm zwischen den Eichfeldern. Die Eichinvarianz ist eine starke Bedingung an die Art der Wechselwirkungen die von der Theorie zugelassen werden. Als Lagrangefunktion, die diese Wechselwirkung beschreibt, kann gewählt werden:

$$\mathcal{L} = \psi(i\partial\!\!\!/ - m)\bar{\psi} - \tfrac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \quad . \tag{2.17}$$

2.2.3 Eichfelder auf dem Gitter

Für die Berechnung auf dem Computer ist es notwendig das Raum-Zeit-Kontinuum zu diskretisieren, das heißt durch ein Gitter zu ersetzen. Durch das Einführen des Gitters sind die Felder der Quarks nur noch auf den Gitterpunkten definiert. In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß die zugehörigen Eichfelder auf den Kanten des $\mathbf{Z}^4$-Gitters lokalisiert sind. Je vier dieser Kanten werden, wie in der Einleitung gezeigt, zu einer *Plaquette* zusammengefaßt. Sie wurde Anfang der siebziger Jahre von Wegner und Wilson [1] erstmalig konstruiert.

Mit einem Ordnungsparameter läßt sich ein Phasenübergang beschreiben. Die Plaquette, die kleinstmögliche Schleife auf dem Gitter, ist zwar kein Ordnungsparameter, weil sie alle Werte zwischen Null und Eins annehmen kann, aber der Mittelwert über die Plaquetten fungiert als Ordnungsparameter. Die Plaquette erfüllt die Forderung nach der nicht-lokalen Eichinvarianz. In den letzten beiden Abschnitten wurde gezeigt, wie in einer Theorie, die eine kontinuierliche Symmetriegruppe besitzt, dem freien fermionischen Anteil der Wirkung ein kinetischer Anteil für die Eichfelder beigefügt wird. Nun soll das Eichprinzip auf das Gitter übertragen werden.

Auf dem Gitter ist es notwendig die euklidische Formulierung der Dirac-Gleichung zu verwenden, die Lorentz-Gruppe wird dabei durch die O(4) Rotationsgruppe ersetzt. Die γ-Matrizen genügen der Algebra

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu} \quad ,$$

mit den Ersetzungen $\gamma^0 \to \gamma_4$ und $\gamma^k \to i\gamma_k$. Die fermionische Wirkung schreibt sich als

$$S_F = \int d^4x \;\; \bar{\psi}(x)(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi(x) \quad . \tag{2.18}$$

Durch das Gitter kann man dem Maß des Pfadintegrals eine Bedeutung geben

$$D\bar{\psi}D\psi = \prod_{\alpha,n} d\bar{\psi}_\alpha(na) \prod_{\beta,m} d\psi_\beta(ma) \quad .$$

Der Gitterabstand ist per se eine dimensionsbehaftete Größe. In den verwendeten natürlichen Einheiten, lassen sich alle anderen Größen in dimensionlose Größen überführen, indem man sie mit Potenzen der Länge multipliziert:

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{a}\hat{m} \\ \psi_\alpha(x) &= \frac{1}{a^{3/2}}\hat{\psi}_\alpha(n) \\ \bar{\psi}_\alpha(x) &= \frac{1}{a^{3/2}}\hat{\bar{\psi}}_\alpha(n) \\ \partial_\mu \psi_\alpha(x) &= \frac{1}{a^{5/2}}\hat{\partial}_\mu \hat{\psi}_\alpha(n) \quad , \end{aligned} \tag{2.19}$$

mit dem anti-hermiteschen Differenzenquotient

$$\hat{\partial}_\mu \hat{\psi}_\alpha(n) = \frac{1}{2}\left[\hat{\psi}_\alpha(n+\hat{\mu}) - \hat{\psi}_\alpha(n-\hat{\mu})\right] \quad . \tag{2.20}$$

So schreibt sich die Gitterversion von (2.18) als

$$\begin{aligned} S_F = {} & \frac{1}{2}\sum_n \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\hat{\mu}} \left[\hat{\bar{\psi}}_\alpha(n)\gamma_\mu^{\alpha\beta}\hat{\psi}_\beta(n+\hat{\mu}) - \hat{\bar{\psi}}_\alpha(n)\gamma_\mu^{\alpha\beta}\hat{\psi}_\beta(n-\hat{\mu})\right] + \\ & \hat{m}_0 \sum_n \sum_\alpha \hat{\bar{\psi}}_\alpha(n)\hat{\psi}^\alpha(n) \quad . \end{aligned} \tag{2.21}$$

Der nächste Schritt ist die lokale Eichtransformation auf das Gitter zu bringen. Das Gruppenelement, welches von dem Gitterpunkt n abhängt, soll mit $G(n) = \exp(i\Lambda(n))$ bezeichnet werden. Nun besteht aber der erste Teil der Gleichung (2.21) aus nicht-diagonalen Termen, deren Ursprung die diskrete Ableitung ist, er zwingt zur Einführung von Eichfreiheitsgraden.

Für den abelschen Fall im Kontinuum transformiert sich so ein Term wie

$$\bar{\psi}(x)\psi(y) \to \bar{\psi}(x)G^{-1}(x)G(y)\psi(y) \quad .$$

Der benötigtet Ausdruck, der die Eichvariation ausgleicht, ist als das Schwinger'sche Linienintegral bekannt

$$U(x,y) = \exp\left(ig_0 \int_x^y A_\mu(z)dz^\mu\right) \quad . \tag{2.22}$$

Unter der Eichtransformation $A_\mu \to A_\mu - \frac{1}{g_0}\partial_\mu \Lambda$ verhält sich $U(x,y)$ wie

$$U(x,y) \to G(x)U(x,y)G^{-1}(y)$$

und damit ist

$$\bar{\psi}(x)U(x,y)\psi(y) = \bar{\psi}(x)\exp\left(ig_0\int_x^y A_\mu(z)dz^\mu\right)\psi(y) \tag{2.23}$$

eichinvariant.

Wie in der Einleitung dieses Abschnittes angekündigt soll das Interesse kleinen Schleifen auf dem Gitter gelten, deshalb ist x nur infinitesimal von y entfernt. So kann man für ein hinreichend nahe an x liegendes $y = x + \epsilon$ nähern:

$$U(x,y) \approx \exp(ig_0\epsilon_\mu A_\mu(x)) \quad .$$

Dieser Ausdruck läßt sich diskretisiern:

$$U(n, n+\hat{\mu}) =: U_\mu(n) = e^{\phi_\mu(n)}, \qquad \phi_\mu(n) \in \mathrm{SU(N)} \quad .$$

Die eichinvariante Version der Gl.(2.21)

$$\begin{aligned} S_F &= \frac{1}{2}\sum_n\sum_{\hat{\mu}}\left[\hat{\bar{\psi}}(n)\gamma_\mu U_\mu(n)\hat{\psi}(n+\hat{\mu}) - \hat{\bar{\psi}}(n)\gamma_\mu U^\dagger_\mu(n)\hat{\psi}(n-\hat{\mu})\right] + \\ &\quad \hat{m}_0\sum_n \hat{\bar{\psi}}(n)\hat{\psi}(n) \end{aligned} \tag{2.24}$$

ist invariant unter den Transformationen

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(n) &\to G(n)\hat{\psi}(n), \\ \hat{\bar{\psi}}(n) &\to \hat{\bar{\psi}}(n)G^{-1}(n) \\ U_\mu(n) &\to G(n)U_\mu(n)G^{-1}(n+\hat{\mu}), \\ U^\dagger_\mu(n) &\to G(n+\hat{\mu})U^\dagger_\mu(n)G^{-1}(n) \quad . \end{aligned} \tag{2.25}$$

Die Eichfelder $U_{n,n+\hat{\mu}}$ befinden sich auf den *Verbindungsvariablen* (*Links*), welche jeweils zwei Punkte des Gitters miteinander verbinden, wie man in der Figur 2.1 sieht.

Im folgenden soll der Hut über den Größen auf dem Gitter der Übersicht halber fortgelassen werden. Im folgenden sei a=1.

Um die Dynamik der Eichfelder zu beschreiben muß man die Wirkung um einen geeigneten eichinvarianten Term erweitern. Die minimale Kopplung, die mit Gl.(2.6) eingeführt wurde, ist zunächst eine Kopplung an ein statisches Feld. Um die Propagation des Feldes zu erlauben benutzt man im allgemeinen

$$S_{Gauge} = \frac{1}{4}\int dx^4 F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}, \tag{2.26}$$

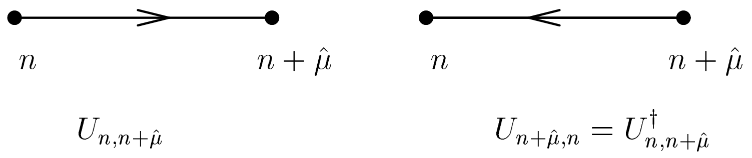

Abbildung 2.1: Die Verbindungsvariablen

mit dem $F_{\mu\nu}$ aus Gl.(2.16). Auch dieser Teil der Wirkung soll ein Funktional der Verbindungsvariablen sein. Wegen der lokalen Struktur von (2.26) betrachtet man kleine Schleifen in dem euklidischen Raum-Zeit-Gitter, die Plaquette. Sie wird aus dem Produkt pfadgeordneten Verbindungsvariablen der Länge a zusammengesetzt, wie in Abbildung 2.2 dargestellt. Eine Plaquette in der $\mu\nu$-Ebene schreibt sich als

$$U_{\mu\nu}(n) := U_{\mu}(n)U_{\nu}(n+\mu)U^{\dagger}_{\mu}(n+\nu)U^{\dagger}_{\nu}(n) = \exp(ig_0 a^2 F^{\mu\nu}(n)) \quad . \tag{2.27}$$

In (2.27) ist $F_{\mu\nu}$ die diskrete Version von (2.16):

$$F_{\mu\nu} = \frac{1}{a}\left[(A_{\nu}(n+\mu) - A_{\nu}(n)) - (A_{\mu}(n+\nu) - A_{\mu}(n))\right] + ig_0[A_{\mu}(n), A_{\nu}(n)] \ . \tag{2.28}$$

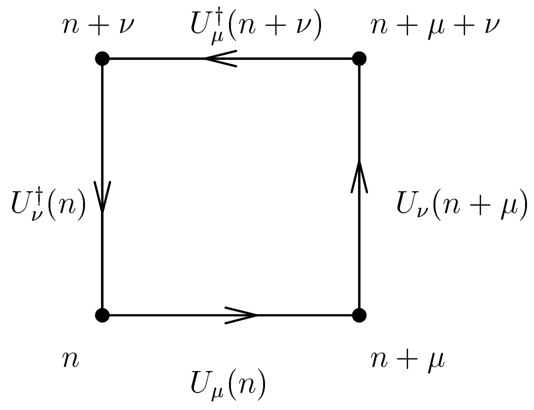

Abbildung 2.2: Die Plaquette

Für kleine Gitterabstände ist es angemessen die Exponentialfunktion in (2.27) zu entwickeln. Approximiert man sie bis zur zweiten Ordnung, erhält man für den diskreten Eichanteil der Wirkung in führender Ordnung

$$S_G[U] \approx \frac{a^4}{4}\sum_n F_{\mu\nu}(n)F^{\mu\nu}(n) = \frac{2N}{g_0^2}\sum_n\sum_{\mu<\nu}\left[1 - \frac{1}{2N}\mathrm{Tr}\left(U_{\mu\nu}(n) + U^{\dagger}_{\mu\nu}(n)\right)\right] \quad , \tag{2.29}$$

oder symbolisch über die Plaquetten summiert

$$S_G[U] = \frac{2N}{g_0^2} \sum_P \left[[1 - \frac{1}{2N} \mathrm{Tr} \left(U_P + U_P^\dagger \right) \right] \quad . \tag{2.30}$$

Die Summe $\sum_P$ läuft über alle Plaquetten in einem Richtungssinn, beispielsweise gegen den Uhrzeigersinn, wie in der Abbildung 2.2. Bemerkenswert ist, daß die Kopplungskonstante bei der diskreten Wirkung quadratisch im Nenner steht, während sie in der Kontinuumsversion linear in die Wirkung einging. Deshalb ist die starke Kopplungsentwicklung auf dem Gitter die natürliche. Mit der Bezeichnung

$$\beta = \frac{4}{g_0^2}$$

, schreibt sich der Eichanteil der Wirkung für die SU(2) ($\mathrm{Tr}\ U = \mathrm{Tr}\ U^\dagger$) als

$$S_G[U] = \beta \sum_P \left[1 - \frac{1}{2} \mathrm{Tr}\ U_P \right] \quad . \tag{2.31}$$

2.3 Die spezifische Wärme

Thermodynamik
In der Thermodynamik definiert man die spezifische Wärme durch

$$C_{\mathcal{C}} := \lim_{\Delta T \to 0} \left. \frac{\Delta Q}{\Delta T} \right|_{\mathcal{C}} = \left. \frac{\delta Q}{dT} \right|_{\mathcal{C}} \quad , \tag{2.32}$$

dabei ist ΔQ die Wärmezufuhr, die notwendig ist, um die Temperatur des Systems längs des Weges $\mathcal{C}$ im Zustandraum um ΔT zu erhöhen. Für den wichtigen Spezialfall, daß $\mathcal{C}$ längs einer Isochoren verläuft, gilt mit dem ersten Hauptsatz $\delta Q = dU + PdV$:

$$C_V = \lim_{\Delta T \to\ 0} = \left. \frac{\delta Q}{dT} \right|_{V = konstant} = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V \quad . \tag{2.33}$$

In der Statistischen Mechanik identifiziert man nach Boltzmann's Ergodenhypothese das Zeitmittel einer thermodynamischen Größe mit dem Scharmittel ihres entsprechenden Operators. Für die innere Energie U ist es der Erwartungswert des Hamiltonoperators $U = \langle H \rangle$. Setzt man die Boltzmannkonstante $k = 1$ ($\beta = 1/T$), so schreibt sich die spezifische Wärme im kanonischen Ensemble als

$$C_V = \left. \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial T} \right|_V = \left. \frac{\partial}{\partial \frac{1}{\beta}} \right|_V \frac{\mathrm{Tr}\ (H e^{-\beta H})}{\mathrm{Tr}\ e^{-\beta H}} = \beta^2 \left(\left\langle H^2 \right\rangle - \langle H \rangle^2 \right) \quad . \tag{2.34}$$

Somit wird die spezifische Wärme durch die Varianz der Energie gegeben.

Pseudo-spezifische Wärme auf dem Gitter
Diskretisieren wir die letzte Gleichung, das heißt wir definieren in Analogie zwischen Kopplung und inverser Temperatur eine *pseudo-spezifische Wärme*. Die Eich-Wirkung $S_G{=}\beta S$ kann, analog zu βH, als Produkt aus Kopplung und Wirkung betrachtet werden. Der inneren Energie entspricht der Plaquette-Erwartungswert (Mittelung über das Gitter mit N_P Plaquetten*):

$$\overline{E} = \frac{1}{N_P}\sum_P E_P \quad , \quad E_P = 1 - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\ U_P \quad , \quad S = \sum_P E_P \quad .$$

Die Varianz der Energie läßt sich als Summe über Plaquette-Erwartungswerte schreiben:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\frac{1}{\beta}}\Big\langle E_P\Big\rangle &= \frac{\int dU\ \beta^2\ (-E_P S)\ e^{-\beta S}\cdot\int dU\ e^{-\beta S}}{\left(\int dU\ e^{-\beta S}\right)^2} \\ &+ \frac{\int dU\ E_P\ e^{-\beta S}\cdot\int dU\ \beta^2\ S\ e^{-\beta S}}{\left(\int dU\ e^{-\beta S}\right)^2} \\ &= \beta^2\sum_{P'}\left(\Big\langle E_P E_{P'}\Big\rangle - \Big\langle E_P\Big\rangle^2\right) \quad . \end{aligned} \tag{2.35}$$

Auf dem Gitter läßt sich die Varianz der Energie, also die Varianz des Plaquette-Erwartungswertes, messen. Man kann dabei auf zwei Arten vorgehen:

- Man mißt die Varianz des Erwartungswertes der Plaquetten während einer einzelnen Simulation.
- Man betrachtet die Änderung des Erwartungswertes der Plaquetten zwischen Simulationen zu verschiedenen Kopplungen.

