

Friedrich-Schiller-Universität Jena  
Physikalisch-Astronomische Fakultät

Diplomarbeit

**Effektive Theorien auf dem Raumzeitgitter  
Die Inverse Monte-Carlo-Methode für  
Yang-Mills-Theorien**

eingereicht von Tobias Kästner  
geboren am 18. Juli 1979 in Eisenach



1. Gutachter: Prof. Dr. phil. habil. Andreas Wipf

2. Gutachter: PD Dr. rer. nat. Wolf G. Schmidt

Tag der Verleihung des Diploms :



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur</b>	<b>5</b>
2.1. Eichtheorien . . . . .	5
2.2. Paralleltransport und WILSON-Loop . . . . .	8
2.3. Pfadintegral und Gitterregularisierung . . . . .	11
2.3.1. Skalares Feld . . . . .	11
2.3.2. Eichtheorie . . . . .	14
2.4. Feldtheorie bei endlicher Temperatur . . . . .	20
2.4.1. Quantenmechanik . . . . .	20
2.4.2. Eichfeldtheorie . . . . .	22
2.4.3. Zusammenhang zwischen $\beta$ und $\beta_g$ . . . . .	23
<b>3. Inverse Monte-Carlo-Methode für effektive Wirkungen</b>	<b>27</b>
3.1. Der POLYAKOV-Loop als neuer Freiheitsgrad . . . . .	27
3.2. SCHWINGER-DYSON-Gleichungen . . . . .	31
3.2.1. Die Zustandssumme in der <i>effektiven</i> Theorie . . . . .	31
3.2.2. Symmetrien . . . . .	32
3.2.3. SCHWINGER-DYSON-Gleichungen für SU(2) . . . . .	34
3.3. Die Inverse Monte-Carlo-Methode . . . . .	35
<b>4. Numerische Aspekte</b>	<b>39</b>
4.1. Quantenfeldtheorie auf dem Computer . . . . .	39
4.1.1. Grundlagen . . . . .	39
4.1.2. Fehleranalyse . . . . .	42
4.2. IMC - Algorithmus und Implementation . . . . .	45
4.2.1. Nomenklatur . . . . .	45
4.2.2. Lineare überbestimmte Gleichungssysteme . . . . .	47

4.2.3.	Wahl der Operatoren . . . . .	48
4.2.4.	Korrektheit der Implementation . . . . .	49
<b>5.</b>	<b>Ergebnisse für SU(2)-Eichtheorie</b>	<b>51</b>
5.1.	Simulation der YANG-MILLS-Theorie . . . . .	51
5.2.	Simulation der <i>effektiven</i> Theorie . . . . .	54
5.2.1.	Ansatz für die Wirkung . . . . .	54
5.2.2.	<i>Effektive</i> Theorie mit zwei Kopplungen . . . . .	58
5.3.	Inverse MONTE-CARLO . . . . .	60
5.3.1.	Bestimmung der Kopplungen . . . . .	60
5.3.2.	Vergleich mit Yang-Mills . . . . .	63
5.3.3.	Yang-Mills-Trajektorie . . . . .	66
5.4.	Zusammenfassung . . . . .	67
<b>6.</b>	<b>Ausblick auf SU(3)</b>	<b>69</b>
6.1.	Simulation der YANG-MILLS-Theorie . . . . .	69
6.2.	Ansatz für die Wirkung . . . . .	74
6.3.	SCHWINGER-DYSON-Gleichungen für SU(N) . . . . .	75
<b>A.</b>	<b>Wärmebad-Algorithmus</b>	<b>77</b>
<b>B.</b>	<b>IMC mit dem Softwarepaket jenLaTT</b>	<b>81</b>
B.1.	Objektorientierter Softwareentwurf in der numerischen Simulation	81
B.2.	jenLaTT - Eine Übersicht . . . . .	83
<b>C.</b>	<b>SU(2)-Wirkungsterme und IMC-Operatoren</b>	<b>89</b>
<b>D.</b>	<b>Zusammenfassung der Messdaten</b>	<b>93</b>
D.1.	IMC . . . . .	93
D.2.	Zweipunktfunktion . . . . .	95
<b>E.</b>	<b>Konventionen</b>	<b>97</b>

*Der unermesslich reichen, stets sich erneuernden Natur gegenüber wird der Mensch, soweit er auch in der wissenschaftlichen Erkenntnis fortgeschritten sein mag, immer das sich wundernde Kind bleiben und muss sich stets auf neue Überraschungen gefasst machen.*

*Max Plank*





# 1. Einleitung

Der Beginn des 20. Jahrhunderts steht mit den Arbeiten von ALBERT EINSTEIN und MAX PLANCK für den Aufbruch der Physik zum ganz Großen wie zum ganz Kleinen. Keiner Epoche zuvor war es beschieden, so rasant Entdeckung an Entdeckung zu knüpfen und in kürzester Zeit ein neues – das moderne – Weltbild zu formen. Viele waren an diesem Erfolg beteiligt, der die Physik in weniger als 50 Jahren grundlegend ändern sollte. An die Stelle der NEWTONSCHEN ewig gleich fließenden Zeit, der alle Bewegung unterworfen war, trat die Vorstellung einer dynamischen wechselseitigen Beziehung von Raum, Zeit und Materie. An die Stelle der Atome DEMOKRITS, der unteilbar kleinsten Bausteine, trat ein völlig neues Konzept, das die klassischen Grenzen von Teilchen und Welle zu verwischen begann. Die Einsicht in die Struktur der Materie wuchs stetig, neue Teilchen wurden entdeckt, Theorien entwickelt, die mehr und mehr Teilchen vorhersagten und die schließlich auch (fast) alle gefunden wurden. Das *Standardmodell* der Elementarteilchenphysik fasst diese Errungenschaften in einen gemeinsamen theoretischen Rahmen, der Vorhersagen mit einer bisher von keiner anderen Wissenschaft erreichten Genauigkeit ermöglicht. Dieses Grundgerüst ist die Quantenfeldtheorie. Sie stellt den gelungenen Versuch dar, die aufgeworfenen Fragen der Quantentheorie mit dem neuen Raumzeitbegriff zu vereinen. Darüber hinaus bringen die durch dieses Gerüst getragenen Theorien Ordnung in den sonst unüberschaubaren "Teilchenzoo" der modernen Elementarteilchenphysik. Den Schlüssel zu dieser Einsicht, die weit über das bloße Zählen und Katalogisieren der Teilchen hinausgeht, bilden Symmetrien. Ermöglicht ihr Vorhandensein zunächst die Klassifikation anhand der mit ihnen verbundenen Erhaltungsgrößen, gehen die lokalen Eichsymmetrien sogar noch weiter und bieten eine Erklärungsmöglichkeit für die beobachteten vier Naturkräfte überhaupt. Als integraler Bestandteil des *Standardmodelles* gehören diese Eichtheorien heute zu den herausragenden Leistungen der theoretischen Physik.

Bei allen Erfolgen sind aber bis heute auch eine Fülle von Fragen unbeantwortet geblieben. Ein viel beachtetes Problem ist der Einschluss der heute als am elemen-

## 1. Einleitung

tarsten geltenden Teilchen – den Quarks – in Baryonen und Mesonen. Die Quarks werden von der diesen Sektor des *Standardmodelles* beschreibenden Quantenchromodynamik (QCD) vorhergesagt, wurden aber bisher in keinem Experiment direkt beobachtet. Daher muss die QCD dieses Einschluss-Phänomen (Confinement) erklären können, wenn sie endgültig Anerkennung finden soll. Zur Lösung scheint das heutige Verständnis der Quantenfeldtheorie an seine Grenzen zu stoßen. So können zwar perturbative Ergebnisse aufgrund der asymptotischen Freiheit der QCD für tief inelastische Streuexperimente erhalten werden, die Methode versagt jedoch bei Fragen zum Grundzustand (dem Vakuum) der Theorie, wie sie für das Confinement von Bedeutung wären. Für diese müssen nicht-perturbative Zugänge entwickelt werden, von denen die Gitterformulierung als einer der vielversprechendsten gilt. Ohne den technischen Details späterer Kapitel vorzugreifen, ermöglicht das Gitter das Studium der vollen (nicht perturbativen) Theorie. Die Vakuumstruktur kann sichtbar gemacht werden und auch das Confinement wird beobachtet. Neben ausgefeilten analytischen Methoden ist hierbei das wichtigste Hilfsmittel zur Gewinnung von neuen Aussagen der Computer. Das Gitter ermöglicht die numerische Behandlung der auftretenden Fragestellungen und die gewonnenen Resultate bestätigen die aufgestellten Vermutungen. Das sich abzeichnende Bild für das Confinement ergibt, dass das Vakuum in einer symmetrischen (kein Einschluss oder Deconfinement) oder in einer gebrochenen (Einschluss oder Confinement) Phase vorliegen kann. Im Rahmen dieser Arbeit nehmen wir dabei den Standpunkt ein, dass die Auswahl der Phase durchaus über die Temperatur oder den Druck geschieht. Bei sehr hohen Temperaturen ( $kT \approx 150\text{MeV}$ ) oder unter enormen Druck, wie sie z.B. kurze Zeit nach dem Urknall oder zur heutigen Zeit in Neutronensternen herrschen, können die Quarks und die die starke Kraft übertragenden Gluonen entkoppeln und ein Quark-Gluonplasma bilden. Die uns umgebende Natur liegt hingegen in der gebrochenen Phase mit den sich aus den Quarks konstituierenden Nukleonen vor. Da die QCD als Theorie in ihrer Gesamtheit jedoch kaum zu kontrollieren ist, besteht ein möglicher Lösungsansatz darin, sich auf die den Phasenübergang verursachenden Freiheitsgrade der Theorie zu beschränken. Damit wird gleich zu Beginn die Frage aufgeworfen, welche dies sind und wie die QCD anschließend zu vereinfachen ist. Die Antwort hierauf geben die *effektiven* Theorien. So wie die phenomenologische Thermodynamik die Details der ihr zu Grunde liegenden statistischen Physik ausblendet, vernachlässigen diese die (hoffentlich) irrelevanten Freiheitsgrade der vollen Theorie und erlangen dadurch eine einfachere Gestalt. Bei diesem Vorgehen können numerische Simulationen sowohl

der vollen Theorie als auch der *effektiven* Modelle wertvolle Hinweise liefern. Sowohl über wichtige Merkmale wie über die Gültigkeit gemachter Annahmen und Ansätze können mit Hilfe von solchen computergestützten Methoden Aussagen gefunden werden.

