QCD bei endlichen Temperaturen mit quenched Wilson Fermionen

Diplomarbeit

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Peter Schmidt

24. Dezember 1996

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Einleitung

Das *Standardmodells* dient zur Beschreibung der in der Natur vorkommenden elementaren Teilchen und der ersten drei der vier fundamentalen Wechselwirkungen. Dieses sind die elektromagnetischen, die schwachen, die starken Kräfte und die Gravitationskraft. Die ersten beiden sind in der Elektroschwachen Eichtheorie zusammengefaßt. Für sie und die starke Wechselwirkung läßt sich die Lagrangedichte aus dem Prinzip der lokalen Eichinvarianz ableiten. Die Gravitationskraft entzieht sich einer vereinheitlichten Beschreibung. Trotzdem läßt sich auch die allgemeine Relativitätstheorie auf klassischem Niveau aus der speziellen durch das Prinzip lokaler Eichinvarianz herleiten [1].

Verbunden mit der Beschreibung der Wechselwirkung ist die Beschreibung der dieser unterliegenden Teilchen. Es gibt zwei verschiedene Arten von grundlegenden Elemetarteilchen, welche unterschiedlichen Kräften unterliegen. Da sind zunächst die Leptonen (Elektron, Myon, Tauon) mit ihren Antiteilchen und ihre zugehörigen Neutrinos, welche der elektroschwachen Wechselwirkung unterliegen. Außerdem gibt es die Quarks in ihren verschiedenen Flavours (up, down, strange, charm, bottom, top). Sie unterliegen der elektroschwachen und der starken Wechselwirkung. Alle massebehafteten Teilchen unterliegen außerdem der Gravitationskraft. Allen diesen Elementarteilchen ist (nach bisheriger experimenteller Auflösung) gemein, Punktteilchen zu sein.

Diese Arbeit wird die Theorie der starken Wechselwirkung, die **Q**uanten **C**hromo **D**ynamik, untersuchen. Die durch sie beschriebenen Quarks sind Fermionen, also Spin $\frac{1}{2}$ Teilchen, und tragen eine elektrische Ladung von $\frac{-1}{3}, \frac{2}{3}$, über die sie elektromagnetisch wechselwirken können. Zusätzlich besitzen sie drei *Farb*freiheitsgrade und sind in diesen invariant unter einer lokalen SU(3) Farbgruppentransformation. Diese lokale Invarianz macht die QCD, wie auch alle anderen Eichtheorien, zu einer Theorie mit Wechselwirkung. Sie wird vermittelt durch acht Eichbosonenfelder mit Spin 1, den Gluonen. Da diese Teilchen selbst Farbladung tragen, existiert in dieser Theorie eine Selbstwechselwirkung der Gluonen, wodurch nichttriviale Eigenschaften hervorgerufen werden.

Hadronen werden in farbneutraler Weise aus den Quarks gebildet. So bestehen

Mesonen aus einem Quark und seinem Antiquark und Baryonen aus drei Quarks unterschiedlicher Farbe.

Die weitgehende Akzeptanz des Standardmodells beruht auf seine präzise Vorhersagekraft durch störungstheoretische Berechnungen. Im Elektroschwachen Sektor zeigt sich dieses in Streuquerschnitten bei Streuexperimente und in der QCD z.B. im Bereich der tiefinelastischen Streuung.
Die Störungstheorie ist in der QCD nur für große Impulsüberträge, also kleine Abstände, anwendbar, da nur dann die starke Kopplungskonstante α_S klein wird und Quarks als asymptotisch frei betrachtet werden können. Bei großen Abständen ab 1fm hingegen steigt α_S soweit an, daß ein störungstheoretischer Zugang nicht mehr sinnvoll erscheint.

Um die starke Wechselwirkung in einem solchen Bereich untersuchen zu können, ist also ein nicht-störungstheoretischer Zugang notwendig. Dieser ist in den siebziger Jahren von Kenneth Wilson [2] zum erstenmal formuliert worden. Er besteht darin, die Raumzeit zu diskretisieren und auf ein euklidisches vierdimensionales Gitter zu übertragen. Physikalische Observablen werden in der Pfadintegralformulierung auf dem Gitter dargestellt. Dabei werden die unendlichdimensionalen Integrale zu endlichdimensionalen und die ursprünglich divergente Theorie regularisiert. Die Integrale können dann durch geeignet schnelle Computern numerisch ausgewertet werden. Dieser Zugang ist die **G**itter **E**ich **T**heorie. Erste numerische Simulationen sind von Michael Creutz [3] durchgeführt worden.

Die Gitterregularisierung führt jedoch zu systematischen Fehlern. Diese tauchen durch die Art der Diskretisierung der Wirkung und der Felder auf und sind abhängig vom endlichen Gitterabstand a. Durch diesen erhält man auch im Impulsraum einen *Cut-Off*, welcher die auf dem Gitter realisierten Impulse nach oben beschneidet (Ultraviolett Cut-Off).
Um den simulierten Gitterabstand bei gleicher Qualität der Ergebnisse zu halbieren, ist eine Vervielfachung der Rechenzeit notwendig. Deshalb versucht man mit Hilfe von verbesserten Wirkungen und Gitteroperatoren die Fehler in a zu reduzieren, so daß Abweichungen von den Kontinuumsgrössen erst in höherer Ordnung des Cut-Offs beginnen. Das führt zu verschiedenen Wirkungen im reinen Eichsektor wie auch im fermionischen Sektor, welche im Limes $a \to 0$ alle gegen die Kontinuumswirkung gehen. Für Simulationen, die in dieser Arbeit durchgeführt sind, wird als Eichwirkung die reine Wilson-Wirkung und im fermionischen Teil die sogenannten Clover-Wirkung verwendet. Beide sind behaftet mit Fehlern in $\mathcal{O}(a^2)$.

Mit Hilfe dieser Formulierung lassen sich nun verschiedene physikalische Observablen berechnen. Auch lassen sich grundsätzliche Fragestellungen wie die *Confinement-Hypothese* untersuchen. Diese sagt aus, daß zur Separation zweier Quarks eine

unendliche Energie notwendig ist, und damit, daß Quarks in der Natur nicht frei beobachtet werden können.
In der Pfadintegralformulierung erhalten die zu berechnenden Größen die Struktur der Zustandssumme eines thermodynamischen Systems. Dieses ermöglicht, Thermodynamik auf dem Gitter betreiben zu können. Dazu muß nur der Integrationsweg in der Zeitrichtung beschränkt werden auf ein endliches Intervall. Die Temperatur ergibt sich dann aus $T = \frac{1}{N_\tau a}$. So lassen sich thermodynamische Observablen untersuchen und das Verhalten der Quarks bei steigender Temperatur. Hierzu gibt es die Vermutung, daß Quarks bei einer kritischen Temperatur T_C einem *Deconfinement*-Phasenübergang erleiden, so daß sie von einem Zustand kalter hadronischer Materie zu einem heißen Quark-Gluon Plasma wechseln.

Die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Observablen sind zum einen die Massen von Charmonium und zum anderen die Bethe-Salpeter Amplituden der untersuchten Zustände. Betrachtet werden dabei das 0^{-+}- und das 1^{--}-Meson, welche für die leichtesten Quarks gerade das Pion und das Rhomeson sind. Die Observablen werden bei $T = 0$ und auf Hochtemperaturgittern unterhalb und oberhalb des Phasenübergangs untersucht. Dazu werden aus Quarkpropagatoren Mesonkorrelationsfunktionen in t oder z-Richtung gebildet. Aus ihrem Exponentiellen Abfall kann die Grundzustandsmasse und aus Mesonpropagatoren mit verschiedenen Radien die Bethe-Salpeter-Amplitude extrahiert werden.

Die Simulationen in dieser Arbeit wurden in der *Quenched Approximation*, auch *Valenzquarkapproximation*, durchgeführt, in der virtuelle Quarkloops vernachlässigt werden. Das bedeutet, daß die Bildung von Quark-Antiquarkpaaren unterdrückt wird. Dieses ist für die untersuchten Charmoniumzustände auch eine durchaus vernünftige Annahme. Wesentliche Eigenschaften der Theorie bleiben in dieser Approximation erhalten.

Im ersten Kapitel wird die QCD auf dem Gitter formuliert. Es wird beschrieben, wie physikalische Observablen mit Hilfe von verbesserten Wirkungen berechnet werden können und wie Thermodynamik auf dem Gitter betrieben werden kann.

In Kapitel zwei werden die untersuchten Observablen dargestellt. Es wird beschrieben, wie Mesonenmassen und Bethe-Salpeter Wellenfunktionen aus Quarkpropagatoren erhalten werden können.

Das dritte Kapitel befaßt sich mit der Frage, wie die Fermionmatrix zur Berechnung von Quarkpropagatoren effizient numerisch invertiert werden kann. Verschiedene Verfahren werden dazu näher dargestellt. Außerdem wird beschrieben, wie das zu lösende Gleichungssystem durch Preconditioning besser konditioniert werden kann, um eine schnellere Konvergenz der Invertierungsverfahren zu erreichen.

Im vierten Kapitel wird die CRAY-T3D, die Maschine, auf dem ein Großteil der Simulationen zu dieser Arbeit gemacht wurden, vorgestellt und in ihren Eigenschaften beschrieben. Die für die Simulationen entwickelten Programme werden vorgestellt und das in ihnen verwendete Message Passing Paradigma zur Komunikation zwischen den Prozessoren des T3D wird näher beschrieben.

Abschließend werden die numerischen Resultate in Kapitel fünf aufgeführt und diskutiert.

Im Anhang werden Konventionen zusammengefaßt und numerische Details erläutert.

Kapitel 1

Gitterformulierung der QCD

Im ersten Kapitel wird beschrieben, wie physikalische Observablen mit Hilfe der Quantenchromodynamik (QCD) auf einem Gitter berechnet werden können. Kapitel **1.1** stellt den Ausgangspunkt der QCD im Kontinuum dar mit den grundlegenden, die Physik beschreibenden Gleichungen. Dies wird in **1.2** auf ein Gitter übertragen. Es werden verschiedene Möglichkeiten aufgezeigt, die durch die Diskretisierung auftretenden Fehler zu kompensieren. Dieses geschieht zum einen im reinen Eichteil der Wirkung (**1.2.1**) und zum anderen im fermionischen Anteil (**1.2.2**). Dabei wird auch gezeigt, wie Thermodynamik auf dem Gitter formuliert werden kann (**1.2.3**). Danach wird in **1.3** erläutert, wie die vorher definierten Größen auf dem Gitter berechnet werden können. In **1.3.2** wird die in dieser Arbeit benutzte Approximation der QCD auf dem Gitter dargestellt. Sie erlaubt, physikalische Aussagen mit verhältnismäßig wenig Rechenzeit zu erhalten. Anschließend wird in **1.4** aufgezeigt, wie man die so erhaltenen Ergebnisse für das Kontinuum zu interpretieren hat.

1.1 QCD im Kontinuum

Die Quantenchromodynamik beschreibt als Teil des Standardmodells die Wechselwirkung zwischen Quarks und Gluonen. Die Quarks $(q_k, \bar{q}_k)$ sind die Konstituenten der Baryonen und Mesonen und zusammen mit den Leptonen die elementaren Materiebausteine. Die Gluonen (A_μ) sind die Austauschteilchen, welche die Wechselwirkung vermitteln. Erste grundlegende Arbeiten zur QCD sind Ende der sechziger Jahre entstanden [4].
Zur Beschreibung der QCD benötigt man die Lagrangedichte $\mathcal{L}_{QCD}$. Sie definiert die

Art und Stärke der Wechselwirkung zwischen Quarks und Gluonen und der Gluonen untereinander.

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{QCD} &= -\frac{1}{2}\mathrm{Tr}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \sum_{k=1}^{n_f} \bar{q}_k(i\gamma^\mu D_\mu - m_k)q_k && (1.1)\\
F_{\mu\nu} &= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig\,[A_\mu, A_\nu] && (1.2)\\
D_\mu &= (\ \partial_\mu\ -\ igA_\mu\ ) && (1.3)\\
A_\mu &= \sum_{l=1}^{8} \frac{A^l_\mu \lambda^l}{2} && (1.4)
\end{aligned}$$

Dabei ist $F_{\mu\nu}$ der Feldstärketensor der QCD, D_μ der kovariante Ableitungsoperator und λ^l die Gell-Mann Matrizen der SU(3) "Farbgruppe". Sie sind die acht Erzeugenden dieser Gruppe aus der Lie-Algebra der SU(3). Die $A^l_\mu(x)$ in Gl. (1.4) repräsentieren die Gluonenfelder. Durch diese Art der Konstruktion wird die lokale Eichinvarianz der QCD gewährleistet. Mit Hilfe der Lagrangefunktion lassen sich physikalische Größen berechnen. Sie sind Erwartungswerte quantenmechanischer Operatoren. Um sie berechnen zu können, benötigt man die Wirkung der QCD.

$$\begin{aligned}
S &= \int d^4x\ \mathcal{L}_{QCD} && (1.5)\\
<\ \mathcal{O}(\bar{q}, q, A)\ > &= \frac{\int d\bar{q}dqdA\ \ \mathcal{O}(\bar{q}, q, A)\ e^{iS(\bar{q},q,A)}}{\int d\bar{q}dqdA\ e^{iS(\bar{q},q,A)}} && (1.6)
\end{aligned}$$

Den unendlichdimensionalen Integralen über die gluonischen und fermionischen Felder muß dann im Sinne der Quantenfeldtheorie eine Bedeutung gegeben werden (siehe dazu beispielsweise [5]).

1.2 QCD auf dem Gitter

Um die QCD auf dem Computer überhaupt formulieren zu können, sind verschiedene Schritte notwendig.

1. Euklidische Formulierung der Kontinuums-QCD durch Fortsetzung der quantenmechanischen Größen im Komplexen (Wickrotation).

2. Diskretisierung der nun euklidischen Raum-Zeit auf einem Gitter mit Gitterabstand a.

3. Dimensionsbehaftete Größen werden auf dem Gitter per Umnormierung durch dimensionslose Größen ersetzt.

4. Fermionenfelder werden auf die Gitterpunkte gesetzt.

5. Um Eichsymmetrie zu erhalten, werden die Gluonenfelder als SU(3) Matrizen auf die Verbindungslinien (Links) zwischen den Gitterpunkten gesetzt. Sie repräsentieren den weggeordneten Schwingerschen Paralleltransporter $U(x,y) = \mathcal{P}\ exp\ (ig \int_x^y dz\ A_\mu(z))\ \in \mathrm{SU}(3)$.

6. Ableitungen werden durch Differenzenquotienten ersetzt.

Damit erhält man Spinorfelder mit $n_c n_s$[1]=12 Einträgen, welche auf den Gitterpunkten leben, und Eichfelder (SU(3) Matrizen), die diese Spinoren verbinden.
Diese somit naiv diskretisierte Wirkung ist allerdings nicht die eindeutig der Kontinuumswirkung zugeordnete Gitterwirkung. Es lassen sich ganze Klassen von Wirkungen auf dem Gitter definieren, die für kleine Gitterabstände gegen die Kontinuumswirkung gehen. Sie sollten nur eichinvariant sein, und physikalische Größen, die mit ihnen berechnet werden, sollten für $\lim_{a\to 0}$ gegen den korrekten Kontinuumswert gehen. Das bedeutet, daß man prinzipiell mit einer beliebigen Theorie auf dem Gitter starten kann, wenn sie denn nur obige Forderungen erfüllt. Mit Hilfe der somit gegebenen Gitterwirkung lassen sich dann Erwartungswerte von Gitteroperatoren durch den Computer bestimmen.
Die Gitterversion der Wirkung (1.1) gliedert sich in einen fermionischen Teil, welcher die Wechselwirkung der Quarks untereinander durch die Gluonen beschreibt und in einen rein gluonischen Teil, der die Selbstwechselwirkung der Austauschteilchen charakterisiert. Schon letzterer Anteil der Wirkung beinhaltet nichttriviale Physik, aus der bereits qualitative Eigenschaften des Systems abgelesen werden können. So werden in der Reinen Eichtheorie Phasenübergänge untersucht oder z.B. die Stringtension berechnet, ein Maß für die Anziehungskraft zwischen Quarks bei großen Abständen, von der man annehmen kann, daß sie durch dynamische Quarks nicht wesentlich beeinflußt wird.

1.2.1 Reine Eichwirkung

Tree-Level

Betrachten wir den Teil der Kontinuumswirkung, der ausschließlich die gluonischen Felder enthält: $S_G = -\frac{1}{2}\mathrm{Tr}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$.
In der Gitterformulierung werden diese Felder durch die SU(3)-Matrizen auf den Links dargestellt. Entwickelt man die Gitterwirkung in a, so erhält man in erster Näherung die Kontinuumswirkung (1.5) zurück, wenn die Gitterwirkung durch die

[1] $n_c = 3$: Anzahl der Farbfreiheitsgrade, $n_s = 4$: Anzahl der Spinorfreiheitsgrade

Summe über die Plaquetten $U^{1\text{x}1}_{\mu\nu}(x)$ definiert wird. Ausgehend von einem Punkt x werden diese Matrizen gebildet durch das Produkt der entgegen des Uhrzeigersinn liegenden Links um eine elementare Plaquette auf dem Gitter.

$$
\begin{aligned}
U^{1\text{x}1}_{\mu\nu}(x) &= U_\mu(x)U_\nu(x+\hat{\mu})U^\dagger_\mu(x+\hat{\nu})U^\dagger_\nu(x) \\
&= \square_{\mu\nu}(x) \qquad (1.7) \\
S_G &= \beta \sum_x \sum_{\mu<\nu} \Big(1 - \frac{1}{N}\mathrm{Re}\,\mathrm{Tr}\, U^{1\text{x}1}_{\mu\nu}(x)\Big) \\
&= \int d^4x \left(\frac{1}{2}\,\mathrm{Tr} F^2_{\mu\nu} + O(a^2)\right) \qquad (1.8)
\end{aligned}
$$

Dabei ist $\beta = \frac{2N}{g_0^2} = \frac{6}{g_0^2}$ und g_0 die Kopplungskonstante der QCD.

Verbesserte Wirkung

Der Fehler, den man durch die Diskretisierung auf dem Gitter macht, liegt nach Gl. (1.8) bei dem Quadrat des Gitterabstandes. Dieser Fehler läßt sich durch geeignete Wahl von Zusatztermen in der Wirkung vermindern. Die Zusatzterme müssen so bemessen sein, daß in der Entwicklung unnötige Terme höherer Ordnung in a wegfallen, ohne daß die Wirkung in niedriger Ordnung für die notwendigen Terme verändert wird. So beginnen die Abweichungen von der Kontinuumswirkung erst mit a^4 oder a^6, je nach Art der Verbesserung. Die Zusatzterme sollten natürlich auch wieder eichinvariant sein, weshalb sie allgemein gebildet werden durch symmetrisierte geschlossene Loops von Eichfeldern auf dem Gitter, ausgehend von einem Punkt. Der kleinste geschlossene Loop (1x1) ist die bereits benutzte Plaquette in der nicht-verbesserten Wirkung. Diese Herangehensweise folgt dem von Symanzik in den achtziger Jahren initierte Improvement Scheme [6]. So ist eine sogenannte Tree-Level verbesserte Wirkung [7, 8] definiert durch

$$
\begin{aligned}
S^I_G = &\sum_x \sum_{\mu<\nu} \beta_{1\text{x}1} \Big(1 - \frac{1}{N}\mathrm{Re}\,\mathrm{Tr}\ \square_{\mu\nu}(x)\Big) \\
&-\beta_{2\text{x}1}\Big(1 - \frac{1}{2N}\mathrm{Re}\,\mathrm{Tr}\Big(\boxed{}_{\mu\nu}(x) + \boxed{\begin{matrix}\\ \end{matrix}}_{\mu\nu}(x)\Big)\ . \qquad (1.9)
\end{aligned}
$$

Die Kopplungskonstanten $\beta_{1\text{x}1} = \frac{5}{3}\beta$ und $\beta_{2\text{x}1} = -\frac{1}{6}\beta$ sind so gewählt, daß sich durch die Anteile der kleinen und großen Plaquetten überflüssige Terme der Ordnung a^2 wegheben und in niedrigster Ordnung a^4 zurückbleibt.

Tadpole Verbesserte Wirkung

Von Lepage und Mackenzie [9] wurde 1991 dargestellt, daß Terme höherer Ordnung in ag_0 in der Entwicklung der Eichfelder

$$U_\mu(x) \;=\; e^{iag_0 A_\mu(x)} \approx\; 1 + iag_0 A_\mu(x) + ... \tag{1.10}$$

vorhanden sind, die eine einfache Verbindung zwischen den Kontinuumsoperatoren und den Gitteroperatoren verkomplizieren sollen. So erhält man beispielsweise als Erwartungswert von U_μ in der Landau-Eichung nicht wie erwartet 1, sondern eine davon abweichende Größe. Diese Abweichung soll verursacht werden durch die sogenannten Tadpole-Diagramme. Sie entstehen bei Kontraktion durch Termen höherer Ordnung in a. Statt Definition (1.10) sollte vielmehr eine renormierte Version benutzt werden. Dazu teilt man einfach das Eichfeld durch dessen Erwartungswert, damit dieser durch die neue Observable nun korrekt wiedergegeben wird. Alternativ dazu ist es auch möglich, die vierte Wurzel des Erwartungswertes der 1x1-Plaquette benutzen, da in ihr das Eichfeld viermal eingeht. Da die Plaquette einfach zu messen ist und auch keine Eichung benötigt wird, erweist sich dieses als einfachste Möglichkeit, die Tadpole-Terme in der Simulation zu berücksichtigen.

$$U_\mu(x) \;=\; u_0(1 + iag_0 A_\mu(x)) \tag{1.11}$$

$$u_0 \;=\; < \frac{1}{3}\mathrm{Re}(\mathrm{Tr}\; U_{\mu\nu}^{1\mathrm{x}1}) \;>^{\frac{1}{4}} \tag{1.12}$$

Nach obiger Definition sollten nun die Eichfelder auf dem Gitter reskaliert werden, $U_\mu(x)$ geht also über in $U_\mu(x)/u_0$, was praktischerweise einfach durch eine Umnormierung der Kopplung erreicht wird (z.B. $\beta_{new}^{1\mathrm{x}1} = \frac{2N}{g_0^2 u_0^4}$).