Dieses Thema wird bei der Auswertung wieder aufgegriffen. Dann soll der Einfachheit halber die pseudo-spezifische Wärme nur spezifische Wärme genannt werden.

2.4 Feldtheorie bei endlicher Temperatur

Bei den bisherigen Betrachtungen der Feldtheorie wurde der Begriff der Temperatur außen vor gelassen. Die Rechnungen bezogen sich immer auf den Fall $T{=}0$. Um eine Beschreibung der QFT bei einer von Null verschiedenen Temperatur zu ermöglichen, wurde die *Feldtheorie bei endlicher Temperatur* (*Finite Temperature Field Theory*) entwickelt, bei der man die Wechselwirkung der Teilchen mit dem sie umgebenen Medium, dem Wärmebad, berücksichtigt. Interessant für die QFT bei

*Ein vierdimensionales Gitter der Größe l^4 beinhaltet $N = 3\cdot 2\cdot l^4$ Plaquetten.

endlicher Temperatur sind extrem hohe Temperaturen, wie sie im frühen Universum geherscht haben oder hohe Baryondichten, wie sie im Inneren von Sternen zu finden sind. Forschungsschwerpunkt dieses Gebiets ist der Phasenübergang von Hadronen (Confinement) zum Quark-Gluon-Plasma (Deconfinement).

Wie in Abschnitt 2.1 erwähnt, wird die Zeit in der Feynman'schen Pfadintegralformulierung zu imaginären Werten fortgesetzt: $t \to -i\tau$. Die Idee der Feldtheorie bei endlicher Temperatur ist die Zeit als inverse Temperatur zu betrachten: $\tau \hat{=} 1/T$. Die Zustandsumme für ein System mit endlich vielen Freiheitsgraden schreibt sich im euklidischen Fall und der Boltzmannkonstante $k=1$ als

$$Z = \int D\Phi D\Psi \; e^{-\int_0^{1/T} d\tau \int d^3x \; \mathcal{L}_E(\Phi,\Psi)} \quad . \tag{2.36}$$

Das Pfadintegral läuft über alle *periodischen* Pfade, die bei der Zeit $\tau=0$ starten und zu ihrem Ausgangspunkt bei $\tau = \frac{1}{T}$ zurückkehren. In Analogie zur statistischen Mechanik bezeichnet man die inverse Temperatur mit $\beta = \frac{1}{T}$.[†] Die bosonischen Felder müssen periodischen Randbedingungen genügen,

$$\phi(\vec{x}, 0) = \phi(\vec{x}, \beta) \quad ,$$

und die fermionischen Felder antiperiodischen Randbedingungen,

$$\psi(\vec{x}, 0) = -\psi(\vec{x}, \beta) \quad .$$

Betrachten wir nun die thermodynamische Observablen, die für die Feldtheorie bei endlicher Temperatur für Bedeutung sind. Im kanonischen Ensemble erhält man die mittlere *Energiedichte* ε und den *Druck* P aus der Zustandssumme durch

$$\varepsilon = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}\right)_V \quad \text{und} \quad P = \frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_\beta \quad . \tag{2.37}$$

Während bei der Energiedichte die inverse Temperatur $\beta = a_t N_t$ variiert wird, bleibt das gesamte Volumen $V = a_s^3 N_s^3$ konstant, umgekehrt für den Druck. Um zu ermöglichen, daß die Temperatur unabhängig vom Volumen variiert werden kann, führt man unterschiedliche Gitterabstände für Raum (a_s) und Zeit (a_t) ein. Die asymmetrische Formulierung wird nur benutzt um die Ableitung zu berechnen, nach dem Ableiten wird wieder $a = a_s = a_t$ gesetzt. Für das Erreichen des korrekten Kontinuumslimes ist es nötig, daß ebenfalls verschiedene, unabhängige Kopplungen $1/g_s^2$ und $1/g_t^2$ eingeführt werden. Mit der Notation $\xi = a_t/a_s$ schreibt sich der Eichanteil für die asymmetrische SU(2)-Wirkung als

$$S_G[U] = \frac{4}{g_s^2}\xi \sum_{P_s}\left[1 - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\; U_{P_s}\right] + \frac{4}{g_t^2}\frac{1}{\xi}\sum_{P_t}\left[1 - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\; U_{P_t}\right] \quad . \tag{2.38}$$

[†] In diesem Teil der Arbeit ist mit β immer die inverse zeitliche Ausdehnung gemeint. Es ist nicht mit der Kopplung auf dem Gitter zu verwechseln.

P_s bezeichnet die Raum-Raum-Plaquetten (alle Verbindungsvariablen in räumlicher Richtung) und P_t die Raum-Zeit-Plaquetten (gebildet aus je zwei Raum- und zwei Zeit-Verbindungsvariablen).

Auf dem symmetrischen Gitter mißt man das Quark-Antiquark-Potential mittels des Wilson-Loops für große euklidische Zeiten. Im Fall endlicher Temperatur läßt sich, zu diesem Zweck, auch der *Polyakov-Loop* verwenden. Er dient auch zur Bestimmung der freien Energie eines einzelnen schweren Quarks. Damit läßt sich die kritische Kopplung des Phasenüberganges zwischen Confinement und Deconfinement bestimmen. Der Polyakov-Loop ist definiert als das Produkt aller Verbindungsvariablen in Zeitrichtung an einem festen Raumpunkt:

$$L(\vec{n}) = \mathrm{Tr} \prod_{n_4=1}^{N_t} U_4(\vec{n}, n_4) \quad . \tag{2.39}$$

Kapitel 3

Numerische Methoden

3.1 Monte-Carlo-Integration

In der Hochenergiephysik benutzt man die Monte-Carlo-Integration um Erwartungswerte von Observable in der Pfadintegralformulierung (2.2) auszurechnen:

$$\langle O\rangle = \frac{\int DU\;\; O[U]\; e^{-\beta S[U]}}{\int DU\;\; e^{-\beta S[U]}} \quad . \tag{3.1}$$

Die direkte numerische Integration über die Verbindungsvariablen U (Links) läßt sich nicht ausführen, weil das Integral zu hochdimensional ist. Ein Gitter der Kantenlänge 12 enthält $4 \cdot 12^4 \approx 83\,000$ SU(2) Matrizen, die von je 4 Parametern abhängen. Wertete man die Funktion etwa nur an 10 Stellen für die numerische Integration aus, so müßte man eine Summe aus $10^{330\,000}$ Summanden berechnen.

Im Gegensatz zu der gewöhnlichen numerischen Integration nutzt die Monte-Carlo-Integration aus, daß nur ein geringer Teil des Integrationsbereiches – der Anteil, wo die Wirkung minimalisiert wird – zum Ergebnis beiträgt. Diese Erkenntnis ist die Grundlage des *„importance sampling"*: Man erzeugt eine Folge von Konfigurationen von Verbindungsvariablen, deren Wahrscheinlichkeitsverteilung dem Boltzmannfaktor $e^{-\beta S[U]}$ proportional ist. So läßt sich das Ensemblemittel durch die Summe

$$\langle O\rangle \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} O(U_i) \tag{3.2}$$

über die Folge der generierten Konfigurationen approximieren.

3.1.1 Der Wärmebadalgorithmus

Für Systeme bei denen sich die gewünschte Wahrscheinlichkeitsverteilung explizit erzeugen läßt, ist der *Wärmebadalgorithmus* (*Heatbath-Algorithm*) zu implementieren, Das sind im wesentlichen solche Verteilungen, für die die Wirkung durch integrierbare, invertierbare Funktionen gegeben sind.

Gleichung (3.1) repräsentiert den Erwartungswert einer thermodynamischen Größe im kanonischen Ensemble bei der Temperatur $T = 1/\beta$. In der Thermodynamik werden Gleichgewichtszustände beschrieben, deshalb ist es notwendig, das System vor einer Messung zu thermalisieren. Starten kann man mit einer beliebigen Besetzung des Gitters mit SU(2)-Matrizen. Jede Verbindungsvariable wird dann nacheinander mit dem Wärmebad berührt, d.h. U wird durch U' ersetzt, welches mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$dP(U') \sim e^{-\beta S[U']} dU' \tag{3.3}$$

gewählt wurde. Der Wärmebadalgorithmus ist ein lokaler Algorithmus, es wird nur eine Verbindungsvariable gleichzeitig ersetzt. Für die Erneuerung einer Verbindungsvariable reicht es aus, die lokale Wirkungsänderung zu betrachten. Dieser Anteil ist durch das Produkt der Verbindungsvariable mit den sechs angrenzenden *Heftklammern* (engl. *staples*) gegeben, mit denen die Verbindungsvariablen U eine Plaquette bildet, wie in Abbildung 3.1 zu sehen ist.

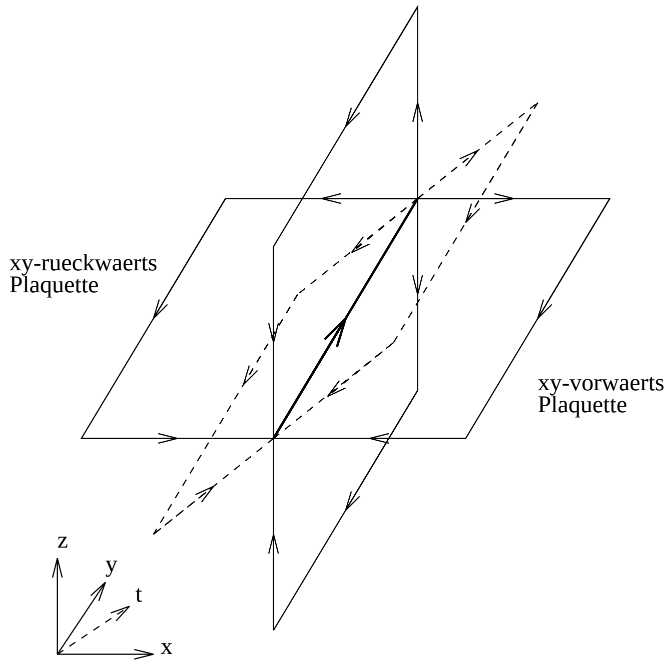

Abbildung 3.1: An jeder Verbindungsvariable (Mitte) hängen sechs Heftklammern, mit denen bei der Aktualisierung die Wirkung berechnet wird

Bei einer *Aktualisierung* (engl. *Update*) des Gitters werden alle Matrizen einmal ausgetauscht. Nach einigen hundert (oder auch tausend) Aktualisierungen hat sich das System thermalisiert. Von allen Monte-Carlo-Algorithmen thermalisiert der Wärmebadalgorithmus am schnellsten das System, da die wiederholte Anwendung jedes anderen Algoritmus nur den Wärmebadalgorithmus simulieren würde.

Wärmebadalgorithmus für die SU(2) nach Creutz [4]
Die Gruppe SU(2) hat gegenüber den höherdimensionalen speziellen unitären Gruppen den Vorteil, daß sie sich einfach durch

$$U = a_0\mathbf{1} + i\vec{a}\vec{\sigma}$$

$$\mathbf{1} \text{ – Einheitsmatrix} \quad , \quad \vec{\sigma} \text{ – Paulimartizen}$$

$$a_0^2 + \vec{a}^2 = 1 \quad , \quad a_{1,2,3,4} \in \mathbf{R}$$

parametrisieren läßt. Damit schreibt sich das invariante Haar'sche Maß als

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

Die Summe der Heftklammern $\tilde{U}$ hat die Eigenschaft, wieder ein Element der Gruppe SU(2) zu sein, wenn man sie mit der Wurzel ihrer Determinante normiert, $k = |\tilde{U}|^{1/2}$, $\bar{U} = \tilde{U}/k$. Damit schreibt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung (3.3) mit (2.31) als

$$dP(U\bar{U}^{-1}) \sim dU e^{\frac{1}{2}\beta k\ Tr\ U} = \frac{1}{2\pi^2}\;\delta(a^2-1)\;d^4a\;e^{\beta k a_0} \quad . \tag{3.4}$$

Um eine Verbindungsvariable zu ersetzen, muß man eine exponentiell gewichtete Zufallszahl für a_0 aus dem Intervall $[-1,1]$ ziehen,

$$P(a_0) \sim \sqrt{1-a_0^2}\;\;e^{\beta k a_0} \tag{3.5}$$

und einen Punkt $\vec{\alpha}$ auf der Spähre mit dem Radius $1-a_0^2$ zufällig bestimmen. Der Exponentialteil läßt sich invertieren: Wählt man x gleichverteilt aus $]e^{-2\beta k}, 1[$, so ergibt sich $a_0 = 1 + (\beta k)^{-1}\ln(x)$. Für den Faktor $\sqrt{1-a_0^2}$ muß man allerdings einen *Annahme-/Ablehnungsschritt* einführen, d.h. man lehnt die neue Wahl für a_0 mit der Wahrscheinlichkeit $1-\sqrt{1-a_0^2}$ ab und unternimmt einen neuen Versuch, bis a_0 angenommen wird.

Verbesserter Wärmebadalgorithmus für die SU(2)
Das Problem bei dem Wärmebadalgorithmus nach Creutz liegt in der geringen Akzeptanzrate der neuen Verbindungsvariablen. Die Verteilung von $P(a_0) \in [-1,1]$ hat ihr Maximum (besonders für größere β-Werte) etwas unterhalb der 1. Nahe der 1 ist aber der Wurzelfaktor $\sqrt{1-a_0^2}$ klein, die Verbindungsvariablen wird dort häufig abgelehnt. Um diesem Problem entgegenzutreten, verbesserten Fabricius und Haan [5], sowie Kennedy und Pendelton [6], den Wärmebadalgorithmus.

Die Verteilung 3.5 läßt sich bis auf den Faktor $\sqrt{1+a_0}$ durch die χ^2-Verteilung für drei Freiheitsgrade

$$P(\chi^2) \sim \sqrt{\chi^2}\;e^{-\chi^2/2}$$

ersetzen, substituiert man

$$\beta k(1-a_0) = \chi^2/2 \quad .$$

Diese Verteilung hat ihr Maximum bei $\chi^2 = 1$. Man erzeugt eine χ^2-Verteilung mit drei Freiheitsgraden $\chi^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2$, wobei die $x_{1,2,3}$ Gaußverteilt sind. Zur Korrektur des nach oben hin unbeschränkten χ^2-Intervalls, prüft man, ob $a_0 \geq -1$, was $\chi^2 \leq 4\beta k$ entspricht. Den Akzeptanztest führt man mit dem Faktor $\sqrt{1+a_0}$ durch. Ab einer Kopplung $\beta > 1.7$ führt die veränderte Gewichtung der Zufallsverteilung zu einer höheren Akzeptanzrate als bei Creutz.

3.1.2 Overrelaxation – Aufbrechen der Autokorrelation

Durch die Wechselwirkung der Eichfelder hängt die Wahl der neuen Verbindungsvariablen von den benachbarten Verbindungsvariablen ab, deshalb sind die Messungen der thermodynamischen Größen in aufeinanderfolgenden Konfigurationen nicht unabhängig. Es stellt sich also die Frage, wie man die Korrelationen der Konfigurationen aufbrechen kann. Zwar könnte man zwischen zwei Messungen von Observablen soviele Wärmebadaktualisierungen durchführen, bis die Korrelation der Gitter verschwindet, einfacher aber ist es, das Gitter zu durchmischen. Dabei muß gewährleistet sein, daß die Wirkung unverändert bleibt. Ein recht einfaches Verfahren stellte Creutz 1987 [7] vor. Beim *Overrelaxation-Algorithmus* wird die Verbindungsvariable durch ihr Inverses multipliziert mit dem normierte Inverse ihrer Nachbarn ersetzt. Das Gitter wird auf diese Art durch sein „Spiegelbild“ ersetzt. Gespiegelt wird an dem Wert, welcher die Wirkung minimalisiert. Sei wieder $\bar{U}$ die normierte Summe der Heftklammern der Verbindungsvariablen U. Die neue Verbindungsvariable wird als

$$U' = \bar{U}^{-1} U^{-1} \bar{U}^{-1}$$

gewählt. Die Wirkung bleibt unverändert:

$$\begin{aligned} Tr[U'\bar{U}] &= Tr[\bar{U}^{-1}U^{-1}\bar{U}^{-1}\bar{U}] \\ &= Tr[(U\bar{U})^{-1}] \\ &= Tr[(U\bar{U})^{\dagger}] \\ &= Tr[U\bar{U}] \quad . \end{aligned} \tag{3.6}$$

Zweifaches Anwenden des Algorithmus für alle Verbindungsvariablen gibt nicht wieder das ursprüngliche Gitter, es sei denn, man würde die Reihenfolge der Aktualisierung der Variablen umkehren. Gewöhnlicherweise benutzt man drei bis elf Overrelaxation-Schritte pro Wärmebadschritt.