In dieser Arbeit soll eine konkrete Methode vorgestellt werden, die in dem beschriebenen Umfeld Anwendung finden kann. Um das Problem weiter zu vereinfachen, werden wir an Stelle der QCD die YANG-MILLS-Theorien studieren. Dies bedeutet, dass die in der QCD enthaltenen Fermionen als unendlich massiv und damit nicht-dynamisch behandelt werden. Die erhaltenen einfacheren Modelle bieten bereits ein interessantes Betätigungsfeld für die zu entwickelnden Methoden und Programme. Für eine realistische Theorie müssen am Ende auch wieder Fermionen berücksichtigt werden, was jedoch – allein unter numerischen Gesichtspunkten – zu einem erheblichen Mehraufwand führt und weit außerhalb der Reichweite dieser Arbeit liegt. Im Folgenden geben wir einen kurzen Überblick zum Aufbau der Arbeit. In Kapitel 2 werden die notwendigen analytischen Begriffe und Ergebnisse in Kürze dargestellt. Im Einzelnen werden dort Eichtheorien als klassische Feldtheorie und deren Quantisierung im Gitterformalismus besprochen. Das Kapitel abschließend gehen wir auf Feldtheorien bei endlicher Temperatur ein. In Kapitel 3 finden sich die – ebenfalls noch analytischen – Vorbetrachtungen sowie eine ausführliche Beschreibung der Inverse MONTE-CARLO-Methode. Die wichtigsten numerischen Voraussetzungen werden Gegenstand des vierten Kapitels sein und umfassen neben einer kurzen Vorstellung der MONTE-CARLO-Methode noch weitere Aspekte, die im Zusammenhang mit den im dritten Kapitel eingeführten SCHWINGER-DYSON-Gleichungen stehen. Unsere konkret für den Fall der SU(2)-YANG-MILLS-Theorie erhaltenen Ergebnisse werden in Kapitel 5 ausführlich dargestellt und diskutiert. Das sechste und letzte Kapitel dient dem Ausblick auf den interessanteren Fall der SU(3)-YANG-MILLS-Theorie, die eng mit der oben diskutierten QCD verwandt ist.

## 1. *Einleitung*

# 2. Gittereichfeldtheorien bei endlicher Temperatur

Das in diesem Kapitel dargestellte Material hat längst Einzug in die gängigen Lehrbücher der Quantenfeldtheorie gehalten, so dass wir im Einzelnen auf Zitate verzichten. Im Abschnitt über die klassischen Aspekte folgen wir im Wesentlichen [6, 31, 50, 57] und [64]. Eine ausführliche Darstellung des Pfadintegralformalismus findet sich in [25, 39, 40, 41, 57], Standardtexte für die Gitterformulierung sind [13, 41, 46, 56] sowie [58]. Feldtheorien bei endlichen Temperaturen werden in [43, 56] ausführlich behandelt.

## 2.1. Eichtheorien

Das allen Untersuchungen in dieser Arbeit zu Grunde liegende Konzept ist das Vorhandensein lokaler Symmetrien der Theorie und damit einhergehend die Existenz von Eichfeldern. Dieser Abschnitt dient der Zusammenstellung der wichtigsten Definitionen und Ergebnisse, die im weiteren Verlauf benötigt werden. Wir beginnen mit der einfachsten LAGRANGE-Dichte mit vorhandener Eichsymmetrie, der LAGRANGE-Dichte der QED

$$\mathcal{L}_{\text{QED}} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \bar{\psi}(\not{\partial} - m)\psi + ie\bar{\psi}\not{A}\psi. \quad (2.1)$$

Mit den Definitionen

$$D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu \quad \text{und} \quad \not{D} = \gamma^\mu D_\mu \quad (2.2)$$

geht (2.1) in

$$\mathcal{L}_{\text{QED}} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \bar{\psi}(\not{D} - m)\psi \quad (2.3)$$

über und ist offensichtlich für konstantes  $\Lambda \in \mathbb{R}$  invariant unter der Transformation

$$\psi(x) \rightarrow e^{i\Lambda}\psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x)e^{-i\Lambda}. \quad (2.4)$$

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

Verlangen wir hingegen, dass  $\Lambda$  eine beliebige (reelle) Funktion auf der Raumzeit ist,  $\Lambda = \Lambda(x)$ , bleibt (2.3) nur dann invariant, wenn zusätzlich zu

$$\psi(x) \rightarrow e^{i\Lambda(x)}\psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x)e^{-i\Lambda(x)} \quad (2.5a)$$

auch

$$\not{D} \rightarrow e^{i\Lambda(x)}\not{D}e^{-i\Lambda(x)} \quad (2.5b)$$

gilt<sup>1</sup>. Die Transformationen (2.5) multiplizieren die Felder bzw. den DIRAC-Operator der Theorie mit einer lokal variierenden Phase  $e^{i\Lambda(x)} \in U(1)$ , ohne dabei die Wirkung und damit die Bewegungsgleichungen der Felder oder andere physikalische Eigenschaften der Theorie zu ändern. Man sagt daher auch, dass die QED eine  $U(1)$ -Eichtheorie ist. Der in (2.2) definierte lineare Operator  $D_\mu$  heißt auch aufgrund seines Transformationsverhaltens (2.5b) kovariante Ableitung.

Bevor wir darauf näher eingehen, soll das bisher Besprochene von  $U(1)$  auf  $SU(N)$  verallgemeinert werden, wozu es nützlich ist die folgenden gebräuchlichen Notationen einzuführen: Mit  $\Omega(x)$  bezeichnen wir die (lokale) Eichtransformation und mit  ${}^\Omega\psi, {}^\Omega\not{D}$  etc. die transformierten Größen. Da  $\Omega(x) \in SU(N)$  eine  $N \times N$ -Matrix ist, wird aus dem bisherigen DIRAC-Spinor  $\psi$  im einfachsten Fall<sup>2</sup> ein  $N$ -komponentiger Spaltenvektor mit einem inneren "Farbindex"  $a = 1 \dots N$ . Die Eichtransformationen (2.5) nehmen somit folgende Gestalt an (die Farbraumindizes sind unterdrückt und mit  $\Omega \in SU(N)$  gilt  $\Omega^\dagger = \Omega^{-1}$ ) :

$${}^\Omega\psi(x) = \Omega(x)\psi(x), \quad {}^\Omega\bar{\psi}(x) = \bar{\psi}(x)\Omega^\dagger(x), \quad {}^\Omega D_\mu = \Omega(x)D_\mu\Omega^\dagger(x). \quad (2.6)$$

Um die elektrische Ladung als Kopplungsstärke zwischen Materie und Eichfeld zu verallgemeinern, wird von nun an eine eichfeldspezifische Kopplung  $g$  und eine darstellungsabhängige Ladungszahl  $q$ , die wir 1 setzen, unterschieden. Setzen wir (2.2) in (2.6) ein:

$$\begin{aligned} {}^\Omega(\partial_\mu + igA_\mu) &= \Omega(x)(\partial_\mu + igA_\mu)\Omega^{-1}(x) \\ &= \Omega(x)\partial_\mu\Omega^{-1}(x) + ig\Omega(x)A_\mu\Omega^{-1}(x) \\ &= \partial_\mu + ig\Omega A_\mu\Omega^{-1} + \Omega(\partial_\mu\Omega^{-1}), \end{aligned} \quad (2.7)$$

erhalten wir mit  ${}^\Omega\partial_\mu \equiv \partial_\mu$  das Transformationsverhalten des Eichfeldes

$${}^\Omega A_\mu = \Omega A_\mu\Omega^{-1} + \Omega(\partial_\mu\Omega^{-1}), \quad (2.8)$$

<sup>1</sup>Zumindest für den Materieterm  $\bar{\psi}(\not{D} - m)\psi$  ist dies offensichtlich.

<sup>2</sup>Für unsere Zwecke ist es ausreichend nur die definierende Darstellung zu berücksichtigen.

dass nun ebenso wie die Eichtransformation  $\Omega(x)$  als eine  $N \times N$ -Matrix verstanden werden soll<sup>3</sup>, während sich (2.8) für  $\Omega(x) = e^{i\Lambda(x)} \in U(1)$  wieder auf den aus der Elektrodynamik bekannten Ausdruck  ${}^\Omega A_\mu = A_\mu + \partial_\mu \Lambda$  reduziert.

Man gelangt demnach direkt zur Theorie des Elektromagnetismus, wenn ausgehend von der freien DIRAC-Theorie die dort manifest vorhandene globale  $U(1)$ -Symmetrie (vgl. (2.4)) zu einer lokalen Symmetrie erweitert wird. Hierbei ersetzt die kovariante Ableitung  $D_\mu$  die partielle Ableitung  $\partial_\mu$ , d.h. es muss ein neues Feld  $A_\mu$  eingeführt werden, um (2.5b) zu erfüllen. Gleichzeitig werden damit die elektromagnetischen Wechselwirkungen der bereits vorhandenen Fermionfelder eingeführt. Die hier betrachteten Symmetrien führen für das Eichfeld zwangsläufig auf ein Spin-1-Feld und dessen Quanten allgemein als Eichbosonen bezeichnet werden. In der QED sind dies die Photonen und in der QCD heißen sie Gluonen. Im Vergleich zu (2.1) fehlt nur noch der kinetische Term (MAXWELL-Term) für das Eichfeld  $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ , wobei seine Form durch die Forderung nach LORENTZ- und Eichinvarianz bereits fixiert wird<sup>4</sup>. Die hierbei benutzte Feldstärke  $F_{\mu\nu}$  ergibt sich dabei für die QED (in der bekannten Weise) aus den Eichfeldern:  $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ . Für eine entsprechende Verallgemeinerung kommen wir direkt zum Ziel, wenn die Feldstärke in Analogie zum RIEMANN- oder Krümmungstensor der allgemeinen Relativitätstheorie als Kommutator zweier kovarianter Ableitungen definiert wird [10]:

$$F_{\mu\nu} \stackrel{\text{df.}}{=} \frac{1}{ig} [D_\mu, D_\nu]. \quad (2.9)$$

Eine kurze Rechnung zeigt

$$[D_\mu, D_\nu] = ig(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) + (ig)^2 [A_\mu, A_\nu] \quad (2.10)$$

und damit

$$F_{\mu\nu} = (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) + ig[A_\mu, A_\nu]. \quad (2.11)$$

Die Natürlichkeit der Definition (2.9) lässt sich differentialgeometrisch begründen

---

<sup>3</sup>Bei dieser Charakterisierung wird zunächst die geometrische Natur des Eichfeldes nicht klar. Mathematisch korrekt entspricht das Eichfeld einer Einsform, die Werte in der LIE-Algebra der Eichgruppe  $su(N)$  annimmt. Der Text bezieht sich unter diesem Gesichtspunkt auf die fundamentale Darstellung der LIE-Algebra.