1.2.2 Fermion-Wirkung

Wilson-Wirkung

Betrachtet man den fermionischen Anteil der Wirkung, so erhält man nach einer naiven Diskretisierung der Kontinuumswirkung folgende Gitterwirkung

$$S_F \;=\; \sum_{x,y,i,j,\alpha,\beta} \bar\Psi^i_\alpha(n) M^{ij}_{\alpha\beta}(x,y)\Psi^j_\beta(y) \tag{1.13}$$

mit der Fermionenmatrix

$$\begin{aligned} M^{ij}_{\alpha\beta}(x,y) \;&=\; \sum_\mu \frac{1}{2}\,(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\;[\;\delta_{y,x+\hat\mu}\;U^{ij}_\mu(x) - \delta_{y,x-\hat\mu}\;U^{\dagger ij}_\mu(x-\hat\mu)\;] \\ &\quad + m\delta_{xy}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} \;\;. \end{aligned} \tag{1.14}$$

Dabei kennzeichnen x, y die Gitterkoordinaten, i, j die Farbindizes und α, β die Spinorindizes. m entspricht dem Massenparameter der Kontinuumswirkung. Im Kontinuumslimes geht die Physik, die sich mit dieser Wirkung extrahieren läßt, jedoch nicht gegen die Kontinuumsphysik. Das wird deutlich bei der Betrachtung der Zweipunktkorrelationsfunktion (Quarkpropagator). Fouriertransformiert man die Ortskoordinaten und führt den Kontinuumslimes aus, so erhält man für das freie Fermionenfeld (die Eichfelder werden gleich der Einheitsmatrix gesetzt)

$$\begin{aligned} < \Psi_\alpha(x)\bar{\Psi}_\beta(y) > &= lim_{a\to 0} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \frac{(-i\sum_\mu \gamma_\mu \tilde{p} + m\mathbf{1})_{\alpha\beta}}{\sum_\mu \tilde{p}_\mu^2 + m^2} \; e^{ip(x-y)} && (1.15) \\ \tilde{p}_\mu &= \frac{1}{a}\sin(p_\mu a) \; . && (1.16) \end{aligned}$$

Die Anzahl der Polstellen dieser Funktion bestimmt die Zahl der simulierten Teilchen. Die Nullstellen des Nenners ergeben sich aus den Nullstellen der Sinusfunktion. Da die Integration jedoch über ein Intervall geht, an dessen Rändern jeweils Nullstellen des Sinus liegen, erhält man insgesamt $2^D = 16$ Massen auf dem Gitter, die sich im Kontinuumslimes nicht wegheben. Man erreicht hier effektiv eine Verdopplung der simulierten Teilchenzahl pro Dimension. Wie Nielsen und Ninomiya 1981 in ihrem "No-go Theorem" [10] gezeigt haben, ist dieses auf dem Gitter prinzipiell bei Erhaltung der chiralen Symmetrie für $m = 0$ unvermeidlich.
Um das Auftreten dieser Massenverdopplung zu umgehen, gibt es mehrere Wege. Kogut und Susskind haben durch eine Verteilung der inneren Freiheitsgerade auf Hyperkuben eine Reduzierung der Teilchenanzahl mit Hilfe der Staggered Fermionen [11] erreicht.
Wilson hat 1974 eine Wirkung [2] vorgeschlagen, bei der durch Einfügung des D'Alambertschen Operators die Massen der zusätzlichen Teilchen etwa $m \approx \frac{\pi}{a}$ werden. Im Kontinuumslimes werden sie also unendlich schwer und entkoppeln damit. Erkauft hat er sich dadurch allerdings eine explizite Brechung der im Kontinuum vorhandenen chiralen Symmetrie. Die Wilson-Wirkung ist

$$\begin{aligned} S_{WF} &= S_F - \frac{r}{2} \sum_{x,i,\alpha} \Psi^i_\alpha(x) \Box \Psi^i_\alpha(x) \\ &= \sum_{x,y,i,j,\alpha,\beta} \Psi^i_\alpha(x) M^{WF}_{\alpha\beta,ij}(x,y) \Psi^j_\beta(y) && (1.17) \end{aligned}$$

mit der Wilson Fermionenmatrix

$$\begin{aligned} M^{WF}_{\alpha\beta,i,j}(x,y) &= (m+4r)\,\delta_{xy}\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} - \\ & \frac{1}{2}\sum_\mu [\,(r\mathbf{1}-\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\;\delta_{y,x+\hat{\mu}}\;U^{ij}_\mu(x) \\ & \quad + \quad (r\mathbf{1}+\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\;\delta_{y,x-\hat{\mu}}\;U^{\dagger ij}_\mu(x)\,]\;. && (1.18) \end{aligned}$$

Dabei ist r der sogenannte Wilson-Parameter, welcher die relative Stärke des Zusatztermes definiert. Für $r = 0$ erhalten wir die naive Fermionenwirkung zurück.

Mit der Wahl $r = 1$ werden die $(r\mathbf{1} \pm \gamma_\mu)$ zu Projektionoperatoren auf einen zweidimensionalen Unterraum im Spinorraum. Dieses bringt Vorteile bei der Simulation auf dem Computer, da nur zwei der vier Spinorkomponenten bei der Multiplikation von Eich- und Fermionfeld wirklich berücksichtigt werden müssen. Dieses wird im Anhang unter (B.1) ausführlich dokumentiert (siehe dazu auch [12]).
Der Massenparameter läßt sich auch darstellen als $m = \frac{1}{2}(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_{crit}})$. κ bestimmt m und κ_{crit} entspricht einem Wert, an dem m verschwindet. Im freien Fall für $r = 1$ ist $\kappa_{crit} = \frac{1}{8}$. Bei einer Theorie mit Wechselwirkung ist κ_{crit} von der Kopplung und der gewählten Gittergröße abhängig. $\kappa_{crit}(\beta)$ liegt dann zwischen $\frac{1}{8}$ und $\frac{1}{4}$. Das hängt mit der Brechung der chiralen Symmetrie auch für verschwindendes m zusammen. Dadurch wird die Masse renormiert und $m_q \neq m$. $m = 0$ wird also erreicht bei unterschiedlichen κ. Um eine Massenskala zu haben, ist es nötig, zuerst einmal κ_{crit} zu bestimmen.
Für Wilson Fermionen handelt es sich bei m also nur um einen Parameter, welcher im Lagrangian das Feld definiert, nicht jedoch um die physikalische Masse in Gittereinheiten. Diese erhält man erst durch eine Untersuchung der Pole des Quark-Propagators. Verfährt man wie bei der naiv diskretisierten Wirkung, so ergibt sich im freien Fall mit $r = 1$

$$\begin{aligned} < \Psi_\alpha(x)\bar{\Psi}_\beta(y) > \;&=\; lim_{a\to 0} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^4p}{(2\pi)^4}\, e^{ip(x-y)} \\ &\left(\frac{1}{\frac{1}{a}\, \sum_\mu (\; i\gamma_\mu \sin p_\mu a \;+\; (1-\cos p_\mu a)\;) \;+\; ma} \right)_{\alpha\beta} . \end{aligned} \tag{1.19}$$

Betrachtet man den Pol und setzt dazu $\vec{p}_\mu = \vec{0}$, so ergibt sich für die oberen Komponenten des Spinors mit $p_4 = iE$

$$\begin{aligned} 1 \,+\, m \;&=\; \cos(iEa) \;-\; i\gamma_4 \sin(iEa) \\ &=\; \cos(-im_{phys}a) \;+\; i\sin(-im_{phys}a) \\ &=\; e^{m_{phys}a} \end{aligned} \tag{1.20}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow m_{phys} \;&=\; \frac{1}{a}\, \ln(1 \,+\, m) \\ &=\; \frac{1}{a}\, \ln\left(1 \,+\, \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\kappa} \,-\, \frac{1}{\kappa_{crit}} \right)\right) \;. \end{aligned} \tag{1.21}$$

Haben wir also κ_{crit} bestimmt, so erhalten wir durch (1.21) für jeden Kopplungsparameter die simulierte Quarkmasse.
Ein weiterer Nachteil der Wilson Wirkung besteht darin, daß die Abweichungen von der Kontinuumsphysik statt $O(a^2)$ nun $O(a)$ sind. Dieses Manko versucht man, wie bereits in der reinen Eichwirkung, durch Hinzufügen weiterer Operatoren auszugleichen. Das führt zu einer verbesserten Wilson-Wirkung.

Clover Wirkung

Von Sheikoleslami und Wohlert ist eine verbesserte Wirkung [13] vorgeschlagen worden, die nun bis zur Ordnung a^2 korrekt ist. Diese ist die Sheikoleslami Wohlert Wirkung oder auch Clover (Kleeblatt) Wirkung. Sie ist folgendermaßen definiert:

$$S_C = \left(\frac{1}{2\kappa}\right) \sum_{xy\alpha\beta ij} \bar{\Psi}^i_\alpha(x) \mathcal{M}^C_{\alpha\beta ij}(x,y) \Psi^j_\beta(y) \ , \tag{1.22}$$

mit der Clovermatrix

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}^C_{\alpha\beta ij}(x,y) &= A^{ij}_{\alpha\beta}(x)\, \delta_{xy} - \kappa\, \Delta^{ij}_{\alpha\beta}(x,y) && (1.23)\\
A^{ij}_{\alpha\beta}(x) &= \mathbf{1} - \frac{\kappa r}{2}\, g_0\, F_{\mu\nu}(x)\, \sigma_{\mu\nu} && (1.24)\\
\Delta^{ij}_{\alpha\beta}(x,y) &= \sum_\mu [\, (r\mathbf{1} - \gamma_\mu)_{\alpha\beta}\, \delta_{y,x+\hat{\mu}}\, U^{ij}_\mu(x) \\
&\quad + \ (r\mathbf{1} + \gamma_\mu)_{\alpha\beta}\, \delta_{y,x-\hat{\mu}}\, U^{\dagger ij}_\mu(y) \,] && (1.25)\\
\sigma_{\mu\nu} &= \frac{i}{2}\, [\, \gamma_\mu, \gamma_\nu \,] && (1.26)\\
g_0\, F_{\mu\nu}(x) &= \frac{1}{4} \sum_j \frac{1}{2i} \left(U^{1\text{x}1}_{j\mu\nu}(x) - U^{1\text{x}1\,\dagger}_{j\mu\nu}(x) \right) \ . && (1.27)
\end{aligned}$$

Bei den $U^{1\text{x}1}_{j\mu\nu}$ handelt es sich um die vier in Abb.(1.1) dargestellten Plaquetten, welche von einem Punkt x entgegen des Uhrzeigersinns ausgehen und in der $\mu\nu$-Ebene liegen. Nach Gl.(1.10) sind die Gittereichfelder $U_\mu(x) = exp(iag_0\, A_\mu(x))$. So ergibt sich für eine Plaquette

$$\begin{aligned}
U^{1\text{x}1}_{\mu\nu}(x) &= exp(iag_0\, F_{\mu\nu}(x)) \\
&\approx \mathbf{1} + iag_0 F_{\mu\nu} - ... && (1.28)
\end{aligned}$$

Damit erhält man die Gitterversion des Feldstärketensors der QCD. Obiges $F_{\mu\nu}(x)$ ist die symmetrisierte Variante, um keine Richtung im Gitter zu bevorzugen. Um die Abweichung zur Kontinuumsphysik zu veringern, ist es notwendig, nicht nur ausschließlich die Wirkung zu verbessern, sondern auch die Operatoren, welche benutzt werden, um Erwartungswerte auszurechnen. Für die Clover Wirkung geht dieses einher mit einer isospektralen Transformation der Fermionenfelder [14].

$$\begin{aligned}
\Psi \quad &\rightarrow \quad \Psi_{new} = \left(1 - \frac{r}{4}(\gamma_\mu D_\mu - m)\right) \Psi && (1.29)\\
\bar{\Psi} \quad &\rightarrow \quad \bar{\Psi}_{new} = \bar{\Psi} \left(1 + \frac{r}{4}(\gamma_\mu D_\mu + m)\right) && (1.30)
\end{aligned}$$

Für On-Shell Größen, wie es Massen sind, kann man durch Anwendung der Dirac-Gleichung $(\gamma_\mu D_\mu + m\mathbf{1})\Psi = 0$ die Rotationen vereinfachen, wenn statt der Differentialoperatoren die Massen eingesetzt werden. Dann ist es auch möglich, die gesamte Transformation wegzulassen, da es sich so nur um eine Umnormierung der Fermionenfelder handelt ($\Psi_{new} = (1 + \frac{r}{2}m)\Psi$).

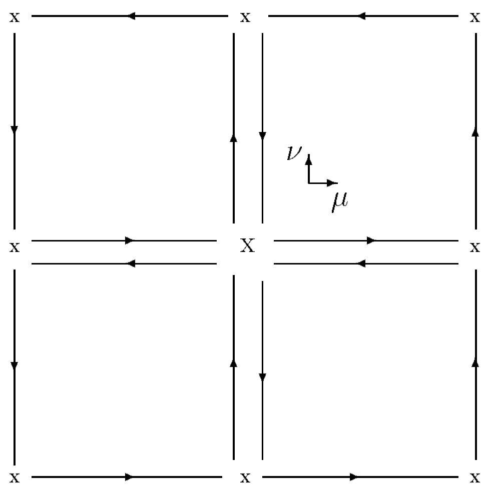


Abbildung 1.1: Gitterrepräsentation von $F_{\mu\nu}$

Tadpole Verbesserte Wirkung

Ebenso wie im reinen Eichfall werden auch hier die Eichfelder renormiert, so daß die Gitterversion den Kontinuumseichfeldern ähnlicher wird. $U_\mu(x) \rightarrow U_\mu(x)/u_0$. In $\Delta^{ij}_{\alpha\beta}(x,y)$ aus Gl. (1.25) erhält man damit ein u_0 im Nenner und in $A^{ij}_{\alpha\beta}$ durch den Cloveranteil vier. Ein u_0 kann in κ absorbiert werden. Damit bleibt in $A^{ij}_{\alpha\beta}$ ein Faktor $C = u_0^{-3}$, welcher als zusätzlicher Parameter eingeführt werden kann, um den Cloveranteil zu renormieren. Somit erhält man

$$A^{ij}_{\alpha\beta}(x) = \mathbf{1} - C\frac{\kappa r}{2}\, g_0\, F_{\mu\nu}(x)\, \sigma_{\mu\nu} \quad . \tag{1.31}$$

1.2.3 Thermodynamik auf dem Gitter

QCD bei hohen Temperaturen ist ein Teilbereich der Quantenchromodynamik, in dem versucht wird, den Phasenübergang zu beschreiben, bei dem Quarks und Gluonen von einem kalten Zustand gebundener hadronischer Materie zu einem heißen Quark-Gluon Plasma wechseln, in dem die Quarks fast frei propagieren können. Die Farbladung wird in der heißen Phase duch Debye-Screening abgeschirmt. Dies ist ein Scenario, welches sich im frühen Universum einige Mikrosekunden nach dem Urknall abgespielt haben soll (siehe bsp. [15]).
Die bisher dargestellten Methoden eignen sich jedoch nicht direkt zur Beschreibung heißer physikalischer Systeme. Um Thermodynamik auf dem Gitter betreiben zu können, geht man von der Zustandssumme im Kontinuum aus. So sieht man, was

verallgemeinert werden muß, um ein System mit Temperatur zu diskretisieren. Ohne Berücksichtigung des chemischen Potentials erhält man

$$\begin{aligned} < \mathcal{O} > &= \frac{1}{Z} \mathrm{Tr}\ \mathcal{O} e^{-\mathcal{H}/Tk_0} && (1.32) \\ Z(T,V) &= \mathrm{Tr}\ e^{-\mathcal{H}/Tk_0} \\ &= \int DAD\bar{A}DqD\bar{q} e^{-\int_0^{\frac{1}{Tk_0}} d\tau \int d_V^3 x \mathcal{L}(A,\bar{A},q,\bar{q})} \quad . && (1.33) \end{aligned}$$

Dabei ist $\mathcal{H}$ der Hamiltonian des Systems, V das Volumen, T die Temperatur und k_0 die Boltzmannkonstante. Obiges Integral wird also ausgeführt über den gesamten Raum, wie bei Null Temperatur Systemen, jedoch nur über einen endlichen "Zeitraum". Dieses führt zur Definition der inversen Temperatur $\beta_\tau = \frac{1}{Tk_0}$. Außerdem werden die Integrale über die Felder der wechselwirkenden Teilchen ausgeführt über im bosonischen Fall periodische und im fermionischen Fall antiperiodische Felder in der Zeit.

$$\Phi(\vec{x},0) = \Phi(\vec{x},\beta_\tau) \quad (1.34)$$

$$\Psi(\vec{x},0) = -\Psi(\vec{x},\beta_\tau) \quad (1.35)$$

Auf dem Gitter ist die inverse Temperatur also gegeben durch $T = (N_\tau a)^{-1}$, mit N_τ als Ausdehnung des Gitters in Zeitrichtung. In der Praxis sind natürlich sowohl Zeit- als auch Raumrichtung endlich und beschränkt durch die Computerresourcen. Zur Simulation von $T = 0$ werden dann Gitter benutzt mit $N_\tau \geq N_\sigma$, mit N_σ als Ausdehnung des Gitters in die räumlichen Richtungen. Für endliche Temperaturen wird die Zeitrichtung wesentlich kleiner als die Raumrichtung gewählt, je heißer, desto kürzer die Zeitachse. Beispiele für thermodynamische Observablen sind die Energiedichte ϵ und der Druck p.

$$\epsilon = -\frac{1}{V}\frac{\partial}{\partial\beta_\tau}(\ln Z)_V \quad (1.36)$$

$$p = -\frac{1}{\beta_\tau}\frac{\partial}{\partial V}(\ln Z)_{\beta_\tau} \quad (1.37)$$

Auf dem Gitter ergibt dieses in Störungstheorie

$$\epsilon = \frac{1}{a^4}\frac{6}{g_0^2}\left(< \mathcal{P}_\sigma - \mathcal{P}_\tau > + g_0^2 < c_\sigma \mathcal{P}_\sigma - c_\tau \mathcal{P}_\tau >\right) \quad (1.38)$$

$$p = \frac{1}{3}\epsilon + \frac{1}{a^4}\frac{4}{g_0^3}\left(a\frac{\partial g_0}{\partial a}\right) < \mathcal{P}_\sigma + \mathcal{P}_\tau > \quad . \quad (1.39)$$

$(1 - \mathcal{P}_{\sigma,\tau})$ ist dabei der Erwartungswert räumlichen oder zeitlichen Plaquetten, $c_{\sigma,\tau}$ die Karschkoeffizienten [16].

1.3 Numerische Berechnung des Pfadintegrals

1.3.1 Yang-Mills Theorie

Will man nun rein gluonische Observablen ausschließlich mit Hilfe der reinen Eichwirkung untersuchen, so fällt der fermionische Anteil des Integrals (1.6) weg. Das übrigbleibende Integral läßt sich mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden [17] berechnen als Ensemblemittel der mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $P_{conf} \propto exp(-S_G(U))$ verteilten Konfigurationen.

$$\begin{aligned} < \mathcal{O} > &= \frac{1}{Z} \int DU \; \mathcal{O} \; e^{-S_G(U)} \\ &\approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathcal{O} \; [U_i] \end{aligned} \tag{1.40}$$

Um ein Ensemble zu generieren, startet man eine sogenannte Markov Kette [18] von Konfigurationen. Zu beachten ist bei der Erzeugung neuer Konfigurationen aus den alten die Gewährleistung von Ergodizität und Detailed Balance. Ein einfaches und langsames Verfahren ist beispielsweise der Metropolis Algorithmus [19], in dem durch Veränderung eines Links eine neue Konfiguration vorgeschlagen wird und diese angenommen wird, wenn die Wirkung sich verringert hat, und mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit angenommen wird, wenn sie sich erhöht hat.
Zur Beschleunigung der Bewegung der Eichfelder durch den Phasenraum kann man sich noch verschiedener Verfahren bedienen, welche oben genannte Bedingungen erfüllen. So wird in dieser Arbeit durch den Cabibbo-Marinari-Pseudo-Heatbath [20] und den Kennedy Pendleton Algorithmus [21] in den SU(2) Untergruppen zusammen mit Overrelaxation [22, 23] ein wesentlich schnelleres Schreiten der Eichfelder durch den Konfigurationsraum erreicht. Damit kann Rechenzeit gespart werden, und es stehen unkorrelierte Daten mit der korrekten Verteilung in sinnvoller Zeit zur Verfügung.

1.3.2 Quenched Approximation

Ziel ist es, das Integral (1.6) zu bestimmen. Betrachtet man die Zustandssumme und integriert den fermionischen Anteil mit Hilfe des Grassmannintegrals aus, so erhält man

$$\begin{aligned} \int D\bar{\Psi} D\Psi DU \;\; e^{-(\bar{\Psi}\mathcal{M}(U)\Psi + S_G)} &= \int DU det(\mathcal{M}(U)) \;\; e^{-S_G} \\ &= \int DU \;\; e^{-S_G + \ln det(\mathcal{M}(U))} \quad . \end{aligned} \tag{1.41}$$

Will man also wie beim reinen Eichfeld Erwartungswerte von Operatoren durch Monte Carlo Algorithmen bestimmen, so muß bei der Berechnung der Wirkung jedesmal auch die Determinante der Fermionenmatrix bestimmt werden, um mit einer effektiven Wirkung dann das Eichfeldintegral auszuführen. Dieses ist zeitlich gesehen ein unmögliches Unterfangen, da die Determinante hochgradig nichtlokal ist und sehr viele Faktoren mit unterschiedlichen Vorzeichen berechnet und summiert werden müssen.
Trotzdem gibt es Methoden, das Integral zu bestimmen durch Hybrid Monte Carlo [24] oder der Multibosonen Technik [25]. Beide Methoden sind jedoch sehr zeitaufwendig. Beim Hybrid Monte Carlo ist es notwendig, bei jedem Update der Eichfelder die Fermionenmatrix zu invertieren. Dadurch bewegt man sich in Simulationszeit gerechnet nur sehr langsam durch den Phasenraum. Die zweite Methode approximiert die Determinante durch ein Integral über eine große Anzahl von bosonischen Feldern, die wie im reinen Eichfall einfach zu behandeln sind. Zur zusätzlich verbrauchten Rechenzeit hat man außerdem einen sehr großen Speicherbedarf. Beide Methoden sind also sehr aufwendig in den benötigten Computerresourcen.
In der Quenched Approximation werden solch zeitaufwendige Berechnungen vermieden. Die Determinante wird zu eins gesetzt. Damit vernachlässigt man den Teil der Wirkung, der für interne virtuelle Quark-Loops verantwortlich ist. Observablen, von denen angenommen werden kann, daß sie von Quark-Loops nicht oder kaum beeinflußt werden, sollten auf dem Gitter also auch in dieser Approximation zu berechnen sein.
Während man also bei der vollen QCD auf das langsame Hybrid Monte Carlo oder den Multibosonenalgorithmus angewiesen ist, kann in der quenched QCD die Generation der Eichfelder durch einen Pseudo Heatbath und Overrelaxation, wie im reinen Eichfall, beschleunigt werden. Auf den so erzeugten Konfigurationen können dann auch fermionischen Observablen gemessen werden.

1.4 Der Kontinuumslimes

Alle Größen, welche auf dem Gitter berechnet werden können, sind dimensionslos. Um eine physikalische dimensionsbehaftete Observable $\mathcal{O}$ aus einer dimensionslosen Gittergröße $\hat{\mathcal{O}}$ bestimmen zu können, berechnet man

$$\mathcal{O}(g_0, a) = \left(\frac{1}{a}\right)^{Dim(\mathcal{O})} \hat{\mathcal{O}}(g_0) \ . \tag{1.42}$$

Dazu muß der Gitterabstand in Abhängigkeit von der Kopplung g_o für diese Observable allerdings bekannt sein. In Störungsrechnung wird das Verhalten von $a(g_0)$ durch Gl. (1.43) wiedergegeben.

$$a(g_0) = \frac{1}{\Lambda_{Lattice}} \left(\beta_0 g_0^2\right)^{-\beta_1/2\beta_0^2} e^{-\frac{1}{2\beta_0 g_0^2}} \tag{1.43}$$

Dies ist jedoch nur als Näherung niedriger Ordnung zu betrachten. Rechnungen ergeben Abweichungen davon, welche auch abhängig sind von der betrachteten Observablen. In einem bestimmten Kopplungsbereich sieht man, daß das Verhalten verschiedener Observablen bezüglich $a(g_0)$ fast universell ist. Dieser Bereich liegt für die Standard-Wilson-Wirkung bei $\beta \geq 5.7$. Bei der Bildung von Quotienten von Observablen bei der gleichen Kopplung erhält man noch Korrekturen, die abhängig sind von den Observablen selber aber auch von der benutzten Wirkung. So ist z.B. das Verhältnis der Rhomasse und der Wurzel der Stringtension

$$\frac{m_\rho \, a(g_0, \rho)}{\sqrt{\sigma} \, a(g_0, \sigma)} = \frac{m_\rho}{\sqrt{\sigma}} + \mathcal{O}(a^2) \qquad (1.44)$$

für die Wilson-Wirkung. Mit Hilfe von verbesserten Wirkungen will man diese $a-$Korrekturen vermindern. Dann läßt sich aus dem Vergleich von Kontinuums- und Gitterobservable der Gitterabstand bei geeigneten Kopplungen bestimmen, um dieses als Input zur Berechnung anderer Observablen zu benutzen. Üblicherweise bedient man sich dabei der Stringtension oder der Rhomasse. So stammen die in dieser Arbeit benutzten Daten ebenfalls aus beiden Größen.
Die Durchführbarkeit ist allerdings davon abhängig, daß das verwendete Gitter mit dem Gitterabstand a auch geeignet ist für das zu untersuchende physikalische System. Ist das simulierte Volumen zu klein (N_σ zu klein), so paßt das System nicht mehr vollständig auf das Gitter (Finite Volume Effekt), hat man einen zu großen Abstand, so wird das Gitter zu grob, die Physik zu beschreiben, und Effekte, die nur auf einer kleineren Längenskala bemerkbar sind, fallen durch das Gitter hindurch. Auch diese Finite a Effekte hofft man durch die Verwendung von verbesserten Wirkungen und Operatoren zu reduzieren.
Der Kopplungsbereich, der geeignet ist, physikalische Ergebnisse zu extrahieren, wird als Skalen-Fenster bezeichnet. Die Simulationen in dieser Arbeit sind bei Kopplungen gerechnet, von denen angenommen werden kann, daß sie sich in diesem befinden.