Der Algorithmus ist deterministisch und mikrokanonisch. Er ist deshalb ungeeignet, um eine Konfiguration zu thermalisieren.

3.2 Die Ferrenberg-Swendsen Methode

Die *Histogrammethode* wurde 1988 von Ferrenberg und Swendsen vorgestellt [8]. Ihr liegt die Idee zugrunde, daß ein einziges Histogramm der Wirkung einer sehr langen

MC-Integration die gesamte thermodynamische Information des Systems enthält. Die Zustandsdichte ist unabhängig von dem Eingangsparameter (Kopplung) der Simulation, deshalb läßt sich das Histogramm der Zustandsdichte für jeden anderen Eingangsparameter rekonstruieren. Rein theoretisch, wenn es möglich wäre, ein perfektes Histogramm für einen Parameter zu erhalten, wäre es nicht mehr nötig den Parameterraum (Bereich für die Koppplung) zu durchfahren, um das funktionale Verhalten der thermodynamischen Größen zu bestimmen. Ferrenbergs und Swendsens Hoffnung war, die Effektivität der MC-Simulationen um „zwei oder mehr Größenordnungen zu erhöhen".

Ein halbes Jahr später stellten die beiden Autoren ein verbessertes Verfahren vor, die *Multihistogrammethode* [9]. Hierbei werden die Histogramme aus verschiedenen MC-Integrationen als Informationsquelle verwendet. Während die Einzelhistogrammethode grundsätzlich ein Extrapolationsverfahren ist, läßt sich mit der Multihistogrammethode eine Interpolation durchführen, wenn die Histogramme an benachbarten Punkten des Parameterraumes erstellt wurden, so daß sich ihre Flanken überdecken. Überdecken sie sich etwa bis zur halben Höhe des Histogramms, so hat man für jeden Wert der Kopplung β etwa die gleiche Anzahl von Iterationen der Simulation.

Bei einer MC-Simulation im kanonischen Ensemble werden Konfigurationen mit der Häufigkeit proportional zum Boltzmanngewicht $\exp(-\beta H)$ erzeugt, wobei H die Hamilitonfunktion des Systems ist. Die Wahrscheinlichkeit, ein System bei der Wirkung S zu beobachten, ist

$$P_\beta(S) = \frac{1}{Z(\beta)} W(S) e^{-\beta S} \quad , \tag{3.7}$$

wobei

$$Z(\beta) = \sum_\sigma e^{-\beta H(\sigma)} = \sum_S W(S) e^{-\beta S} \tag{3.8}$$

$$\sum_\sigma = \text{Summe über die Zustände}$$

die Zustandssumme des Systems und $W(S)$ die Anzahl der Zustände zu vorgegebenem S (*Zustandsdichte*) sind:

$$W(S) = \sum_\sigma \delta(S - S(\sigma)) \quad .$$

Da ein thermodynamisches Gleichgewicht simuliert wird, sollte für einen langen Lauf der Simulation das Wirkungshistogramm $N_\beta(S)$ geteilt durch die Gesamtzahl der Messungen $n_\beta = \sum_S N_\beta(S)$ gegen die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_\beta(S)$ streben:

$$\frac{N_\beta(S)}{n_\beta} \underset{n_\beta \to \infty}{\longrightarrow} \frac{1}{Z(\beta)} W(S) e^{-\beta S} \quad . \tag{3.9}$$

Der fundamentale Schritt besteht nun darin die Kopplung zu verschieben: Ist die Verteilung für eine Kopplung β bekannt, so weiß man auch die Verteilung für jede andere Kopplung

$$P_{\beta'}(S) = \frac{1}{Z(\beta')} W(S) e^{-\beta' S} \quad . \tag{3.10}$$

Auch die Zustandssumme zu einer anderen Kopplung läßt sich durch die bekannte Zustandssumme und Wahrscheinlichkeitsverteilung ausdrücken:

$$\begin{aligned} Z(\beta') &= \sum_S W(S) e^{-\beta' S} \\ &= \sum_S \left[W(S) e^{-\beta S} e^{-(\beta'-\beta)S} \right] \\ &= Z(\beta) \sum_S \left[P_\beta(S) e^{-(\beta'-\beta)S} \right] \quad . \end{aligned} \tag{3.11}$$

Invertiert man Gl.(3.9) zu

$$W(S) = \frac{Z(\beta)}{n_\beta} N_\beta(S) e^{\beta S} \quad , \tag{3.12}$$

so ergibt sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung für eine beliebige Kopplung β':

$$P_{\beta'}(S) = \frac{N_\beta(S)}{n_\beta} \frac{Z(\beta)}{Z(\beta')} e^{-(\beta'-\beta)S} = \frac{N_\beta(S) e^{-(\beta'-\beta)S}}{\sum_{S'} N_\beta(S') e^{-(\beta'-\beta)S'}} \tag{3.13}$$

und damit der Erwartungswert einer thermodynamischen Observablen O als

$$\langle O_\beta \rangle = \sum_S O(S) P_\beta(S) \quad . \tag{3.14}$$

Bei der Multihistogrammethode summiert man die Histogramme zu verschiedenen Kopplungen mit den Gewichten $g_k^{-1} = (1 + 2\tau_k)^{-1}$, die man durch die Autokorrelationszeiten τ_k erhält. Sind $N_k(S)$ die gemessenen Histogramme zu den Simulationen $k = 1, \ldots, r$ und $n_{\beta_k} = n_k = \sum_S N_k(S)$ die Anzahl der Messungen der Simulation k bei der Kopplung β_k, so lassen sich zwei Zustandssummen durch

$$\begin{aligned} Z(\beta_k) &= Z(\beta_l) \cdot \frac{1}{n_l} \cdot z_{\beta_l}(\beta_k) \\ z_{\beta_l}(\beta_k) &:= \sum_S N_l(S) e^{-(\beta_k - \beta_l)S} = n_l \frac{Z(\beta_k)}{Z(\beta_l)} \end{aligned} \tag{3.15}$$

verbinden. Die r Zustandssummen der einzelnen Simulationen müssen gleich der gemeinsamen Zustandssumme für alle Daten sein. Die freie Energie $F = -\ln Z$ jeder Simulation ist nur bis auf eine gemeinsame additive Konstante bestimmt. Durch die Parameter $f_k = F(\beta_k)$, die der freien Energie

$$F(\beta_k) - F(\beta_l) = -\ln z_{\beta_l}(\beta_k) + \ln n_l$$

entsprechen, läßt sich die Relation zwischen der Zustandsdichte $W(S)$ und den gemessenen Histogrammen schreiben als:

$$\begin{aligned} W_k(S) &= \frac{N_k(S)}{n_k} Z(\beta_k) e^{\beta_k S} \\ &= \frac{N_k(S)}{n_k} e^{-f_k+\beta_k S} \quad . \end{aligned} \tag{3.16}$$

Simulationen zu verschiedenen Kopplungen lassen sich mit beliebigen, positiven p_k durch

$$W(S) = \sum_{k=1}^{r} p_k(S) W_k(S) \tag{3.17}$$

mit $\sum_k p_k(S) = 1$ verknüpfen.

Nun fügt man die Histogramme in Gl.(3.17) ein. Dabei wird jeder Messwert mit dem Gewicht aus der Autokorrelationszeit multipliziert, wenn er zu dem Gesamthistogramm addiert wird. Die Gewichte $p_k(S)$ ergeben sich, durch das minimieren des Fehlers von $W(S)$. Man erhält:

$$p_k(S) = \frac{n_k \; g_k^{-1} \; e^{-\beta_k S + f_k}}{\sum_{l=1}^{r} n_l \; g_l^{-1} \; e^{-\beta_l S + f_l}} \tag{3.18}$$

So ergeben sich die Multihistogrammgleichung als

$$W(S) = \frac{\sum_{k=1}^{r} N_k(S) \; g_k^{-1}}{\sum_{l=1}^{r} n_l \; g_l^{-1} \; e^{-\beta_l S + f_l}} \tag{3.19}$$

und die Zustandssumme (3.8)

$$Z(\beta_k) = \sum_S W(S) e^{-\beta_k S} = e^{-f_k} \quad . \tag{3.20}$$

Die freien Energien werden selbstkonsitent durch die Iteration der letzten beiden Gleichungen gefunden. Da man zu der freien Energie eine beliebige Konstante hinzuaddieren kann, setzt man im allgemeinen die freie Energie der ersten Simulation gleich Null. Die gefundene Lösung ist eindeutig.

Kapitel 4

Resultate

4.1 Die Simulationen

Für meine Arbeit habe ich auf symmetrischen Gittern verschiedener Größe das Verhalten der reinen SU(2)-Eichtheorie untersucht. Das Simulationsprogramm verfügt über folgende Funktionen: Einlesen und Abspeichern von Konfigurationen (Menge der Verbindungsvariablen und Meßwerte), Erzeugen von Startkonfigurationen, Wärmebad- und Overrelaxation-Algorithmus, Messen des Plaquette-Erwartungswertes und des Polyakov-Loops, Messen der Plaquette-Korrelation. Um einen zu großen Einfluß der Randeffekte zu vermeiden, wurden periodische Randbedingungen in allen Richtungen implementiert.

Zuerst thermalisiert das Programm ein gegebenes System, das heißt, es wird ein Gitter erzeugt, dessen Verbindungsvariablen mit der Wahrscheinlichkeitsverteilung (3.3) zu einer gegebenen Kopplung β gewählt sind. Hierzu wurde 1000 bis 2000 mal der Wärmebadalgorithmus angewandt. Nach der Thermalisierung habe ich, je nach Wahl der Kopplung und der Größe des Gitters, 30 000 bis 1 800 000 Messungen vorgenommen. Zwischen den Messungen habe ich das Gitter mit *einem Wärmebadschritt und drei Overrelaxation-Schritten* aktualisiert. Diese Art von Aktualisierung bezeichne ich im folgenden mit *einer Iteration.*

Mit den Funktionen Abspeichern und Einlesen war es mir möglich, nach einer wählbaren Anzahl Iterationen die Simulation zu unterbrechen, das Zwischenergebnis auszuwerten und eventuell die Konfiguration weiter zu iterieren.

Von dem Simulationsprogramm gibt es zwei verschiedene Versionen, eine skalare Version für Workstations und eine vektorielle Version für Vektorrechner. Die Versionen unterscheiden sich durch die Art der Adressierung und den Zufallszahlengenerator. Für die Richtigkeit der Simulationen der Gittereichtheorie ist es entscheidend, einen guten Zufallszahlengenerator zu wählen. Das 16^4-Gitter wurde im wesentlichen auf der S600 der RWTH-Aachen gerechnet. Das Programm erreichte dort einen Vektorisierungsgrad von 86% mit dem Zufallszahlengenerator G05 von NAG-Mark15. Die Ergebnisse des 12^4-Gitters stammen von der Convex des hiesigen HRZ. Die Simulationen auf den kleineren Gittern 4^4, 6^4 und 8^4 wurden auf dem

DEC-Alpha Pool der Theoretischen Physik durchgeführt.

Die Wahl von einem Wärmebadschritt und drei Overrelaxation-Schritten (1+3) habe ich aus folgenden Gründen getroffen: Ein Overrelaxation-Schritt benötigt etwa 26% der Rechenzeit eines Wärmebadschrittes. Die drei Overrelaxation-Schritte verringern die Autokorrelation wie ein Wärmebadschritt. Das Histogramm der Messungen nach jeder (1+0) Iteration hätte zu viel redundante Information enthalten. Die Wahl (1+3) optimierte das Informations-Zeit-Verhältnis für das Messen der Erwartungswerte von Plaquette und Polyakov-Loop.

4.2 Die Bestimmung der spezifischen Wärme

Wie in dem Abschnitt 2.3 erwähnt, gibt es prinzipiell zwei Möglichkeiten, die spezifische Wärme zu bestimmen.

Betrachten wir zunächst die spezifische Wärme zu einer einzelnen Kopplung. Die Varianz der Energie kann nach (2.35) als Summe über die Plaquetten geschrieben werden. Um die spezifische Wärme des gesamten Gitters mittels n Iterationen zu approximieren, muß man zwei Mittelungsschritte durchführen: Das Gittermittel über die N Plaquetten ($-$) und die Mittelung über die n Iterationen ($<\ >$):

$$\begin{aligned} C_V(\beta) = \frac{d}{d\frac{1}{\beta}}\left\langle \overline{E} \right\rangle &= \beta^2 \left(\frac{1}{Nn} \sum_{P,P'} \sum_{i=1}^{n} E_{P,i} E_{P',i} - \frac{1}{Nn^2} \sum_{i,j=1}^{n} \sum_{P} E_{P,i} \sum_{P'} E_{P',j} \right) \\ &= \beta^2 \left(\frac{N}{n} \sum_{i=1}^{n} \overline{E_i}\ \overline{E_i} - \frac{N}{n^2} \sum_{i,j=1}^{n} \overline{E_i}\ \overline{E_j} \right) \\ &= \beta^2 N \left(\left\langle \overline{E}^2 \right\rangle - \left\langle \overline{E} \right\rangle^2 \right) \quad . \end{aligned} \tag{4.1}$$

Für die zweite Möglichkeit bildet man den Differenzenquotienten, oder eine andere numerische Ableitung, aus zwei um $\Delta\beta$ verschiedenen Messungen von $\left\langle E(\beta) \right\rangle$:

$$C_V(\beta) = \frac{d}{d\frac{1}{\beta}} \left\langle E(\beta) \right\rangle = -\beta^2 \frac{d}{d\beta} \left\langle E(\beta) \right\rangle \tag{4.2}$$

$$C_V(\beta + \tfrac{1}{2}\Delta\beta) = -(\beta + \tfrac{1}{2}\Delta\beta)^2 \ \frac{\left\langle E(\beta+\Delta\beta) \right\rangle - \left\langle E(\beta) \right\rangle}{\Delta\beta} \quad . \tag{4.3}$$

Der letzte Ausdruck ist positiv, weil $\left\langle E(\beta+\Delta\beta) \right\rangle - \left\langle E(\beta) \right\rangle < 0$.

Für das 16^4-Gitter sind die Ergebnisse dieser beiden Methoden in der Abbildung 4.1 eingezeichnet. Man erkennt deutlich den Peak der spezifischen Wärme zwischen β=2.20 und β=2.30. Überraschender Weise decken sich die Ergebnisse der Varianzmethode ($\circ$) (4.1) und der Differenzenmethode ($\triangle$) (4.2) nicht.