<sup>4</sup>Man überzeugt sich leicht, dass ein Masseterm  $m^2 A_\mu A^\mu$  die Eichsymmetrie brechen würde. Hingegen kann in 4 Dimensionen noch ein weiterer Term  $F_{\mu\nu} \tilde{F}^{\mu\nu}$  hinzugenommen werden. Diese allgemeineren Wirkungen sind Gegenstand der topologischen Feldtheorien und werden hier nicht weiter verfolgt.

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

und führt direkt zum Transformationsverhalten der Feldstärke:

$${}^\Omega F_{\mu\nu} = \frac{1}{ig} [{}^\Omega D_\mu, {}^\Omega D_\nu] = \frac{1}{ig} [{}^\Omega D_\mu \Omega^\dagger, {}^\Omega D_\nu \Omega^\dagger] = \Omega \frac{1}{ig} [D_\mu, D_\nu] \Omega^\dagger = \Omega F_{\mu\nu} \Omega^\dagger. \quad (2.12)$$

Wir bemerken noch, dass die Feldstärke äquivalent zu (2.9) auch durch

$$F_{\mu\nu} = D_\mu A_\nu - D_\nu A_\mu \quad (2.13)$$

definiert werden kann[58]<sup>5</sup>. Die in (2.12) gefundene Kovarianz der Feldstärke ermöglicht die Verallgemeinerung von (2.1):

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} \text{tr} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \bar{\psi} (\not{D} - m) \psi, \quad (2.14)$$

wobei die Spur zum einen zu einem Skalar führt und zum anderen die Eichinvarianz sichert, da unter ihr zyklisch getauscht werden kann. Eine wichtige Konsequenz von (2.11) ist im nicht ABELSCHEN Fall die Existenz des Kommutators  $ig[A_\mu, A_\nu]$ , der in (2.14) zu kubischen und quartischen Termen in den Eichfeldern und bei der Quantisierung zu Wechselwirkungstermen der Eichbosonen untereinander führt. Im Gegensatz zur Elektrodynamik ist damit schon die Untersuchung der 'reinen' Eichtheorie, d.h. der Theorie ohne dynamische Fermionen, interessant und im hohen Grade nicht trivial. Diese Theorien heißen YANG-MILLS-Theorien und wir geben zur Vollständigkeit die zugehörige LAGRANGE-Dichte an:

$$\mathcal{L}_{\text{YM}} = -\frac{1}{4} \text{tr} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}. \quad (2.15)$$

Den Hauptgegenstand unserer Arbeit bilden die  $SU(2)$ - resp.  $SU(3)$ -YANG-MILLS-Theorien, wobei wir unser Hauptaugenmerk auf den einfacheren Fall  $SU(2)$  richten und erst in Kapitel 6 auf den die starke Wechselwirkung beschreibenden und damit realistischeren Fall  $SU(3)$  zurückkommen.

## 2.2. Paralleltransport und Wilson-Loop

Die enge Verwandtschaft der Eichtheorien zur allgemeinen Relativitätstheorie, die darin zum Ausdruck kommt, dass die gemeinsamen mathematischen Grundlagen einer einfachen geometrischen Vorstellung entwachsen, lässt mit dem bereits

---

<sup>5</sup>Diese Definition ist sicher ungewöhnlich, da im Gegensatz zu (2.9) die kovariante Ableitung  $D_\mu$  hier auf die Eichfelder  $A_\nu$  angewandt werden soll und dies keiner geometrischen Operation entspricht. Der Ausdruck  $D_\mu A_\nu$  ist daher als Matrixmultiplikation  $(\partial_\mu + igA_\mu)^a_c (A_\nu)^c_b$  zu lesen. Diese Definition führt dann mit (2.13) in der Tat auf (2.11).



adoptierten Konzept der kovarianten Ableitung auch das Analogon des Paralleltransportes zu. Diesen zur Verfügung zu haben, wird sich im Vorgriff auf die Gitterregularisierung der quantisierten Theorie als sehr nützlich erweisen, so dass an dieser Stelle näher darauf eingegangen werden soll. Zunächst sei an die Definition des Paralleltransportes für ein Vektorfeld  $V^\mu$  längs eines Weges

$$\mathcal{C} : [0, 1] \rightarrow \mathbb{M}^4, \quad \tau \mapsto y(\tau) \quad (2.16a)$$

erinnert:

$$0 = \frac{D}{D\tau} V^\lambda \equiv \dot{y}^\mu D_\mu V^\lambda. \quad (2.16b)$$

Wir führen die folgenden Bezeichner ein

$$x_0 = y(0), \quad x = y(1) \quad (2.16c)$$

und verlangen, dass die Lösung von (2.16b) eine i.Allg. vom Weg  $\mathcal{C}$  abhängende lineare Abbildung zwischen den Tangentialräumen in  $x_0$  und  $x$  ist:

$$U : T_{x_0} \mathbb{M}^4 \rightarrow T_x \mathbb{M}^4, \quad V^\lambda(x) \mapsto U^\lambda{}_\rho(x, x_0) V^\rho(x_0).$$

Da dies längs des ganzen Weges für beliebige Vektorfelder gelten soll, muss  $U(y, x_0)$  selbst (2.16b) erfüllen<sup>6</sup>:

$$\dot{y}^\mu D_\mu U(y, x_0) = 0, \quad U(x_0, x_0) = 1. \quad (2.17)$$

Bevor wir die Lösung von  $U(y, x_0)$  angeben, übersetzen wir von der allgemeinen Relativitätstheorie zurück in die Notation der Eichtheorie:

$$\psi^a(x) = U^a{}_b(x, x_0) \psi^b(x_0), \quad \bar{\psi}_a(x) = \bar{\psi}(x_0)_b (U^\dagger)^b{}_a(x, x_0). \quad (2.18)$$

An die Stelle der Vektorfelder  $V^\lambda$  treten die DIRAC-Felder  $\psi^a$  und  $\bar{\psi}_a$ , wobei wir zur Deutlichkeit den Farbindex notiert haben. Die lineare Abbildung  $U^\lambda{}_\rho(x, x_0)$  zwischen den Tangentialräumen wird zu einer linearen Abbildung zwischen den (Farb-) Vektorräumen der inneren Symmetrie, d.h. zu einem Element der Eichgruppe:  $U(y, x) \in SU(N)$ . Die Lösung kann nach einem kurzen Zwischenschritt direkt aus (2.17) abgelesen werden. Wir erhalten

$$\dot{y}^\mu D_\mu U(y(\tau), x_0) = \dot{y}^\mu (\partial_\mu + ig A_\mu) U(y(\tau), x_0) = 0,$$

---

<sup>6</sup>Dies ist das gleiche Argument, was in der Quantenmechanik zum Zeitentwicklungsoperator führt. Die Gestalt der formalen Lösung ist in beiden Fällen gleich.

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

was ausgeschrieben der folgenden gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\frac{d}{d\tau}U(y(\tau), x_0) = \left( -ig \frac{dy^\mu}{d\tau} A_\mu(y(\tau)) \right) U(y(\tau), x_0) \quad (2.19)$$

entspricht. Die formale Lösung lautet

$$U(y(\tau), x_0) = \mathcal{P} \exp \left\{ -ig \int_0^\tau \frac{dy^\mu}{ds} A_\mu(y(s)) ds \right\} \quad (2.20a)$$

und kann mit (2.16c) auch als

$$U(x, x_0) = \mathcal{P} \exp \left\{ -ig \int_{\mathcal{C}} A_\mu dz^\mu \right\} \quad (2.20b)$$

geschrieben werden. In (2.20) bedeutet  $\mathcal{P}$  das pfadgeordnete Produkt entlang des Weges  $\mathcal{C}$  in Verallgemeinerung des zeitgeordneten Produktes der Quantenmechanik.

Als nächstes untersuchen wir das Verhalten von  $U(y, x)$  unter Eichtransformationen und erwarten mit (2.6) und (2.18),

$$\begin{aligned} \psi(y) = U(y, x)\psi(x) &\Rightarrow \Omega\psi(y) = \Omega U(y, x)\Omega\psi(x) \\ &\Rightarrow \Omega(y)\psi(y) = \Omega U(y, x)\Omega(x)\psi(x), \end{aligned}$$

das folgende Transformationsverhalten:

$$\Omega U(y, x) = \Omega(y)U(y, x)\Omega^\dagger(x). \quad (2.21)$$

Um (2.21) zu beweisen, zerlegen wir den Pfad  $\mathcal{C}$  in infinitesimale Segmente [58]:

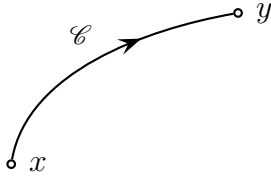
$$U(y, x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=0}^N U(z_i, z_i - dz_i) \quad (2.22a)$$

mit

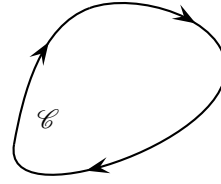
$$z_0 = y, \quad z_{i+1} = z_i - dz_i, \quad z_N - dz_N = x. \quad (2.22b)$$

In den infinitesimalen Paralleltransportern entwickeln wir das Exponential und setzen (2.7) ein:

$$\begin{aligned} \Omega U(z, z - dz) &= 1 - ig \Omega A_\mu(z) dz^\mu \\ &= 1 - ig (\Omega(z) A_\mu(z) \Omega^\dagger(z) + \Omega(z) (\partial_\mu \Omega^\dagger(z)) dz^\mu) \\ &= \Omega(z) (\Omega^\dagger(z) - \partial_\mu \Omega^\dagger(z) dz^\mu - ig A_\mu(z) \Omega^\dagger(z) dz^\mu) \\ &= \Omega(z) (1 - ig A_\mu(z) dz^\mu) \Omega^\dagger(z - dz) + \mathcal{O}(dz^2) \\ &= \Omega(z) U(z, z - dz) \Omega^\dagger(z - dz). \end{aligned} \quad (2.23)$$



(a) Der SCHWINGER-String wird zur Beschreibung eichinvarianter Zwei-Quark-Zustände genutzt [39].



(b) Der WILSON-Loop ist in der quantisierten Theorie die allgemeinste eichinvariante Observable in Abwesenheit von Fermionfeldern [63].

Abbildung 2.1.: Der Paralleltransporter erlaubt die Bildung eichinvarianter Größen.

Der Vergleich mit (2.22) zeigt, dass sich alle  $\Omega(x_i)$  bis auf das erste und letzte wegheben und somit (2.21) stehen bleibt.