Kapitel 2

Spektroskopie

In Kapitel **2** werden die in dieser Arbeit untersuchten Observablen dargestellt. Es wird erläutert, wie in der Quenched Approximation (siehe **1.3.2**) Mesonmassen bestimmt werden und wie die Bethe-Salpeter-Amplitude sowohl für den Grundzustand wie auch für den ersten angehobenen Zustand extrahiert werden.
In Kapitel **2.1** werden dazu Quark- und Hadronoperatoren eingeführt, um in **2.2** Massen von Mesonen zu extrahieren. In Kapitel **2.3** wird eine Methode dargestellt, wie Operatoren auf dem Gitter konstruiert werden können, deren Signale für den Grundzustand kaum mehr durch angeregte Zustände verunreinigt sind. Dieses bietet eine Möglichkeit zur Bestimmung der Bethe-Salpeter Wellenfunktion des Grund- sowie des ersten angeregten Zustandes in **2.5**.

2.1 Fermionische Operatoren

2.1.1 Quarkpropagator

Ein großer Teil der Simulationszeit geht in die Berechnung von Quarkpropagatoren auf bereits vorhandenen Eichfeldkonfigurationen. Der Propagator ist die Zweipunktkorrelationsfunktion des Quarkfeldes bzgl. der fermionischen Freiheitsgrade F. Er beschreibt ein Quark, welches vom Ort $\vec{y} = \vec{0}$ zum Zeitpunkt 0 zum Ort $\vec{x}$ zum Zeitpunkt t propagiert.

$$\begin{aligned} < \ G^{ij}_{\alpha\beta}(\vec{x},t;0) \ >_F &= \frac{1}{Z}\int D\bar{\Psi}D\Psi \ \bar{\Psi}^i_\alpha(\vec{x},t)\Psi^j_\beta \ e^{-(\bar{\Psi}\mathcal{M}\Psi)} \\ &= \frac{1}{Z}\,\mathcal{M}^{-1\,ij}_{\alpha\beta}(\vec{x},t;0)\,det\mathcal{M}(U) \\ &= \mathcal{M}^{-1\,ij}_{\alpha\beta}(\vec{x},t;0) \end{aligned} \tag{2.1}$$

Zur Berechnung des Quarkpropagators wird also die Inverse der Fermionmatrix benötigt. Dieses erweist sich als der zeitaufwendigste Teil der Berechnung. Auf die Invertierungsmethode wird in Kapitel **3** im Detail eingegangen. Mit Hilfe der so erzeugten Quarkpropagatoren lassen sich dann Hadronen berechnen.

2.1.2 Hadron Operatoren

Da sämtliche beobachtbaren Teilchen farbneutral sind, müssen Meson- wie Baryonoperatoren auch auf dem Gitter so konstruiert werden, daß diese Eigenschaft erhalten ist. Sie werden gebildet durch

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{Meson}(x) &= \bar{\Psi}^{i,f_1}_{\alpha}(x)\,\Gamma_{\alpha\beta}\;\Psi^{i,f_2}_{\beta}(x) \\ \mathcal{O}_{Baryon}(x) &= \epsilon_{ijk}\left(\Psi^{i,f_1}_{\alpha}(x)\,\Gamma_{\alpha\beta}\;\Psi^{j,f_2}_{\beta}(x)\right)\;\Psi^{k,f_3}_{\gamma}\;. \end{aligned} \tag{2.2}$$

$f_{1,2,3}$ bezeichnet den Flavour des Quarkfeldes. Für Mesonen ist $\Gamma \in \{\mathbf{1}, \gamma_\mu, \gamma 5, \gamma_5\gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}\}$ und für Baryonen sind außerdem Kombinationen dieser Matrizen mit bestimmten weiteren Operatoren erlaubt. Γ bestimmt die Quantenzahlen der Operatoren. So ist das Pion ein Pseudoskalar mit $J^{PC} = 0^{-+}$ und deshalb $\pi = \bar{\Psi}\gamma_5\Psi$, das Rho ein Vektorteilchen mit $J^{PC} = 1^{--}$, so daß $\rho = \sum_{i=1}^{3}\bar{\Psi}\gamma_i\Psi$ und das Proton $p = (uC\gamma_5 d)u$, mit u und d als up und down Flavour und C als Ladungskonjugationsoperator. Für Mesonen gilt außerdem $\mathcal{O}(x) = \pm\,\mathcal{O}^\dagger(x)$.

2.2 Berechnung von Massen

2.2.1 Der Mesonpropagator

Zur Berechnung von Mesonenmassen betrachtet man Mesonpropagatoren.

$$C(\vec{x},t) = <0|\;\mathcal{O}(\vec{x},t)\;\mathcal{O}^\dagger(0)\;|0> \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned} &= \pm <0|\;\bar{\Psi}^{i,f_1}_{\alpha}(\vec{x},t)\Gamma_{\alpha\beta}\Psi^{i,f_2}_{\beta}(\vec{x},t)\;\;\bar{\Psi}^{j,f_2}_{\gamma}(0)\Gamma_{\gamma\delta}\Psi^{j,f_1}_{\delta}(0)\;|0> \\ &= \pm\frac{1}{Z}\int DU D\bar{\Psi}D\Psi\;e^{-(\bar{\Psi}\mathcal{M}\Psi+S_G)} \\ &\qquad \bar{\Psi}^{i,f_1}_{\alpha}(\vec{x},t)\Gamma_{\alpha\beta}\Psi^{i,f_2}_{\beta}(\vec{x},t)\;\;\bar{\Psi}^{j,f_2}_{\gamma}(0)\Gamma_{\gamma\delta}\Psi^{j,f_1}_{\delta}(0) \\ &= \pm\frac{1}{Z}\int DU\;\Gamma_{\alpha\beta}\Gamma_{\gamma\delta}\;det\mathcal{M}(U)\;e^{-S_G} \\ &\qquad (\;\mathcal{M}^{-1\;ij,f_2f_2}_{\beta\gamma}(\vec{x},t;0)\mathcal{M}^{-1\;ji,f_1f_1}_{\delta\alpha}(0;\vec{x},t) \\ &\qquad -\;\;\mathcal{M}^{-1\;ii,f_2f_1}_{\beta\alpha}(\vec{x},t;\vec{x},t)\mathcal{M}^{-1\;jj,f_1f_2}_{\delta\gamma}(0;0)\;)\;. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Für Nicht-Flavour Singletts folgt in der quenched Approximation (siehe **1.3.2**)

$$C(\vec{x},t) \;=\; \pm <0|\Gamma_{\alpha\beta}\,\Gamma_{\gamma\delta}\,G^{ij,f_2f_2}_{\beta\gamma}(\vec{x},t;0)\,G^{ji,f_1f_1}_{\delta\alpha}(0;\vec{x},t)|0>_U \quad . \tag{2.5}$$

Der Index U an dem Erwartungswert kennzeichnet das Pfadintegral über ausschließlich die Gluonenfreiheitsgrade. Mit Hilfe der γ_5-Symmetrie der Fermionmatrix

$$G^{ji,ff}_{\delta\alpha}(0;\vec{x},t) \;=\; (\gamma_5)_{\delta\rho}\,G^{\dagger ji,ff}_{\rho\sigma}(0,\vec{x},t)\,(\gamma_5)_{\sigma\alpha} \tag{2.6}$$

erhält man

$$\begin{aligned} C(\vec{x},t) &= \pm <0|\,(\Gamma)_{\alpha\beta}\,G^{ij,f_2f_2}_{\beta\gamma}(\vec{x},t;0)\,(\Gamma)_{\gamma\delta}\,(\gamma_5)_{\delta\rho}\,G^{\dagger ji,f_1f_1}_{\rho\sigma}(0,\vec{x},t)\,(\gamma_5)_{\sigma\alpha}\,|0>_U \\ &= \pm <0|\;\mathrm{Tr}\left[\,\Gamma\;G^{f_2}(\vec{x},t;0)\;\Gamma\;\gamma_5\;G^{\dagger\,f_1}(0;\vec{x},t)\;\gamma_5\,\right]|0>_U \quad . \end{aligned} \tag{2.7}$$

Für das Pion erhält man so

$$C_\pi(\vec{x},t) \;=\; <0|\;\|\;G^{ij,uu}_{\beta\gamma}(\vec{x},t;0)\;\|^2\;|0>_U\;, \tag{2.8}$$

da der Quarkpropagator für Up- und Down-Quarks, wegen der Entartung der Masse beider Konstituenten des Pions, gleich ist. Die Korrelationsfunktion des Pions ist also einfach die Summe aller Betragsquadrate der Colour- und Spinoreinträge des Quarkpropagators. Bei anderen Teilchen hat man zusätzlich die Gammaarithmetik zu beachten.

Ausgehend von Gleichung (2.3) kann man auch einen analytischen Ausdruck für den Mesonpropagator erhalten, wenn man einen kompletten Satz von Zuständen $\{|n>\}$ einfügt und über sämtliche Orte einer Zeitschicht summiert, um Zustände mit Impuls $\vec{p}$ herauszuprojezieren.

$$\begin{aligned} C(\vec{p},t) &= \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p}\vec{x}}C(\vec{x},t) \\ &= \sum_{\vec{x}}\sum_n \int \frac{d^3\vec{q}}{(2\pi)^3 2E_n(\vec{q})} <0|\mathcal{O}(x)|n,\vec{q}><n,\vec{q}|\mathcal{O}^\dagger(0)|0> \;\; e^{-i\vec{p}\vec{x}} \\ &= \sum_n \left(A_n(\vec{p})e^{-E_n(\vec{p})t} + A'_n(\vec{p})e^{-E'_n(\vec{p})(N_\tau - t)}\right) \end{aligned} \tag{2.9}$$

A_n sind die Bethe-Salpeter Amplituden des $n-$ten angehobenen Zustands und E_n die zugehörige Energie, welche über die Dispersionsrelation mit Masse und Impuls $\vec{p}$ verknüpft ist.

$$2\sinh(\frac{E_n}{2}) \;=\; a\sqrt{m^2_{n,phys} + \vec{p}^2} \tag{2.10}$$

Auf dem Gitter erhält man die vor- und rückwärts propagierenden Teilchen mit Impuls $\vec{p}$. Für große Zeiten dominiert der Grundzustand. Für Mesonen gilt außerdem, anders als bei Baryonen, daß $A_0(\vec{p}) = A'_0(\vec{p})$ und $E_0(\vec{p}) = E'_0(\vec{p})$, da beide Teilchen identisch sind. Damit ergibt sich

$$C(\vec{p},t) \;=\; 2A_0(\vec{p})e^{-E_0(\vec{p})N_\tau/2}\cosh\left(E_0(\vec{p})\left(\frac{N_\tau}{2} - t\right)\right) \quad . \tag{2.11}$$

Mit Hilfe von Gl. (2.10) erhält man dann die physikalische Masse. Im folgenden sei $\vec{p} = \vec{0}$, so daß $2\sinh(E_0/2) = am_{0,phys}$. So läßt sich also durch obige Fitfunktion für große Zeiten die Masse des Grundzustandes bestimmen.
Für kleine Zeiten wird die Korrelationsfunktion noch kontaminiert sein durch Beiträge höherer Anregungen. Deshalb ist es günstig eine möglichst große Ausdehnung in Zeitrichtung zu haben, um die Masse des Grundzustandes verläßlich bestimmen zu können. Nun ist jedoch Kapitel **1.2.3** zu entnehmen, daß eine verhältnismäßig geringe Zeitausdehnung notwendig ist, um ein Hochtemperatursystem zu simulieren. In diesem Fall ist es auch möglich, zu diesem Zweck die Korrelationen in räumlicher z.B. z-Richtung zu berechnen und somit eine Korrelationslänge bzw. Screeningmasse statt der Grundzustandsmasse zu extrahieren. Obige Rechnungen können jedoch genau wie im Fall der Zeitkorrelation durchgeführt werden, so daß auch hier Funktion (2.11) zu fitten ist. N_τ ist dann zu ersetzen durch N_σ.

2.2.2 Effektive Masse

Um eine erste Schätzung für m_0 zu erhalten, bedient man sich der effektiven Masse, die definiert ist durch

$$m^{eff}(t) \quad = \quad \ln\left(\frac{C(t)}{C(t+1)}\right) . \tag{2.12}$$

Wie bereits beschrieben, können die angehobenen Zustände für große Zeiten vernachlässigt werden, so daß m_0 dominiert. Für $t << \frac{N_\tau}{2}$ kann man auch den rückwärts propagierenden Zustand vernachlässigen und erhält so $m^{eff} \approx m_0$.
Ein typischer effektiver Massenplot ist in Abb. (2.1) zu sehen. Die Fehler auf m^{eff} enstammen einer Jacknife Analyse. Man sieht deutlich ein Plateau ab einer moderaten Zeit, in dem die angeregten Zustände mit höheren Massen im Rauschen verschwunden sind und nicht mehr beitragen. Ab Zeitschicht 17 sieht man ein Abfallen der effektiven Masse bedingt durch den rückwärts propagierenden Zustand.
Die Bestimmung der effektiven Masse sollte als eine Methode gesehen werden, mit deren Hilfe das Zeitintervall eingeschränkt werden kann, welches zum Fitten verwendet wird. Außerdem erhält man erste Informationen über die Grundzustandsmasse.

2.2.3 Fitten der Massen

Um an die Daten einen cosh nach Gl. (2.11) legen zu können, muß zuerst das Intervall, auf dem gefittet wird, auf einen geeigneten Bereich eingeschränkt werden, in dem keine Beiträge angehobener Zustände mehr spürbar sind. Man kann dazu verschiedene Fits an den selben Datensatz anschauen, deren Intervall immer weiter

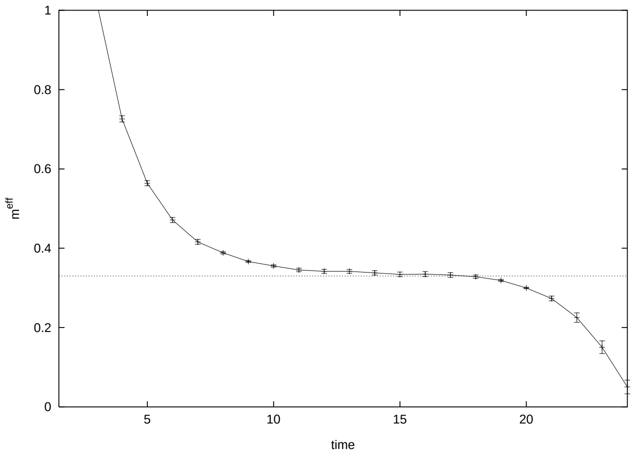


Abbildung 2.1: Effektive Masse m^{eff} des Pseudoskalars in Gittereinheiten auf einem 24^3x48 Gitter bei $\beta = 6.2,\ \kappa = 0.141$

eingeschränkt wird, bis sich die Fitparameter stabilisiert haben. Um das Intervall stabiler Parameter zu vergrößern, über den auf dem Effektiven Massenplot abzulesenden Bereich Methoden bedienen.
Durch einen Fit nicht an einen einzelnen cosh, sondern deren zwei, wird versucht, die erste angehobene Masse m_1 zu berücksichtigen. Dadurch ist es möglich, einen größeren Bereich zu fitten, als für einen Einzel-cosh-Fit möglich. Dieser Fit hat sich jedoch bei dem verwendeteten Fitprogramm[1] als sehr instabil erwiesen. Ob er konvergierte, hing stark von der Wahl der Startwerte ab. Deshalb war keine automatisierte Auswertung möglich.
Durch Verschmieren der Eich- und Fermionenfelder ist es möglich, ausgedehnte Operatoren zur erzeugen. Dadurch werden reale ausgedehnte Mesonen besser auf dem Gitter nachgebildet. (Siehe Kap. **2.3**)
Durch einen kombinierten Fit an mehrere Korrelationsfunktionen mit Operatoren unterschiedlicher Ausdehnung ist es möglich, auch einen Mehrkanalfit zu stabilisieren und außerdem noch Informationen über die Wellenfunktionen des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes zu extrahieren. (Siehe Kap. **2.3, 2.5**)
Zum Fitten der Daten wird die Standardmethode der χ^2-Minimierung benutzt. Hierbei wird die Fehlerfunktion χ^2 in Abhängigkeit der zu fittenden Parameter $a_1, a_2, .., a_{n_a}$ einer Versuchsfunktion $f(t, \vec{a})$ (hier des $cosh$) minimiert. Bei korellierten Daten benutzt man

$$\chi^2(\vec{f(a)}) = \sum_{t_i t_j} (X(t_i) - f(t_i, \vec{a}))\ \mathcal{C}^{-1}_{t_i t_j}\ (X(t_j) - f(t_j, \vec{a})) \tag{2.13}$$

$$\mathcal{C}_{t_i t_j} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{k=1}^{N} (x_k(t_i) - X(t_i))\,(x_k(t_j) - X(t_j))\,, \tag{2.14}$$

[1] usefit3.3: entwickelt im Hause

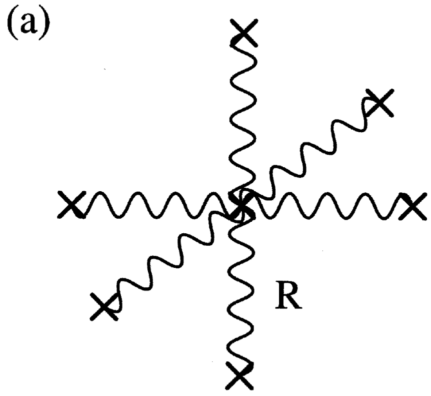


Abbildung 2.2: Geschmierter Propagator

wobei $x_k(t_i)$ der Wert der Observablen auf der Konfiguration k der Zeitschicht t_i ist, $X(t_i)$ der Mittelwert über alle Konfigurationen an einer Zeitschicht und $\mathcal{C}_{t_i t_j}$ die Kovarianzmatrix. Ein guter Fit sollte bei $N_F = n_t - n_a$ Freiheitsgraden bei $\chi^2/N_F \approx 1$ liegen, was einem gaussverteilten Datensatz entspricht. Dazu sollte die Anzahl der Konfigurationen allerdings auch groß genug sein, um von einer Gaussverteilung der Daten ausgehen zu können.

2.3 Schmieren der Operatoren

Wie in Kapitel **2.2.3** bereits angedeutet, ist es möglich, durch Veränderung der Operatoren das Fitintervall zu vergrößern, um zu einer vertrauenwürdigeren Masse zu gelangen. Dazu gibt es mehrere Methoden mit unterschiedlichen Eigenschaften. Ihnen allen ist gemein, daß sie versuchen, Eigenschaften der Mesonen und Hadronen besser nachzubilden, als es mit den punktförmigen Operatoren der Fall ist. Bei den untersuchten Teilchen handelt es sich schließlich um ausgedehnte Objekte. Diese Ausdehnung versucht man, auf dem Gitter nachzubilden, um damit den Überlapp des Operators mit der Beobachtungsgröße zu vergrößern, was heißt, ein besseres Signal für die Bethe-Salpeter-Amplituden zu erhalten. Beiträge höherer Anregung sollen damit vermindert werden. Zwei in den letzten Jahren entwickelte Methoden sind das Jakobi Smearing (siehe dazu [26]) und das Wuppertal Smearing [27].
In dieser Arbeit wurde das sogenannte Fuzzing [28] gewählt, welches eichinvariante auf dem Gitter "verschmierte" Operatoren erzeugt, die eine bessere Entsprechung der im Kontinuum ausgedehnten Hadronen sind. Durch das Fuzzen erhält man Operatoren mit in Abbildung (2.2) dargestelltem Aussehen. Ein geschmiertes Quarkfeld

mit der Ausdehnung R ist dann

$$\begin{aligned}\Psi^{smeared}(x,R) &= \sum_{\mu\in V_{z,t}} (\ U^{\dagger}(x-\hat{\mu})\ ..\ U^{\dagger}(x-R\hat{\mu})\Psi(x-R\hat{\mu})\ + \\ &\qquad U(x)\ ..\ U(x+(R-1)\hat{\mu})\Psi(x+R\hat{\mu})\ ),\end{aligned} \tag{2.15}$$

also der Durchschnitt aller sechs umgebenen Werte im Abstand R in jede außer der Korrelationsrichtung. Somit gilt $V_z = \{x,y,t\}$ und $V_t = \{x,y,z\}$. Die Mesonkorrelationsfunktion für senkengefuzzte Operatoren ist dann

$$C(t,R) \;=\; <0|\frac{1}{6}\sum_{x\in V_{z,t}} \bar{\Psi}^{smeared}_{\alpha,i}(x)\Gamma_{\alpha\beta}\Psi^{i}_{\beta}(x)\ \bar{\Psi}^{j}_{\gamma}(0)\Gamma_{\gamma\delta}\Psi^{j}_{\delta}(0)|0> \ . \tag{2.16}$$

Um die Operatoren eichinvariant zu machen, werden die Quarkfelder mit den Eichfeldern verbunden. Das Schmieren von Eichfeldoperatoren zur Berechnung des Quarkpotentials ist eine seit langem gebräuchliche Methode zur Erhöhung des Überlapps mit dem Grundzustand [29]. Nach dieser Methode wird auch hier den Eichfeldern iterativ eine Ausdehnung gegeben, um die Gluonwolke, von denen die Quarks umgeben sind, besser zu simulieren. Zu einem Link werden die zu ihm orthogonal liegenden Staples, welche nicht in der Korrelationsrichtung liegen, addiert und das Ergebnis zurückprojeziert auf die SU(3) (siehe Abb. (2.3)).

$$U_{new}(x,\nu) \;=\; \mathcal{P}_{SU(3)}\left(cU_{old}(x,\nu) \;+ \sum_{\mu\in V_{z,t}/\nu} U_{Umweg(\mu)}\right) \tag{2.17}$$

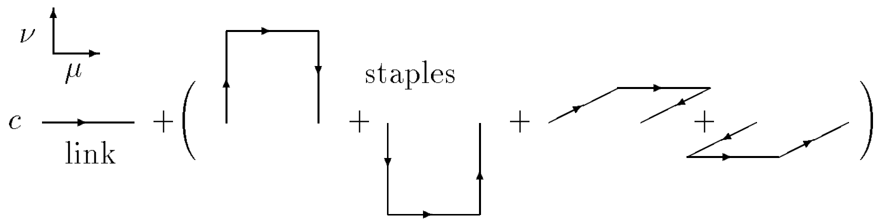


Abbildung 2.3: Schmieren des Eichfeldes

Die somit geschmierten Mesonpropagatoren können nun zur Bestimmung der Masse benutzt werden. In Abbildung (2.4) sieht man die Veränderung von m^{eff} in Abhängigkeit zum Fuzzinglevel des Quarkfeldes. Hier wird deutlich, daß für eine bestimmte Ausdehnung des Operators die effektive Masse am flachsten ist, was aufzeigt, welche Daten gefittet werden sollten, um einen möglichst gutes Signal zu erhalten. Flach bedeutet eine geringere Kontamination durch angehobene Zustände und rührt daher, daß die Amplitude der Wellenfunktion des kontaminierenden Zustandes bei diesem Radius eine Nullstelle hat und somit im Propagator nicht mehr beiträgt.