Der Grund für die Diskrepanz ist in der Autokorrelation der Messungen zu suchen. Die Formel zur Berechnung der spezifischen Wärme (4.1) entspricht bis auf

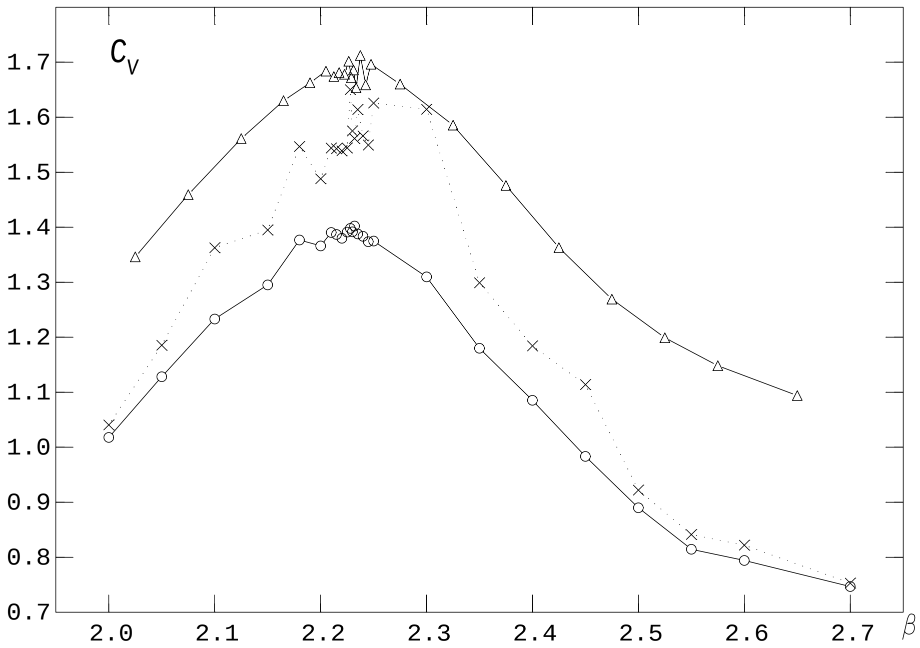

Abbildung 4.1: Die spezifische Wärme des 16^4-Gitters aufgetragen über einen weiten Bereich der Kopplung β. Die drei Kurven sind aus der Differenzenmethode ($\triangle$), der Fehlerschätzung ($\times$) und der direkt gemessenden Schwankung ($\circ$) gewonnen. Die Punkte der Kurven sind durch Polygonzüge verbunden um das Auge zu führen.

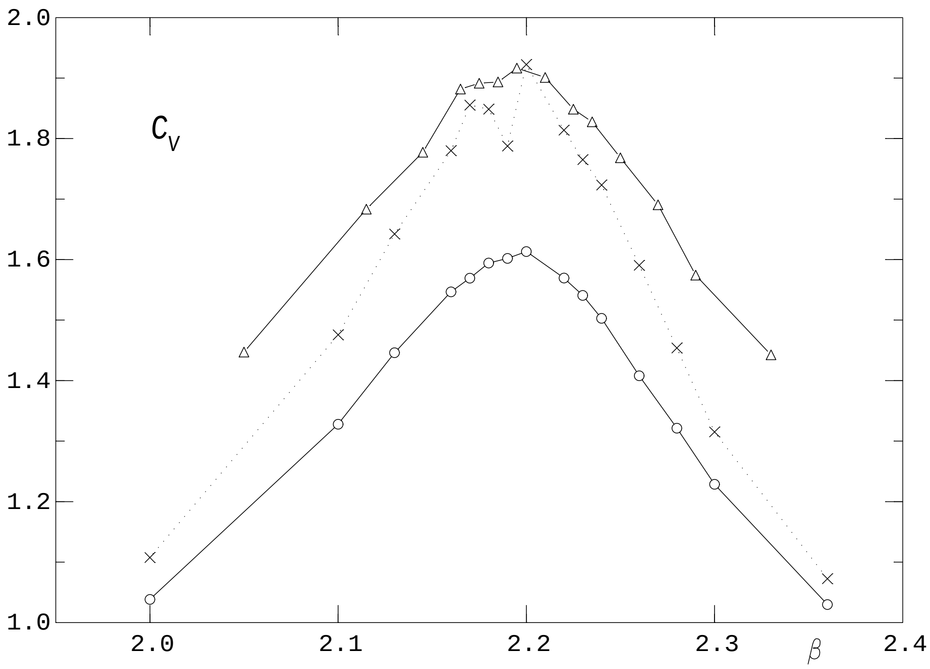

Abbildung 4.2: Die verschiedenen Methoden zur Bestimmung der spezifische Wärme des 4^4-Gitters im Vergleich (Bezeichnungen wie in 4.1).

den Volumen- und den β-Faktor der Formel für die Varianz

$$\sigma^2(\overline{E}) = \left\langle \overline{E}^2 \right\rangle - \left\langle \overline{E} \right\rangle^2 \quad . \tag{4.4}$$

Die Berechnung der spezifischen Wärme entspricht also einer Fehlerschätzung. Aber der Vergleich zeigt, daß die spezifische Wärme nach der Schätzung des naiven Fehlers (4.4) systematisch zu klein ist, weil die Meßwerte der Plaquetten korreliert sind. Im folgenden soll eine Methode der Fehlerschätzung vorgestellt werden, die die Autokorrelation der Daten berücksichtigt.

Die Idee der Blockmethode ist, mehrere korrelierte Meßwerte $x_j = \overline{E}_j$ der Simulation zu einem Block zusammenzufassen und den Mittelwert der Meßwerte als neuen unkorrelierten Meßwert zu interpretieren. Dazu wird zuerst der *Nächste-Nachbar-Korrelations-Koeffizient* $K(1)$ ausgerechnet:

$$K(1) = \frac{\frac{1}{n-1}\left[\sum_{j=1}^{n-1} x_j x_{j+1} - \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n-1} x_j \sum_{j=2}^{n} x_{j+1}\right]}{\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_j^2 - \left(\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} x_j\right)^2} \quad . \tag{4.5}$$

n ist die Anzahl der Daten $\{x_j\}$. Für unkorrelierte Daten schwankt $K(1)$ um Null, für stark korrelierte Daten $x_j \simeq x_{j+1}$ haben Nenner und Zähler den gleichen Wert, $K(1)$ geht gegen 1.

Nun faßt man je b Daten zu einem neuen Wert zusammen

$$y_j^{(b)} = \frac{1}{b}\sum_{k=1}^{b} x_{b(j-1)+k}$$

und berechnet deren Nächste-Nachbar-Korrelations-Koeffizient:

$$K(b) = \frac{\frac{1}{\frac{n}{b}-1}\left[\sum_{j=1}^{\frac{n}{b}-1} y_j^{(b)} y_{j+1}^{(b)} - \frac{1}{\frac{n}{b}-1}\sum_{j=1}^{\frac{n}{b}-1} y_j^{(b)} \sum_{j=2}^{\frac{n}{b}} y_{j+1}^{(b)}\right]}{\frac{b}{n}\sum_{j=1}^{\frac{n}{b}} y_j^{(b)2} - \left(\frac{b}{n}\sum_{j=1}^{\frac{n}{b}} y_j^{(b)}\right)^2} \quad . \tag{4.6}$$

Der Nenner von (4.6) ist die Varianz der geblockten Daten:

$$\sigma^2(b) = \sigma^2(y^{(b)}) \quad . \tag{4.7}$$

Man erhält eine Folge von Korrelationen und Varianzen der geblockten Daten $y^{(b)}$. Man bricht die Rechnung ab, wenn zu wenig ($\simeq 20$) Blöcke verbleiben. Die Folge der Korrelationskoeffizienten $K(b)$ wird zuerst durch das Blocken abfallen, da die Blöcke zunehmend ihre Korrelation verlieren. Später wird die Folge jedoch wieder ansteigen, weil die wenigen, großen Blöcke Summen über so viele Meßwerte sind, daß sie sich nur gering von einander unterscheiden, $y_j^{(b)} \simeq y_k^{(b)}$ und damit $y_j^{(b)} \simeq y_{j+1}^{(b)}$.

Entsprechend steigt die Varianz der geblockten Daten zunächst an und fällt für große Blöcke wieder ab. Wenn die Gesamtzahl der Daten genügend groß ist, verbleibt der Wert der Varianz über einige Mittelungsschritte auf einem Plateau. Innerhalb dieses Plateaus wählt man den Datensatz $\bar{y}$ mit dem kleinsten Korrelationskoeffizienten. Das Verhältnis

$$a = \frac{\sigma^2(\bar{y})}{\sigma^2(x)} \tag{4.8}$$

kann als integrierte Autokorrelationszeit interpretiert werden. Die Meßdaten $\{x_j, x_{j+a}, x_{j+2a}, \ldots\}$ haben die Autokorrelationszeit 1.

Für eine realistische Fehlerschätzung nimmt man diese Daten als Eingabe, bestimmt das Plateau der Varianz und normiert die so erhaltene Varianz mit der Gesamtanzahl der unkorrelierten Daten. Multipliziert mit dem Faktor β^2 erhält man eine verbesserte Schätzung der spezifischen Wärme aus der Schwankung. Sie ist in den Abbildungen 4.1 und 4.2 als Kreuz ($\times$) eingezeichnet. Für die anderen Gitter ergibt sich ein ähnliches Bild, die beiden Gitter sind beispielhaft herausgegriffen. Auch diese Schätzung deckt sich noch nicht mit der Differenzenmethode, sie zeigt aber die Ursache der Diskrepanz der beiden Ergebnisse. Weiteren Aufschluß wird die Ferrenberg-Swendsen Methode bringen.

4.3 Ergebnisse der Histogramm-Methode

Das Simulationsprogramm maß nach jeder Iteration den Gittermittelwert der Plaquette $\overline{E}$ und des Polyakov-Loops, und speicherte jeden dieser Werte in einer Datei ab. Aus diesen Dateien erstellte das Interpolationsprogramm Histogramme und führte eine Interpolation nach Abschnitt 3.2 durch. Die Qualität der Ergebnisse der Histogramm-Methode ist durch die Güte des Gesamthistogramms beschränkt. Um eine ausreichende Anzahl von Meßpunkten zu jedem Wirkungsintervall zu erhalten, ist es notwendig, die Kopplungen β_k so zu wählen, daß die Histogramme $W_k(S)$ gut überlappen. In der Abbildung 4.3 sind die Histogramme der einzelnen Simulationen auf dem 6^4-Gitter und das Gesamthistogramm als deren gewichtete Summe dargestellt. Aus dieser Grafik läßt sich abschätzen, in welchem Bereich die Interpolation sinnvolle Resultate bringen kann. In dem Bereich $\langle E \rangle \simeq 0.38$ bis $\langle E \rangle \simeq 0.44$ sind genügend Einträge vorhanden. Diesem Bereich des Plaquette-Erwartungswertes entspricht der Bereich der Kopplung $2.16 \leq \beta \leq 2.34$. Für die anderen Gitter ergibt sich ein ähnliches Bild. Allerdings nimmt die Breite der Histogramme mit zunehmender der Gittergröße ab, da bei einem größeren Gitter über mehr Plaquetten gemittelt wird, also die Schwankung des Gittermittelwertes sinkt.

Bei der Anwendung der Ferrenberg-Swendsen Methode zeigte sich ein recht erstaunliches Ergebnis. Nicht die Eingangsdaten ($\circ$) wurden interpoliert, sondern die spezifische Wärme, welche aus dem numerischen Differenzenquotienten ($\triangle$) gewonnen wurde. Das Ferrenberg-Swendsen-Programm hat die Autokorrelationen auf seine Art mit berücksichtigt. Man beachte besonders die Vergrößerung der Interpolations-

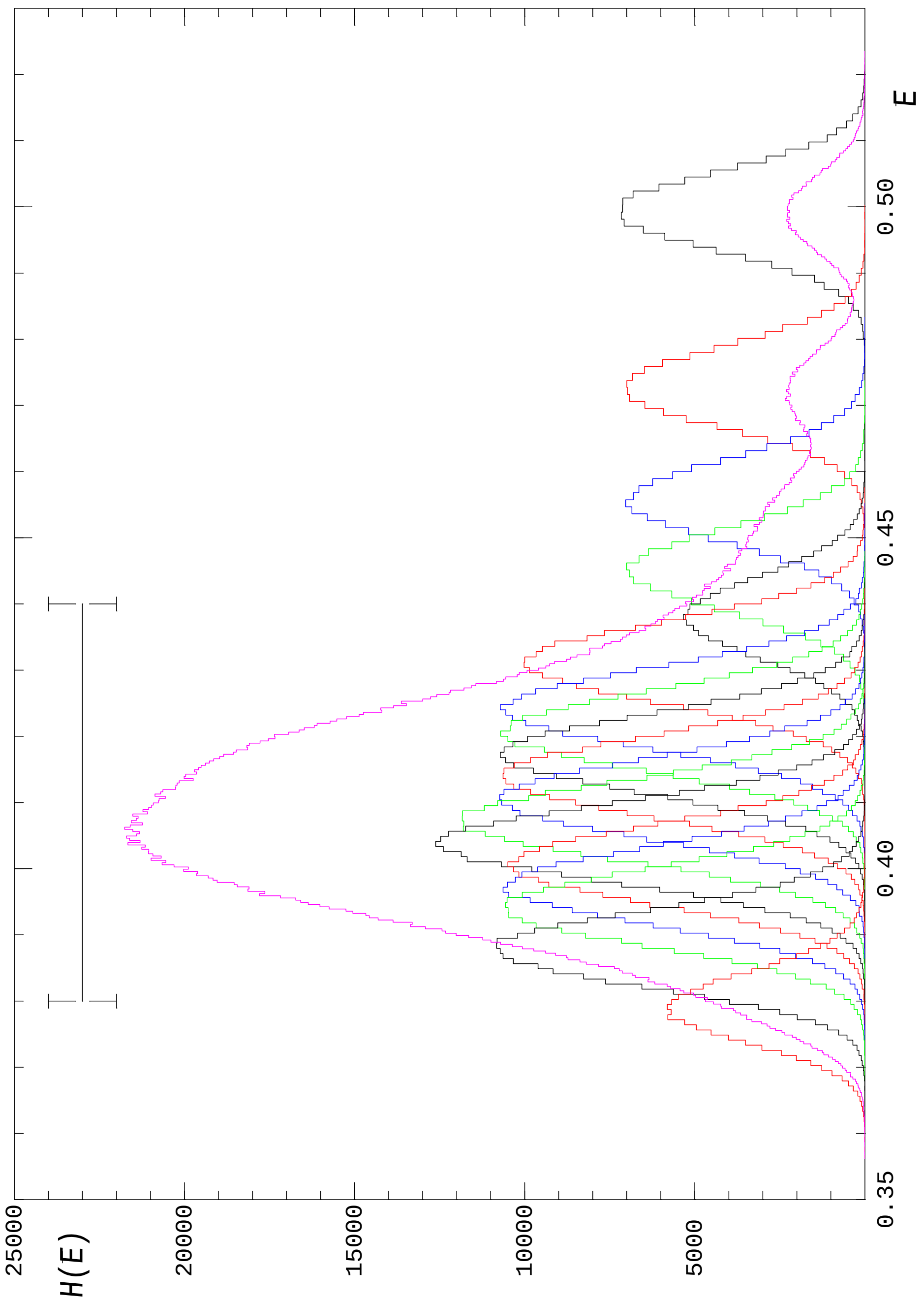

Abbildung 4.3: 6^4: Einzelhistogramme und Gesamthistogramm des Gittermittels der Plaquette $\bar{E}$. Der Bereich, in den ausreichend Daten für eine Interploation nach Ferrenberg-Swendsen vorhanden sind, ist mit der waagerechten Linie markiert.