Eine erste Anwendung für den Paralleltransporter  $U(y, x)$  ist die Bildung eichinvarianter Bilinearformen (vgl. Abb. 2.1(a)) in den Fermionfeldern [39], wie sie bei der Beschreibung von Zwei-Quark-Zuständen in der quantisierten Theorie auftreten:

$$\Gamma(y, x) \stackrel{\text{df.}}{=} \bar{\psi}(y)U(y, x)\psi(x) \quad (2.24)$$

Mit (2.6) und (2.21) ist dies offensichtlich eichinvariant und damit (im Prinzip) observabel. Die zweite wichtige Klasse von Operatoren bilden die WILSON-Loops (vgl. Abb. 2.1(b))

$$\text{tr } W(\mathcal{C}) \stackrel{\text{df.}}{=} \text{tr} \exp \left\{ -ig \oint_{\mathcal{C}} A_{\mu} dz^{\mu} \right\}, \quad (2.25)$$

die ebenfalls eichinvariant sind und Paralleltransportern entlang geschlossener Kurven entsprechen<sup>7</sup>.

## 2.3. Pfadintegral und Gitterregularisierung

### 2.3.1. Skalares Feld

Eine elegante Methode eine Theorie zu quantisieren, ist durch das Funktionalintegral gegeben, auf das wir im Folgenden am Beispiel des skalaren Feldes kurz eingehen wollen. Das Funktionalintegral wird in der Feldtheorie als "Summe" über

<sup>7</sup>Die Eichinvarianz folgt dabei aus (2.21) und der Tatsache das unter der Spur in (2.25) zyklisch getauscht werden darf, also  $\Omega U_{\mathcal{C}}(x, x) = \Omega(x)U_{\mathcal{C}}(x, x)\Omega^{\dagger}(x)$ .

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

alle klassischen Felder definiert, wobei jede Feldkonfiguration mit einer Phase gewichtet wird:

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi e^{iS[\varphi]}, \quad S[\varphi] = \int dt \int d^3x \mathcal{L}[\varphi]. \quad (2.26)$$

Die zeitgeordneten GREEN-Funktionen der Theorie können mit Hilfe des Funktionalintegrals berechnet werden:

$$G(x_1, \dots, x_n) \stackrel{\text{df.}}{=} \langle \Omega | \mathcal{T} \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n) | \Omega \rangle \quad (2.27a)$$

$$= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\varphi e^{iS[\varphi]} \varphi(x_1) \dots \varphi(x_n). \quad (2.27b)$$

Ihre Kenntnis erlaubt es, alle Informationen der Theorie, z.B. die S-Matrixelemente, zu rekonstruieren. In (2.27a) bezeichnen wir mit  $|\Omega\rangle$  den Grundzustand und mit  $\mathcal{T}$  den Zeitordnungsoperator. Nach (2.27b) kann in diesem Zugang insbesondere auf eine spezielle HILBERT-Raum-Darstellung der Operatoren verzichtet werden.

Im Hinblick auf die im Anschluss zu besprechende Gitterregularisierung ist es nützlich, die Theorie zur imaginären oder EUKLIDISCHEN Zeit fortzusetzen, was durch eine WICK-Rotation realisiert wird:

$$t \rightarrow -i\tau, \quad iS \rightarrow -S_E. \quad (2.28)$$

Im Fall des freien skalaren Feldes ist  $S_E$  durch

$$S_E = \int d\tau \int d^3x \frac{1}{2} \left( (\partial_\tau \varphi)^2 + (\nabla \varphi)^2 + m^2 \varphi^2 \right), \quad S_E \geq 0 \quad (2.29)$$

gegeben und die im MINKOWSKI-Raum stark oszillierende Phase  $e^{iS}$  geht in einen beschränkten Maßfaktor  $e^{-S_E}$  über, der Feldkonfigurationen mit großer (EUKLIDISCHER) Wirkung exponentiell unterdrückt. Der durch (2.28) gegebenen EUKLIDISCHEN Theorie wird ebenfalls ein Funktionalintegral zugeordnet:

$$\mathcal{Z}_E = \int \mathcal{D}\varphi e^{-S_E}. \quad (2.30)$$

Das Funktionalintegral (2.30) verfügt dabei sowohl analytisch als auch für die numerische Simulation im Vergleich zur ursprünglichen Theorie über große Vorteile<sup>8</sup>. Wir werden von nun an ausschließlich diese Feldtheorien betrachten und einen expliziten Bezeichner "E" nicht länger notieren.

---

<sup>8</sup>Zum einen gelingt es bisher nur für diesen Fall auf den unendlich dimensionalen Funktionenräumen der Felder ein Maß  $\mathcal{D}\varphi$  einzuführen. Zum anderen ist es die damit einhergehende statistische Interpretation, die die Anwendung von MONTE-CARLO-Methoden möglich macht. Auf den ersten Punkt gehen wir nicht weiter ein, den zweiten werden wir in Kapitel 4.1 ausführlicher darstellen.

Auch das Funktionalintegral (2.30) ist noch nicht ausreichend definiert, so dass wir uns im nächsten Schritt einer möglichen Regularisierung zuwenden wollen. Darunter wird eine Vorschrift verstanden, die auftretende Divergenzen in Abhängigkeit eines 'cut-offs'  $\Lambda$  formalisiert und es im Sinne eines zunächst "naiven" Grenzprozesses erlaubt, die ursprüngliche Form der Theorie zurückzugewinnen. Die eigentliche Bedeutung dieser Prozedur besteht jedoch darin, während des Grenzprozesses auch die "nackten" Parameter der Theorie abzuändern, so dass am Ende zunächst divergierende Größen endlich werden. Dieses umfangreiche bis heute nicht vollständig verstandene Programm wird allgemein als Renormierung bezeichnet und die vorausgehende Regularisierung ist in diesem Rahmen für die Klassifizierung und Untersuchung der auftretenden Divergenzen von Bedeutung. Eine mögliche Vorgehensweise besteht darin, das Raumzeit-Kontinuum – was die auf ihm definierten Felder mit unendlich vielen Freiheitsgrade ausstattet – selbst zu regularisieren, indem man dieses mit einem hyperkubischen Gitter  $\Lambda$  der Gitterkonstanten  $a$  ausfüllt. Die Felder werden zu Funktionen auf diesen Gitterpunkten reduziert, Ableitungen gehen in Differenzen und Integrale in diskrete Summen über:

$$\varphi(x) \rightarrow \varphi_x, \quad \partial_\mu \varphi(x) \rightarrow \frac{1}{a} (\varphi_x - \varphi_{x+a\hat{\mu}}), \quad \int \varphi(x) d^4x \rightarrow a^4 \sum_x \varphi_x. \quad (2.31)$$

In (2.31) wurden dabei sämtliche Diskretisierungsdetails unberücksichtigt gelassen<sup>9</sup>.

Die Freiheitsgrade der Theorie werden damit abzählbar und im Falle eines endlichen Gitters  $\Lambda$  mit Volumen  $V = |\Lambda|a^4$  ebenfalls endlich. Das Funktionalmaß  $\mathcal{D}\varphi$  als "Summe über alle Feldkonfigurationen" wird zu

$$\mathcal{D}\varphi = \prod_{x \in \Lambda} d\varphi_x \quad (2.32a)$$

---

<sup>9</sup>In Hinblick auf den Kontinuumsimes ist dies legitim, da dieser von den Details der Regularisierung nicht abhängen darf. Für konkrete Gitterrechnungen kann es in der Tat einen Unterschied machen, ob man z.B. mit einer *Links-*, *Rechts-* oder *symmetrischen* Ableitung arbeitet. Ein gravierender Unterschied zur Kontinuumstheorie fällt trotzdem sofort auf: Die Brechung der LORENTZ-Invarianz auf eine diskrete Untergruppe. Tatsächlich werden auf dem Gitter EUKLIDISCHE Feldtheorien betrachtet. Für diese entspricht der LORENTZ-Gruppe die Gruppe der EUKLIDISCHEN Rotationen  $O(d)$ , von der nur die endlichen Drehungen, für die das Gitter auf sich selbst abgebildet wird, weiterhin Symmetrien bleiben. Für die bereits besprochenen Eichsymmetrien stellt sich heraus, dass diese in ihrer Gesamtheit in die Gitterformulierung übertragen werden können (vgl. Kapitel 2.3.2).

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

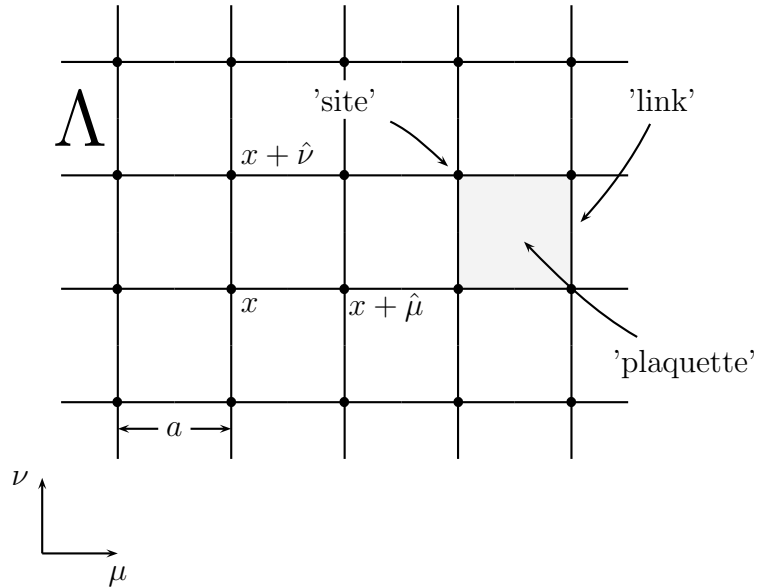


Abbildung 2.2.: Gitterregularisierung der Kontinuumstheorie: Die Vektoren der Länge  $a$  in Koordinatenrichtung  $\mu$  werden mit  $\hat{\mu} = ae_\mu$  bezeichnet.

und das Funktionalintegral (2.30) schließlich zu

$$\mathcal{Z} = \prod_{x \in \Lambda} \int d\varphi_x e^{-S_E[\varphi]}. \quad (2.32b)$$

Der Anschluss an die Kontinuumsphysik geschieht im Limes  $a \rightarrow 0$  und  $V \rightarrow \infty$  und ist in der quantisierten Theorie, wie bereits angedeutet i.Allg. auf Renormierungsmethoden und Universalitätsargumente angewiesen.