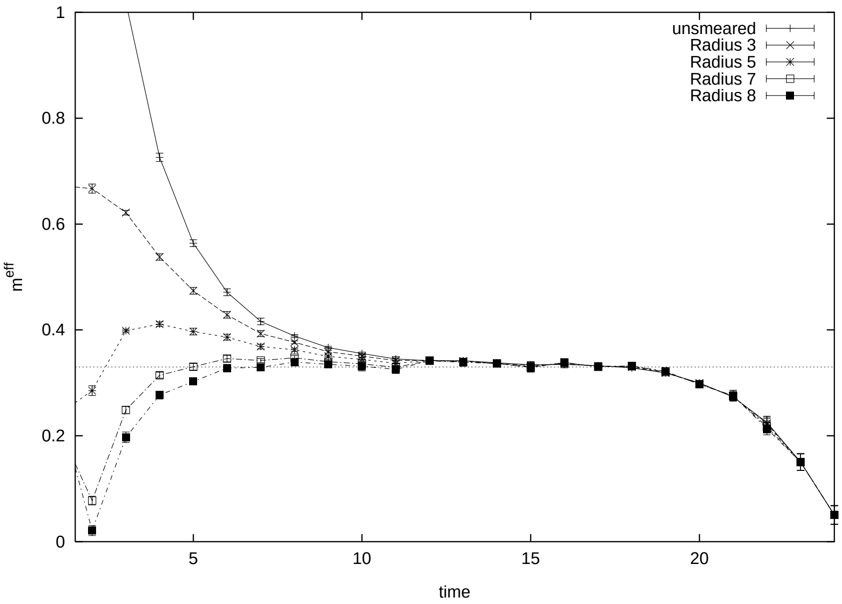


Abbildung 2.4: Effektive Masse eines geschmierten Pseudoskalar
$\beta = 6.2,\ \kappa = 0.141$
Smearinglevel der Eichfelder: 8,
Smearinglevel des Propagators zwischen 0 und 8

Die in dieser Arbeit benutzten Mesonpropagatoren sind senkengeschmiert, was heißt, daß nur dem Meson auf den Senkenseite eine Ausdehnung gegeben wurde. Es ist auch möglich, die Quelle oder auch Senke und Quelle zu schmieren. Beide Methoden haben jedoch einige Nachteile. Für senkengeschmierte Mesonen werden nur Quarkpropagatoren aus Punktquellen benötigt, die, wie in Gl. (2.16) beschrieben, nachbehandelt werden, um dem Meson auf der Senkenseite eine Ausdehnung zu geben. Für quellengeschmierte Mesonen müsste für jeden Radius ein Quarkpropagator erzeugt werden, was eine Verfielfachung der Rechenzeit bedeuten würde. Gibt man der Quelle und der Senke eine Ausdehnung, so heben sich die Beiträge beider Anteile teilweise gegenseitig auf und der gewünschte Effekt der Signalverbesserung verschwindet, so daß die Mesonpropagatoren rein lokalen Operatoren gleichen [28].

2.4 Der Chirale Limes

Um nun physikalische Mesonmassen aus den, wie in Kapitel **2.2** beschrieben, erhaltenen Gittermassen berechnen zu können, benötigt man zwei Skalen, die die Gitterwelt mit dem Kontinuum in Verbindung bringen. Sowohl der Gitterabstand a wie auch die Quarkmasse m_q müssen in physikalischen Einheiten bekannt sein.

Den Gitterabstand kann man über die Stringtension oder die Rhomasse im chiralen Limes auf dem Gitter festlegen. Die Quarkmasse entnimmt man Gl. (1.21). Dazu muß allerdings erst κ_{crit} bestimmt werden. Das ist der Wert, an dem die Quarkmasse verschwindet. Dieses geschieht durch Berechnung der Masse des Pseudoskalar im chiralen Limes.
Das Up- sowie das Down-Quark sind mit ihrer Masse von etwa 5Mev nicht direkt auf dem Rechner zu simulieren, da die Zeit zum Invertieren der Fermionenmatrix für $\lim \kappa \to \kappa_{crit}$ gegen Unendlich geht. Beide Quarks können jedoch also masselos betrachtet werden, so daß das Pion $(u\gamma_5 d)$ das Goldstone Boson der Theorie ist, welches in der Realität durch explizite Brechung der chiralen Symmetrie aufgrund nichtverschwindender Quarkmasse eine kleine Masse erhält.
Will man dieses Teilchen untersuchen, so extrapoliert man von größeren Massen aus den chiralen Limes dadurch, daß κ_{crit} dort festgelegt wird, wo die Pionmasse verschwindet. Das Pion genügt als Pseudoskalares Teilchen der Gitterversion der PCAC-Relation (Partial Conserved Axial Current $(\partial_\mu A_\mu = 2m\bar{\Psi}\gamma_5\Psi)$ (bis auf Korrekturen in a)), woraus folgt

$$m_\pi^2(\kappa) \quad = \quad a_\pi \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_{crit}}\right). \tag{2.18}$$

Ebenso genügt das ρ-Meson als Vektorteilchen in chiraler Störungstheorie

$$m_\rho(\kappa) \quad = \quad a_\rho + b_\rho \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_{crit}}\right). \tag{2.19}$$

Durch Extrapolation zu κ_{crit} läßt sich hier die ρ-Masse im chiralen Limes bestimmen und durch Vergleich mit dem physikalischen Wert eine Längenskala durch Festlegung des Gitterabstandes etablieren.
Die Simulationen in dieser Arbeit sollen die Eigenschaften von $c\bar{c}$-Bindungszustände (Charmonium) beleuchten. Die Charmmasse liegt bei $m_c = 1.35(5)$GeV [30]. Die Werte für κ_{crit} werden daher der Literatur entnommen. Ist die Skala bekannt, so lassen sich auch die Massen der schwereren Quarks auf dem Gitter festlegen, durch Vergleich mit den Massen geeigneter Teilchen mit dem zu berechnenden Quark als Konstituenten.
Die Abbildungen (2.5) und (2.6) zeigen die lineare Extrapolation zu κ_{crit} und die Berechnung der ρ-Masse auf einem 24^3x48 Gitter. Die Daten entstammen verschiedenen Arbeiten der UKQCD [32, 33, 34]. κ_{crit} ergibt sich damit zu

$$\begin{aligned} \kappa_{crit}(6.2) &= 0.14315^{+2}_{-2} \\ \kappa_{crit}(6.0) &= 0.14556^{+6}_{-8}\ . \end{aligned} \tag{2.20}$$

Durch Festlegung der ρ-Masse im chiralen Limes läßt sich auch der Gitterabstand bei beiden β-Werten bestimmen. Aus UKQCD- und APE-Rechnungen ergibt sich

$$\begin{aligned} a^{-1}(6.2) &= 2.7(1)\ \text{GeV} \\ a^{-1}(6.0) &= 2.05(6)\ \text{GeV}. \end{aligned} \tag{2.21}$$

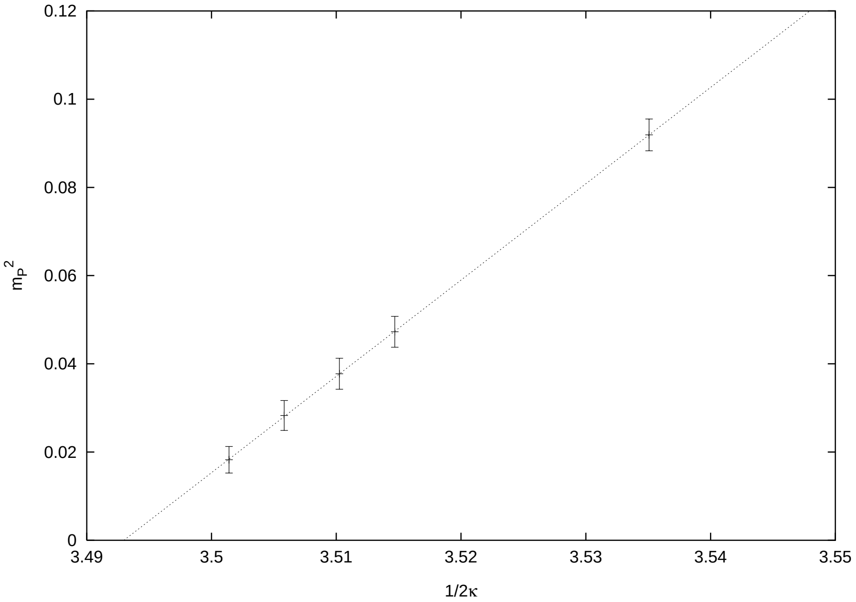


Abbildung 2.5: Chirale Extrapolation der π-Masse für $\beta = 6.2$ [33]

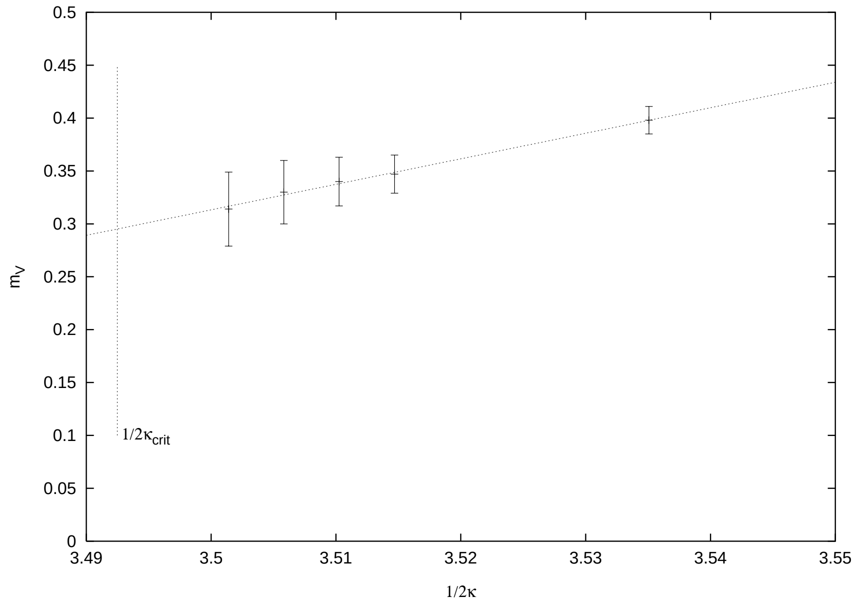


Abbildung 2.6: Chirale Extrapolation der ρ-Masse für $\beta = 6.2$ [33]

Bielefelder Berechnungen [31] der Stringtension σ des Quarkpotentials ergeben davon um bis zu 5% nach unten abweichende Werte. Dies bestätigt die in **1.4** beschriebene Abhängigkeit des Gitterabstandes von der Observablen. Im folgenden werden die aus der $\rho-$Masse extrahierten verwendet.

2.5 Die Bethe-Salpeter-Wellenfunktion

In Kapitel **2.3** wurde beschrieben, wie es möglich ist, durch die Konstruktion ausgedehnter Operatoren für die Berechnung von Massen bessere Signale zu erhalten. Das Plateau der effektiven Masse wird bei geeigneter Separation größer, so daß man einen vertrauenswürdigeren Fit erhält.
Mit Hilfe dieses Verfahrens kann man allerdings auch Informationen über die Bethe-Salpeter-Wellenfunktionen (siehe [28, 36]) erhalten. Sie ergibt sich nach (2.9) bis auf einen Normierungsfaktor aus der Amplitude A_i der Korrelationsfunktion. Durch einem Doppelzustandsfit, welcher die Massen des Grundzustandes und des ersten angeregten Zustandes festlegt, lassen sich damit auch die Amplituden für beide Zustände der Wellenfunktion berechnen.
Beide Wellenfunktionen können parametrisiert werden durch geeignete Exponentialfunktionen. Nach [36] liefert

$$\Phi^0_{BS}(R) \quad \propto \quad exp\left(-\left(\frac{R}{a}\right)^{\nu}\right) \tag{2.22}$$

eine gute Fitfunktion. Um die Nullstelle des angehobenen Zustands wiederzugeben wird hier

$$\Phi^1_{BS}(R) \quad \propto \quad \left(1-\frac{R}{b}\right) exp\left(-\left(\frac{R}{a}\right)^{\nu}\right) \tag{2.23}$$

verwendet. Beide Funktionen sind motiviert durch die Radialwellenfunktionen in einem Coulombpotential. Dort ist $\nu = 1$ und $a = b$. Für ein lineares Potential erhält man $\nu = 1.5$ [36]. In reiner Eichtheorie erhält man einen Potentialverlauf, wie er in Abb. (5.3) [31] dargestellt ist, ein coulombartiges Verhalten am Urprung und ein lineares für große Abstände. Aus diesem Grund erwarten wir eine Wellenfunktion deren Parameter ν, a und b von denen eines Coulomb- oder linearen Potentials abweichen können. Prinzipiell hoffen wir jedoch ein qualitativ ähnliches Verhalten feststellen zu können.

Kapitel 3

Invertierung der Fermionmatrix

In diesem Kapitel soll kurz gezeigt werden, mit welchen Methoden der Quarkpropagator aus **2.1.1** berechnet werden kann. Die generelle Herangehensweise wird in **3.1** kurz motiviert. In **3.2** werden dazu verschiedene Verfahren zur Invertierung der Fermionenmatrix dargestellt. Danach wird in **3.3** auf numerische und analytische Besonderheiten des benutzten Inverters eingegangen.

3.1 Motivation

In Kapitel **2** wurde dargestellt, daß zur Berechnung von Mesonmassen der Quarkpropagator benötigt wird. Dieser ist das Inverse der Fermionmatrix (siehe Gl. (2.1)). Benötigt werden die Einträge der $(\vec{x}, t)$-ten Spalte des Propagators für sämtliche Spinor- und Farbindizes, insgesamt also $n_c n_s = 12$ Spalten.

$$G^{ij}_{\alpha\beta}(\vec{x}, t; 0) \quad = \quad \mathcal{M}^{-1\,ij}_{\alpha\beta}(\vec{x}, t; 0) \tag{3.1}$$

Es ist also essentiell, die Fermionmatrix zu invertieren. Das ist äquivalent dazu, folgendes Gleichungssystem zu lösen:

$$\left(\mathcal{M}^{ij}_{\alpha\beta}(U)\right)(x, y) \;\; \Psi^{j}_{\beta}(y) \quad = \quad \Phi^{i}_{\alpha}(x) \tag{3.2}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 \\ . \\ . \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ . \\ . \\ 0 \end{pmatrix} x - te\ Zeile$$

$$\Rightarrow \Psi^j_\beta(y) = \mathcal{M}^{-1\,ji}_{\beta\alpha}(U)(y,x)\,\Phi^i_\alpha(x) \tag{3.3}$$

Dabei ist U das Eichfeld, von dem $\mathcal{M}$ abhängt. $\mathcal{M}$ ist eine NxN-Matrix[1], deren Einträge nach Gl. (1.23-1.27) fast ausschließlich Nullen sind. Ohne diese Eigenschaft wäre es unmöglich, das Gleichungssystem zu lösen. Die gesamte Matrix könnte nicht einmal vollständig im Speicher gehalten werden.
Ein weiterer Faktor, der die Lösbarkeit des Gleichungssystems beeinflußt, ist die Verteilung der Eigenwerte der Matrix. Ein Maß dafür, wie schnell die Matrix invertiert werden kann, ist die Konditionszahl. Sie wird gebildet aus dem Quotienten des kleinsten und des größten Eigenwertes. Die Anzahl der Invertierungsschritte einer Wilson-Fermion-Matrix mit einem Conjugate Gradient Algorithmus ergibt sich aus

$$N_{CG}^{-1} \propto \frac{\lambda_{min}}{\lambda_{max}} . \tag{3.4}$$

Bei kleinen Quarkmassen sollte zum einen $\lambda_{max} \approx$ const sein und zum anderen $\lambda_{min} \approx (1 - \frac{\kappa_{crit}-\kappa}{\kappa_{crit}})$. Damit sieht man, daß für $m \to 0$ die Anzahl der Invertierungsschritte divergiert und so eine Lösung des Gleichungssystems nicht mehr möglich ist. Die Anzahl der Invertierungsschritte kann so auch als Kriterium verwendet werden, wie nahe κ sich bereits an κ_{crit} befindet.

3.2 Invertierungsverfahren

Zur Lösung von Gleichung (3.2) gibt es verschiedene Verfahren. Einem Großteil von ihnen ist zu eigen, daß sie mit einem mehr oder weniger gut geratenem Lösungsvektor starten, um ihn dann iterativ zu verbessern. Dies wird solange wiederholt, bis man annehmen kann, definiert durch ein geeignetes Abbruchkriterium, daß der errechnete Vektor nicht mehr allzu weit von der tatsächlichen Lösung entfernt ist. Man bewegt sich also auf einer hochdimensionalen Fehlerfläche talabwärts. Die verschiedenen Methoden unterscheiden sich in der Hauptsache dadurch, wie die Richtung des Lösungsvektors im Fehlerraum bestimmt wird.

[1]Auf den in dieser Arbeit benutzten Gittern liegt N bei bis zu 24^3x48x12 $\approx 8 * 10^6$

So kann man unter diesen “Successive Line Minimisation” Algorithmen vor allem zwei Methoden unterscheiden.

Steepest Descent

Der Lösungsvektor wird gesucht in Richtung des lokalen Gradienten $\bigtriangledown\epsilon$ der Fehlerfunktion ϵ und ist die offensichtlichste Art eines Minimierungsproblems. Diese Fehlerfunktion kann beispielsweise das Residuum

$$< r, r > \;=\; < \mathcal{M}\Psi - \Phi, \mathcal{M}\Psi - \Phi > \tag{3.5}$$

sein, welches die Abweichung von $\mathcal{M}$ mal der iterativen Lösung von der Quelle Φ angibt. Ein Problem dieses Algorithmus besteht darin, daß Lokale Minima die Konvergenz zur richtigen Lösung behindern oder beeenden können, so daß dieses Verfahren nicht stabil ist oder sehr lange braucht.

Conjugate Residual

Bei dieser von Eisenstat[37] und Oyanagi[38] beschriebenen Methode geschieht die Minimierung entlang von k konjugiert orthogonalen Richtungen. Dabei sind Ψ und Φ konjugiert orthogonal zueinander bezüglich $\mathcal{M}$, wenn gilt: $< \Psi, \mathcal{M}\Phi >= 0$. Der gesuchte Lösungsvektor der Gleichung (3.2) liegt im Krylov Raum, welcher durch konjugiert orthogonale Vektoren aufgespannt wird.

$$\Psi_{exact} \;\in\; \{\, \Phi, \mathcal{M}\Phi, \mathcal{M}^2\Phi, .., \mathcal{M}^{s-1}\Phi \,\} \tag{3.6}$$

Dabei ist s die Ordnung des minimalen Polynoms[2]. Mit Hilfe dieser Algorithmen soll das Steckenbleiben in lokalen Minima vermieden werden. Der Nachteil besteht im sehr großen Speicherplatzbedarf, da sämtliche k Vektoren ständig aufbewahrt werden müssen.
Implementiert sind zwei Versionen des Conjugate Residual Typ.

1. **Minimal Residual**
   Gestartet wird mit $r_0 = \Phi - \mathcal{M}\Psi_0$. Dann wird iteriert:

$$\begin{aligned}\alpha_n &= \frac{(\mathcal{M}r_n, r_n)}{(\mathcal{M}r_n, \mathcal{M}r_n)}\\ \Psi_{n+1} &= \Psi_n + \alpha_n r_n\\ r_{n+1} &= r_n - \alpha_n \mathcal{M} r_n\end{aligned}$$

[2] Das Polynom mit dem kleinsten Grad, für welches gilt $P(\mathcal{M} - \lambda\mathbf{1}) = \mathbf{0}$, λ Eigenwert von $\mathcal{M}$

Minimiert wird das Residuum. Da nur der letzte konjugierte Vektor gespeichert wird, ist der Speicherplatzbedarf sehr gering. Durch Overrelaxation kann das Konvergenzverhalten beschleunigt werden. Leider muß dieser Algorithmus nicht unter allen Umständen konvergieren. Vor allem nahe am chiralen Limes (kleine simulierte Massen) wird er instabil oder benötigt sehr lange. (Siehe [39])

2. **Conjugate Gradient**
   Man startet mit $p_0 = r_0 = \Phi - \mathcal{M}\Psi_0$ und iteriert

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \frac{|r_n|^2}{(p_n, \mathcal{M}p_n)} \\ \Psi_{n+1} &= \Psi_n + \alpha_n p_n \\ r_{n+1} &= r_n - \alpha_n \mathcal{M} p_n \\ \beta_n &= \frac{|r_{n+1}|^2}{|r_n|^2} \\ p_{n+1} &= r_{n+1} + \beta_n p_n \end{aligned}$$

   Entwickelt wurde dieser Algorithmus in den 50er Jahren von Hestenes und Stiefel [40]. Die Minimierungsrichtung wird so gewählt, daß sie konjugiert orthogonal zu allen bisherigen Iterationsschritten bleibt. Damit wird der Krylov Raum automatisch aufgespannt, so daß für eine NxN Matrix dieser Algorithmus garantiert in N Schritten konvergiert. Numerische Rundungsfehler, wie sie auf dem Computer unvermeidlich sind, wurden dabei nicht berücksichtigt. Es wird eine positive, hermitesche Matrix benötigt. Für eine Wilson Fermionen Matrix lößt man deshalb $\mathcal{M}^\dagger\mathcal{M}\ \Psi = \mathcal{M}^\dagger\ \Phi$. Damit ergeben sich zwei Matrixmultiplikationen pro Iteration. Da die Matrixmultiplikation der zeitaufwendigste Teil in diesem Algorithmus ist, wird das Verfahren dadurch wesentlich verlangsamt.

3. **Weitere Algorithmen**
   Conjugate Gradient oder Minimal Residual lassen sich durch leichte Abwandlungen in ihrer Geschwindigkeit noch verbessern. Der Nachteil ist fast immer ein erhöhter Speicherplatzbedarf. Es muß also abgewägt werden zwischen Schnelligkeit und Computerresourcen. Weitere Algorithmen sind beispielsweise der γ_5-Bi-Congruential Gradient Algorithm, welcher die γ_5 Symmetrie der Fermion-Matrix ausnutzt ($\gamma_5 M \gamma_5 = M^\dagger$) und zwei Sequenzen von konjugiert orthogonalen Vektoren generiert, der γ_5-Quasi-Minimal Residual Algorithm (QMR) [41] oder der Stabilised Bi-Conjugate Gradient (BiCGstab2) [42], welcher zur Zeit als schnellster Algorithmus gilt, jedoch einen großen Speicherplatzbedarf und ein unorthodoxes Konvergenzverhalten hat.

3.3 Numerik

3.3.1 Preconditioning der Fermionmatrix

Außer durch die Wahl eines geeigneten Algorithmus kann die Geschwindigkeit der Inversion noch durch Preconditioning der zu invertierenden Matrix beschleunigt werden. Dadurch wird die Konditionszahl der Matrix verbessert, was die Anzahl der Invertierungsschritte bis zur Konvergenz reduziert. In dieser Arbeit wurde das sogenannte Even-Odd Preconditioning [43] verwendet. Dabei wird die Matrixinversion zuerst nur auf der Hälfte aller Punkte vollzogen, um danach den vollständigen Lösungsvektor aus der halben Lösung zu konstruieren. Sortiert man das Gitter nach geraden und ungeraden Punkten[3] um, so ergibt sich für die Fermionmatrix, wie sie in Gleichung (1.23) definiert wird,

$$\begin{aligned} \mathcal{M}\Psi &= \Phi \\ \begin{pmatrix} A_{ee} & -\kappa\Delta_{eo} \\ -\kappa\Delta_{oe} & A_{oo} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_e \\ \Psi_o \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \Phi_e \\ \Phi_o \end{pmatrix} \quad . \end{aligned} \tag{3.7}$$

Dabei sind A und Δ aus Gleichung (1.24) und (1.25). Wird (3.7) von links multipliziert mit

$$\begin{pmatrix} \mathbf{1}_{ee} & \kappa\Delta_{eo}A_{oo}^{-1} \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

so erhält man für den geraden Anteil

$$(A_{ee} - \kappa^2\,\Delta_{eo}\,A_{oo}^{-1}\,\Delta_{oe}\,)\,\Psi_e \;=\; \Phi_e + \kappa\,\Delta_{eo}\,A_{oo}^{-1}\,\Phi_o \quad . \tag{3.8}$$

Faßt man die linke Seite von Gl. (3.8) zusammen, so erhält man eine neue Matrix mit Einträgen von allen geraden Punkten und damit eine neue zu lösende Gleichung:

$$\mathcal{M}'_{ee}\,\Psi_e \;=\; \Phi'_e \tag{3.9}$$

Löst man diese Gleichung, so kann man sich den Lösungsvektor auf den ungeraden Punkten aus

$$\Psi_o \;=\; A_{oo}^{-1}\,(\Phi_o + \kappa\,\Delta_{oe}\Psi_e) \tag{3.10}$$

rekonstruieren. Somit wird effektiv nicht mehr eine NxN- sondern eine $\frac{N}{2}$x$\frac{N}{2}$-Matrix invertiert. Die Anzahl der Rechenoperationen ist pro Iteration die gleiche wie bei der Inversion der vollen Matrix. Das sieht man, wenn man die Anzahl der Multiplikationen mit Δ betrachtet. In beiden Fällen werden zwei Multiplikationen benötigt.