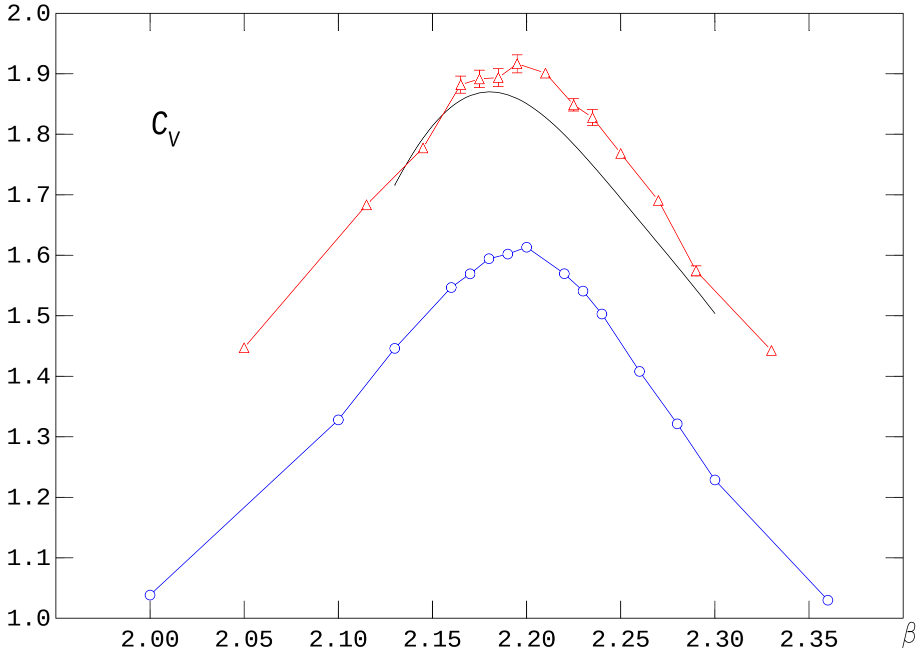

Abbildung 4.4: Spezifische Wärme des 4^4-Gitters. Die Ergebnisse der Differenzenmethode ($\triangle$) und der direkt gemessenden Schwankung ($\circ$) sind durch Polygonzüge verbunden um das Auge zu führen. Die Ferrenberg-Swendsen-Interpolation ist als schwarze Kurve eingezeichnet.

kurve des 12^4-Gitters, Abbildung 4.8. In den Abbildungen 4.4 bis 4.9 finden sich die Ergebnisse der Interpolation.

Wie man an den Grafiken sieht, liefern die Ferrenberg-Swendsen-Interpolation und die Differenzenmethode konsistente Werte für die spezifische Wärme. Wie läßt sich der Fehler dieser Ergebnisse schätzen?

Für die Differenzenmethode habe ich den Fehler folgendermaßen geschätzt: Zuerst bestimmte ich den Fehler des Plaquette-Erwartungswertes mit dem oben beschriebenen Block-Verfahren. Bei der Subtraktion der Plaquette-Erwartungswerte kann sich im ungünstigsten Fall der absolute Fehler aufaddieren:

$$\Delta C_V(\tfrac{1}{2}(\beta_i+\beta_{i+1})) = -(\tfrac{1}{2}(\beta_i+\beta_{i+1}))^2 \; \frac{\Delta\Big\langle E(\beta_i)\Big\rangle + \Delta\Big\langle E(\beta_{i+1})\Big\rangle}{\beta_i-\beta_{i+1}} \quad . \tag{4.9}$$

Dieser Fehler ist an den $\triangle$-Symbolen eingezeichnet. Liegen die Punkte weiter auseinander, so verschwinden die Fehlerbalken in den Symbolen. Probleme bereitet die Differenzenmethode wenn Meßpunkte dicht beieinanderliegen, denn dann werden zwei kleine Zahlen durcheinander geteilt.

Für die Ferrenberg-Swendsen-Interpolation bietet sich die Fehlerabschätzung mit der Jackknife-Methode an. Ich habe versucht mit einer verschiedenen Anzahl von Blöcken (6,10,20) einen Fehlerkorridor zu bestimmen. Offenbar unterschätzt das

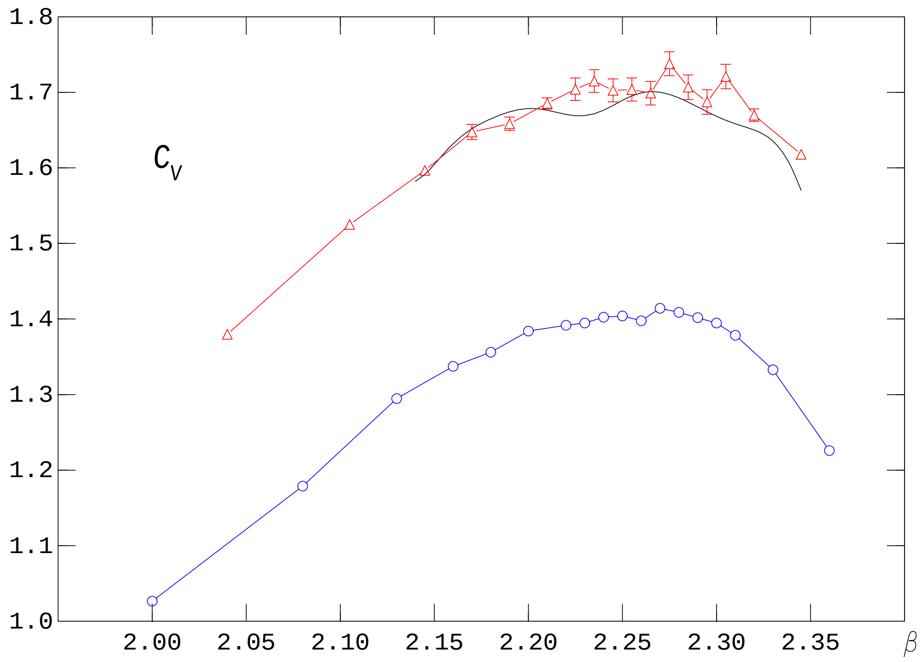

Abbildung 4.5: Spezifische Wärme des 6^4-Gitters (Bezeichnungen wie in der Abbildung 4.4.

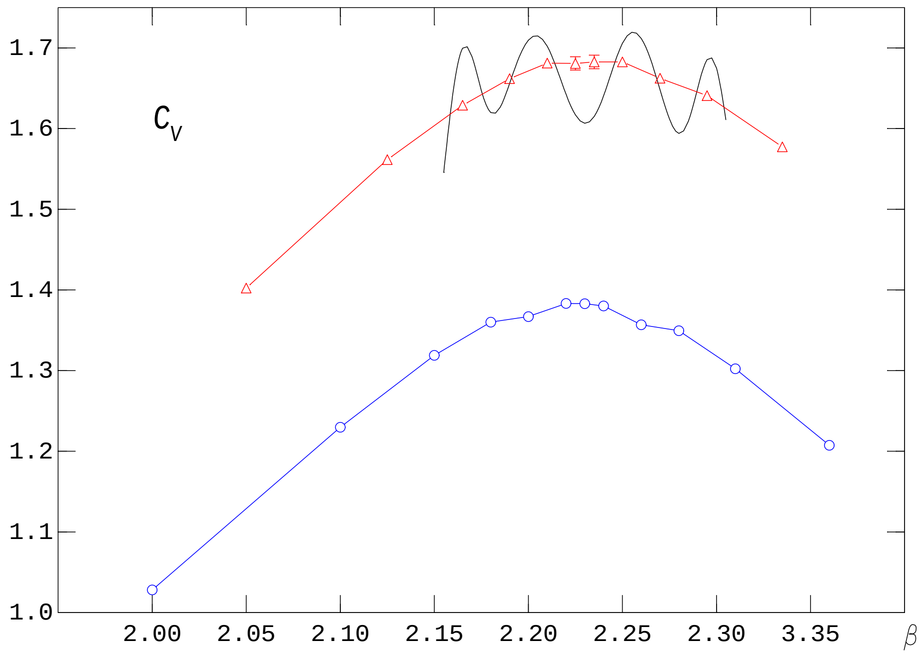

Abbildung 4.6: Spezifische Wärme des 8^4-Gitters (Bezeichnungen wie in der Abbildung 4.4).

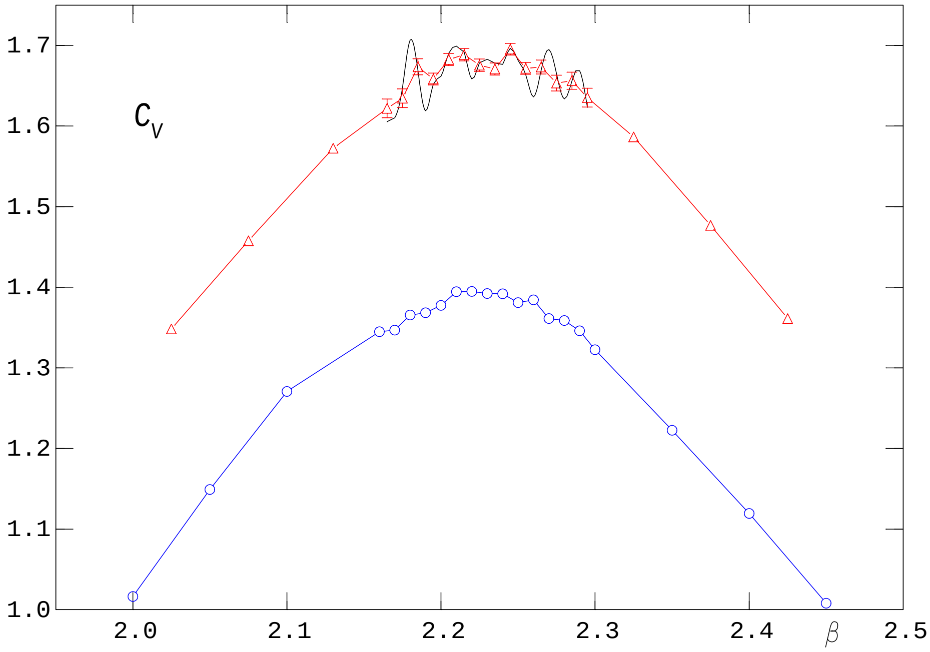

Abbildung 4.7: Spezifische Wärme des 12^4-Gitters (Bezeichnungen wie in der Abbildung 4.4).

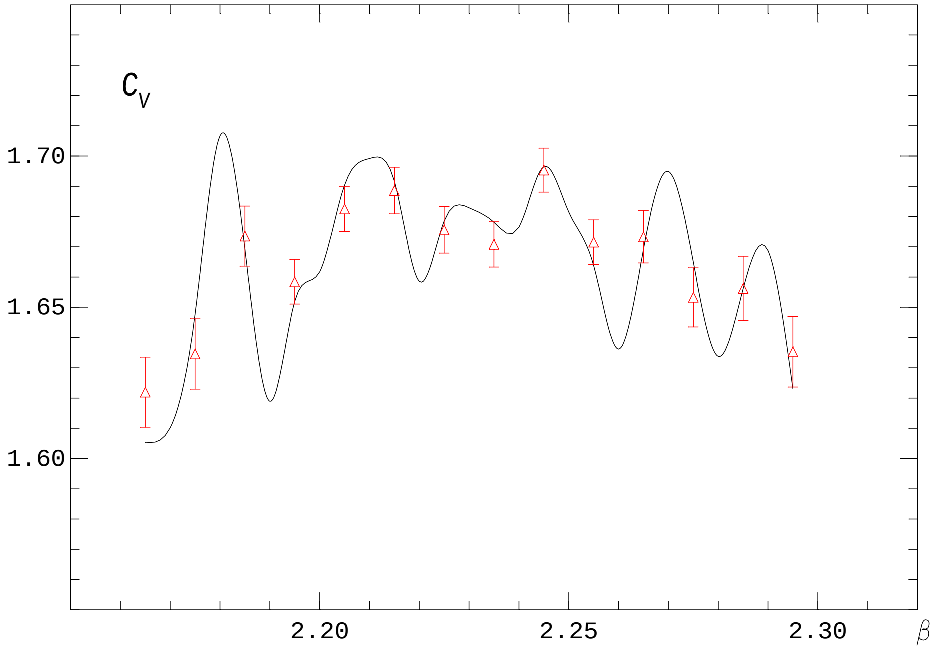

Abbildung 4.8: 12^4-Gitter: In der Vergrößerung erkennt man, wie gut die Interpolationskurve die Punkte aus dem Differenzenverfahren ($\triangle$) durchläuft.

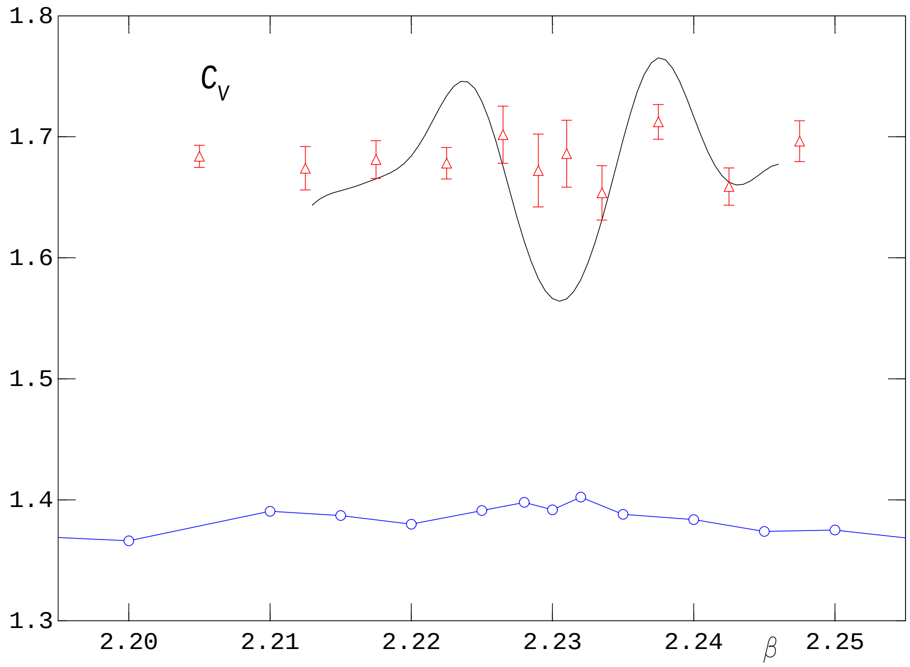

Abbildung 4.9: Interpolation der spezifischen Wärme des 16^4-Gitters. Diese Abbildung ist ein Ausschnitt der Spitzen der Kurven von Abbildung 4.1. Hier zeigt sich deutlich die Grenze des Verfahrens, nur die Gesamthöhe der Interpolation besitzt eine Aussage, ein Peak ist nicht erkennbar.

Jackknife-Verfahren den Fehler deutlich. Der Fehlerkorridor ist unwesentlich breiter als die Linie. Der Fehler der Ferrenberg-Swendsen-Resultate dürfte eher in der Größenordnung der Schwankungen liegen.

Mit zunehmender Gittergröße wird es schwieriger das Maximum der spezifischen Wärme einzugrenzen. Zum einen steigt der Zeitbedarf für eine Iteration wie N^4. In die Simulation des 16^4-Gitters wurde 1.5 mal soviel Rechenzeit investiert wie in die der anderen Gitter zusammen. Zum anderen ist bei großen Gittern die Schwankung des Gittermittels der Plaquette geringer, weil bei jeder Iteration über mehr Plaquetten gemittelt wird. Dies wird durch den größeren Volumenfaktor kompensiert. Hier liegt der Grund für die beachtlichen Schwankungen der Ferrenberg-Swendsen-Interpolation für die größeren Gitter.

Das Problem der geringen Statistik möchte ich anhand von Abbildung 4.10 verdeutlichen. In der Grafik sind die Zwischenergebnisse der Messungen der spezifischen Wärme über der bis dahin durchgeführten Anzahl Iterationen aufgetragen. Jede Kurve zeigt den Verlauf des Mittelwertes einer Simulation. Man sieht deutlich, daß für eine Lokalisierung des Maximums mindestens 750 000 Iterationen je Kopplung notwendig sind. Das 6^4-Gitters ist beispielhaft herausgegriffen, für die größeren Gitter ergibt sich ein ähnliches, leicht schlechteres Bild, da weniger Iterationen durchgeführt wurden. Nur das 4^4-Gitter bereitet weniger Probleme. Es lassen sich schnell viele Iterationen erzeugen und der Peak ist deutlicher ausgeprägt.