Mit (2.32b) haben wir zunächst einen wohldefinierten Ausdruck für (2.30) erhalten, der für computergestützte MONTE-CARLO-Methoden sehr gut geeignet ist und den wir nun auf die Eichtheorien übertragen wollen.

### 2.3.2. Eichtheorie

#### Differentialformen auf dem Gitter

Die hier betrachtete Formulierung der gitterregularisierten Wirkung einer Eichtheorie stammt von K.G. WILSON [63]. Zum besseren Verständnis der darin auftauchenden Größen gehen wir zunächst auf weitere im Zusammenhang mit der Diskretisierung stehende Aspekte ein. Eichfeld  $A_\mu$  und Feldstärke  $F_{\mu\nu}$  sind von ihrer geometrischen Natur her die Komponenten von 1- resp. 2-Formen, die entlang

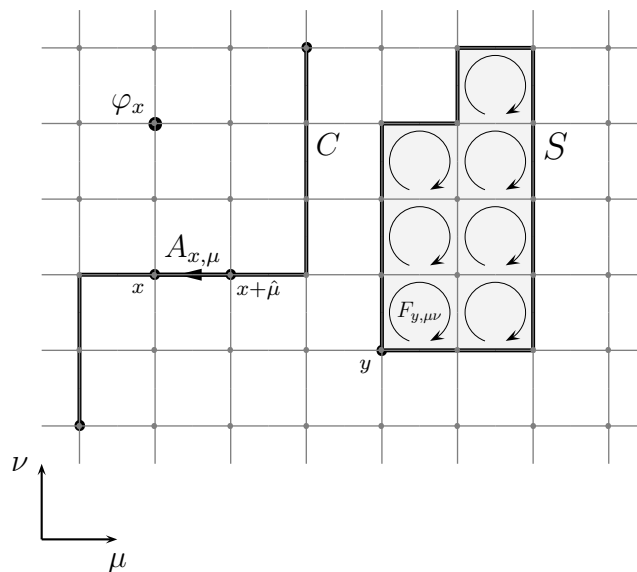


Abbildung 2.3.: Funktionen (0-Formen) sind auf Gitterpunkten, 1-Formen auf 'links' und 2-Formen auf 'plaquettes' definiert. Die 'links' und 'plaquettes' tragen eine Orientierung: Richtung bzw. Umlaufsinn.

von Wegen bzw über Flächen integriert werden können. Es ist daher von Nutzen, die im vorigen Abschnitt eingeführte Diskretisierung von Funktionen auf Differentialformen beliebigen Grades auszudehnen<sup>10</sup>. Die natürlichsten Wege in einem Gitter sind die Verbindungen zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten entlang der Koordinatenachsen. Sie sind auch die kürzesten realisierbaren Wege, so dass es natürlich erscheint, in einer diskretisierten Theorie 1-Formen als Funktionen auf diesen Verbindungen zu definieren. Allgemeinere Wege können aus diesen 'links' zusammengesetzt und Wegintegrale durch diskrete Summen ausgedrückt werden. Analog sind 2-Formen als Funktionen auf den kleinsten realisierbaren Flächen, den 'plaquettes', und Flächenintegrale als Summe über eine gewisse Anzahl derselben gegeben. Tabelle 2.1 fasst die Überlegungen zusammen.

<sup>10</sup>Im Sinne der Mathematik entspricht dies Fragestellungen der algebraischen Topologie, genauer der Frage nach der Homologie einer gegebenen Mannigfaltigkeit [37, 64].

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

Objekt	Kontinuum	Gitter
Funktion	$\varphi(x)$	$\varphi_x$
1-Form	$A_\mu(x)dz^\mu$	$A_{x,\mu}$ oder $A_l$
2-Form	$F_{\mu\nu}(x)d\sigma^{\mu\nu}$	$F_{x,\mu\nu}$ oder $F_p$
Integral	$\int \varphi(x)d^d x$	$a^d \sum_x \phi_x$
Wegintegral	$\int_{\mathcal{C}} A_\mu dz^\mu$	$a \sum_{l \in \mathcal{C}} A_l$
Flächenintegral	$\oint_{\Sigma} F_{\mu\nu} d\sigma^{\mu\nu}$	$a^2 \sum_{p \in \mathcal{S}} F_p$

Tabelle 2.1.: Benutzte Notation und Diskretisierungsvorschrift beim Übergang vom Kontinuum zum Gitter

### Gitterfeld-Wirkung

Um das Funktionalintegral einer Eichtheorie

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}A_\mu e^{-S_{\text{YM}}[A_\mu]} \quad (2.33a)$$

$$S_{\text{YM}} = \frac{1}{4} \int \sum_{\mu,\nu} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} d^4 x \quad (2.33b)$$

zu diskretisieren, erweist es sich als vorteilhaft, anstatt der in (2.33a) eingehenden Eichpotentiale  $A_\mu$  die Paralleltransporter  $U(y, x)$  zu benutzen. Der Ausdruck für die Gitterwirkung wird erwartungsgemäß eine von (2.33b) stark abweichende Gestalt haben, deren endgültige Form (2.44a) wir im Folgenden motivieren werden<sup>11</sup>. Dazu erinnern wir an (2.20b) und notieren für den Paralleltransport zwischen zwei benachbarten 'sites' (im Kontinuum)

$$\begin{aligned} U(x, x + ae_\mu) &= \exp \left\{ -ig \int_{x+ae_\mu}^x A_\mu dz^\mu \right\} \\ &= \exp \{ a ig A_\mu(\tilde{x}) \} \approx \exp \{ a ig A_\mu(x) \} \\ &\approx 1 + a ig A_\mu(x). \end{aligned} \quad (2.34)$$

<sup>11</sup>Unsere Ableitung orientiert sich dabei stark an [58].



In der zweiten Zeile wurde vom Mittelwertsatz Gebrauch gemacht und ferner angenommen, dass sich das Eichfeld  $A_\mu$  im betrachteten (sehr kleinen) Intervall kaum ändert. Wir definieren den diskretisierten Paralleltransporter:

$$U_{x,x+ae_\mu} \equiv U_{x,\mu} \stackrel{\text{df.}}{=} 1 + aigA_{x,\mu}. \quad (2.35)$$

Der in der obigen Definition verwandte diskrete Ausdruck des Eichpotentials

$$A_{x,\mu} = \frac{i}{ag}(1 - U_{x,\mu}) \quad (2.36)$$

besitzt mit (2.34) den richtigen Kontinuumsimes. Das Transformationsverhalten von  $U_{x,\mu}$  kann mit (2.21) ebenfalls aus (2.34) abgelesen werden:

$$\Omega U_{x,\mu} = \Omega_x U_{x,\mu} \Omega_{x+\hat{\mu}}^\dagger. \quad (2.37)$$

Eine Möglichkeit die kovariante Ableitung zu diskretisieren ist mit

$$D_\mu \Phi(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon} (U(x, x + \varepsilon e_\mu) \Phi(x + \varepsilon e_\mu) - \Phi(x)) \quad (2.38)$$

durch

$$D_\mu \Phi_x = \frac{1}{a} (U_{x,\mu} \Phi_{x+\hat{\mu}} - \Phi_x) \quad (2.39)$$

gegeben<sup>12</sup>. Um einen Ausdruck für die Feldstärke zu erhalten, gehen wir von Definition (2.13) aus:

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu} &= D_\mu A_\nu - D_\nu A_\mu \\ F_{x,\mu\nu} &= \frac{1}{a} (U_{x,\mu} A_{x+\hat{\mu},\nu} - A_{x,\nu} - (\mu \leftrightarrow \nu)) \\ &= \frac{i}{a^2 g} (U_{x,\mu} (1 - U_{x+\hat{\mu},\nu}) - (1 - U_{x,\nu}) - (\mu \leftrightarrow \nu)) \\ &= \frac{-i}{a^2 g} (U_{x,\mu} U_{x+\hat{\mu},\nu} - U_{x,\nu} U_{x+\hat{\nu},\mu}). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Die diskretisierte Feldstärke transformiert demnach folgendermaßen:

$$\Omega F_{x,\mu\nu} = \Omega_x F_{x,\mu\nu} \Omega_{x+\hat{\mu}+\hat{\nu}}, \quad (2.41)$$

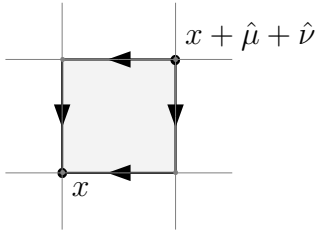
und eine eichinvariante Größe ist wiederum die Spur über das Quadrat der Feldstärke<sup>13</sup>:

$$\begin{aligned} \text{tr } F_{x,\mu\nu} F_{x,\mu\nu}^\dagger &= \frac{1}{a^4 g^2} \text{tr} (2 \cdot \mathbb{1} - 2\Re(U_{x+\hat{\mu},\nu} U_{x,\mu} U_{x,\nu}^\dagger U_{x+\hat{\nu},\mu}^\dagger)) \\ &= \frac{2}{a^4 g^2} \text{tr} (\mathbb{1} - \Re \square_{x,\mu\nu}). \end{aligned} \quad (2.42)$$

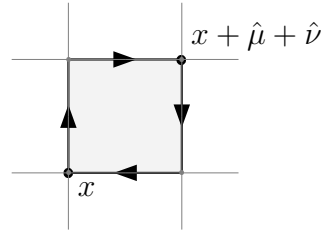
<sup>12</sup>Dieser Ausdruck führt mit (2.34) gerade auf (2.2).

<sup>13</sup>Über doppelt auftretende Indizes wird dabei nicht summiert.

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur



(a)  $F_{x,\mu\nu}$  misst als Operator die Differenz zwischen den eingezeichneten Paralleltransportern, wie es auch in (2.9) zum Ausdruck kommt.



(b) Das Quadrat der Feldstärke entspricht einem WILSON-Loop und wird im Text mit  $\square_{x,\mu\nu}$  bezeichnet.