[3] Bei geraden Punkten ist die Summe aller Koordinaten im Gitter gerade, bei ungeraden Punkten ungerade. So ist $x = (1, 1, 1, 2)$ ein ungerader Punkt.

Der Großteil der Rechenzeit wird in dieser Routine verbraucht. Der Vorteil, den diese Art des Preconditioning bietet, liegt darin, daß der Nichtdiagonalanteil der neuen Matrix mit einem Faktor κ^2 versehen ist statt mit κ, wie vorher. Für kleine κ liegt sie also wesentlich näher an der Einheitsmatrix. Solch ein System ist wesentlich besser konditioniert. Dadurch konvergiert Ψ_n schneller gegen die gesuchte Lösung. Untersuchungen [44] zeigen, daß dieses mit der Clover-Wirkung etwa dreimal schneller geschieht als ohne Preconditioning.

3.3.2 Dekomposition des Cloverterm

Nach (3.8) und (3.10) wird die Matrix A auf den geraden und A^{-1} auf den ungeraden Punkten benötigt. Dabei ist A hermitesch ($A = A^\dagger$) und diagonal in der Ortskoordinate. Lokal an einem Punkt lebt also eine 12x12 Matrix ($n_c n_s = 12$).
Die Berechnung von A ist trivial. Um $A^{-1}(x)$ zu erhalten, benutzt man einen Algorithmus zur Dekomposition von A in Untermatrizen. A läßt sich schreiben als $A = L^\dagger DL$, wobei D eine Diagonalmatrix und L eine obere Dreiecksmatrix ist. Dann ergibt sich statt einer Multiplikation mit A^{-1} eine Multiplikation mit $L^{-1}D^{-1}(L^\dagger)^{-1}$. Gespeichert werden dann A auf den geraden Feldern und L und D auf den ungeraden Feldern. Der Algorithmus zur Dekomposition und zur Multiplikation mit L^{-1} und D^{-1} wird im Anhang unter **B.3** genau beschrieben. Dieses Verfahren akkumuliert kleine aber nicht wesentliche Rundungsfehler.

Kapitel 4

QCD auf dem T3D

In Kapitel **4** soll kurz die Maschine (der T3D)[1] beschrieben werden, auf welcher die Simulationen zu dieser Arbeit stattgefunden haben. Dazu wird in **4.1** ein grober Überblick über die verschiedenen Rechnerarchitekturen gegeben und der T3D eingeordnet. In **4.2** wird der T3D näher in seinem Aufbau und seiner Leistung beschrieben. Danach wird in **4.3** dargestellt, welche Programme auf dieser Maschine entwickelt wurden. Einen großen Aspekt der Programmierarbeit nahm dabei die Parallelisierung des Codes in Anspruch. Dazu wurde ein Message Passing System benutzt, auf welches in **4.4** näher eingegangen wird. Abschliessend wird in **4.5** gezeigt, wie der parallelisierte Code auf unterschiedlich vielen Prozessoren skaliert.

4.1 Einführung in Rechnerarchitekturen

Serielle Verarbeitung von Daten, wie sie Rechenmaschinen mit einer Von Neumann Architektur leisten, bewirkt die Bearbeitung von Befehlen in einer bestimmten Reihenfolge. Auch auf Multitasking Maschinen geschieht immer nur eine Operation gleichzeitig. Immer größere Anforderungen an die Bearbeitungsgeschwindigkeit von Daten bedingen die Entwicklung immer leistungsfähigerer, schnellerer Prozessoren. Diesem Wachstum sind jedoch zum einen technische aber auch physikalische Grenzen gesetzt, so daß als ein Ausweg, schnellere Maschinen zu erschaffen, die Aufteilung der zu erledigenden Arbeit auf viele schnelle, miteinander verbundene Bausteine eines Computers gesehen werden kann. Das ist das Konzept des Parallel Computing. In seiner Durchführung sind verschiedene Wege gangbar, welche grob durch Flynn's Taxonomy dargestellt werden. Hier wird Makroarchitektur durch den Informations- und den Datenfluß charakterisiert. So besitzt die ganz normale Workstation oder

[1]T3D steht für 3-Dimensionaler Torus und beschreibt die Prozessoranordnung

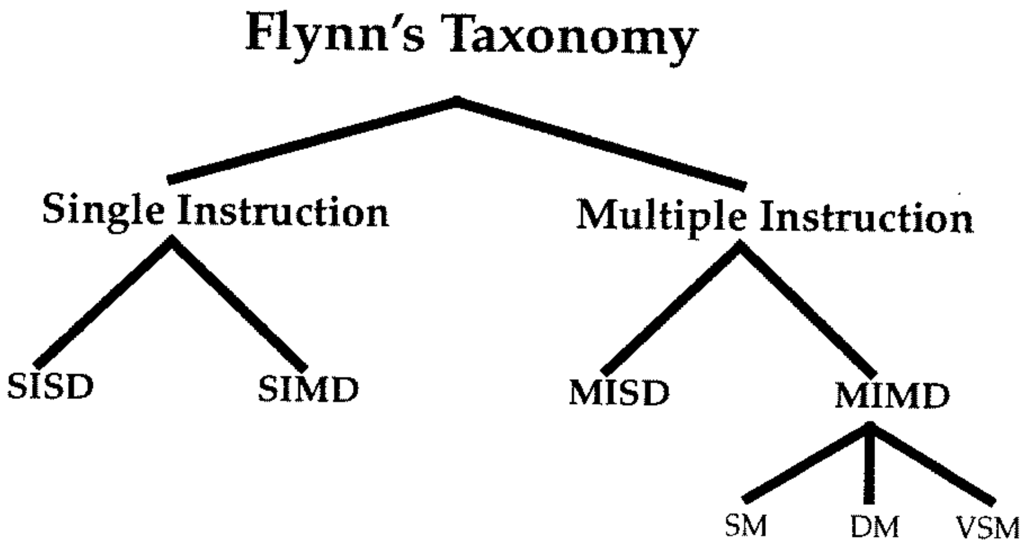


Abbildung 4.1: Grobe Übersicht der verschiedenen Computerarchitekturen durch Flynn's Taxonomy

der PC (SISD), wie beschrieben einen einzelnen Befehlsfluß mit einem bestimmten Datensatz. Im Unterschied dazu läuft auf der in Bielefeld zur Verfügung stehende SIMD-Maschine (eine Quadrics) ein Programm auf einer großen Anzahl von Prozessoren ab. Auf jedem ihrer Knoten wird zu jedem Zeitpunkt der gleiche Programmschritt durchgeführt, so daß jeder Prozessor in jeder Taktsequenz genau das gleiche macht, nur mit unterschiedlichen Daten. Damit kann ein Vielfaches an Arbeit gleichzeitig erledigt werden. Der T3D ist eine Multiple Instruction Multiple Data Maschine mit einem Virtual Shared Memory. Auf jedem ihrer Prozessoren ist es möglich, ein von den anderen verschiedenes Program zu laden. Möglich ist auch, auf einer Gruppe von Prozessoren jeweils das gleiche Program nach dem SIMD Konzept ablaufen zu lassen. Die Operationen eines Prozessors werden jedoch nicht gleichgetaktet sein mit denen der anderen. Somit kann im Prinzip durch einfache Ablaufsteuerung (if-then) auf jedem Prozessor effektiv ein unterschiedliches Programm ablaufen und dieses mit unterschiedlichen Datensatz. Solch ein System ist wesentlich variabler in seiner Handhabung und erlaubt komplexe Untergliederung von Operationen auf Datenblöcken wie beispielsweise Taskfarming. Virtual shared memory bedeutet, daß eigentlich jeder Prozessor einen lokalen Speicher sein eigen nennt, über einen globalen Adressbereich aber trotzdem auf nicht lokale Daten zugreifen kann.

4.2 Aufbau und Leistungsdaten des T3D

Der T3D besitzt abhängig von der Größe der Maschine zwischen 128 und 512 DEC Alpha 21064 Prozessoren (PE) mit einer Geschwindigkeit von 151 Mflop/s peak performance pro PE bei 64-bit. Damit erreicht er eine Gesamtgeschwindigkeit von bis 38.6 Gflop/s für eine 256-Prozessor Maschine, wie sie beispielsweise im Konrad-Zuse Institut in Berlin steht.
Er besitzt einen 8 Kbyte direct mapped data cache und 8 Kbyte instruction cache. Vor allem ersterer erweist sich als Bottleneck für Operationen mit sehr ungünstig verteilten Daten. Der Hauptspeicher hat 64 Mbyte RAM pro PE. Seine Prozessoren sind in einem 3-dim Torus mit 6 Verbindungen zu benachbarten Knoten angeordnet. An jedem Knoten liegen zwei von ihnen. Seine (mit allen Kunstgriffen, wie read-ahead buffer) erreichte schnellste Transfer Rate liegt bei 300 Mbyte/s.
Er benutzt ein Virtual shared memory System und erlaubt dadurch Sprachen, die nicht mehr Explizite Datentransferbefehle enthalten. Programmiersprachen des T3D sind C, C++, Fortran77, Fortran90 (nur teilweise implementiert), Craft (Cray Research Adaptive Fortran). Letzteres ist eine spezielle parallele Fortranversion, welche eine bessere Performance ermöglicht als das für eine große Anzahl von Rechnern bereitgestellte HPF (High Performance Fortran). Die Kommunikation zwischen den Prozessoren findet entweder unsichtbar für den Benutzer statt (beispielsweise durch CRAFT) oder es wird ein Message Passing Protokoll benutzt (MPI, PVM, SHMEM). In seiner Unicos Umgebung besitzt der T3D verschiedene hilfreiche Werkzeuge zur Analyse des Programmcodes, wie z.B. Debugger oder Performance Analyser.

4.3 Programme auf dem T3D

Im Rahmen dieser Arbeit wurden mehrere Programme für den T3D entwickelt. Dies geschah zum Teil auf der Maschine der EPCC[2] in Edinburgh und zum Teil auf der Maschine des Konrad Zuse Institutes (ZIB) in Berlin. Die T3D Programme benutzen zur Kommunikation das Message Passing Interface (MPI), welches auf dem T3D sowie dem Workstationcluster in Edinburgh installiert ist. Vor allem letzteres war in der Anfangszeit eine geeignete Entwicklungsplattform, da der T3D sehr ausgelastet ist. Insgesamt sind folgende Programme in Fortran und MPI entwickelt worden.

[2] Edinburgh Parallel Computing Center

1. Zunächst wurde ein Reines SU(3)-Eichprogramm mit der Wilson-Plaquette Wirkung entwickelt (siehe **1.2.1**).
   Dieses Programm benutzt einen Cabibbo -arinari-Pseudo-Heatbath mit Kennedy Pendleton Algorithmus in den SU(2) Untermatrizen und Overrelaxation.

2. Danach wurde ein Wilson Fermionen Invertierungsprogramm zur Erzeugung der Punktquellen-Quarkpropagatoren auf den durch (1) erzeugten Eichfeldern geschrieben (siehe Kapitel **3**).
   Die Invertierungsalgorithmen sind ein Overrelaxed Minimal Residual und ein Conjugate Gradient mit Even/Odd Preconditioning zur Beschleunigung der Konvergenz. Es wird eine Clover-Wirkung verwendet, wahlweise auch mit Tadpole Improvement. Die Dslash Kernroutine wurde durch Ausnutzung der Projektionsoperatoren auf Zweierspinoren beschleunigt (siehe Kapitel **B.1**).

3. Zur Erzeugung Senken- geschmierter Mesonkorrelationsfunktionen (siehe **2.3**) wurde ein Smearing/Fuzzing Programm geschrieben.

4.4 Message Passing Interface

Es existieren verschiedene Methoden zur Kommunikation zwischen Prozessoren auf Parallelrechnern. Durch Message Passing wird im Programmcode explizit darauf Einfluß genommen, welche Art von Daten zu welchem Zeitpunkt von welchem Prozessor zu welchem anderen Prozessor in welchen Speicherbereich geschickt wird. Dies ist ein grundlegend anderes Konzept als das Parallel Programming, bei dem das Parallelisieren der im Programm enthaltenen Instruktionen und Daten dem Compiler überlassen wird. Es gibt verschieden Systeme des Message Passing, die von den Produzenten leistungsfähiger Großrechenanlagen für die jeweiligen Maschinen entwickelt wurden.
MPI ist ein spezielles Message Passing System, welches Anfang der 90er von einem Konsortium entwickelt wurde, an dem sich verschieden Firmen und Organisationen beteiligt haben. Ziel war es, eine Plattform zu finden, die zum einen viele Vorteile unterschiedlicher Systeme in sich vereinigt und auch auf eine große Anzahl von Computerarchitekturen portabel ist. Dieses wurde 1993 mit einer ersten Version erreicht, die inzwischen weiter ausgebaut und von einigen Kinderkrankheiten bereinigt wurde. Nichtsdestoweniger befindet sich MPI noch in Entwicklung. Es soll aber in den nächsten Jahren andere Message Passing Systeme ersetzen können.

Enthalten im MPI-Standard sind:

- Punkt zu Punkt Kommunikation
- Globale Operationen
- Aufbau von virtuellen Prozessortopologien und Prozessorgruppierungen
- Einbindung in C oder Fortran
- Profiling und Möglichkeit zur Untersuchung des internen Managements

Nicht enthalten sind:

- Explizite Shared-Memory Operationen
- Über den normalen Standard hinausgehende Operationen
- Debugger
- Explizites I/O

Möglicherweise wird in zukünftigen Versionen das eine oder andere enthalten sein oder zumindest lokal unterstützt werden.

Programme auf dem T3D werden generell für bestimmte Anzahl[3] Prozessoren compiliert und bei Benutzung auf eben so vielen ausgeführt. Auf den Ort, an dem sich die beanspruchten Prozessoren physikalisch in der Maschine befinden, hat der Benutzer keinen Einfluß. Also wird anders als bei SIMD-Maschinen die Datenaufteilung nicht einer realen Prozessorverteilung angepasst. Stattdessen ist der Benutzer frei, selbst eine dem Problem angepasste virtuelle Prozessortopologie zu entwerfen. Die passende Topologie für die QCD ist natürlich ein kartesisches und vierdimensionales hyperkubisches Gitter. In diesem sollte ein Prozessor wissen:

- Wo liege ich im logischen Gitter, und welchem Ort entspricht dieses im physikalischen Gitter?
- Wer sind meine Nachbarn?
- Für Globale Operationen: Wo liegen alle übrigen Prozessoren?

[3] Erlaubt sind 2^n Prozessoren, $n = 0, 1, 2...$

Werden Messages verschickt an einen oder mehrere Prozessoren, so wird durch MPI dem Rechner mitgeteilt:

- Welcher Prozessor sendet?
- Wo liegen die Daten auf dem sendenden Prozessor?
- Welche Art von Daten wird gesendet und wieviel?
- Welche(r) Prozessor(en) erhält/erhalten die Daten?
- Wohin sollen die Daten auf den/m empfangenen Prozesor(en)?
- Wieviel Daten ist/sind der/die Empfänger überhaupt bereit zu erhalten?

Ausführlichere Informationen sind dem MPI-Standard zu entnehmen. Ein typisches Beispiel einer Kommunikation zwischen zwei Prozessoren ist in Abbildung (4.2) dargestellt. Der Code ist in Fortran77 geschrieben mit zusätzlichen MPI-Befehlen und entstammt der Staple-Berechnung im Reinen Eichprogramm.
Im MPI_ISSEND-Call wird an den Prozessor in (-nu)-Richtung ein Datenblock, definiert durch die Maske mat_VECTOR_dnTYPE, ab der Adresse u(1,1,1,oe,mu) geschickt. Im MPI_IRECEIVE wird ein gleichartiger Block aus (+nu)-Richtung empfangen. Dieser wird in einem kontinuierlichen Buffer ab der Adresse u(1,1,nsiteshalf+1,oe,mu) gelagert. Die folgenden Einträge sind ein "Name" zur Identifikation der Sendung, die benutzte virtuelle Prozessortopologie, in der der Transfer ablaufen soll, ein Informationspaket über die Größe der Sendung und einige andere Dinge und eine Variable in der ein Errorcode enthalten ist, falls etwas bei der Sendung oder dem Empfang schiefgegangen sein sollte.
Beide Aktionen werden mit obigen Befehlen angestoßen. Durch die MPI_WAIT Kommandos wird die Kommunikation vollständig abgeschlossen. Zwischen ihnen liegt zum einen der Austausch eines Protokolls, welches obige aufgelisteten Informationen enthält, der eigentliche Sendevorgang und gegebenenfalls noch die Wartezeit auf die Daten und die Informationen ohne wirkliche Aktivitäten der CPU. Durch die Wahl dieses asynchronen Sendebefehls ist es jedoch möglich, diese Totzeit durch zusätzliche Rechenoperationen zu füllen, in diesem Fall der Multiplikation einiger Matrizen mit Hilfe der Subroutine multalldn. So wird ein Teil der Kommunikation hinter Rechnungen versteckt. Diese Vorgehensweise liefert einen effizienteren Code.

4.5 Performance

Die Taktrate der Dec-Alpha Prozessoren liegt bei 151 MHz. Die Performance der Kernroutienen dieser Programme ist in Tabelle (4.1) dargestellt. Sie wurde gemessen mit Hilfe des Performance Analyser Apprentice. Einige Kernroutinen wurden

```
      CALL MPI_ISSEND(u(1,1,1,oe,mu),1,mat_VECTOR_dnTYPE(nu,oe),
     1            neigh(-nu),1000,comm,send_request,ierror)
      CALL MPI_IRECV(u(1,1,nsiteshalf+1,oe,mu),1,mat_CONT_TYPE,
     1            neigh(nu),1001,comm,rec_request,ierror)


      call multalldn(u(1,1,1,oe,mu),u(1,1,1,oe,nu),helpbt1(1,1,1),
     1            maxarray,ownhalfvol(4),normalsites(1))


      CALL MPI_WAIT(send_request,send_status,ierror)
      CALL MPI_WAIT(rec_request,rec_status,ierror)
```

Abbildung 4.2: Typischer Befehl zum Senden und Empfangen von Daten

Programm	Routine	Performance	Spent time
Eichprogramm	SU(3) Matrixmultiplikation n x n	38.5 MFlops/s	9.3 %
	SU(3) Matrixmultiplikation d x n	36.5 MFlops/s	17.7 %
	SU(3) Matrixmultiplikation d x d	32.0 MFlops/s	10.1 %
	Berechnung der Staples	27.3 MFlops/s	50.9 %
	Programm	18.6 MFlops/s	100 %
	SU(3) X Spinor	30.1 MFlops/s	25.4 %
Invertierungs-programm	Zweierspinor $\rightarrow$ Viererspinor	7.73 MFlops/s	13.5 %
	Viererspinor $\rightarrow$ Zweierspinor	14.7 MFlops/s	4.7 %
	Dslash-Routine	19.8 MFlops/s	47.5 %
	A_{oo}^{-1} X Spinor	20.4 MFlops/s	20.5 %
	A_{ee} X Spinor	- MFlops/s	14.2 %
	Programm	14.3 MFlops/s	100 %

Tabelle 4.1: Performance der Kernroutinen des Reinen Eich- und des Invertierungsprogramm

hier nicht erfaßt, da sie beispielsweise auf BLAS-Routinen[4] zurückgreifen oder spezielle interne Funktionen wie exp, die Apprentice nicht zu untersuchen in Lage ist. Dabei symbolisiert "n" eine normale SU(3)-Matrix und "d" eine adjungierte. Die schnellsten Routinen sind die Matrixmultiplikationen des reinen Eichprogrammes. Sie sind geschrieben in Fortran 77 und erreichen etwa 26% der Peak Performance. Diese eher geringe Ausbeute hat mehrere Gründe.
Zum einen besitzt der T3D nur 32 reelle Register, so daß bei der Multiplikation zweier SU(3) Matrizen zwangsläufig immer wieder auf den Cache zurückgegrifffen werden muß. Zum anderen kann die Anordnung der Daten im Speicher nicht immer optimal zur Benutzung des Caches arrangiert werden, so daß häufig in den Hauptspeicher gegriffen werden muß. Dieses nennt man einen Cache Konflikt. Außerdem wird die Optimierung nicht immer vom Compiler perfekt gelöst. Wesentliche Schritte müssen von Hand bearbeitet werden. Dieses sind beispielsweise

- Einführung von Padding zwischen Datenblöcken, damit konsekutiv benutzte Daten nicht auf den gleichen Cachezeilen liegen
- Aufrollen interner Schleifen, damit der Compiler besser bemerkt, was in lokalen Registern gehalten werden kann
- Prefetching von Daten in den Cache, welche wahrscheinlich hintereinander benötigt werden
- Pipelining der Rechenoperationen (läßt sich von Hand nur in Assembler programmieren)
- BLAS-Routinen, welche schnelle Rechenoperationen auf Matrizen oder Vektoren erlauben.

Außer von den oben aufgeführten Punkten hängt die Schnelligkeit eines Programmes auch von der eigentlichen Problemstellung ab und davon, wie diese auf die Prozessoren verteilt wurde. Nun sind Rechnungen in der QCD sehr geeignet, auf eine große Anzahl von Recheneinheiten verteilt zu werden, da sie fast immer lokal sind und Informationen nur an den Grenzen von lokalen Gittern ausgetauscht werden müssen. Dies legt allerdings nahe, die lokalen Gitter groß zu gestalten, um ein möglichst gutes Verhältnis zu haben zwischen der Anzahl der Daten, die lokal zur Verfügung stehen, und den Daten, die von Prozessor zu Prozessor geschickt werden müssen.
So sieht man in Abbildung (4.3) die Zeiten, die eine Messung des reinen Eichprogrammes auf zwei unterschiedlich großen globalen Gittern benötigt, abhängig von der Prozessoranzahl. Enthalten ist in der angegebenen Zeit ein Heatbath-Update und vier Overrelaxation-Updates einschließlich der Messung des Plaquetteerwartungswertes und des Polyakovloops. Es wird deutlich, daß je kleiner das lokale

[4]Basic Linear Algebra Subroutines

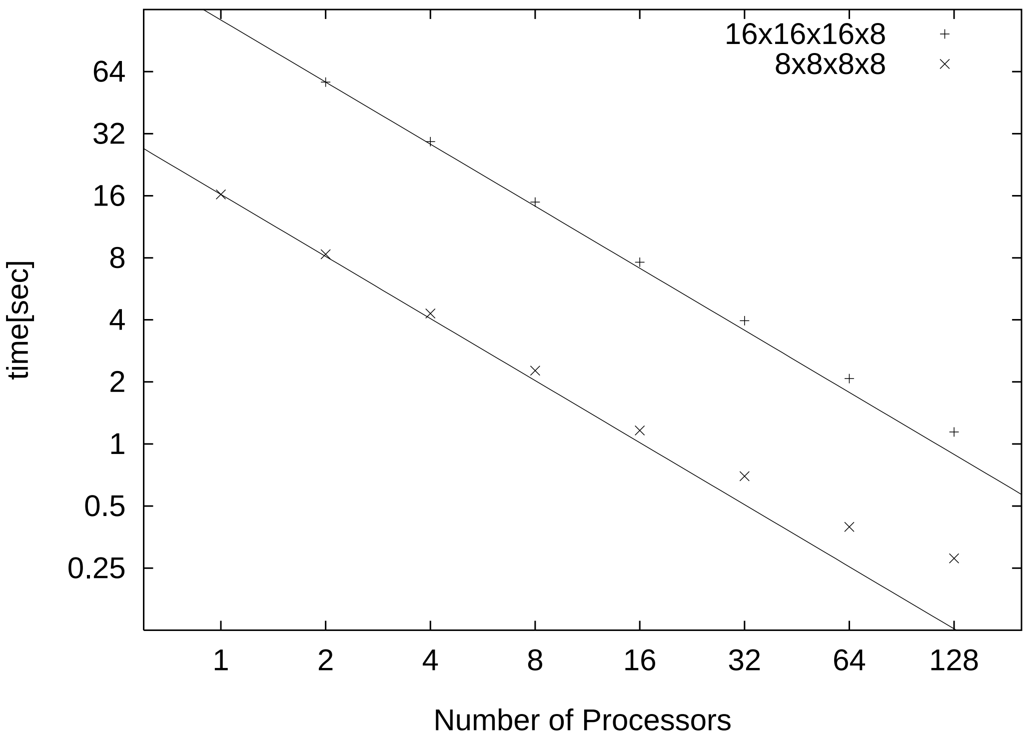


Abbildung 4.3: Skalenverhalten eines reinen Eichprogramms auf einem 16^3x8 und einem 8^4 Gitter

Gitter ist, desto ungünstiger skaliert die benötigte Zeit für eine Messung. Auf dem großen Gitter ist es noch gut möglich, mit 128 Prozessoren zu arbeiten, ohne mit großen Einbußen rechnen zu müssen. Auf dem kleinen Gitter hingegen lohnt sich der Schritt zu einer größeren Menge von Knoten nicht mehr. Fast die gesamte Zeit geht in die zusätzliche Kommunikation.