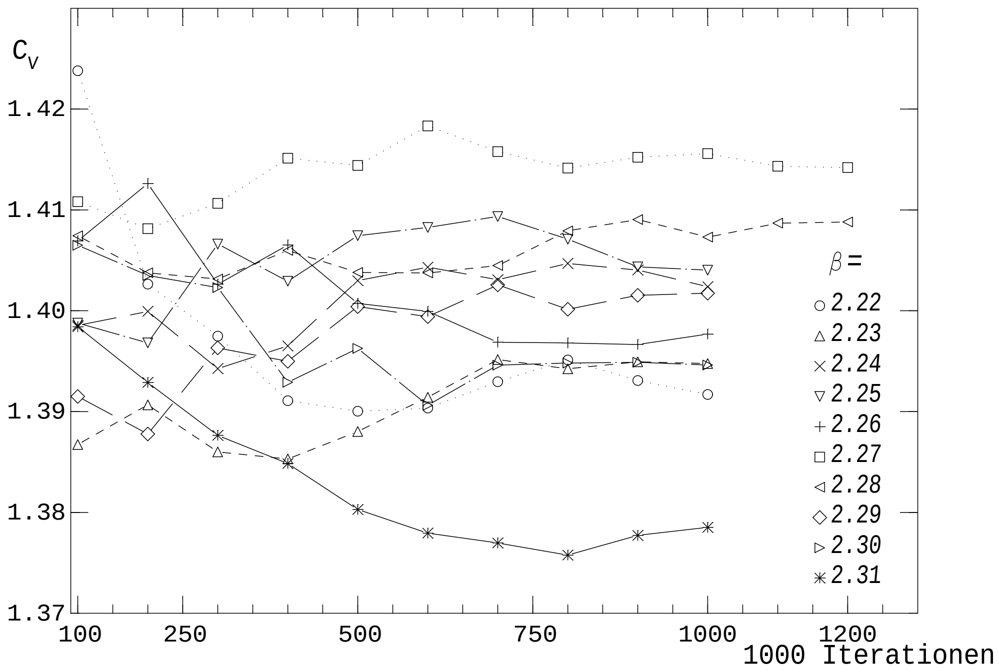

Abbildung 4.10: Entwicklung der spezifischen Wärme des 6^4-Gitters für die Simulationen zu $\beta = 2.22$ bis $\beta = 2.31$

4.4 Vergleich der Gitter

In den Abbildungen 4.11, 4.12 und 4.13 ist die spezifische Wärme, welche durch die Differenzenmethode gewonnen wurde im Vergleich der verschiedenen Gitter eingezeichnet. Bei den drei größeren Gittern zeigt sich keine Abhängigkeit des Peaks von der Gittergröße. Bei dem 6^4-Gitter ist der Peak geringfügig nach rechts verschoben und etwas höher als bei den größeren Gittern. Das Maximum läßt sich in Abbildung 4.5 in der Nähe von β=2.28 lokalisieren. Das 4^4-Gitter zeigt einen deutlich stärkeren Anstieg der spezifischen Wärme. Auch ist der Peak leicht nach links verschoben. In der folgenden Tabelle befinden sich die Positionen der Peaks:

N^4	β	C_V
4	2.18 - 2.20	1.91
6	2.27 - 2.29	1.73
8	2.21 - 2.25	1.68
12	2.21 - 2.25	1.69
16	2.20 - 2.25	1.68

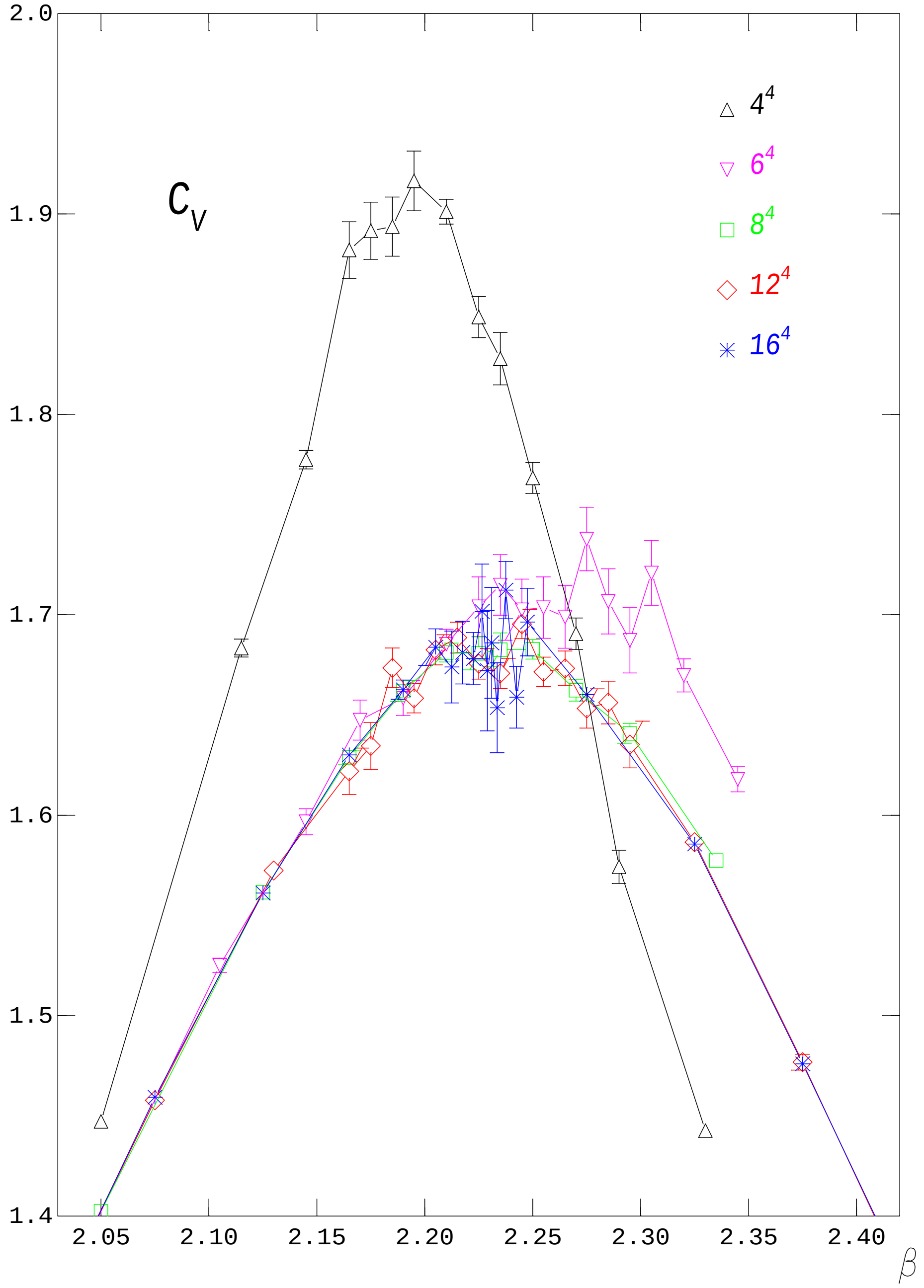

Abbildung 4.11: Ergebnisse der Differenzenmethode aller 5 Gitter im Vergleich

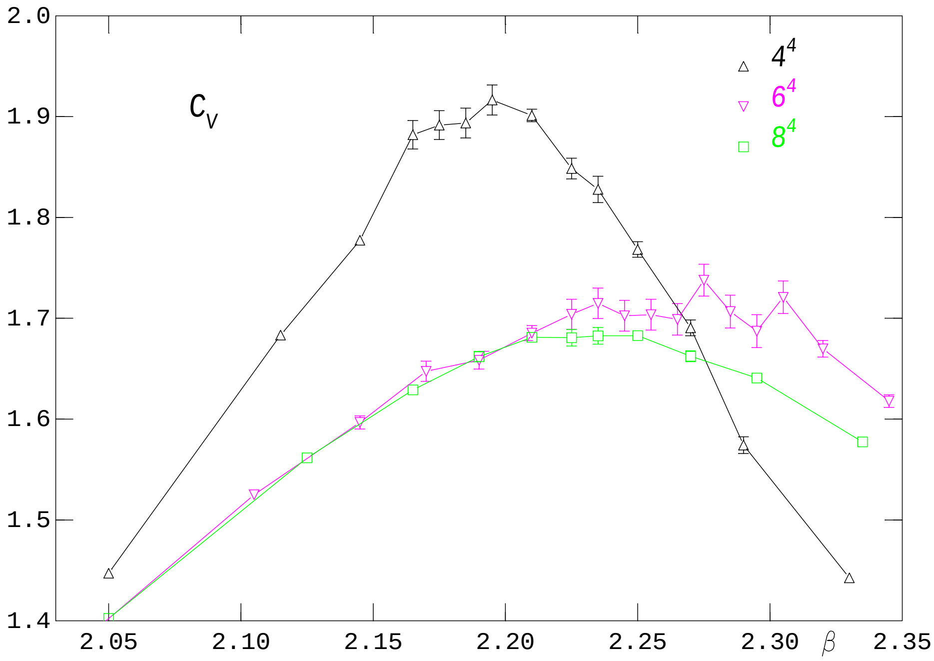

Abbildung 4.12: Bei den drei Gitter 4^4, 6^4 und 8^4 besitzt der Peak der spezifischen Wärme eine deutliche Abhängigkeit von der Gittergröße.

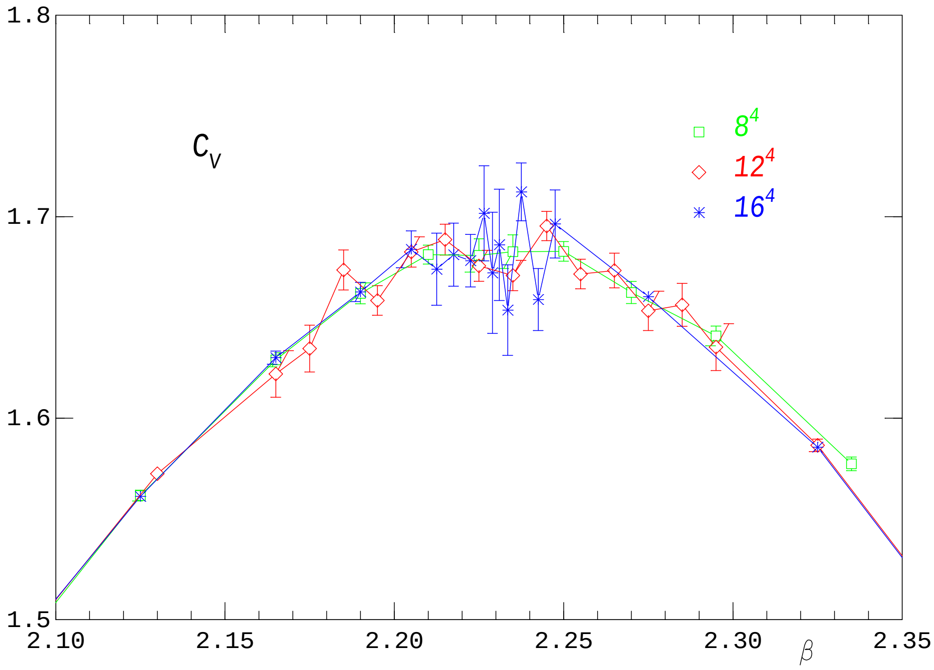

Abbildung 4.13: Bei den Gitter 8^4, 12^4 und 16^4 besitzt der Peak der spezifischen Wärme keine merkliche Abhängigkeit von der Gittergröße.

Kapitel 5

Diskussion

5.1 Untersuchung der spezifischen Wärme im SU(2)-Modell um 1980

In diesem Abschnitt sollen einige ältere Arbeiten vorgestellt werden, die sich ebenfalls mit der pseudo-spezifischen Wärme befaßt haben. Die Übersicht zeigt, daß die Autoren zu recht verschiedenen Ergebnissen gekommen sind, und daß es bis heute keine abschließende Meinung gibt. Bei der Betrachtung der Simulationen (Wahl der Gitter, Anzahl der Iterationen) und deren Ergebnisse, muß man den Stand der damaligen Computertechnik berücksichtigen. Da Speicherplatz und Geschwindigkeit der Computer deutlich geringer waren als heute, konnten nur vergleichsweise kleine Gitter mit einer geringen Anzahl Iterationen untersucht werden.

Im Jahr 1979 verfasste Creutz den Artikel *Confinement and the Critical Dimensionality of Space-Time* [10]. Creutz kommt zu dem Ergebnis, daß ein Phasenübergang zwischen starker und schwacher Kopplung, wie er bei der SO(2) in vier Dimensionen und der SU(2) in fünf Dimensionen vorkommt, bei der SU(2) in vier Dimensionen nicht zu beobachten sei. Creutz's Methode bestand im Abkühlen und Erwärmen einer Konfiguration, das heißt er vergrößerte oder verringerte die Kopplung β und trug den Plaquette-Erwartungswert über der Kopplung auf, wenn sich der Erwartungswert über sechs Iterationen nicht mehr wesentlich verändert hatte. Er führte die Simulationen auf einem 4^4- und 5^4-Gitter durch. Bei den beiden erstgenannten Modellen beobachtete Creutz einen „deutlichen Hysteresis-Effekt“, bei der SU(2) in vier Dimensionen nicht. Ein Hysteresis-Effekt deutet auf einen Phasenübergang 1.Ordnung hin. Lediglich eine verlangsamte Konvergenz des Plaquette-Erwartungswertes von zwei verschiedenen Konfigurationen ließ sich in dem Bereich $2.2 \leq \beta \leq 2.5$ feststellen.

Lautrup und Nauenberg betrachteten 1980 in ihrem Artikel *Correlations and Specific Heat of the SU(2) Lattice Gauge Model* [11] die spezifische Wärme wie im Kapitel 2.3 beschrieben. Sie bestimmten die Kopplung für das Maximum des Peaks auf $\beta \simeq 2.2$. Ihrer Meinung nach verursacht das „*bulk*-Verhalten des Gitters das scharfe Ansteigen der spezifische Wärme". Im Vergleich mit dem U(1)-Modell beobachteten die Autoren kein Ansteigen des Peaks der spezifischen Wärme mit der Gittergröße $4^4 \to 5^4 \to 6^4$, aber ein „*critical slowing down*" für den Bereich großer spezifischer Wärme. Sie interpretierten diese Beobachtung als „ein Wettstreit zweier Phasen".

Falcioni et al. versuchten mit der Technik der Hochtemperaturentwicklung des Plaquette-Erwartungswertes die Herkunft des Peaks auf ein „Paar komplexer Singularitäten nahe der reellen Achse bei $\beta \simeq 2.4$" zurückzuführen [12]. Den Grund für die Diskrepanz zu dem Wert $\beta \simeq 2.2$ sahen die Autoren in der kleinen Ausdehnung der Gitter. Sie mußten jedoch zugeben, daß ihre „Hypothese sehr schwer zu prüfen ist".

Zu einem bemerkenswerten Ergebnis kamen Nauenberg, Brower und Schalk 1981 in ihrer Veröffentlichung *Finite-Size scaling and asymptotic freedom of the SU(2) lattice gauge model* [13]. Sie beobachteten im Gegensatz zu den zuvor genannten Wissenschaftlern eine Abhängigkeit der Höhe und dem Ort des Peaks von der Gittergröße. Ebenso beobachteten sie „langreichweitige Korrelationen auf dem Gitter", welche zu einen großen Anteil zu der spezifische Wärme beitrugen (siehe Gleichung (2.35)), daß die „Nächste-Nachbar-Korrelation nur die halbe Höhe des Peaks ausmacht". Im Gegensatz zum üblicherweise beobachteten Skalenverhalten zeigte die spezifische Wärme den deutlichsten Peak beim *kleinsten* Gitter. Je größer das Gitter gewählt wurde, umso kleiner wurde der Peak; auch verschob er sich zu größeren β-Werten. Die Autoren bestimmten das Maximum für den Peak des unendlich großen Gitters auf $\beta \simeq 2.2$. Sie folgerten, daß dieses Verhalten nicht mit einem üblichen Phasenübergang verbunden sei.

Greensite und Lautrup [14] vermuteten 1981, daß das Zentrum Z_2 der Gruppe SU(2) für das besondere Verhalten der SU(2) gegenüber der SO(3) in vier Dimensionen, die einen Hysteresis-Effekt zeigt, verantwortlich seien könnten. „Die SO(3) kann nicht zwischen den Link-Variablen U und $-U$ unterscheiden. Der Verlust der Freiheitsgrade könnte einen Phasenübergang zwischen starker und schwacher Kopplung hervorrufen." Leider ist in dem Artikel kein Vergleich der beiden Modelle mit der SU(2) in fünf Dimensionen zu finden.