Die diskretisierte Gitterwirkung ergibt sich schließlich aus der EUKLIDISCHEN YANG-MILLS-Wirkung <sup>14</sup>

$$S_{\text{YM}} = \frac{1}{4} \int d^4x \sum_{\mu,\nu} \text{tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (2.43)$$

durch den bereits besprochenen Übergang vom Integral zur diskreten Summe

$$\frac{1}{4} \int F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \rightarrow a^4 \sum_x \text{tr} F_{x,\mu\nu} F_{x,\mu\nu}^\dagger$$

und führt nach einer kurzen Rechnung auf den folgenden Ausdruck:

$$S_{\text{W}} = \sum_{\square \in \Lambda} \beta_g \left( 1 - \frac{1}{N_c} \Re \text{tr} \square_{x,\mu\nu} \right) \quad (2.44a)$$

$$\beta_g = \frac{N_c}{g^2}. \quad (2.44b)$$

Gleichung (2.44a) ist die zu Beginn dieses Abschnittes erwähnte, erstmals von WILSON [63] vorgeschlagene Wirkung. Die jüngere Forschung hat seitdem eine Vielzahl von Erweiterungen hervorgebracht, die z.B. neben der hier benutzten fundamentalen auch weitere Darstellungen berücksichtigen [33]. Ein Vergleich von

<sup>14</sup>Unter Ausnutzung der Antisymmetrie von  $F_{\mu\nu}$  summieren wir dabei über jede 'plaquette' nur einmal gemäß

$$\sum_{\square} P_{\mu\nu}^2 = \sum_x \sum_{\mu < \nu} P_{\mu\nu}^2 = \frac{1}{2} \sum_x \sum_{\mu} \sum_{\nu} P_{\mu\nu}^2 \quad \text{für } P_{\mu\nu} = \pm P_{\nu\mu}.$$

WILSON-Wirkung und einer durch Hinzunahme der adjungierten Darstellung verbesserten Wirkung findet sich in [38]. Eine andere und häufig in Zusammenhang mit der Simulation von chiralen Fermionen auftauchende Verbesserung besteht in der Hinzunahme größerer Plaquetten [18], etwa vom Format  $1 \times 2$  oder  $2 \times 2$ , welche die Gitterartefakte reduzieren. Die gebräuchlichste Wirkung unter diesen 'improved 'WILSON actions' geht auf SYMANZIK [61] zurück. In [17, 47] finden sich weitere Vorschläge, welche in [23, 44] miteinander verglichen werden. In dieser Arbeit beschränken wir uns auf die WILSON-Wirkung (2.44a), da zum einen keine dynamischen Fermionen betrachtet werden sollen und daher kaum ein Nutzen aus den verbesserten Wirkungen zu ziehen ist. Zum anderen sind die für die WILSON-Wirkung existierenden MONTE-CARLO-Methoden erprobt bzw. am einfachsten zu implementieren.

### Funktionalintegral

Im Funktionalintegral  $\mathcal{Z}$  (2.30) über alle Feldkonfigurationen zu integrieren, heißt mit (2.44a) die gruppenwertigen  $U_{x,\mu}$  auf den 'links' des Gitters mit einem zunächst noch unbestimmten Maß  $d\mu(U)$  zu integrieren:

$$\mathcal{Z} = \prod_{x,\mu} \int d\mu(U_{x,\mu}) e^{-S_W[\mathcal{U}]} . \quad (2.45)$$

In der im Kontinuum benutzten Form des Funktionalintegrals (2.33a) wird über die reellen Komponenten der Eichfelder<sup>15</sup>  $A_\mu(x) = A_\mu^a(x)T_a$  integriert. Da in diesen zunächst auch alle eichäquivalenten Konfigurationen enthalten sind und dies zu nicht kontrollierbaren Divergenzen führt, müssen – wie aus der Literatur bekannt – weitere eichfixierende Terme zur Wirkung hinzugenommen werden (FADEEV-POPOV). Topologisch gesehen kommen diese Divergenzen von der Nichtkompaktheit der LIE-Algebra, entstehen aber für kompakte Eichgruppen nicht auf dem Gitter, so dass eichfixierende Terme in dieser Formulierung nicht gebraucht werden [58]. Jedoch wird auf der (nichtlinearen) Eichgruppe ebenfalls ein Maß benötigt, dass eichinvariant, d.h. invariant unter (2.37) ist:

$$U_{x,\mu} \rightarrow \Omega_x U_{x,\mu} \Omega_{x+\hat{\mu}}^\dagger \quad d\mu(\Omega_x U_{x,\mu} \Omega_{x+\hat{\mu}}^\dagger) \stackrel{!}{=} d\mu(U_{x,\mu}) .$$

---

<sup>15</sup>Wir haben bisher über die Gestalt der Matrizen  $A_\mu$  nichts gesagt. Aus der Literatur ist aber bekannt, dass das Eichfeld Werte in der LIE-Algebra  $\mathfrak{g}$  der Eichgruppe nimmt und die LIE-Algebra ein reeller Vektorraum ist, dessen Basis häufig mit  $T_a$  bezeichnet wird.

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

An jedem 'link' entspricht dies einer gleichzeitigen Links- und Rechtsinvarianz des Maßes  $d\mu$ . Für kompakte LIE-Gruppen erfüllt das HAAR-Maß diese Anforderungen [36]:

$$d\mu_{\text{H}}(g) = d\mu_{\text{H}}(hgf),$$

also

$$\int_G d\mu_{\text{H}}(g)\varphi(g) = \int_G d\mu_{\text{H}}(g)\varphi(hgf); \quad f, h \text{ fest.}$$

In Bezug auf (2.45) wird daher stets das HAAR-Maß gemeint sein. Damit haben wir für reine Eichtheorien ein gitterregularisiertes Funktionalintegral (2.45) gefunden.

## 2.4. Feldtheorie bei endlicher Temperatur

### 2.4.1. Quantenmechanik

Um die einzelnen Schritte, die zur Formulierung einer Feldtheorie bei endlichen Temperaturen führen, transparenter zu gestalten, beginnen wir mit einem einfachen quantenmechanischen System. Unser Ziel ist ein Ausdruck für die Zustandssumme, die als Spur des statistischen Operators definiert ist:

$$\mathcal{Z} = \text{tr } \varrho, \quad \varrho = e^{-\beta\hat{H}} \quad \text{und} \quad \beta = \frac{1}{T}. \quad (2.46)$$

In (2.46) haben wir dabei wie üblich den HAMILTON-Operator mit  $\hat{H}$ , die Temperatur mit  $T$  und die inverse Temperatur mit  $\beta$  ( $k_{\text{B}} = 1$ ) bezeichnet. Der Ausdruck für  $\varrho$  stimmt dabei streng genommen nur im thermodynamischen Gleichgewicht, so dass wir im Folgenden auch nur an den Gleichgewichtserwartungswerten von Observablen

$$\langle \mathcal{A} \rangle \stackrel{\text{df.}}{=} \frac{\text{tr } \varrho \mathcal{A}}{\text{tr } \varrho} \quad (2.47)$$

interessiert sein werden. Für die Auswertung der Spur in (2.46) auszuwerten wir in die Ortsdarstellung

$$\mathcal{Z} = \int \langle q | e^{-\beta\hat{H}} | q \rangle dq, \quad (2.48)$$

wodurch das Problem auf die Bestimmung der Diagonalmatrixelemente des statistischen Operators reduziert wird. Um für diese einen Ausdruck zu erhalten,

erinnern wir an die Übergangsamplitude vom Zustand  $|q, t_1 = 0\rangle$  in den Zustand  $|q', t_2 = t\rangle$ , die mit Hilfe des Pfadintegrals durch

$$\langle q' | e^{-i\hat{H}t} | q \rangle = \int_{\substack{\tilde{q}(0)=q \\ \tilde{q}(t)=q'}} \mathcal{D}\tilde{q} e^{iS[q]}, \quad S[q] = \int_0^t L[q, \dot{q}, t'] dt' \quad (2.49)$$

gegeben ist. Dieser Ausdruck kann ebenfalls für positiv definite HAMILTON-Operatoren analytisch zu imaginären Zeiten (vgl. (2.28)) fortgesetzt werden:

$$\langle q' | e^{-\hat{H}\tau} | q \rangle = \int_{\substack{\tilde{q}(0)=q \\ \tilde{q}(\tau)=q'}} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-S_E[\tilde{q}]}. \quad (2.50)$$

Für  $q' = q$  und  $\tau = \beta$  ist dies der gesuchte Ausdruck (2.48). Die Randbedingungen der rechten Seite bedeuten, dass im Pfadintegral nur über die  $\beta$ -periodischen Wege  $\tilde{q}(\tau) = \tilde{q}(\tau + \beta)$  integriert wird, für die zusätzlich  $\tilde{q}(0) = \tilde{q}(\beta) = q$  gilt. Wir setzen (2.50) in die Zustandssumme ein:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int dq \int_{\tilde{q}(0)=\tilde{q}(\beta)=q} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-S_E[\tilde{q}]} \\ &= \int_{pRB} \mathcal{D}q e^{-S_E[q]}, \end{aligned} \quad (2.51a)$$

wobei  $pRB$  jetzt darauf hinweist, *alle*  $\beta$ -periodischen Wege aufzusummieren. In der Wirkung wird dadurch im Gegensatz zu (2.30) in der imaginären Zeit  $\tau$  nur noch über ein endliches Intervall  $[0, \beta]$  anstatt über die ganze reelle Achse  $\mathbb{R}$  integriert:

$$S_E[q] = \int_0^\beta L_E[q, \dot{q}, \tau] d\tau. \quad (2.51b)$$

Abgesehen von diesem Unterschied und den periodischen Randbedingungen entspricht (2.51a) dem Funktionalintegral aus Kapitel 2.3 für eine 0-dimensionale Feldtheorie, und im Limes  $T \rightarrow 0$ , also  $\beta \rightarrow \infty$ , kann man (2.26) zurückgewinnen. Beide Ausdrücke werden daher als Zustandssumme bezeichnet.

Das Ergebnis (2.51a) kann unmittelbar auf den Fall der skalaren Feldtheorie verallgemeinert werden, wobei EUKLIDISCHE Wirkung und Zustandssumme durch

$$S_E = \int_0^\beta d\tau \int \mathcal{L}(\varphi, \partial_\mu \varphi, \tau) d^3x \quad (2.52a)$$

$$(2.52b)$$

und

$$\mathcal{Z}_\beta = \int_{pRB} \mathcal{D}\varphi e^{-S_E[\varphi]}, \quad (2.52c)$$

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

gegeben sind. Die Periodizitätsbedingung an das Feld  $\varphi$  lautet nunmehr ausgeschrieben

$$\varphi(0, \vec{x}) = \varphi(\beta, \vec{x}). \quad (2.52d)$$

Thermodynamische Erwartungswerte (2.47) können schließlich aus

$$\langle A \rangle_\beta = \frac{\int_{pRB} \mathcal{D}\varphi A e^{-S_E}}{\int_{pRB} \mathcal{D}\varphi e^{-S_E}} \quad (2.53)$$

berechnet werden, was ebenfalls große Ähnlichkeit mit (2.27b) hat.