Kapitel 5

Auswertung

In Kapitel **5** werden die Ergebnisse präsentiert, die in dieser Arbeit mit Hilfe der in **4.3** beschriebenen Programme erhalten wurden. Zunächst werden in **5.1** die Ergebnisse der Plaqutteerwartungswerte dargestellt, welche $\beta = 6.0$ und $\beta = 6.2$ auf Hoch- und Niedrigtemperaturgittern gemessen wurden. Danach werden in **5.2** die Massen des Pseudoskalars und des Vektormesons diskutiert, welche auf diesen Gittern bei unterschiedlichen Quarkmassen gerechnet wurden. In **5.3** werden die Wellenfunktionen für den Grund- und den ersten angehobenen Zustand dargestellt.

5.1 Die Plaquette

Zunächst wurden mit Hilfe der reinen Wilson-Eichwirkung Eichkonfigurationen erzeugt bei $\beta = 6.0$ und $\beta = 6.2$ auf jeweils einem Null- und einem Hochtemperaturgitter. Die Gitter und β-Werte wurden so gewählt, daß man sich noch im Skalenfenster befindet und kaum Finite-Size Effekte zu erwarten sind. Für die Nulltemperaturgitter wurde κ_{crit} und a^{-1} den Daten der UKQCD und APE entnommen (siehe **2.4** und [32, 33, 34]), um so eine Massen- und eine Längenskala festlegen zu

N_σ	N_τ	β	$Temperatur$	a^{-1}
16	32	6.0	0.0 T_c	2.05(6) GeV
24	8	6.0	0.9 T_c	2.05(6) GeV
24	48	6.2	0.0 T_c	2.7(1) GeV
24	8	6.2	1.1 T_c	2.7(1) GeV

Tabelle 5.1: Untersuchte Gitter mit Temperatur und Gitterabstand

N_σ	N_τ	β	Statistik	P	P_σ	P_τ
16	32	6.0	50000	0.593681(3)	0.593679(4)	0.593682(4)
24	8	6.0	50000	0.593691(4)	0.593690(4)	0.593691(4)
24	48	6.2	50000	0.613632(1)	0.613632(1)	0.613631(1)
24	8	6.2	50000	0.613770(3)	0.613739(3)	0.613800(3)

Tabelle 5.2: Plaquetteerwartungswerte

können. Die Hochtemperaturgitter wurden einmal ober- und einmal unterhalb des Phasenübergangs gewählt, um die Physik in beiden Phasen vergleichen zu können. Die Gittergrößen, Temperatur und Gitterabstand sind in Tabelle (5.1) dargestellt.
In Tabelle (5.2) sind die gemessenen Plaquetteerwartungswerte aufgeführt. Die Erzeugung der Eichfelder geschieht durch den Cabibbo-Marinari-Pseudo-Heatbath [20], den Kennedy Pendleton Algorithmus [21] in den SU(2) Untergruppen und Overrelaxation [22, 23]. Dabei wurden vier Overrelaxationschritte mit einem Heatbathschritt zu einem kombinierten Schritt zusammengefaßt. Jeden kombinierten Schritt wurde der Erwartungswert P der 1x1-Plaquette gemessen. Dabei wurde noch unterschieden zwischen P_σ (rein räumliche Plaquetten 12, 13 und 23) und P_τ (raum-zeitliche Plaquetten 14, 24 und 34). Zu Beginn wurden $N_{therm} = 1000$ Thermalisierungsschritte gemacht.
Die zu den Daten angegebenen Fehler ergeben sich aus den Schwankungsquadraten und der Autokorrelationslänge τ durch

$$\sigma^{real}(P_i) \quad = \quad \sigma(P_i)\sqrt{1+2\tau} \quad . \tag{5.1}$$

Dabei ist $\sigma(P_i)$ der naive Fehler der jeweiligen Observablen. Auf allen Gittern lag τ zwischen zwischen eins und zwei. Die Ergebnisse stimmen mit den Resultaten in der Literatur [31] innerhalb der Fehlergrenzen überein.

5.2 Massen des 0^{-+} und 1^{--}

In diesem Abschnitt sollen die Resultate für den Pseudoskalar und das Vektormeson dargestellt werden, die bei unterschiedlichen Parametern (β, κ, Gittergröße) berechnet wurden.
Mit Hilfe des Reinen-Eichprogramms wurde alle 500 kombinierte Schritte eine Eichfeldkonfiguration herausgeschrieben, auf welcher dann der Quarkpropagator bei drei unterschiedlichen κ berechnet wurde. Zwei κ wurde so gewählt, daß die simulierte Masse in der Nähe von $m_c = 1.35(5)$GeV liegt. Eines wurde zur Überprüfung der Konsistenz mit anderen Daten (bsp. der UKQCD) bei etwa $m_{strange} = 0.15(5)$GeV [30] gewählt. κ_{crit} wurde den Daten der UKQCD entnommen und ist Gl. (2.20) zu

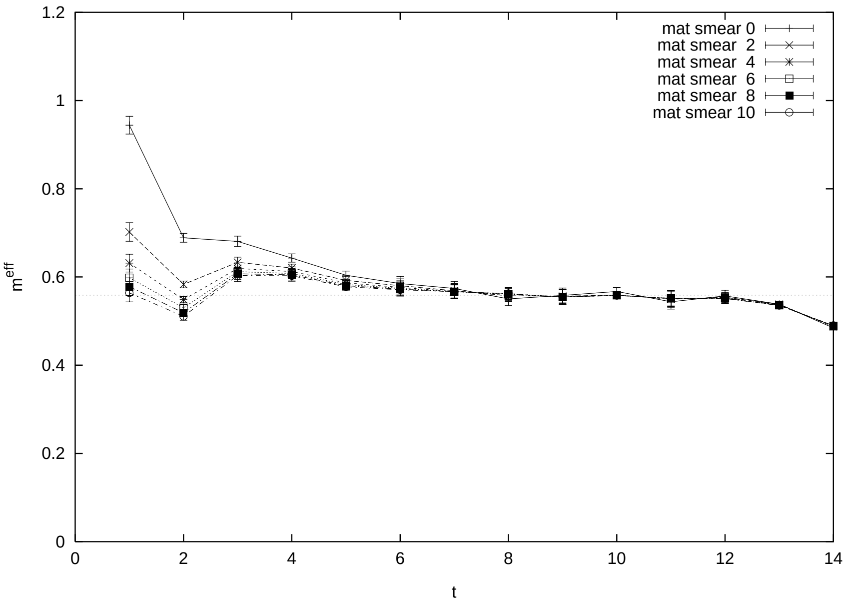


Abbildung 5.1: Effektive Masse des Pseudoskalars bei $\beta = 6.0$, $\kappa = 0.141$, $T = 0$ mit unterschiedlichen Schmierlevel der Eichfelder. Der Radius beträgt $R = 4$ Gittereinheiten

entnehmen. Der Gitterabstand ergibt sich nach Gl. (2.21).
Von den damit gegebenen 100 Konfigurationen pro Gitter wurde bislang ein Viertel ausgewertet. Hierbei liegt zwischen den Konfigurationen ein Abstand von 2000 Schritten, so daß eine Autokorrelation der Propagatoren nicht mehr feststellbar ist. Die so erhaltenen Quarkpropagatoren wurden mit Hilfe der in Kap. **2.2** und **2.3** beschriebenen Technik zur Berechnung von Mesonkorrelationsfunktionen mit Abstand R verwendet.

5.2.1 Schmieren der Eichfelder

Wie in Kap. **2.3** beschrieben wurde, werden durch das Schmieren der Quarkpropagatoren und der Eichfelder ausgedehnte Mesonpropagatoren konstruiert, die möglichst gering kontaminiert sind von den Beiträgen angeregter Zustände.
Vor allem vom Abstand der Quarks zueinander wird das Verhalten der Korrelationsfunktion stark beeinflußt. Die Zahl der Iterationen der Eichfeldschmierung hat nur einen untergeordneten Effekt, wie in Abb. (5.1) zu sehen ist. Abgebildet wird hier die effektive Masse des 0^{-+} (der Pseudoskalar) bei unterschiedlicher Eichfeldschmierung. Die Zahl der Iterationen liegt zwischen null und zehn. Fehler wurden

mit Hilfe eines Jacknife errechnet.
Es ist ein deutlicher Abfall der effektiven Masse von nicht geschmierten Propagatoren zu geschmierten zu sehen. Bei weiterer Erhöhung der Iterationszahl ergibt sich kaum noch eine Änderung im Verhalten des Propagators. Das veranlaßte dazu, die Daten bei einem konstanten Schmierlevel der Eichfelder von $S_{mat} = 8$ auszuwerten.

5.2.2 Ausgedehnte Mesonpropagatoren

Anders als das Eichfeldschmieren hat der Abstand des $q\bar{q}$-Paares einen erheblichen Effekt darauf, wie schnell Anteile angehobener Zustände unterdrückt werden. In Abb. (5.2) sind mehrere effektive Massen des Pseudoskalars auf Hoch- wie Niedrigtemperaturgittern für $\beta = 6.0$ bei allen verfügbaren Quarkmassen dargestellt. In jeder Abbildung werden einige effektive Massen zu verschiedenem charakteristischem Abstand der Quarks, also der Ausdehnung des Mesonoperators, auf der Senkenseite dargestellt. Für die Eichfelder wurde eine konstante Anzahl der Schmieriterationen benutzt ($S_{mat} = 8$). Fehler wurden auch hier mit Hilfe einer Jacknifeanalyse berechnet.
Es ist deutlich zu sehen, daß der gewählte Radius einen großen Einfluß darauf hat, wie schnell ein Plateau in der effektiven Masse erreicht wird. Außerdem ist zu sehen, daß der günstigste Radius abhängig ist von der gewählten Quarkmasse. Scheint der beste Abstand für $\kappa = 0.141$ noch bei etwa vier bis fünf zu liegen, so ist er für die schwereren Massen eindeutig kleiner.
Dieses erscheint auch sinnvoll, wenn man das Potential zwischen zwei Quarks betrachtet. So ergibt sich nach Rechnungen in der reinen Eichtheorie für statische Quarks [31] der in Abb. (5.3) dargestellte Verlauf. Für große Abstände sieht man ein linear ansteigendes Potential. Für geringe Abstände geht es in ein coulombartiges Potential über. Nimmt man an, daß ein nichtrelativistisches Potential die Bindungsenergie zwischen Quarks korrekt beschreibt, so wird die Ausdehnung eines Mesons bestimmt sein durch die Potentialbreite bei einer bestimmten Energie. Dieses bedeutet, daß die zwei schweren Mesonen wesentlich tiefer im Potentialtrichter sitzen als das leichte und damit eine geringere Ausdehnung haben sollten als dieses. Dieses wird auch tatsächlich an realen Teilchen beobachtet.
Auffallend ist, daß bei Erhöhung des Radius die effektiven Massen von unten kommend das Plateau erreichen. Dieses läßt schließen, daß die Amplitude der angeregten Wellenfunktion einen Nulldurchgang hat und für große Abstände negativ wird. Nimmt man den Nulldurchgang der Bethe-Salpeter-Wellenfunktion des angehobenen Zustands (siehe Gl. (2.23)) als ein Maß für den Radius des Teilchens, so ergibt sich hier zunächst einmal eine qualitative Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen und der Erwartung aufgrund des Potentialbildes. Für eine detailierte Aussage des Radius muß allerdings die Wellenfunktion näher untersucht werden.

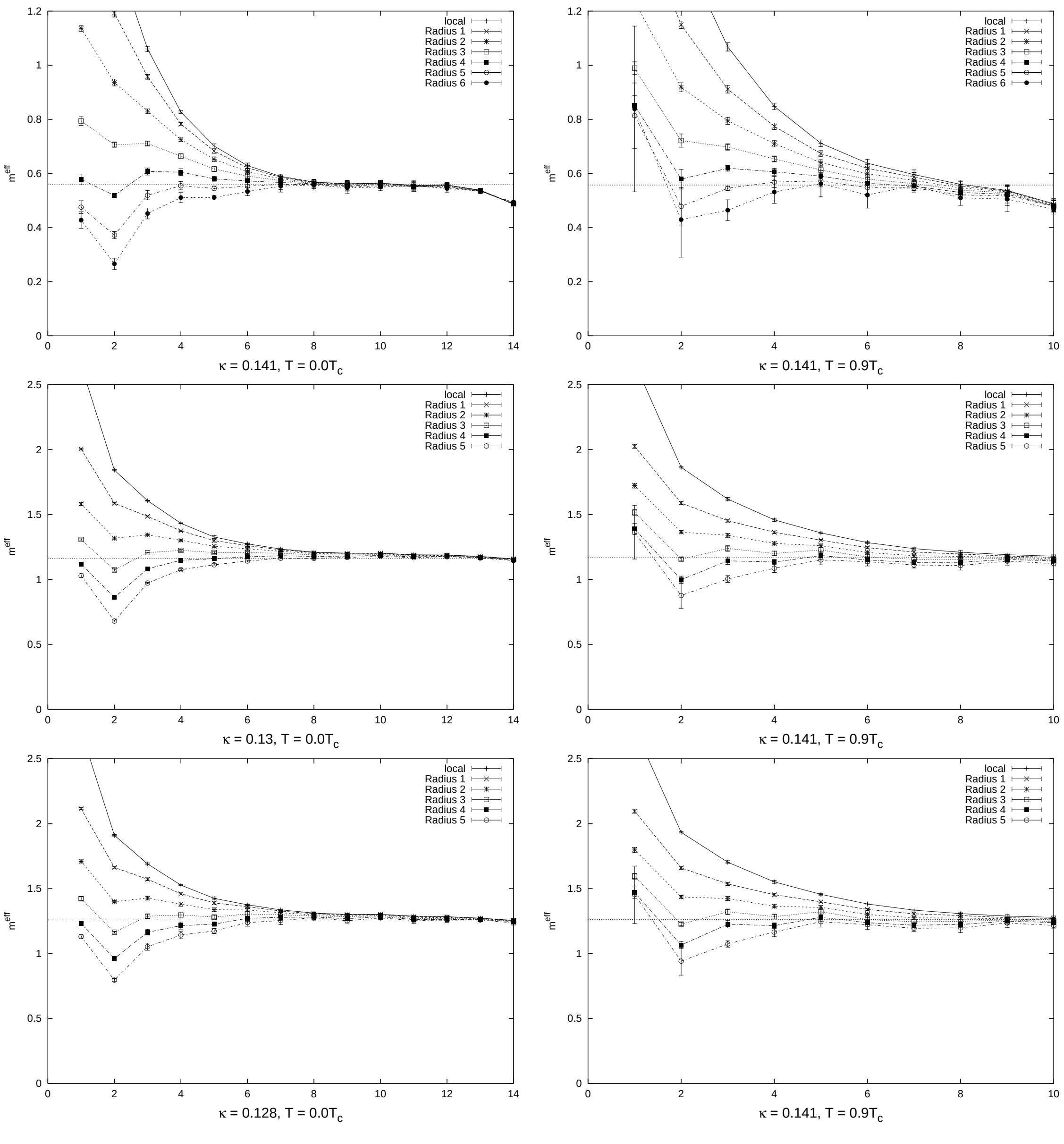


Abbildung 5.2: Effektive Masse des Pseudoskalar bei $\beta = 6.0$ und $\kappa = 0.141, 0.130, 0.128$ auf dem 16^3x32 ($T = 0$) und dem 24^3x8 ($T \approx 0.9 T_C$) Gitter

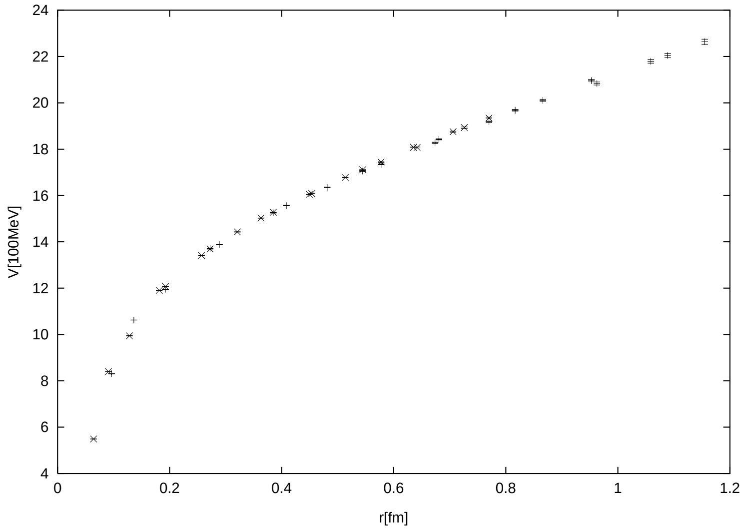


Abbildung 5.3: Das Quarkpotential zweier unendlich schwerer Quarks im Abstand r [31]

Bei den Hochtemperaturgittern scheinen die Plateaus nicht so gut erreicht zu werdenm wie bei den Nulltemperaturgittern. Die effektiven Massen zu unterschiedlichen Radien sind jeweils weiter auseinander, als dies bei $T = 0$ der Fall ist, auch für große Abstände. Dies mag darauf zurückzuführen sein, daß die Ausdehnung des Hochtemperaturgitters in z-Richtung, der Korrelationsrichtung, nicht so groß ist wie in t-Richtung auf dem Nulltemperaturgitter. Bei einer größeren Ausdehnung würden dann dadurch erzeugte Effekte unterdrückt. Um beurteilen zu können, ob dieses auch auf die Wahl der Korrelationsrichtung oder der Temperatur zurückzuführen sein kann, müsste das Verhalten noch systematischer untersucht werden.

5.2.3 Massen

Die Korrelationsfunktionen wurden an die Funktion (2.11) gefittet unter Benutzung der vollen Kovarianzmatrix nach (2.13). Dazu wurden die Daten zunächst symmetrisiert, da bei Benutzung des vollen Intervalls die Dimension der Kovarianzmatrix größer ist als die Anzahl der unabhängigen Konfigurationen. Das hat einen Einfluß auf die Stabilität des Fittes. Das Fitintervall wurde variiert zwischen $[1, \frac{N_\tau}{2}]$ und $[t_{max}, \frac{N_\tau}{2}]$. Danach wurde mit Hilfe der χ^2-Funktion ein geeigneter Bereich gewählt, in dem $\frac{\chi^2}{\mathrm{dof}}$ niedrig genug erschien ($\frac{\chi^2}{\mathrm{dof}} \approx 1$, bei gaussverteilten Zahlen). Dann ist davon auszugehen, daß keine angeregten Zustände sichtbare Beiträge liefern und die Grundzustandmasse verläßlich extrahiert wird.
Hier bereits einen Zweikanalfit zu versuchen, hat sich als unpraktikabel erwiesen,

N_σ	N_τ	β	κ	Statistik	m_π	m_ρ	m_π^{Pol}	m_ρ^{Pol}
16	32	6.0	0.141	25	0.559(3)	0.630(4)	0.566(3)	0.641(4)
			0.130	25	1.162(3)	1.191(3)	1.228(3)	1.263(3)
			0.128	25	1.259(3)	1.284(3)	1.344(3)	1.374(3)
24	8	6.0	0.141	25	0.557(8)	0.64(1)	0.564(8)	0.65(1)
			0.130	25	1.168(6)	1.197(8)	1.236(6)	1.27(1)
			0.128	25	1.262(7)	1.29(1)	1.347(7)	1.38(1)
24	48	6.2	0.141	100	0.333(2)	0.420(4)	0.335(2)	0.423(4)
			0.130	25	1.018(2)	1.040(2)	1.063(2)	1.089(2)
			0.128	25	1.124(2)	1.141(2)	1.184(2)	1.205(2)
24	8	6.2	0.141	25	0.350(4)	0.410(8)	0.352(4)	0.413(8)
			0.130	25	0.995(5)	1.011(4)	1.037(5)	1.055(4)
			0.128	25	1.096(4)	1.110(5)	1.152(4)	1.168(5)

Tabelle 5.3: Massen des Pseudoskalars und des Vektormesons in Gittereinheiten

da auf einem Datensatz mit einem festen R der Fit sich als unstabil erwiesen hat. Dieses ermöglichte kein automatisiertes Auswerten, wie es bei der Anzahl von Daten und Parameter, die variiert werden können, notwendig erscheint. Trotzdem wurden noch einige ausgewählte Datensätze von Hand einem Zweikanalfit unterzogen, um diesen mit dem Einkanalfit zu vergleichen. Es ergaben sich keine Abweichungen innerhalb der Fehlergrenzen.
Die erhaltenen Gittermassen sind in Tabelle (5.3) zu sehen. Dargestellt sind zum einen die erhaltenen Exponenten aus den $cosh$-Fits, zum anderen aber auch die entsprechende Polmasse des Mesons, die sich aus der Dispersionsrelation Gl. (2.10) ergibt. Die Fehler auf den Parametern ergeben sich aus dem χ^2-Fit.
Bei $\beta = 6.0$ sieht man keine Veränderung der Masse des 0^{-+} und des 1^{--} zwischen Null- und Hochtemperaturgitter innerhalb der Fehlergrenzen. Das Hochtemperaturgitter liegt mit $T \approx 0.9T_c$ auch unterhalb des Phasenübergangs, so daß keine wesentlichen Änderungen zu erwarten sind. Für $\beta = 6.2$ liegt das Hochtemperaturgitter mit $T \approx 1.1T_c$ oberhalb des Phasenübergangs. Dort zeigt sich eine leichte Verschiebung zu kleineren Massen für die schweren Mesonen. Daraus könnte man auf eine qualitative Veränderung der Teilchen von Temperaturen unterhalb von T_C zu Temperaturen oberhalb schließen.