Einen Monat später bestimmten die beiden Autoren mittels der *Mean-field*-Methode die Kopplung, bei der die spezifische Wärme ihr Maximum besitzt, auf $\beta = 2.23$ [15]. Sie erreichten damit eine gute Übereinstimmung mit der Monte-Carlo-Simulation von Lautrup und Nauenberg [11].

Bhanot und Creutz [16] benutzten 1981 eine Wirkung, die sich aus zwei Darstellungen, der fundamentalen und der adjungierten, zusammensetzt:

$$S = \sum_P \left[\beta(1 - \tfrac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\,U_P) \;+\; \beta_A(1 - \tfrac{1}{3}\,\mathrm{Tr}_A\,U_P) \right] \quad . \tag{5.1}$$

Für $\beta_A = 0$ erhält man die gewöhnliche Wirkung nach Wilson. Für $\beta = 0$ ist die Wirkung äquivalent zum SO(3)-Modell, mit einem Phasenübergang erster Ordnung bei $\beta_A \simeq 2.5$. Im Grenzfall $\beta_A \to \infty$ beschreibt man das $\mathbf{Z}_2$-Modell, mit einem Pha-

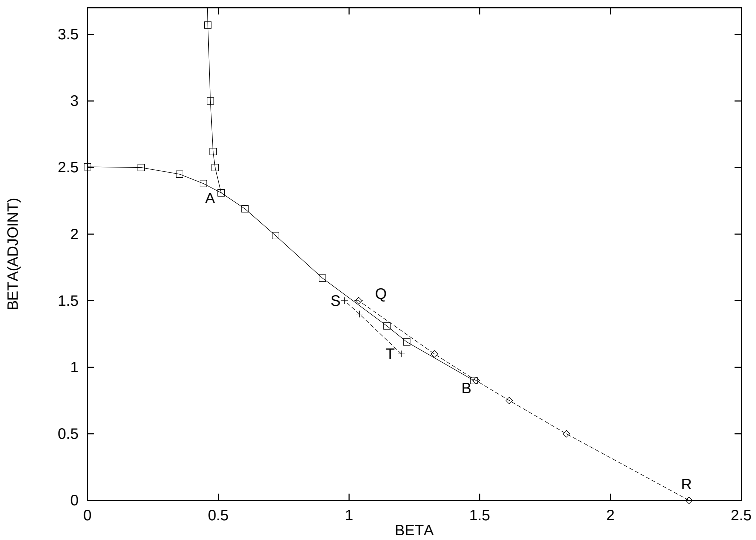

Abbildung 5.1: Phasendiagramm der erweiteren SU(2)-Wirkung. Die durchgezogenen Linien des Phasenüberganges 1.Ordnung sind von der 5^4-Simulation von Bhanot und Creutz [16], die gestrichelte Linie QR ist der Deconfinement-Phasenübergang 2.Ordnung auf dem $8^3 \times 4$-Gitter. Die Abbildung ist aus [17] entnommen.

senübergang erster Ordnung bei $\beta \simeq 0.44$. In der (β, β_A)-Ebene treffen sich die beiden Linien des Phasenübergangs am Punkt A in der Abbildung 5.1. Vom Tripelpunkt geht eine dritte Linie, die einen Phasenübergang erster Ordnung markiert, zum kritischen Punkt B $(\beta, \beta_A) \simeq (1.48, 0.90)$. Der Peak in der spezifischen Wärme der reinen Wilson-Wirkung „kann angesehen werden, als ein Schatten des benachbarten kritischen Punktes“. Der Weg von der starken Kopplung zur schwachen Kopplung kann verschieden gewählt werden: ohne Phasenübergang unter dem kritischen Punkt vorbei, oder mit Phasenübergang über die kritische Linie hinweg, deshalb besteht das Confinement für alle Kopplungen und der „Anstieg der spezifischen Wärme ist ein Gitterartefakt“. Auf Grund der geringen Statistik war es den Autoren nicht möglich den benachbarten Deconfinement-Phasenübergang 2.Ordnung auf dem 5^4-Gitter zu entdecken.

Abschließend soll noch ein aktueller Artikel Beachtung finden, denn Mathur und Gavai klärten 1994 die Situation in der (β, β_A)-Ebene [17]. Sie vervollständigten das Phasendiagramm und identifizierten die Linie vom Endpunkt zur β-Achse als Deconfinement-Phasenübergang der thermischen Feldtheorie. Auf Gittern der Größe $N_s^3 \times N_t = 8^3 \times 2,\ 8^3 \times 4,\ 16^3 \times 8$ wurden die Linien der Phasenübergänge durch die Suszeptibilität des Polyakov-Loops und die Polyakov-Loop-Korrelationen bestimmt. In der Abbildung 5.1 ist die Linie des Phasenübergangs für das Gitter $8^3 \times 4$ eingezeichnet. Sie endet bei $\beta_c \simeq 2.299$, der als Punkt des Deconfinement-Phasenübergangs für die gewöhnliche Wilson-Wirkung von Engels et al. [18] gefunden wurde.

Für Gitter mit größerer Ausdehnung in Zeitrichtung ist der Punkt zu größeren β-Werten verschoben, $\beta_c \simeq 2.427$ (N_t=6) [18]. Die Erklärung für den abweichenden Peak der spezifischen Wärme auf kleinen symetrischen Gittern ist daher vermutlich in der SU(2)-Theorie bei endlicher Temperatur zu suchen.

Zur Übersicht sind noch einmal die verwendeten Gittergrößen und Ergebnisse der zitierten Artikel abgedruckt:

Referenz	Gittergröße	Iterationen	Ergebnis
Creutz [10]	4^4, 5^4	$\simeq$1000	kein Phasenübergang, aber verlangsamte Konvergenz
Lautrup et al. [11]	4^4, 5^4, 6^4	$\simeq$5000	kein Anstieg des Peaks mit der Gittergr., gr. Korrelationlänge
Nauenberg et al. [13]	4^4, 5^4, 6^4, (10^4)	$\simeq$1-6000	Abhängigkeit von der Gittergr. große Korrelationlänge
Bhanot et al. [16]	4^4, 5^4	$\simeq$1000	Schatten des kritischen Punktes Peak ist ein Gitterartefakt
Gavai et al. [17]	$8^3 \times 2 - 16^3 \times 8$	1-2$\cdot 10^5$	[16] geklärt durch Vervollständig. des Diagramms mit Deconfinement-Phasenüberganges 2.Ordnung

5.2 Interpretation der Ergebnisse

Die verschiedenen Peaks in der spezifischen Wärme des 4^4- und des 6^4-Gitters, im Vergleich zu den größeren Gittern, läßt sich auf Effekte der SU(2) bei endlicher Temperatur zurückführen. Das gilt sowohl für die Höhe der Peaks, wie auch für den Ort des Maximums. Die Simulationen der SU(2) bei endlicher Temperatur finden zwar auf asymmetrischen Gitter statt ($N_s > N_t = 4, 6, 8$), jedoch ist das 4^4- und das 6^4-Gitter so klein, daß Effekte endlicher Temperatur nicht nur in Zeitrichtung eine wesentliche Rolle spielen.

Bei dem 4^4-Gitter sind diese Effekte am deutlichsten zu beobachten. Der Deconfinement-Phasenübergang findet bei der kritischen Kopplung $\beta_c \simeq 2.299$ (N_t=4) [18] statt, also *zufällig* in der Nähe der Kopplung $\beta \simeq 2.23$, bei der sich die Position des Maximums der spezifischen Wärme bei den größeren Gittern befindet.

Bei dem 6^4-Gitter treten die Effekte der endlichen Temperatur weniger deutlich auf: Die Ausdehnung in Zeitrichtung ist größer und der Punkt des thermischen Phasenübergangs liegt bei $\beta_c \simeq 2.427$ (N_t=6) [18]. Das höhere β_c erklärt die Verschiebung des Peaks zu größeren β-Werten. Die Wechselwirkung zweier Effekte ist hier zu beobachten. Mit einer höheren Statistik und eventuell einer Vergrößerung des β-Bereiches müßte es möglich sein, auch beim 8^4-Gitter die Effekte der endlichen Temperatur nachzuweisen. Möglicherweise würde man zwei Maxima voneinander trennen können.

Auch Nauenberg et al. beobachteten den größten Peak beim 4^4-Gitter und einen kleinern, nach rechts verschobenen Peak beim 6^4-Gitter. Nur hatten die Autoren damals wahrscheinlich keine Kenntnis des Wertes der kritischen Kopplungen β_c für $N_t = 4, 6, 8, \ldots$, da die SU(2) bei endlicher Temperatur noch nicht ausreichend erforscht war.

Betrachten wir zur Unterstützung dieser These das Gittermittel des Polyakov-Loops, der in der SU(2) bei endlicher Temperatur die wichtige Rolle des Ordnungsparameters spielt. In der Abbildung 5.3 sind die Erwartungswerte der Beträge des Gittermittels der Polyakov-Loops aller symmetrischen Gitter eingezeichnet. Die senkrechten, gestrichelten Linien markieren die kritische Kopplung der $N_t = 4, 6, 8, 12, 16$-Gitter mit unendlichem räumlichen Volumen [19]. Der Bereich des Maximums der spezifischen Wärme ist mit dem waagerechten Balken markiert. Man erkennt einen stetigen Anstieg für das 4^4-Gitter in dem interessanten β-Intervall 2.2 bis 2.3. Bei dem 6^4-Gitter findet der Anstieg erst am Ende des Intervalls statt. Bei dem 8^4-Gitter ist der Anstieg sehr gering und bei den größeren Gittern liegt er weit erfernt. Bei kleineren Gitter ist der Betrag des Polyakov-Loops in dem konstanten Bereich größer, weil der Polyakov-Loop aus weniger Verbindungsvariablen zusammengesetzt wird und über weniger Polyakov-Loops bei einer Messung gemittelt wird. So ergibt sich für das kleinste Gitter der größte Effekt endlicher Temperatur.

Vergleichen wir nun die asymmetrische Gitter $N_s^3 \times 4$ mit dem 4^4-Gitter. Der 4^4-Polyakov-Loop verhält sich wie der der asymmetrische Gitter. Das 4^4-Gitter kann als Fortsetzung der asymmetrische Gitter zu $N_s = 4$ gesehen werden, wie man in der Abbildung 5.4 erkennt. Nur gibt es bei dem 4^4-Gitter natürlich besonders größe Finite-Size-Effekte. Die Kurven der asymmetrischen Gitter sind der Arbeit von Engels et al. [18] entnommen.

Die Autoren Lautrup et al.[11] und Nauenberg et al.[13] beobachteten langreichweitige Plaquette-Korrelationen auf dem Gitter, wenn die spezifische Wärme große Werte annahm. Ich betrachtete drei Arten Plaquette-Plaquette-Korrelationen (Abbildung 5.2): Plaquetten die wie Kacheln in einer Ebene lagen (a), senkrecht aufeinanderstehende Plaquetten (b) und gestapelte Plaquetten (c), jeweils im Abstand

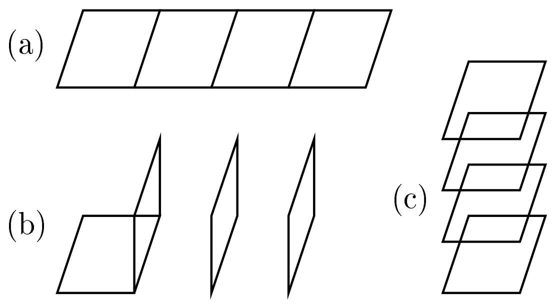

Abbildung 5.2: Die drei untersuchten Arten der Plaquette-Korrelationen

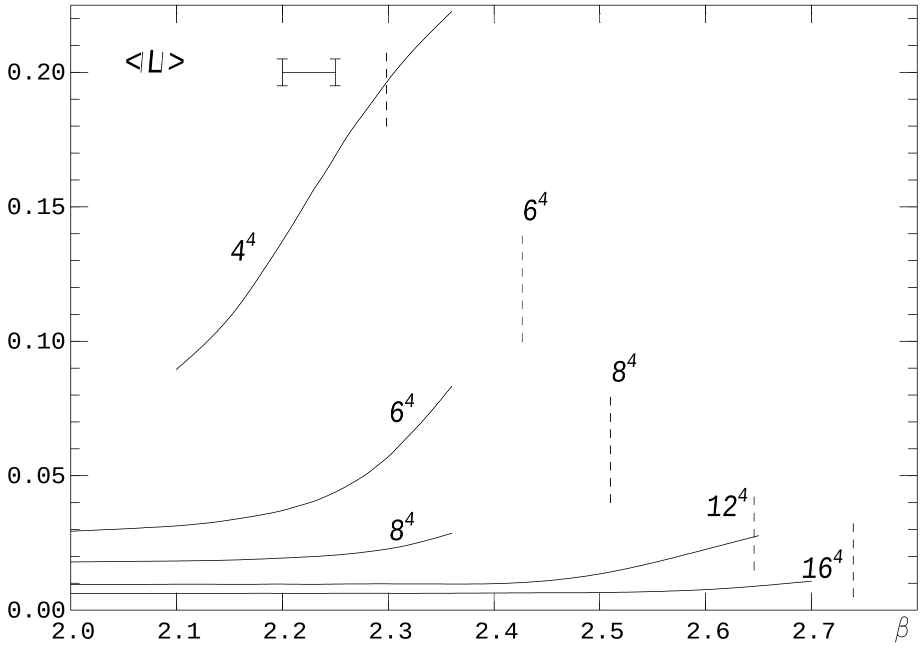

Abbildung 5.3: Erwartungswert des Betrages der Polyakov-Loops aller symmetrischen Gitter. Die senkrechten, gestrichelten Linien markieren die kritische Kopplung der $N_t = 4, 6, 8, 12, 16$-Gitter, die waagerechte Linie den Bereich des Peaks der spezifischen Wärme.

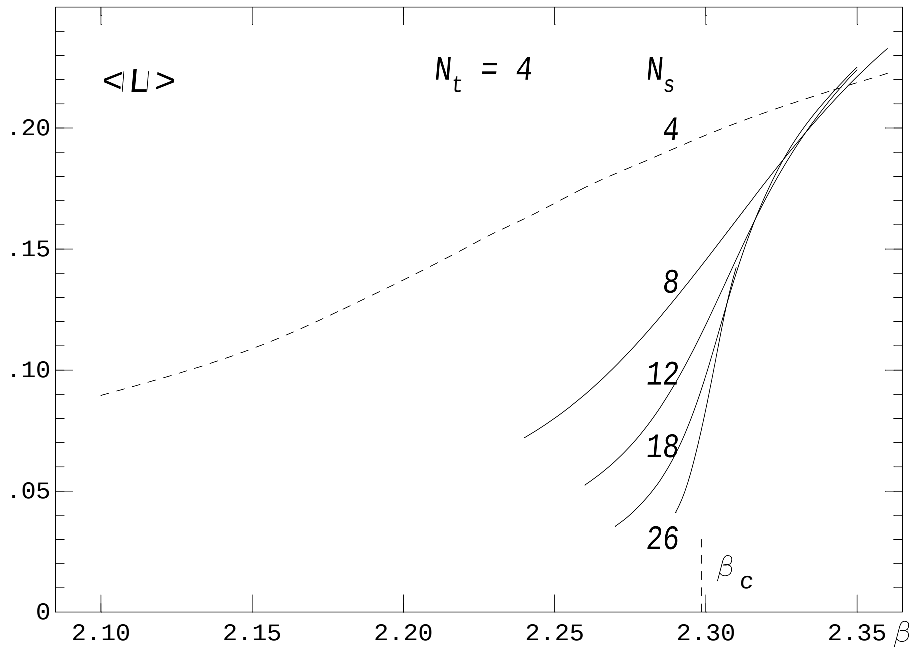

Abbildung 5.4: Erwartungswert des Betrages der Polyakov-Loops für die Gitter mit $N_s = 4, 8, 12, 18, 26$ und $N_t = 4$.

eins bis zur halben Ausdehnung in einer Dimension. Wegen der periodischen Randbedingungen ist die halbe Ausdehnung in einer Dimension der maximal mögliche Abstand. Die drei Typen der Plaquette-Korrelationen zeigen das gleiche Verhalten. In der Tabelle sind die Plaquette-Korrelationen der senkrecht aufeinanderstehende Plaquetten beispielhaft, jeweils im Maximum der spezifischer Wärme, abgedruckt.