### 2.4.2. Eichfeldtheorie

Die Zustandssumme für Eichtheorien bei endlicher Temperatur im Kontinuum wird üblicherweise in WEYL- (oder temporaler) Eichung diskutiert. Am Ende der Konstruktion können jedoch – wie im Fall des reellen skalaren Feldes – periodische Randbedingungen angenommen werden [35], so dass die Zustandssumme erneut die Gestalt

$$\mathcal{Z}_\beta = \int_{pRB} \mathcal{D}A_\mu e^{-S_{\text{YM}}[A_\mu]} \quad (2.54a)$$

annimmt. Die EUKLIDISCHE Wirkung ist durch

$$S_{\text{YM}} = -\frac{1}{4} \int_0^\beta d\tau \int \text{tr} \sum_{\mu, \nu} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} d^3x \quad (2.54b)$$

gegeben und die Periodizitätsbedingung an das Eichfeld lautet

$$A_\mu(0, \vec{x}) = A_\mu(\beta, \vec{x}). \quad (2.54c)$$

Gleichung (2.54) lässt sich unmittelbar in die Gitterformulierung übertragen:

$$\mathcal{Z}_\beta = \prod_{\tau=0}^{N_\tau} \prod_{\vec{x}, \mu} \int dU_{(\tau, \vec{x}), \mu} e^{-S_{\text{W}}[\mathcal{U}]}, \quad (2.55a)$$

wobei die WILSON-Wirkung (2.52a) in folgender Weise modifiziert wird<sup>16</sup>:

$$S_{\text{W}} = a_\tau \sum_{\tau=0}^{N_\tau} a_s^3 \sum_{\vec{x}, \mu} \text{tr} F_{x, \mu\nu} F_{x, \mu\nu}^\dagger. \quad (2.55b)$$

<sup>16</sup>Zur Deutlichkeit haben wir die Gitterabstände in Zeit-  $a_\tau$  und Raumrichtung  $a_s$  unterschieden.

Durch Vergleich von (2.54b) mit (2.55b) erhalten wir für die inverse Temperatur

$$\beta = a_\tau N_\tau, \quad (2.55c)$$

und die WILSON-Wirkung reduziert sich wieder auf die Summe über die 'plaquettes' (vgl.(2.44a)). Unglücklicherweise werden in der Literatur sowohl WILSON-Kopplung als inverse Temperatur mit einem  $\beta$  bezeichnet. Wir folgen der üblichen Notation, versehen aber die WILSON-Kopplung mit einem tiefgestellten  $g$ , um anzudeuten, dass es eine Funktion der Kontinuumskopplung (2.44a) ist, also  $\beta_g = N_c/g^2$ .

Die Periodizitätsbedingung (2.54c) übersetzt sich schließlich in periodische Randbedingungen der 'link'-Variablen in der EUKLIDISCHEN Zeitrichtung,

$$U_{(0,\vec{x}),\mu} = U_{(aN_\tau,\vec{x}),\mu}, \quad (2.55d)$$

welche zusammen mit der in dieser Richtung endlichen Ausdehnung des Gitters<sup>17</sup> den Unterschied zum früheren für  $T = 0$  gefundenen Ausdruck (2.45) ausmachen.

### 2.4.3. Zusammenhang zwischen $\beta$ und $\beta_g$

Um in Computersimulationen mit endlichen Temperaturen arbeiten zu können, benötigen wir eine endliche Ausdehnung des Gitters in der EUKLIDISCHEN Zeit und eine Einstellmöglichkeit der Temperatur. Die erste Forderung erscheint zunächst widersinnig, da in einem Computer grundsätzlich nur in *allen* Richtungen endliche Gitter simuliert werden können. Die zweite ist nicht minder problematisch, da wir außer der Dimensionierung des Gitters und der WILSON-Kopplung keine weiteren Parameter für eine Simulation zur Verfügung haben. In diesem Abschnitt werden wir aufzeigen, wie unter Ausnutzung spezieller Eigenschaften nicht ABELSCHER-Eichtheorien und Ergebnissen des Renormierungsprogrammes die gegebenen Parameter genügen, um die aufgeworfenen Fragen zu beantworten. Wir beginnen die Diskussion mit dem Einstellen der endlichen Temperatur und erinnern an (2.55c):

$$\beta = aN_\tau.$$

---

<sup>17</sup>Alle untersuchbaren Gitter sind in allen Richtungen endlich. Wenn wir die endliche Ausdehnung in EUKLIDISCHER Zeit betonen, heißt das, dass wir diese Richtung vom thermodynamischen Limes ausschließen. Praktisch wird dies durch eine deutlich kleinere Ausdehnung des Gitters in dieser Richtung (Faktor vier und mehr) realisiert. Wir kommen im nächsten Abschnitt noch einmal auf diesen Punkt zurück.

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

Die einfachste Möglichkeit die Temperatur zu variieren ist, bei gegebenem Gitterabstand  $a$  die Anzahl der Gitterpunkte in  $\tau$ -Richtung  $N_\tau$  zu ändern. Der Nachteil daran ist jedoch offensichtlich: Die inverse Temperatur kann nur in Einheiten von  $a$  geändert werden, was, wie zu vermuten ist und durch praktische Rechnungen bestätigt wird, viel zu grob ist, um etwas über die kritische Temperatur<sup>18</sup>  $\beta_c$  auszusagen oder den Phasenübergang selbst zu studieren.

Eine zweite Möglichkeit erlaubt es hingegen, die physikalische Länge des Gitterabstandes  $a$  zu ändern. Dazu wenden wir uns dem Kontinuumsliches der bisher betrachteten gitterregularisierten Theorie zu. Wie in der störungstheoretischen Behandlung treten hier Unendlichkeiten auf, die durch ein Laufen der in der LAGRANGE-Dichte gegebenen Kopplungen kompensiert werden müssen. Wir wollen dies am Beispiel des Quark-Antiquark-Potentials  $V(R)$  verdeutlichen: Auf dem Gitter ist das Potential durch eine dimensionsbehaftete Größe und einen numerischen Faktor gegeben. Da, wie bereits erwähnt, die einzige dimensionsbehaftete Größe auf dem Gitter der Gitterabstand  $a$  ist, folgt unter Beachtung der Dimension des Potentials im Kontinuum  $[V] = \text{Masse} = \text{Länge}^{-1}$ :

$$V(a, g_0, R) = \frac{1}{a} \tilde{V} \left( g_0, \frac{R}{a} \right). \quad (2.56)$$

Ohne im Detail auf die Renormierungsgleichung eingehen zu wollen, ist aus (2.56) bereits klar, dass das Potential im Limes  $a \rightarrow 0$  nur dann gegen einen endlichen Wert streben kann, wenn die 'nackte' Kopplung  $g_0$  derart von  $a$  abhängt, dass sich alle auftretenden Divergenzen kompensieren:

$$V_{\text{phys}}(R) = \lim_{a \rightarrow 0} V(a, g_0(a), R). \quad (2.57)$$

Das für uns entscheidende Resultat ist, dass die notwendige funktionale Beziehung zwischen Gitterabstand und 'nackter' Kopplung genutzt werden kann, um den Gitterabstand als Funktion der Kopplung auszudrücken<sup>19</sup> So findet man

$$a(g_0) \sim e^{-\frac{1}{g_0^2}} \quad (2.58)$$

bzw. für die in der Gitterformulierung verwendete WILSON-Kopplung  $\beta_g$

$$a(\beta_g) \sim e^{-\beta_g}. \quad (2.59)$$

---

<sup>18</sup>Wir werden in Zukunft stets, wann immer dies aus dem Kontext hervorgeht, von der Temperatur sprechen, gleichgültig ob im jeweiligen Fall die physikalische Temperatur oder das Inverse gemeint ist.

<sup>19</sup>Der angegebene Ausdruck kann aus perturbativen Ergebnissen gewonnen werden. Dies wird möglich, da die YANG-MILLS-Theorien asymptotisch frei sind, d.h. die Kopplung  $g_0$  im Limes  $a \rightarrow 0$  ebenfalls verschwindet [56].



Die Relation (2.59) besagt, dass für wachsende  $\beta_g$  der Gitterabstand immer kleiner wird. Dies entspricht der gewünschten Skalentransformation, denn wir erhalten schließlich  $\beta = \beta(\beta_g)$ . Wir bemerken noch, dass eine additive Änderung von  $\beta_g$  lediglich eine Reskalierung der Temperaturskala ermöglicht, man also noch eine von außen vorgegebene Referenztemperatur benötigt. Eine physikalisch ausgezeichnete Temperatur ist die kritische Temperatur des Phasenübergangs, welche prinzipiell im Experiment bestimmt werden könnte<sup>20</sup>.

Damit kommen wir zur ersten zu Beginn aufgeworfenen Frage zurück. Wie gelingt es nur in EUKLIDISCHER Zeitrichtung eine endliche Ausdehnung des Gitters zu erhalten? Die Antwort kann auf das Nichtvorhandensein masseloser Moden in der Theorie zurückgeführt werden. Anders ausgedrückt: Alle Korrelationslängen  $\xi \sim 1/m$  sind endlich und wenn wir unter einem *unendlich* großen ein *genügend* großes Gitter verstehen wollen, so ist nach dieser Betrachtung ein Gitter gemeint, das groß gegenüber den auftretenden Korrelationslängen ist. Beträgt die temporale Ausdehnung des Gitters  $N_\tau$  nur noch einen Bruchteil der räumlichen Ausdehnung  $N_s$  und nähert sich der Größenordnung der Korrelationslängen, so 'spürt' das System die endliche Länge in temporaler Richtung und reagiert sensitiv auf eine durch  $\beta_g$  induzierte Skalenänderung, während die räumlichen Richtungen 'genügend' groß bleiben. Als Faustregel spricht man auf dem Gitter von endlichen Temperaturen ab einem Verhältnis von  $N_s/N_\tau \approx 4$ .

---

<sup>20</sup>Es gibt natürlich noch weitere physikalische Größen, die Referenzskalen setzen können und ferner experimentell bestimmt werden können.