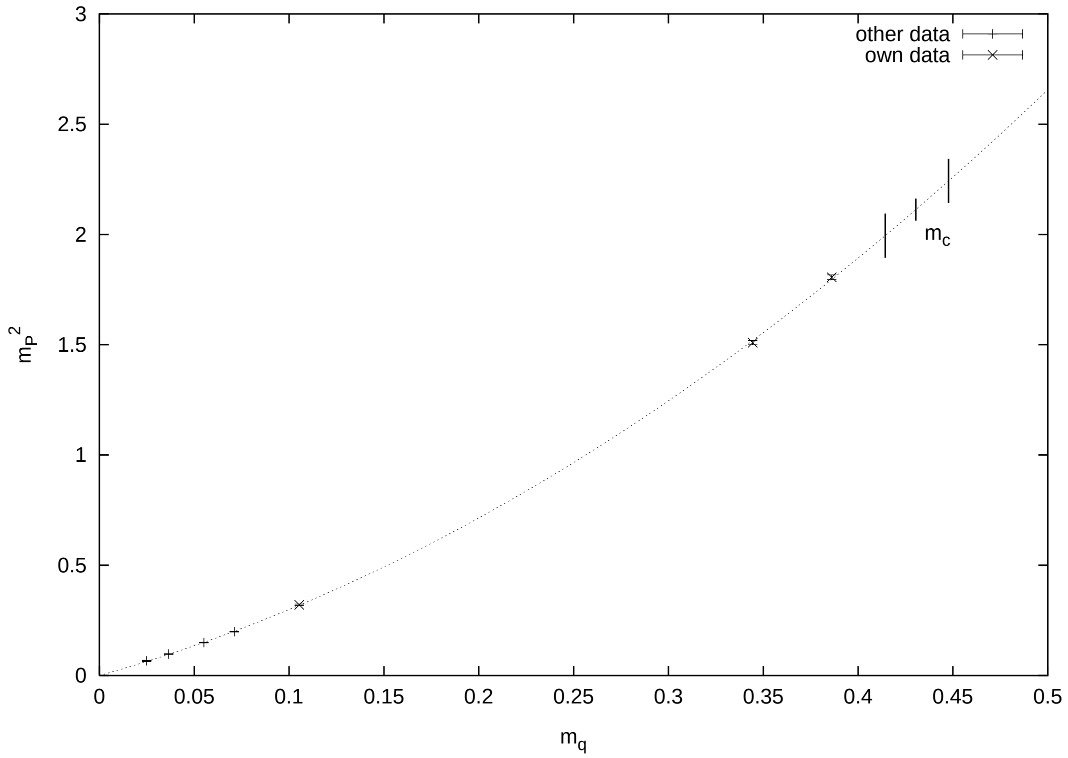
5.2.4 Das Mesonspektrum

In diesem Abschnitt soll die Abhängigkeit der Mesonmassen von den Massen der Quarkkonstituenten dargestellt werden. Dabei werden in Abb. (5.4) und (5.5) die

Daten aus Tab. (5.3) graphisch dargestellt. Aufgetragen sind m_P^2 bzw. m_V gegen die Quarkmasse (siehe Gl. (2.18, 2.19))
Diese Arbeit greift bei der Benutzung von κ_{crit} auf Daten der UKQCD und der APE Collaboration [32, 33, 34] zurück, da die in dieser Arbeit errechneten Massen keine Extrapolation in den Chiralen Limes ermöglichen (siehe **2.4**). Die UKQCD hat auch viele Daten im Heavy-Light Regime [35] und einige im Heavy-Heavy Regime [26] zusammengestellt. Die Heavy-Light Daten wurden durch die Kombination von leichten mit schweren Quarkpropagatoren zu Mesonkorrelationsfunktionen erzeugt. Das zugehörige κ wird durch Kombination der beiden gegebenen κ berechnet ($\frac{1}{\kappa_{eff}} = \frac{1}{\kappa_1} + \frac{1}{\kappa_2}$). Auch diese Daten sind in Abb. (5.4) und (5.5) dargestellt.
Beim Pseudoskalar wird deutlich, daß nach einem anfänglichen quadratischen Verlauf der lineare Anteil für große Massen immer stärker wird. Das Teilchen verliert dort seinen Goldstone-Boson Charakter. Das Vektorteilchen ist in beiden Bereichen in guter Näherung linear.
Untersucht wird in dieser Arbeit Charmonium. Der Pseudoskalar ist das η_c mit einer Masse von $m_{\eta_c} = 2980$MeV, das Vektormeson ist das J/Ψ mit $m_{J/\Psi} = 3098$MeV. Aus diesen Daten läßt sich die Charmquarkmasse berechnen. Sie ergibt sich durch Vergleich der auf dem Gitter gemessenen Mesonenmassen mit denen der in Beschleunigern beobachteten realen Teilchen. Sie ist in den jeweiligen Abbildungen gekennzeichnet und liegt für $\beta = 6.0$ bei $m_c a = 0.44(2)$ und für $\beta = 6.2$ bei $m_c a = 0.33(2)$, gemessen jeweils in Gittereinheiten. Die Fehler ergeben sich aus der Unsicherheit in der Gittergröße a. Das ergibt $\kappa_c(6.0) = 0.1255(10)$ und $\kappa_c(6.2) = 0.129(1)$. In physikalische Einheiten erhalten wir als Charmquarkmasse $m_c = 0.90(5)$GeV in Gitterregularisierung. Im $\overline{\text{MS}}$-System ergibt dieses nach [45, 46] für $\mu = 1.0$GeV $m_c^{\overline{\text{MS}}} = 1.08(6)$GeV. Dieses liegt deutlich unterhalb der Masse $m_c = 1.35(5)$GeV aus [30]. Aber auch das $\overline{\text{MS}}$-Renormalisierungsschema ist nur Störungstheorie niedriger Ordnung.
Die Massen des Pseudoskalar und des Vektormesons wurden mit $f(x) = ax^2 + bx + c$ gefittet. Im Falle des Pseudoskalars ergab sich innerhalb der Fehlergrenzen $c \approx 0$, wie es nach der PCAC-Relation zu erwarten ist. Beim Vektormeson ist $c \approx 0.38$ für $\beta = 6.0$ und $c \approx 0.29$ für $\beta = 6.2$ der Wert der ρ-Masse in Gittereinheiten im chiralen Limes (wie in Abb. (5.4) und (5.5) bzw. (2.6) zu sehen) . Die in dieser Arbeit verwendeten Werte sind so gewählt worden, daß sie in der Nähe von κ_c liegen. Die Auswahl geschah anhand einer Graphik mit den vorhandenen UKQCD Daten.

5.3 Wellenfunktion

Ein Ziel der Arbeit ist es, die Bethe-Salpeter-Wellenfunktion der Mesonen zu untersuchen. Dazu wurden die Mesonpropagatoren zu verschiedenen Radien einem



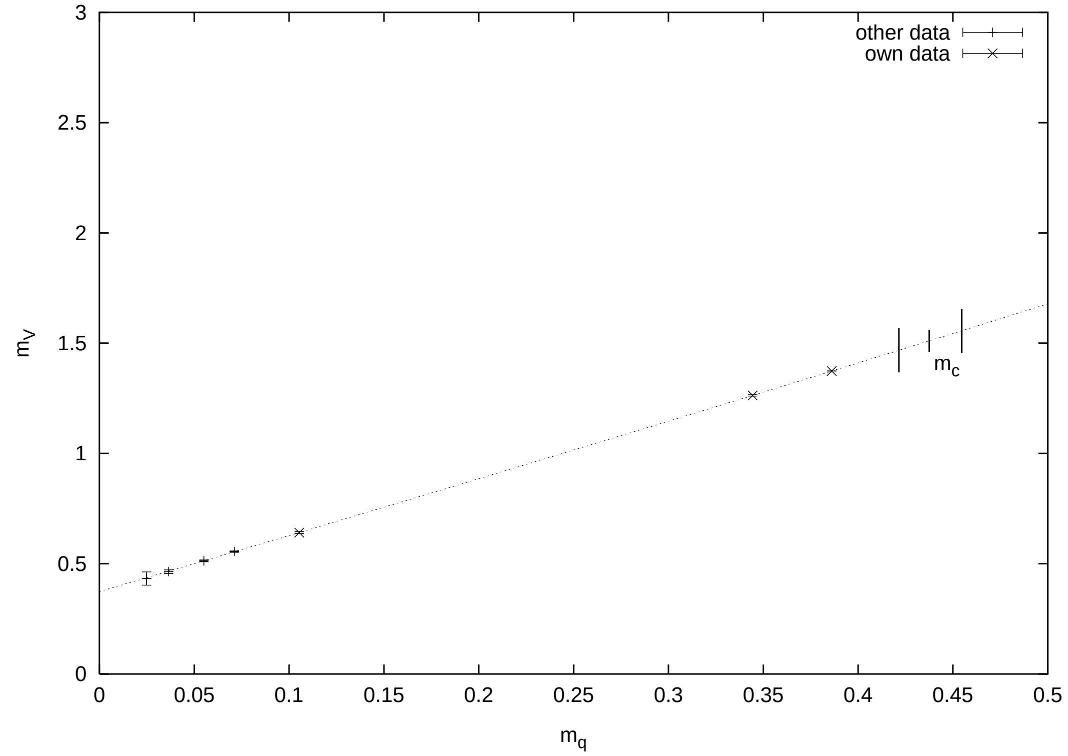


Abbildung 5.4: Massenskala der Massen des Pseudoskalars und des Vektormesons bei $\beta = 6.0$ und $T = 0$

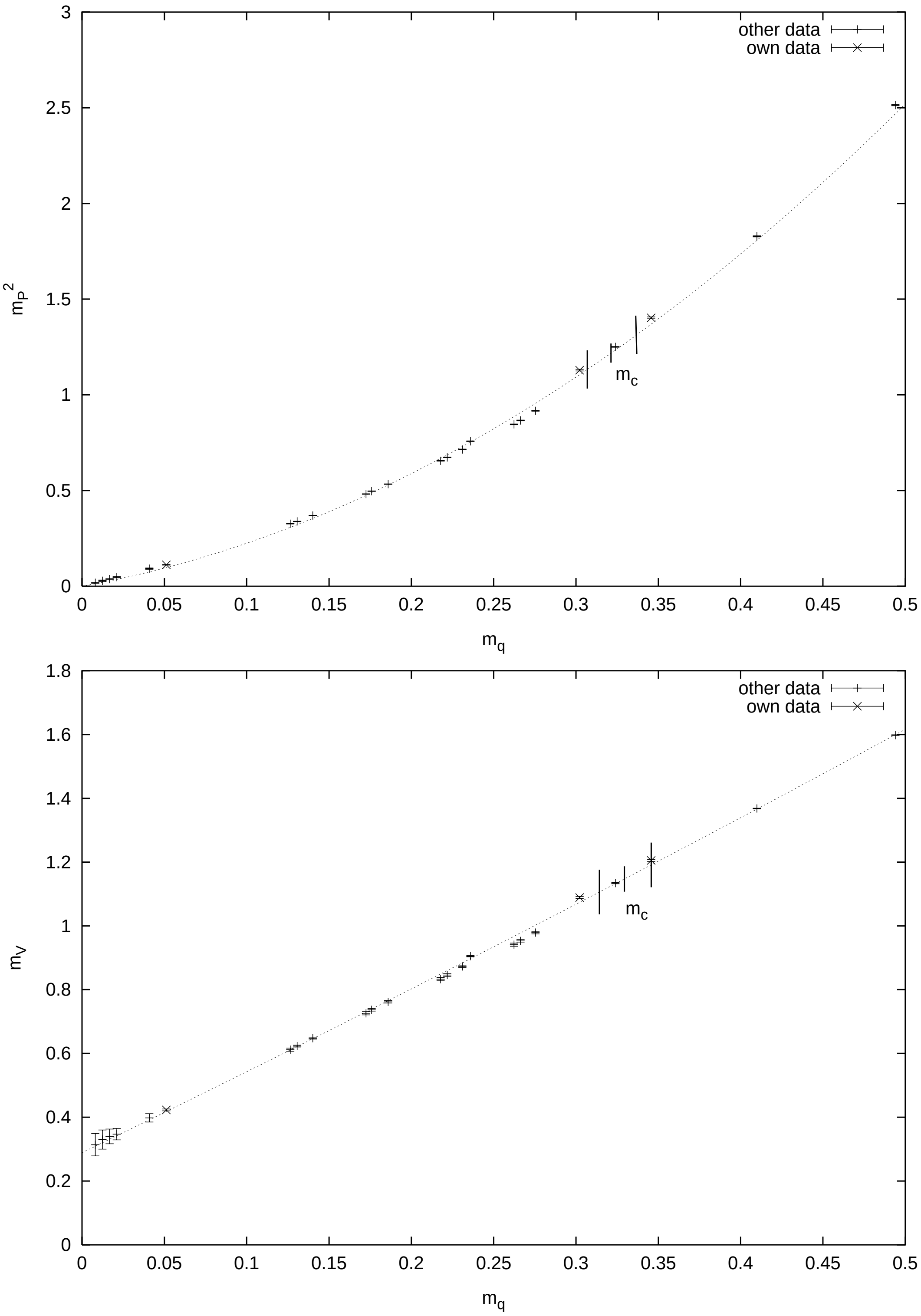


Abbildung 5.5: Massenskala der Massen des Pseudoskalars und des Vektormesons bei $\beta = 6.2$ und $T = 0$

gemeinschaftlichem Zweikanalfit unterzogen, bei dem die Grundzustandsmasse m_0 aus Tabelle (5.3) vorgegeben wurde und die angehobene Masse m_1, wie auch die Amplituden A_0^R und A_1^R zu den verschiedenen Radien der zwei Zustände berechnet wurden. Die Daten wurden dazu in einen Datensatz hintereinandergepackt und als Fitfunktion wurde

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{R=0}^{R_{max}} \Theta(x - RN_{\sigma\tau})\, \Theta((R+1)N_{\sigma\tau} - x) \\ &\qquad (\ A_0^R cosh(m_0(x - (R + \frac{1}{2}N_{\sigma\tau}))) \\ &\qquad + A_1^R cosh(m_1^R(x - (R + \frac{1}{2}N_{\sigma\tau})))\ ) \end{aligned} \tag{5.2}$$

benutzt. Die Θ-Funktionen sorgen dafür, daß die zum jeweiligen Propagator zugehörigen Parameter gefittet werden. Bei diesem Fit wurden nur die Diagonalelemente der Kovarianzmatrix verwendet, da eine Berechnung der vollen Matrix nicht sinnvoll erschien. Die Anzahl der unabhängigen Datensätze war zu gering im Verhältnis zur Größe der Matrix.
Aus diesen Daten lassen sich die Wellenfunktionen des Grundzustandes konstruieren und approximativ, da kontaminiert von allen höheren Anregungen, des ersten angehobenen Zustandes. Bei Einschränkung des Fitintervalls wurde festgestellt, daß sich die Masse m_1 des angehobenen Zustandes leicht nach unten verschob, erklärbar durch geringere Kontamination höherer Zustände. Dabei blieben die Signale des Grundzustandes A_0^R aber im wesentlichen unverändert, jedoch war es nicht mehr möglich, Informationen über die Amplitude des angehobenen Zustand A_1^R zu erhalten. Das Signal ist mit zu großen Fehlern behaftet. Es wurde versucht, das Intervall möglichst weit einzuschränken, dabei aber noch ein gutes Signal zu erhalten. Dies geschieht zum einen mit verhältnismäßig großer Einschränkung (typisch ist 6 bis 10, abhängig vom Gitter) bei der Berechnung der Grundzustandswellenfunktion und mit einer sehr geringen Einschränkung (1 für alle Gitter) bei der ersten Anregung.
Abb. (5.6) und (5.7) zeigen beispielhaft die Wellenfunktionen des Grund- und des angehobenen Zustands des Pseudoskalars in physikalischen Einheiten für verschiedene Parameter. So wurden zwei Wellenfunktionen für $T = 0$ bei beiden zur Verfügung stehenden β und eine Wellenfunktion auf dem zugehörigen Hochtemperaturgitter ausgewählt. Die Parameter wurden so gewählt, daß die Mesonenmassen sich ungefähr im gleichen Bereich von etwa 2.8GeV in der Nähe von m_{η_c} befinden. Die erhaltenen Amplituden und Fehler wurden nach Gl. (2.22) und (2.23) per χ^2-Methode[1] gefittet. Die Koeffizienten sind in Tab. (5.4) und (5.5) aufgeführt.

Betrachten wir zunächst die Abbildungen der Wellenfunktion. Berücksichtigt man einen Fehler durch die Unsicherheiten im Gitterabstand a aus Gl. (2.21), so liegen

[1] Auch hier wurde nicht die volle Kovarianzmatrix benutzt, sondern nur die Fehler auf den verwendeten Daten

die Kurven der Nulltemperaturgitter ziemlich genau aufeinander. Das zeigt, daß die Daten das erwartete Skalenverhalten gut wiedergeben. Die Wellenfunktion des Hochtemperaturgitters weicht degegen sehr deutlich von den beiden anderen ab, was auf den Einfluß der hohen Temperatur oder der Korrelationsrichtung zurückzuführen sein sollte. Beides gilt gut im Falle des Grundzustandes und nicht ganz so deutlich im Falle des angeregten Zustandes.

Bei den tabellierten Daten betrachten wir zunächst den Grundzustand. Hier sieht man mehrere Abhängigkeiten der Fitparameter von den gewählten Massen bzw. dem gewähltem Gitter. Der Parameter a_0 beschreibt den Abstand, nach dem die Wellenfunktion auf den e-ten Teil abgefallen ist und ist damit ein Maß für den Radius des Teilchen. Bei zunehmender Masse nimmt der Abstand ab, was dem in Kapitel **5.2.2** beschriebenen Bild von kleinen schweren und großen leichten Mesonen genügt. Das Vektormeson ist für jeden Kopplungsparameter ausgedehnter als der zugehörige Pseudoskalar. Auch dieses steht in Übereinstimmung mit experimentellen Daten.
Bei $T = 0$ skaliert a sehr gut, was bereits den Abbildungen zu entnehmen ist, bei $T \approx T_C$ jedoch zeigen sich Abweichungen von Skalenverhalten. Auch eine Zunahme des Radius bei steigender Temperatur durch eine Abflachung des linearen Potentialteils kann nicht festgestellt werden. Statt dessen sehen wir einen gegenläufigen Trend sowohl oberhalb wie unterhalb des Phasenübergang.
Untersucht man den Exponenten ν_0, so zeigt sich ein deutlicher Unterschied zwischen dem Pseudoskalar und dem Vektormeson. Der Koeffizient des 1^{--} ist generell wesentlich größer als der des 0^{-+}. Die gefittete Exponentialfunktion ist eine Lösung der Schrödingergleichung für ein Coulombpotential bei $\nu_0 = 1.0$ und für ein lineares Potential mit $\nu_0 = 1.5$ in der WKB Approximation [36]. Man könnte also erwarten, daß je linearer das Potential des Mesons ist, desto näher müßte der Exponent bei 1.5 liegen. Das hieße, daß das Vektormeson ein eher lineares Potential "sehen" müsste, während der Pseudoskalar sich weiter im Coulombanteil befände. Außerdem sollte man annehmen, daß bei steigender Masse ν_0 abnimmt, da sich das Teilchen dann tiefer im Potentialtopf befände. Dies ist ein Trend, der beim 1^{--} tatsächlich zu sehen ist, beim 0^{-+} jedoch nicht. Für $T = 0$ sieht man dort gerade das umgekehrte Verhalten und auf dem Hochtemperaturgitter bleibt der Koeffizient konstant. Das Verhalten der Grundzustandswellenfunktion entspricht also nicht in allen Fällen unseren Erwartungen.

Untersuchen wir nun die Wellenfunktion des angehobenen Zustandes aus Gl. (2.23). Zunächst kann man feststellen, daß der Parameter b_0, der die Nullstelle der Wellenfunktion bestimmt, den "günstigen" Quarkseparationen der Mesonen entspricht, wie sie dem Verlauf der effektiven Massen entnommen wurden. Der Parameter a_1 nimmt wie beim Grundzustand bei steigender Masse ab. Er ist hier allerdings kein direktes Mass für die Ausdehnung des Teilchens, da diese auch von b_1 beeinflußt wird. Beide Parameter sollten allerdings skalieren. a nimmt bei steigender Temperatur stark ab

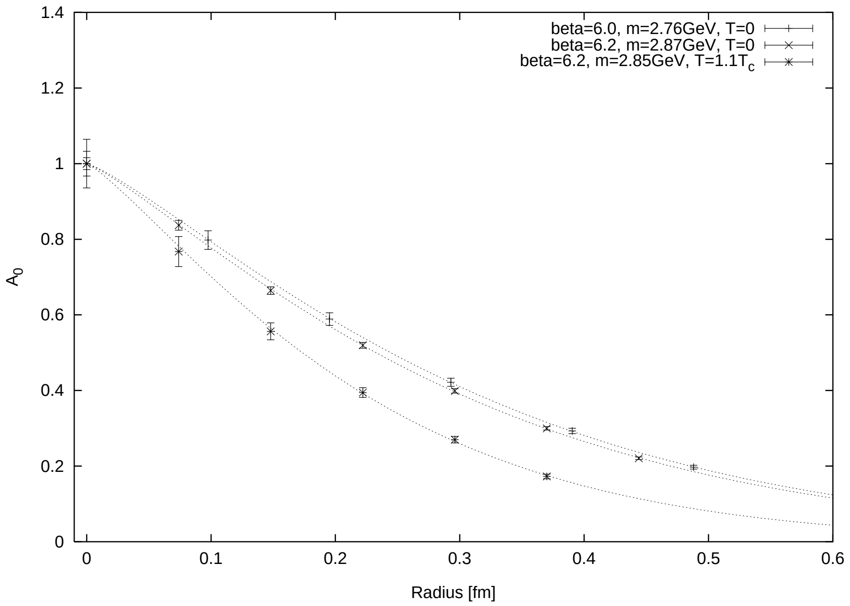


Abbildung 5.6: Bethe-Salpeter-Wellenfunktion des Grundzustand bei $\beta = 6.0, \kappa = 0.128, T = 0$ und $\beta = 6.2, \kappa = 0.130, T = 0$ und $\beta = 6.0, \kappa = 0.130, T = 0$

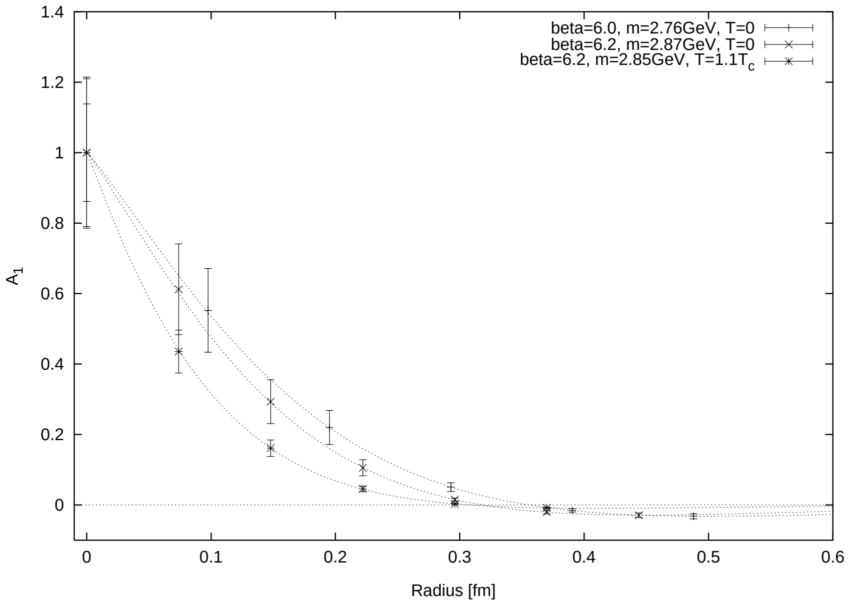


Abbildung 5.7: Bethe-Salpeter-Wellenfunktion ersten angeregten Zustands bei $\beta = 6.0, \kappa = 0.128, T = 0$ und $\beta = 6.2, \kappa = 0.130, T = 0$ und $\beta = 6.0, \kappa = 0.130, T = 0$

N_σ	N_τ	β	κ	a_0	ν_0	a_1	b_1	ν_1
16	32	6.0	0.141	4.16(3)	1.19(3)	3.0(8)	4.6(3)	1.3(7)
			0.130	3.25(4)	1.26(4)	1.9(2)	3.9(1)	1.4(3)
			0.128	3.38(4)	1.23(4)	2.6(3)	3.6(1)	1.3(3)
24	8	6.0	0.141	3.04(6)	1.20(4)	1.8(5)	5.4(3)	1.0(3)
			0.130	2.65(5)	1.20(5)	1.5(2)	3.4(1)	1.0(2)
			0.128	2.59(6)	1.20(5)	1.5(3)	3.3(1)	1.0(2)
24	48	6.2	0.141	5.32(3)	1.15(2)	3.3(4)	7.0(2)	1.2(2)
			0.130	4.27(3)	1.20(3)	2.9(3)	4.30(8)	1.3(2)
			0.128	4.09(3)	1.20(2)	2.8(3)	3.98(5)	1.3(2)
24	8	6.2	0.141	3.61(3)	1.22(3)	2.2(3)	6.0(1)	0.9(2)
			0.130	3.15(2)	1.21(4)	1.7(2)	4.2(1)	1.1(1)
			0.128	3.06(4)	1.22(4)	1.7(2)	4.0(1)	1.1(1)

Tabelle 5.4: Koeffizienten der Bethe-Salpeter-Wellenfunktion für den Grund- und den ersten angeregten Zustand des Pions

N_σ	N_τ	β	κ	a_0	ν_0	a_1	b_1	ν_1
16	32	6.0	0.141	5.75(9)	1.36(7)	3.1(4)	5.1(1)	1.3(3)
			0.130	3.91(4)	1.38(6)	2.6(3)	4.1(1)	1.3(3)
			0.128	4.03(5)	1.32(6)	2.6(3)	3.8(1)	1.3(3)
24	8	6.0	0.141	3.90(10)	1.31(10)	1.7(4)	5.0(2)	0.9(2)
			0.130	3.09(7)	1.27(8)	1.4(3)	3.5(2)	1.0(2)
			0.128	2.96(7)	1.26(8)	1.4(3)	3.3(1)	1.0(2)
24	48	6.2	0.141	7.59(5)	1.40(3)	3.5(1)	6.85(5)	1.25(8)
			0.130	5.27(5)	1.34(5)	2.9(3)	4.4(1)	1.3(3)
			0.128	4.97(4)	1.34(4)	2.8(3)	4.16(7)	1.3(2)
24	8	6.2	0.141	4.59(4)	1.35(5)	2.0(2)	6.3(3)	0.9(1)
			0.130	3.67(4)	1.30(5)	1.6(2)	4.2(1)	1.1(1)
			0.128	3.54(5)	1.30(6)	1.6(2)	4.0(1)	1.1(1)

Tabelle 5.5: Koeffizienten der Bethe-Salpeter-Wellenfunktion für den Grund- und den ersten angeregten Zustand des Rho

und bei steigendem β leicht zu, jedoch nicht genug, um Skalenverhalten zu zeigen. Außerdem scheint er Teilchenunabhängig zu sein. Auch b_0 skaliert nicht.
Beim Exponenten sieht man ein sehr auffälliges Verhalten. Sowohl auf den Null- wie auch auf den Hochtemperaturgittern scheint er unabhängig von der Masse des Mesons, wie auch von β und der Teilchensorte zu sein. Für $T = 0$ liegt er etwa bei 1.3 und für $T = 0$ bei 1.0, sowohl unterhalb wie oberhalb des Phasenübergangs. Es scheint sich also allein um eine Eigenschaft der hohen Temperatur zu handeln oder möglicherweise der Korrelationsrichtung. Das müssten weitere Untersuchungen zeigen.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde Charmonium in der Gitterformulierung der Quanten Chromo Dynamik in der quenched Approximation mit Hilfe einer verbesserten Wilson Wirkung untersucht. Dabei galt das Interesse dem Verhalten bei $T = 0$ und sowohl oberhalb wie unterhalb von T_C.