Abstand	4^4 $\beta = 2.20$	6^4 $\beta = 2.26$	8^4 $\beta = 2.23$	12^4 $\beta = 2.23$	16^4 $\beta = 2.23$
$\langle E^2 \rangle$	0.2836	0.2669	0.2792	0.2791	0.2794
$\langle E_i E_{i+1} \rangle$	0.1813	0.1708	0.1779	0.1772	0.1781
$\langle E_i E_{i+2} \rangle$	0.1805	0.1687	0.1768	0.1769	0.1769
$\langle E_i E_{i+3} \rangle$		0.1685	0.1767	0.1768	0.1769
$\langle E_i E_{i+4} \rangle$			0.1768	0.1768	0.1769
$\langle E_i E_{i+5} \rangle$				0.1768	0.1769
$\langle E_i E_{i+6} \rangle$				0.1769	0.1769
$\langle E_i E_{i+7} \rangle$					0.1769
$\langle E_i E_{i+8} \rangle$					0.1769
$\langle E \rangle^2$	0.1802	0.1685	0.1768	0.1768	0.1769

Man erkennt in Abhängigkeit von β keine Veränderung des Abfalls der Korrelationen, die Korrelationenslänge ist unwesentlich größer als eins. Die zitierten Autoren benutzten (im wesentlichen) nur 4^4- und 6^4-Gitter, konnten also nur die Korrelationen im Abstand 2 und 3 messen. Ich führe die Diskrepanz auf die kleinen Gitter und die geringe Anzahl der Iterationen zurück.

5.3 Zusammenfassung

Diese Arbeit erklärt die Abweichung des Peaks der spezifischen Wärme auf kleinen Gittern, der Grund für den Ansteig der spezifischen Wärme auf symmetrischen Gittern bleibt jedoch ungeklärt.

Die Bestimmung der spezifischen Wärme aus der Varianz ergibt aufgrund von Autokorrelationen des Plaquettenmittelwertes aufeinanderfolgender Iterationen einen zu kleinen Wert. Die Differenzenmethode und die Ferrenberg-Swendsen-Methode liefern jedoch konsistente Ergebnisse.

Der Peak in der spezifischen Wärme ist kein Anzeichen für einen normalen, volumenabhängigen Phasenübergang. Für größere Gitter, bei denen die Effekte der endlichen Temperatur keine bedeutene Rolle spielen, skaliert der Peak nicht. Höhe und Postion bleiben unverändert, siehe Abbildung 4.13. Auch läßt sich kein Anstieg der Plaquette-Plaquette-Korrelationen feststellen, die auf einen Phasenübergang hindeuten könnten. Im Anhang sind die Gewichte $g_k^{-1} = (1 + 2\tau_k)^{-1}$ für die Ferrenberg-Swendsen-Interpolation abgedruckt, die man aus den Autokorrelationszeiten τ_k erhält. Es läßt sich auch kein wesentliches Critical-slowing-down beobachten. Das Confinement besteht für alle Bereiche der Kopplung.

Vergleiche mit Ergebnissen der Simulation der SU(2) bei endlicher Temperatur erklären das abweichende Verhalten des 4^4- und des 6^4-Gitters. Gerade beim 4^4-Gitter liegen die kritische Kopplung des thermischen Deconfinement-Phasenüberganges β_c und das Maximum des Peaks der spezifischen Wärme der symmetrischen Gitter zufällig dicht beisammen. Diese Arbeit ergänzt die Arbeit von Gavai et al.: Effekte der endlichen Temperatur beeinflussen die Größe und Postion des Peaks, nicht die Singularität in dem verwandten Modell bei dem sich die Wirkung aus der fundamentalen und der adjungierten Darstellung zusammensetzt.

Anhang A

Tabellen

Man beachte, daß die inversen Gewichte g_k bei dem 4^4-, dem 6^4- und dem 8^4-Gitter kleiner sind, denn bei diesen Gittern wurde nur jeder fünfte Meßwert als Eingabe für das Ferrenberg-Swendsen-Programm genommen, um Speicherprobleme zu vermeiden. Der Infomationsverlust war gering, da die Daten trotz Overrelaxation noch mit einer beträchtlichen Autokorrelation behaftet waren.

Ergebnisse des 4^4-Gitters					
β	Iterationen	$\langle E\rangle$	$\langle E^2\rangle-\langle E\rangle^2$	$dE/d\beta$	g_k
2.000	900 000	0.498589(15)	1.03		1.10
				1.4472(12)	
2.100	900 000	0.464152(15)	1.32		1.22
				1.6834(44)	
2.130	900 000	0.452863(15)	1.44		1.25
				1.7773(46)	
2.160	900 000	0.441273(15)	1.54		1.33
				1.881(14)	
2.170	900 000	0.437258(15)	1.56		1.36
				1.891(14)	
2.180	900 000	0.433260(15)	1.59		1.38
				1.893(14)	
2.190	900 000	0.429293(15)	1.60		1.36
				1.916(14)	
2.200	900 000	0.425294(15)	1.61		1.37
				1.9011(61)	
2.220	1 800 000	0.417482(10)	1.56		1.36
				1.848(10)	
2.230	1 800 000	0.413833(10)	1.54		1.33
				1.8277(13)	
2.240	900 000	0.410149(15)	1.50		1.32
				1.7682(76)	
2.260	900 000	0.403152(14)	1.40		1.27
				1.6905(78)	
2.280	900 000	0.396590(15)	1.32		1.23
				1.5742(83)	
2.300	900 000	0.390582(15)	1.22		1.17
				1.4426(29)	
2.360	900 000	0.374642(16)	1.03		1.08

Ergebnisse des 6^4-Gitters					
β	Iterationen	$\langle E\rangle$	$\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2$	$dE/d\beta$	g_k
2.000	500 000	0.498783(18)	1.02		1.08
				1.3799(20)	
2.080	500 000	0.472257(19)	1.17		1.13
				1.5250(35)	
2.130	500 000	0.455048(20)	1.29		1.17
				1.5967(64)	
2.160	500 000	0.444637(21)	1.33		1.18
				1.647(10)	
2.180	500 000	0.437639(21)	1.35		1.22
				1.6584(87)	
2.200	1 000 000	0.430724(15)	1.38		1.21
				1.6853(74)	
2.220	1 000 000	0.423822(15)	1.39		1.25
				1.704(14)	
2.230	1 000 000	0.420380(15)	1.39		1.27
				1.714(15)	
2.240	1 000 000	0.416947(15)	1.40		1.26
				1.702(15)	
2.250	1 000 000	0.413569(15)	1.40		1.29
				1.703(15)	
2.260	1 000 000	0.410219(15)	1.39		1.31
				1.698(15)	
2.270	1 000 000	0.406903(15)	1.41		1.34
				1.737(15)	
2.280	1 000 000	0.403554(15)	1.40		1.32
				1.706(16)	
2.290	1 000 000	0.400281(15)	1.40		1.34
				1.687(16)	
2.300	1 000 000	0.397078(15)	1.39		1.39
				1.720(16)	
2.310	1 000 000	0.393839(15)	1.37		1.40
				1.6697(82)	
2.330	1 000 000	0.387634(15)	1.33		1.42
				1.6179(62)	
2.360	500 000	0.378807(18)	1.22		1.34

Ergebnisse des 8^4-Gitters

β	Iterationen	$\langle E\rangle$	$\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2$	$dE/d\beta$	g_k
2.000	200 000	0.498797(16)	1.02		1.08
				1.4023(14)	
2.100	200 000	0.465428(18)	1.22		1.16
				1.5615(26)	
2.150	500 000	0.448137(11)	1.31		1.19
				1.6289(34)	
2.180	600 000	0.437711(10)	1.36		1.21
				1.6619(51)	
2.200	600 000	0.430781(10)	1.36		1.21
				1.6811(46)	
2.220	1 000 000	0.4238968(83)	1.38		1.23
				1.6807(82)	
2.230	1 000 000	0.4205036(82)	1.38		1.24
				1.6826(83)	
2.240	1 000 000	0.4171332(84)	1.38		1.26
				1.6827(48)	
2.260	600 000	0.410485(10)	1.35		1.24
				1.6623(54)	
2.280	600 000	0.404033(10)	1.34		1.27
				1.6408(49)	
2.310	200 000	0.394687(17)	1.30		1.26
				1.5773(33)	
2.360	200 000	0.380222(13)	1.20		1.28

Ergebnisse des 12^4-Gitters					
β	Iterationen	$\langle E \rangle$	$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$	$dE/d\beta$	g_k
2.000	30 000	0.498805(17)	1.01		3.47
				1.3483(27)	
2.050	30 000	0.482364(16)	1.14		3.88
				1.4577(28)	
2.100	30 000	0.465435(16)	1.27		4.04
				1.5724(22)	
2.160	56 000	0.444640(13)	1.34		4.42
				1.621(11)	
2.170	74 000	0.441179(11)	1.34		4.42
				1.634(11)	
2.180	67 000	0.437724(13)	1.36		4.49
				1.6735(99)	
2.190	170 000	0.4342192(77)	1.36		4.68
				1.6583(73)	
2.200	176 000	0.4307772(74)	1.37		4.69
				1.6825(75)	
2.210	163 000	0.4273177(79)	1.39		4.56
				1.6885(77)	
2.220	218 000	0.4238725(77)	1.39		4.86
				1.6755(76)	
2.230	196 000	0.4204903(77)	1.39		5.01
				1.6707(75)	
2.240	216 000	0.4171452(72)	1.39		4.87
				1.6953(72)	
2.250	320 000	0.4137819(71)	1.38		6.83
				1.6715(73)	
2.260	243 000	0.4104934(73)	1.38		4.98
				1.6732(86)	
2.270	107 000	0.4072330(95)	1.36		4.64
				1.6532(97)	
2.280	115 000	0.4040386(93)	1.35		4.78
				1.656(10)	
2.290	79 000	0.400866(11)	1.34		4.99
				1.635(11)	
2.300	77 000	0.397761(11)	1.32		4.70
				1.5865(30)	
2.350	25 000	0.383086(17)	1.22		4.52
				1.4767(39)	
2.400	30 000	0.369996(17)	1.11		4.10
				1.3612(36)	
2.450	30 000	0.358422(14)	1.00		3.92

Ergebnisse des 16^4-Gitters					
β	Iterationen	$\langle E \rangle$	$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$	$dE/d\beta$	g_k
2.000	30 000	0.4988027(85)	1.01		3.46
				1.3461(14)	
2.050	30 000	0.4823882(93)	1.12		3.75
				1.4592(16)	
2.100	30 000	0.465442(10)	1.23		4.18
				1.5611(18)	
2.150	30 000	0.448155(11)	1.29		4.27
				1.6300(32)	
2.180	30 000	0.437722(10)	1.37		4.45
				1.6626(47)	
2.200	50 000	0.430789(10)	1.36		4.64
				1.6838(91)	
2.210	129 000	0.4273261(88)	1.39		4.71
				1.673(17)	
2.215	167 000	0.4256163(95)	1.38		4.61
				1.681(15)	
2.220	154 000	0.4239069(64)	1.37		4.72
				1.678(13)	
2.225	126 000	0.4222082(68)	1.39		4.95
				1.701(23)	
2.228	140 000	0.4211784(75)	1.39		4.88
				1.672(30)	
2.230	356 000	0.4205053(46)	1.39		4.73
				1.686(27)	
2.232	158 000	0.4198279(65)	1.40		4.77
				1.653(22)	
2.235	71 000	0.4188334(70)	1.38		4.87
				1.712(14)	
2.240	67 000	0.4171233(73)	1.38		5.22
				1.658(15)	
2.245	49 000	0.4154739(80)	1.37		4.76
				1.696(16)	
2.250	47 000	0.4137948(87)	1.37		5.45
				1.6602(16)	
2.300	64 000	0.3977555(70)	1.30		4.74
				1.5855(17)	
2.350	29 000	0.3830894(90)	1.17		4.35
				1.4759(19)	
2.400	30 000	0.3700060(82)	1.08		4.10
				1.3629(17)	
2.450	32 000	0.3584175(70)	0.98		4.35
				1.2692(16)	
2.500	30 000	0.3480575(65)	0.88		3.53
				1.1990(16)	
2.550	25 000	0.3386543(62)	0.81		3.00
				1.1482(15)	
2.600	30 000	0.3299957(52)	0.79		2.86
				1.0939(76)	
2.700	20 000	0.3144175(57)	0.74		2.58

Literaturverzeichnis

[1] K.G. Wilson, *Confinement of quarks*, Phys. Rev. **D10** (1974) 2445.

[2] I.J.R. Aitchison, A.J.G. Hey, *Gauge Theories in Particle Physics*, Adam Hilger, Bristol and Philadelphia, 2nd Edition (1989).

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

[4] M. Creutz, *Monte Carlo Study of Quantized SU(2) Gauge Theory*, Phys. Rev. **D21** (1980) 2308.

[5] K. Fabricius, O. Haan, *Heat bath method for the twisted Eguchi-Kawai model*, Phys. Lett. **B143** (1984) 459.

[6] A.D. Kennedy, B.J. Pendleton, *Improved Heatbath Method for Monte Carlo Calculations in Lattice Gauge Theories*, Phys. Lett. **B156** (1985) 393.

[7] M. Creutz, *Overrelaxation and Monte Carlo Simulation*, Phys. Rev. **D36** (1987) 515.

[8] A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, *New Monte Carlo for Studying Phase Transition*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635.

[9] A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, *Optimized Monte Carlo Data Analysis*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 1195.

[10] M. Creutz, *Confinement and the Critical Dimensionality of Space-Time*, Phys. Rev. Lett. **43** (1979) 533.

[11] B. Lautrup, M. Nauenberg, *Correlations and Specific Heat of the SU(2) Lattice Gauge Model*, Phys. Rev. Lett. **45** (1980) 1755.

[12] M. Falcioni, E. Marinari, M.L. Paciello, G. Parisi, B. Taglienti, *Complex Singularities in the Specific Heat of the SU(2) Lattice Gauge Model*, Phys. Lett. **102B** (1981) 270.

[13] M. Nauenberg, R. Brower, T. Schalk, *Finite-Size scaling and asymptotic freedom of the SU(2) lattice gauge model*, Phys. Rev. **D24** (1981) 548.

[14] J. Greensite, B. Lautrup, *First-Order Phase Transition in Four-Dimensional SO(3) Lattice Gauge Theory*, Phys. Rev. Lett. **47** (1981) 9.

[15] J. Greensite, B. Lautrup, *Phase Transition and Mean-Field Methods in Lattice Gauge Theory*, Phys. Lett. **104B** (1981) 41.

[16] G. Bhanot, M. Creutz, *Variant actions and phase structure in lattice gauge theory*, Phys. Rev. **D24** (1981) 3212.

[17] M. Mathur, R. Gavai, *Universality and Deconfinement Phase Transition in SU(2) Lattice Gauge Theory*, Preprint **BI-TP 94/52** (1994).

[18] J. Engels, J. Fingberg, D. Miller, *Phenomenological renormalization and scaling behaviour of SU(2) lattice gauge theory*, Nucl. Phys. **B387** (1992) 501.

[19] J. Fingberg, U. Heller, F. Karsch, *Scaling and asymptotic scaling in the SU(2) gauge theory*, Nucl. Phys. **B392** (1993) 493.

Diese Diplomarbeit wurde unter der Leitung von Prof. Engels angefertigt. Ich möchte mich an dieser Stelle ganz herzlich für die hervorragende Betreuung und Unterstützung durch ihn bedanken.

Auch möchte ich mich bei Martin Lütgemeier und Jörn Rank bedanken, die mir nicht nur bei der Beantwortung vieler Fragen, die bei der Bearbeitung dieses Themas auftraten, geholfen haben, sondern auch für die angenehme Arbeitsatmosphäre in unserem Zimmer.

Abschließend möchte ich noch den guten Unterricht meines Leistungskurs-Lehrers Rainer Blum lobend erwähnen, der mich zum Studium der Physik bewogen hat.