Um die verwendeten Observablen untersuchen zu können, mußten zum einen mehere Programme zur Simulation der zu untersuchenden Größen geschrieben werden, und zum anderen bereits vorhandene Auswertungsprogramme den Erfordernissen angepaßt werden.

Untersuchte Observablen waren zum einen die Massen des Pseudoskalar und des Vektormesons, welche für das Charmquark als Konstituent das η_c und das J/Ψ sind. Zum anderen wurde die Bethe-Salpeter Wellenfunktion betrachtet, welche approximativ eine Aussage über die Ausdehnung des Teilchens machen soll.
Die verwendeteten Parameter (die Kopplung β und der Massenparameter κ) wurden so gewählt, daß die simulierten Quarkmassen zum einen im Bereich der Charmmasse und zum anderen im Bereich der Strangemasse zu liegen kamen. Letzteres wurde gewählt, um Konsistenz mit Daten der UKQCD und der APE-Collaboration überprüfen zu können.

Bei $T = 0$ wurde die Masse des Charmquarks in der Gitterregularisierung zu $m_c = 0.90(5)\text{GeV}$ bestimmt. Im $\overline{\text{MS}}$-System ergibt das $m_c^{\overline{\text{MS}}}(\mu = 1.0\text{GeV}) = 0.1.08(6)\text{GeV}$. Dieses Ergebnis liegt unterhalb der in [30] veröffentlichten Daten von $m_c = 1.35(5)\text{GeV}$.
Bei der Bethe Salpeter Wellenfunktion konnte für den Grundzustand Skalenverhalten festgestellt werden.

Bei den Screeningmassen wurden unterhalb des Phasenüberganges keine Unterschiede zu den Massen bei $T = 0$ innerhalb der Fehlergrenzen festgestellt. Dieses läßt sich interpretieren als ein Fortbestehen des gebundenen Mesonzustandes mit einer Masse unabhängig von der Temperatur. Oberhalb sind einige Verschiebungen der Mesonenmassen zu beobachten, teilweise nach oben (für die leichten Massen) und teilweise nach unten (für die schweren Massen). Ob die Daten eine Aussage machen über die Existenz des erwarteten Quark-Gluon Plasmas oberhalb von T_C, kann nicht geschlossen werden.

Die Bethe-Salpeter Wellenfunktion weißt in der Nähe des Phasenübergangs ober- wie unterhalb von T_C ein ähnliches Verhalten auf. Dieses unterscheidet sich für den Grundzustand qualitativ kaum von dem der Observablen bei $T = 0$. Für den ersten angeregten Zustand erhält man ein von $T = 0$ stark abweichendes Verhalten. Es ist jedoch zu uneindeutig, als daß ohne weitere Untersuchungen auf physikalische Eigenschaften geschlossen werden sollte. Dazu könnten auch andere Operatoren außer das 0^{-+} und das 1^{--} herangezogen werden.

Anhang A

Konventionen

A.1 Gell-Mann Matrizen

Die Erzeugenden der SU(3) sind die acht spurlos antihermiteschen Gell-Mann Matrizen. Diese sind

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \qquad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

A.2 Dirac-Matrizen

Die γ-Matrizen in der selbstadjungierten Darstellung sind

$$\gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Die σ-Matrizen sind definiert durch $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$. Damit sind $\sigma_{\mu\mu} = 0$ und $\sigma_{\mu\nu} = -\sigma_{\nu\mu}$.

$$\sigma_{12} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \sigma_{13} = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_{14} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{23} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_{24} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_{34} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Anhang B

Numerische Details

B.1 Dslash-Routine

In Kapitel **3.3.1** erhielten wir folgendes zu lösendes Gleichungssystem:

$$(A_{ee} - \kappa^2\ \Delta_{eo}\ A_{oo}^{-1}\ \Delta_{oe}\ )\ \Psi_e \quad = \quad \Phi_e + \kappa\ \Delta_{eo}\ A_{oo}^{-1}\ \Phi_o \ , \tag{B.1}$$

mit dem Dslash Operator aus (1.25)

$$\begin{aligned} \Delta^{ij}_{\alpha\beta}(x,y) \quad = \quad & \sum_\mu \left[\ (r\mathbf{1} - \gamma_\mu)_{\alpha\beta}\ \delta_{y,x+\hat\mu}\ U^{ij}_\mu(x) \right. \\ & \left. +\ \ (r\mathbf{1} + \gamma_\mu)_{\alpha\beta}\ \delta_{y,x-\hat\mu}\ U^{\dagger ij}_\mu(y)\ \right]\ . \end{aligned} \tag{B.2}$$

Die Dslash-Routine ist das Kernstück der Matrixinversion. In ihr wird ein Großteil Invertierungszeit verbraucht. Für $r = 1$ erhält man in $(r\mathbf{1} \pm \gamma_\mu)$ Projektionsoperatoren auf einen zweidimensionalen Unterraum des Spinorraumes. Die Ergebnisse dieser Projektionen an den Orten $x \pm \hat\mu$ werden noch mit den SU(3) Matrizen multipliziert und am Ort x summiert.
Dieses beinhaltet einen großen Teil Rechenoperationen und Kommunikation. Es ist jedoch nicht notwendig, den gesamten Spinor dazu zu benutzen. Es ist bereits völlig ausreichend, nur einen zweidimensionalen Spinor zu multiplizieren und kommunizieren, da in diesem bereits sämtliche benötigte Information enthalten ist. Zusätzlich läßt sich dabei auch noch ein Teil des Datentransfers hinter den Rechnungen verstecken, wie in Kapitel **4.4** beschrieben.
Zusammengefaßt ergibt das folgenden Ablauf.

1. Zunächst einmal sind die geeigneten Zweierspinoren $\chi^{\pm}_{\mu,1/2} = (\mathbf{1} \pm \gamma_\mu)_{1'/2',\nu}\ \Psi_\nu$ zu bilden. Je nach Zweierspinor ist $1', 2'$ gleich $1,2$ oder $3,4$.

$$
\begin{aligned}
\chi^+_{1,1} &= \Psi_1 + i\Psi_4 & \chi^-_{1,1} &= i\Psi_2 + \Psi_3 \\
\chi^+_{1,2} &= \Psi_2 + i\Psi_3 & \chi^-_{1,2} &= i\Psi_1 + \Psi_4 \\
\\
\chi^+_{2,1} &= \Psi_1 + \Psi_4 & \chi^-_{2,1} &= \Psi_2 + \Psi_3 \\
\chi^+_{2,2} &= \Psi_2 - \Psi_3 & \chi^-_{2,2} &= -\Psi_1 + \Psi_4 \\
\\
\chi^+_{3,1} &= \Psi_1 + i\Psi_3 & \chi^-_{3,1} &= i\Psi_1 + \Psi_3 \\
\chi^+_{3,2} &= \Psi_2 - i\Psi_4 & \chi^-_{3,2} &= -i\Psi_2 + \Psi_4 \\
\\
\chi^+_{4,1} &= 2\Psi_1 & \chi^-_{4,1} &= 2\Psi_3 \\
\chi^+_{4,2} &= 2\Psi_2 & \chi^-_{4,2} &= 2\Psi_4
\end{aligned}
\tag{B.3}
$$

2. Dann sind die Zweierspinoren mit den Eichfeldern zu multiplizieren und von $x \pm \hat{\mu}$ nach x zu verschicken. Dies geschieht in zwei Schritten. Dabei wird jeweils ein $\pm$-Zweierspinor mit dem passenden Eichfeld multipliziert während die andere Komponente gerade gesendet wird. Zunächst wird

$$
\begin{aligned}
H^+_\mu(x-\hat{\mu}) &= U^\dagger_\mu(x-\hat{\mu})\chi^+_\mu(x-\hat{\mu}) \\
H^-_\mu(x) &= \chi^-_\mu(x+\hat{\mu}),
\end{aligned}
$$

um danach

$$
\begin{aligned}
\chi'^-_\mu(x) &= U_\mu(x)H^-_\mu(x) \\
\chi'^+_\mu(x) &= H^+_\mu(x-\hat{\mu}) \ .
\end{aligned}
\tag{B.4}
$$

3. Zum Schluß folgt die Rekonstruktion der Viererspinoren.

$$
\begin{aligned}
\Psi'_1 &= (\chi'^+_{1,1} - i\chi'^-_{1,2} + \chi'^+_{2,1} - \chi'^-_{2,2} + \chi'^+_{3,1} - i\chi'^-_{3,1} + \chi'^+_{4,1}) \\
\Psi'_2 &= (\chi'^+_{1,2} - i\chi'^-_{1,1} + \chi'^+_{2,2} + \chi'^-_{2,1} + \chi'^+_{3,2} + i\chi'^-_{3,2} + \chi'^+_{4,2}) \\
\Psi'_3 &= (\chi'^-_{1,1} - i\chi'^+_{1,2} + \chi'^-_{2,1} - \chi'^+_{2,2} + \chi'^-_{3,1} - i\chi'^+_{3,1} + \chi'^-_{4,1}) \\
\Psi'_4 &= (\chi'^-_{1,2} - i\chi'^+_{1,1} + \chi'^-_{2,2} + \chi'^+_{2,1} + \chi'^-_{3,2} + i\chi'^+_{3,2} + \chi'^-_{4,2})
\end{aligned}
\tag{B.5}
$$

Abhängig davon, welcher Invertierungsalgorithmus benutzt wird, wird auch $\Delta^\dagger$ in der Matrixmultiplikation benötigt. Da für die Fermionmatrix gilt

$$
\mathcal{M}^\dagger = \gamma_5 \mathcal{M} \gamma_5 \ , \tag{B.6}
$$

ergibt sich

$$
\begin{aligned}
\Delta^{\dagger\, ij}_{\alpha\beta}(x,y) \;\; = \;\; & \sum_\mu \left[\, (r\mathbf{1}+\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\; \delta_{y,x+\hat\mu}\; U^{ij}_\mu(x) \right. \\
& \left. +\;\; (r\mathbf{1}-\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\; \delta_{y,x-\hat\mu}\; U^{\dagger ij}_\mu(y) \,\right] \;\; .
\end{aligned}
\tag{B.7}
$$

Im wesentlichen werden in obiger Dslash-Routine nur einige Vorzeichen vertauscht.

B.2 Clover-Implementation

Die Clover Matrix A ist nach Gl. (1.31)

$$
A^{ij}_{\alpha\beta}(x) \;\; = \;\; \mathbf{1} - \frac{\kappa r}{2}\, g_0\, F_{\mu\nu}(x)\, \sigma_{\mu\nu} \;\; , \tag{B.8}
$$

mit

$$
\sigma_{\mu\nu} \;\; = \;\; \frac{i}{2}\; [\, \gamma_\mu, \gamma_\nu \,] \tag{B.9}
$$

$$
g_0\, F_{\mu\nu}(x) \;\; = \;\; \frac{1}{4} \sum_j \frac{1}{2i} \left(U^{1\mathrm{x}1}_{j\mu\nu}(x) - (U^{1\mathrm{x}1}_{j\mu\nu})^\dagger(x) \right) \;\; . \tag{B.10}
$$

$\frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu}F_{\mu\nu}(x)$ läßt sich schreiben als

$$
\frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu}F_{\mu\nu}(x) \;\; = \;\; \begin{pmatrix} W_0 & W_1 & W_2 & W_3 \\ W_1^\dagger & -W_0 & W_3^\dagger & -W_2 \\ W_2 & W_3 & W_0 & W_1 \\ W_3^\dagger & -W_2 & W_1^\dagger & -W_0 \end{pmatrix} \;\; , \tag{B.11}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
W_0 &= F_{21} \\
W_1 &= F_{32} + iF_{31} \\
W_2 &= F_{34} \\
W_3 &= F_{14} + iF_{42} \;\; .
\end{aligned}
\tag{B.12}
$$

Es ist also prinzipiell nur notwendig W_μ zu bestimmen, um A zu konstruieren. Das bedeutet eine Reduzierung des Speicherplatzbedarfs auf ein Viertel. Da durch das Even-Odd Preconditioning auf der Hälfte der Felder A^{-1} benötigt wird, welches keine derartig günstige Aufteilung ermöglicht, wird im Inversionsprogramm trotzdem der größte Teil des Speichers vom Clover-Term beansprucht.

B.3 Dekompositions-Routine

In Kapitel **3.3.2** wurde dargestellt, daß die hermitesche 12x12-Matrix A aus Gl. (1.31) darstellbar ist als

$$\begin{aligned} A^{ij}_{\alpha\beta}(x) &= \mathbf{1} - \frac{\kappa r}{2}\, g_0\, F_{\mu\nu}(x)\, \sigma_{\mu\nu} \\ &= L^\dagger(x) D(x) L(x) \ , \end{aligned} \tag{B.13}$$

wobei L eine obere Dreiecksmatrix ist und D eine Diagonalmatrix. So ist es möglich statt einer Multiplikation mit A_{oo}^{-1} eine Multiplakation mit $L^{-1}D^{-1}L^{\dagger\,-1}$ durchzuführen. Der verwendete Algorithmus bewirkt eine Berechnung von L und D und dann effektiv eine Multiplikation eines Spinors mit $L^{-1}D^{-1}L^{\dagger\,-1}$.

B.3.1 Dekomposition

Zunächst wird die Zerlegung von A in L und D dargestellt. Dabei sei $N = n_c n_s = 12$

```
DO i = N TO 1 STEP -1
      DO j = i TO 1 STEP -1

            t = A_ij
            DO k = i+1 TO N (nicht für i = N)
                  t = t·L*_ki D_k L_kj
            ENDDO
            IF ( i = j ) THEN
                  D_i = t
            ELSE
                  L_ij = t/D_i
            ENDIF

      ENDDO
      D_i = 1/D_i
ENDDO
```

Gespeichert wird hier effektiv D^{-1} und L bis auf die Diagonalelemente, welche alle $L_{ii} = 1$ sind für alle i.

B.3.2 Multiplikation

Durch folgenden Algorithmus wird ein Spinorfeld mit A^{-1} multipliziert. Dann ergibt $\Phi = L^{-1} D^{-1} L^{\dagger\,-1}$

Zuerst wird mit $L^{\dagger\,-1}$ multipliziert.

$\Phi = \Psi$
DO i = N TO 1 STEP -1
        DO J = N TO i+1 STEP -1 (nicht für i = N)
                $\Phi_i = \Phi_i - L^*_{ji}\Phi_j$
        ENDDO
ENDDO

Dann folgt $(DL)^{-1}$

DO i = 0 TO N STEP 1
        $\Phi_i = \Phi_i D_i$
        DO J = 0 TO i-1 STEP 1 (nicht für i = 0)
                $\Phi_i = \Phi_i - L_{ij}\Phi_j$
        ENDDO
ENDDO

Literaturverzeichnis

[1] R. Utiyama, Phys. Rev. 101 (1956) 1597

[2] K.G. Wilson, in Zichichi (ed.), *New Phenomena in Subnuclear Physics*, Plenum, New York (1975)

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

[4] Y. Nambu, *Preludes in Theoretical Physics*, Amerstam 1966,
H. Fritzsch, M. Gell-Mann, H. Leutwyler, Phys. Lett. B47 (1973) 365.

[5] C. Itzykson, C.B. Zuber, *Quantum Field Theory*, Mc Graw-Hill International Book Company (USA) (1990)

[6] K. Symanzik, *Mathematical Problems in theoretical physics*, eds. R. Schrader et al., *Lecture notes in Physics*, 153 (Springer, Berlin, 1982)
K. Symanzik, Proc. of the Trieste Workshop on Non-pertuerbative field theorie and QCD (World Scientific, Singapore, 1982) 61

[7] P. Weisz, Nucl. Phys. B212 (1983) 1

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

[9] G.P. Lepage, P.G. Mackenzie, Phys. Rev. D48 (1993) 2250

[10] N.B. Nielsen, M. Ninomiya, Nucl. Phys. 185 (1981) 20

[11] J.B. Kogut, L. Susskind, Phys. Rev. D15 (1977) 1111

[12] S. Booth, Thesis Edinburgh (1995)

[13] B. Sheikoleslami and R. Wohlert, Nucl. Phys. B259 (1985) 572

[14] G. Heatlie et al., Nucl. Phys. B352 (1991) 266

[15] F. Karsch, *Simulating the quark gluon plasma*, in *Quark-Gluon Plasma*, R.C. Hwa, ed., World Scientific Publishing, Singapore (1990)

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

[17] H.R. Rothe, *Lattice Gauge Theories - An Introduction* World Scientific (1992)

[18] A.B. Clarke and R.L. Disney, *Probability and Random Processes: A first Course with Applications*, John Wiley & Sons (1985)

[19] N. Metropolis et al., J. Chem. Phys. 21 (1953) 1087

[20] N. Cabibbo and E. Marinari, Phys. Lett. 119B (1982) 387

[21] A.D. Kennedy and B.J. Pendleton, Phys. Lett. 156B (1985) 393

[22] F.R. Brown, T.J. Woch, Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 2394

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

[24] S. Duane et al., Phys. Lett. 195B (1987) 216

[25] M. Lüscher, Nucl. Phys. B418 (1994) 637

[26] R.M. Baxter, Thesis Edinburgh (1993)

[27] S. Güsken et al., in *Lattice '89* Proceeding of the International Symposium, Italy, 1989, edited by R. Petronzio et al. [Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 17 (1990) 361]
Phys. Lett. B227 (1990) 266

[28] UKQCD Collaboration, (P. Lacock et al.) Phys. Rev. D51 (1995) 6403

[29] APE Collaboration (M. Albanese, et al.) Phys. Lett. 192B (1987) 163; 205B (1988) 535; 197B (1987) 400

[30] J. Gasser, H. Leutwyler, Phys. Rep. Vol. 87 Nb. 3 (1982)

[31] G. Boyd et al., Nucl. Phys. B469 (1996) 419

[32] UKQCD Collaboration (C.R. Allton et al.) Nucl. Phys. B407 (1993) 331

[33] UKQCD Collaboration (C.R. Allton et al.) Phys. Rev. D49 (1994) 474

[34] APE Collaboration (C.R Allton et al.) Nucl. Phys. B413 (1994) 461

[35] UKQCD Collaboration (R.M. Baxter et al.) Phys. Rev. D49 (1994) 1594

[36] M.W. Hecht, T.A. DeGrand, Phys. Rev. D 46 (1992) 2155

[37] S.L. Eisenstat et al., J. Num. Anal. 20 (1983) 345

[38] Y. Oyanagi, Comp. Phys. Comm. 42 (1986) 333

[39] C.C Paige and M.A. Saunders, J. Num. Anal. 12 (1975) 617

[40] M.R. Hestenes and E. Stiefel, Journal of Research of the National Bureau of Standards Vol.49 No.6 (Dec 1952)

[41] R.W. Freund, N.M. Nachtigal, Num. Math. 60 (1991) 315

[42] M.H. Gutknecht, J. Sci. Com. 14 (1993) 1020

[43] P. Rossi and T. De Grand, Comp. Phys. Comm. 60 (1990) 211

[44] A.D. Simpson, Thesis Edinburgh (1991)

[45] A. Gonzales Arroyo et al., Phys. Lett. B117 (1982) 437; Phys. Lett. B122 (1983) 486

[46] E. Gabrielli, et al., Nucl. Phys. B362 (1991) 475

Zusätzliche Literatur

[47] N.P Stanford, Thesis Edinburgh (1994)

[48] I. Montvay, G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice*, Cambride University Press (1994)

Danksagung

Diese Arbeit wurde unter Anleitung von Dr. Edwin Laermann durchgeführt. Ich danke Herrn Laermann für die hervorragende Betreuung meiner Diplomarbeit und insbesondere für seine Bereitschaft, sich jederzeit mit meinen Fragen und Problemen zu beschäftigen.
Desweiteren möchte ich danken den Angestellten der EPCC und der QCD-Abteilung der Edinburgh University, wo ich das Glück hatte, in den ersten Monaten meiner Arbeit im Rahmen des TRACS-Programm auf der dortigen Großrechenanlage, dem CRAY-T3D, ausgebildet zu werden. Insbesondere möchte ich hervorheben Richard Kenway als meine dortige Betreuungsperson und Joel Mallard für seine Bereitschaft, sich mit meinen Fragen jederzeit auseinanderzusetzen.
Darüber hinaus möchte ich meiner Arbeitsgruppe danken. Die Zusammenarbeit mit allen hat mir viel Freude bereitet. Besonders erwähnen möchte ich Martin Lütgemeier, ohne dessen Betreuung seiner Auswertungsroutinen diese Arbeit nicht so schnell fertig geworden wäre. Hervorheben möchte ich auch alle, mit denen ich die Gelegenheit hatte, in der Fachschaft zusammenarbeiten zu können und so Erfahrungen außerhalb des fachlichen Bereiches zu machen.
Besonderen Dank gilt meinem Vater Günter Schmidt, seiner Frau Inge Seipold und meiner Freundin Britta Niederjohann, die mich Zeit meines gesamten Studiums unterstützt haben.

Ich versichere, daß ich außer den im Literaurverzeichnis angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel bei der Anfertigung meiner Arbeit benutzt habe.