## 2. Gitterfeldtheorien bei endlicher Temperatur

# 3. Inverse Monte-Carlo-Methode für effektive Wirkungen

In diesem Kapitel wenden wir uns der  $SU(2)$ -YANG-MILLS-Theorie bei endlicher Temperatur zu. Genauer interessieren wir uns für den Confinement/Deconfinement-Phasenübergang bei endlicher Temperatur und werden zunächst eine Observable auswählen, die als Ordnungsparameter für diesen fungiert. Wir werden sehen, dass mit dem als POLYAKOV-Loop bezeichneten Ordnungsparameter der Phasenübergang als spontane Brechung einer globalen Symmetrie verstanden werden kann. Da wir vorrangig am Confinement/Deconfinement-Phänomen interessiert sind, wird im Anschluss eine *effektive* Theorie für den POLYAKOV-Loop motiviert – die in ihrer Struktur einfacher als die YANG-MILLS-Theorie – ebenfalls in einer symmetrischen oder gebrochenen Phase existieren kann. Die Symmetrien der Ausgangstheorie werden die Möglichkeiten für eine *effektive* Wirkung einschränken, aber noch freie Parameter, die *effektiven* Kopplungen, offen lassen. Mit Hilfe weiterer Symmetriebetrachtungen zum Funktionalintegral, die das Aufstellen von SCHWINGER-DYSON-Gleichungen ermöglichen, kann schließlich eine Methode angegeben werden, diese *effektiven* Kopplungen in einem numerischen Verfahren zu bestimmen.

## 3.1. Der Polyakov-Loop als neuer Freiheitsgrad

Als Ausgangspunkt für alle weiteren Betrachtungen wählen wir den POLYAKOV-Loop, der im Kontinuum wie folgt definiert wird:

$$\mathfrak{P}(\vec{x}) \stackrel{\text{df.}}{=} \mathcal{P} \left( e^{\int_0^\beta d\tau iA_0(\vec{x},\tau)} \right). \quad (3.1a)$$

Zunächst entspricht (3.1a) damit einem SCHWINGER-String, der aber aufgrund des gewählten Weges (vgl. Abbildung 3.1) und der vorausgesetzten endlichen Temperatur sowie den Ausführungen des vorangegangenen Kapitels geschlossen und damit

### 3. Inverse Monte-Carlo-Methode für effektive Wirkungen

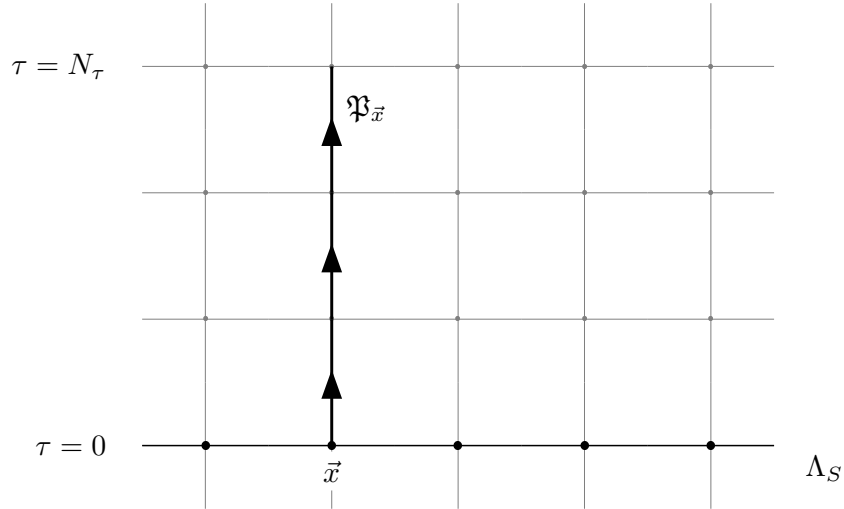


Abbildung 3.1.: Die effektive Theorie reduziert die Dimension der Theorie um eins. Hier und im Folgenden wird mit  $\Lambda_S$  das reduzierte räumliche Gitter bezeichnet, also  $\Lambda = \Lambda_S \times N_\tau$ .

ein spezieller WILSON-Loop<sup>1</sup> ist:

$$A_0(\tau) = A_0(\tau + \beta) \Rightarrow \int_0^\beta A_0(\tau) d\tau = \oint A_0(\tau) d\tau$$

In der Gitterformulierung wird aus (3.1a)

$$\mathfrak{P}_{\vec{x}} \stackrel{\text{df.}}{=} \prod_{\tau=1}^{N_t} U_{(\vec{x}, a\tau), 0} \quad (3.1b)$$

und wir werden beide Formulierungen verwenden.

Bevor eine weitere direkt mit dem POLYAKOV-Loop im Zusammenhang stehende Größe definiert werden soll, bestimmen wir die Transformationseigenschaften von (3.1a) bzw. (3.1b). Gleichung (2.54a) schränkt die möglichen Eichtransformationen  $\Omega(\vec{x}, \tau)$  derart ein, dass mit

$$A_\mu(\vec{x}, \tau) = A_\mu(\vec{x}, \tau + \beta) \quad (3.2a)$$

auch

$${}^\Omega A(\vec{x}, \tau) = {}^\Omega A_\mu(\vec{x}, \tau + \beta) \quad (3.2b)$$

<sup>1</sup>Speziell deshalb, weil er sich von dem in Kapitel 2.2 eingeführten WILSON-Loop topologisch unterscheidet. Die dort betrachteten Loops haben die Windungszahl Null, sind also kontrahierbar, während die Geschlossenheit des POLYAKOV-Loops mit Windungszahl Eins durch die Topologie  $S^1 \times \mathbb{R}^3$  gegeben ist[28].

gelten muss. Eine einfache Wahl fällt auf ebenfalls periodische Eichtransformationen:

$$\Omega(\vec{x}, \tau) = \Omega(\vec{x}, \tau + \beta) \quad (3.3a)$$

bzw.

$$\Omega_{\vec{x}, \tau} = \Omega_{\vec{x}, \tau + \beta}. \quad (3.3b)$$

Der transformierte POLYAKOV-Loop kann mit (3.1b) berechnet werden:

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_{\vec{x}} &= \Omega_{\vec{x}, 1} U_{\vec{x}, 1} \Omega_{\vec{x}, 2}^{-1} \Omega_{\vec{x}, 2} U_{\vec{x}, 2} \dots U_{\vec{x}, N_t} \Omega_{\vec{x}, N_t + 1}^{-1} \\ &= \Omega_{\vec{x}} \mathfrak{P}_{\vec{x}} \Omega_{\vec{x}}^{-1}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

wobei wir in der zweiten Zeile von (3.3b) Gebrauch machen und an den Eichtransformationen künftig die Zeitkoordinate unterdrücken<sup>2</sup>. Gleichung (3.4) entspricht der Konjugation von  $\mathfrak{P}_{\vec{x}}$  mit einem Gruppenelement, woraus folgt, dass eichinvariante Größen durch Produkte von Klassenfunktionen auf der Eichgruppe gegeben sind:

$$\mathcal{O}(\mathfrak{P}) = \prod_{\vec{x}} \mathcal{O}_{\vec{x}}(\mathfrak{P}_{\vec{x}}), \quad \mathcal{O}_{\vec{x}}(g) = \mathcal{O}_{\vec{x}}(hgh^{-1}). \quad (3.5)$$

Die einfachste Klassenfunktion einer Matrix ist ihre Spur, für welche wir einen neuen Bezeichner einführen:

$$L_{\vec{x}} \stackrel{\text{df.}}{=} \frac{1}{N_c} \text{tr} \mathfrak{P}_{\vec{x}}. \quad (3.6)$$

Unser Interesse an dieser Größe begründet sich damit, dass sie als ein Ordnungsparameter den Confinement/Deconfinement-Phasenübergang der Theorie anzeigt. Es kann gezeigt werden [28, 58], dass folgende Relation zwischen dem thermischen Erwartungswert des POLYAKOV-Loops<sup>3</sup>  $\langle L \rangle_{\beta}$  und der freien Energie eines statischen Quarks  $F_Q$  gilt:

$$\langle L \rangle_{\beta} \sim e^{-\beta F_Q}. \quad (3.7)$$

Verschwindet der Erwartungswert,  $\langle L \rangle = 0$ , ist mit (3.7) die freie Energie unendlich groß und es können keine isolierten Quarks auftreten (Confinement), während für nicht verschwindendes  $\langle L \rangle \neq 0$  freie Quarks (Deconfinement) realisierbar sind.

<sup>2</sup>Zunächst müsste in (3.4) statt  $\Omega_{\vec{x}}$  richtig  $\Omega_{\vec{x}, 1}$  geschrieben werden.

<sup>3</sup>Korrekt müsste man von der Spur des POLYAKOV-Loops sprechen. Da wir jedoch nur an eichinvarianten Observablen interessiert sind, bleibt die Sprachregelung bei direktem Bezug auf Erwartungswerte konsistent.

### 3. Inverse Monte-Carlo-Methode für effektive Wirkungen

Um den Phasenübergang besser zu verstehen, kehren wir zu (3.3) zurück und behaupten, dass unter Hinzunahme eines global gewählten Elementes aus dem Zentrum  $Z_N$  der Gruppe

$$\Omega(\vec{x}, \tau) = z \Omega(\vec{x}, \tau + \beta), \quad z \in Z_N \quad (3.8)$$

(3.2) immer noch erfüllt ist. Dazu betrachten wir erneut die Eichtransformation von  $A_\mu$ , die im Kontinuum durch (2.8) gegeben ist:

$${}^\Omega A_\mu(\vec{x}, \tau) = \Omega(\vec{x}, \tau) A_\mu(\vec{x}, \tau) \Omega^{-1}(\vec{x}, \tau) + i \Omega(\vec{x}, \tau) \partial_\mu \Omega^{-1}(\vec{x}, \tau). \quad (3.9)$$

Wir setzen (3.2a) und (3.8) in (3.9) ein und erhalten wegen  $z \in Z_N$  und  $\partial_\mu z = 0$

$$\begin{aligned} {}^\Omega A_\mu(\vec{x}, \tau + \beta) &= z \Omega(\vec{x}, \tau) A_\mu(\vec{x}, \tau) \Omega^{-1}(\vec{x}, \tau) z^{-1} + i z \Omega(\vec{x}, \tau) \partial_\mu \Omega^{-1}(\vec{x}, \tau) z^{-1} \\ &= {}^\Omega A_\mu(\vec{x}), \end{aligned} \quad (3.10)$$

was unserer Behauptung entspricht.

Während Plaquette und Wirkung unter (3.8) nach wie vor invariant bleiben, transformiert der POLYAKOV-Loop nicht länger kovariant:

$${}^\Omega \mathfrak{P}_{\vec{x}} = z \Omega_{\vec{x}} \mathfrak{P}_{\vec{x}} \Omega_{\vec{x}}^{-1} \quad (3.11)$$

bzw.

$${}^\Omega L_{\vec{x}} = z L_{\vec{x}}. \quad (3.12)$$

Wird dies in Bezug zum nicht verschwindenden Erwartungswert  $\langle L \rangle \neq 0$  gesetzt, kann der Confinement/Deconfinement-Phasenübergang bei endlicher Temperatur als spontane Symmetriebrechung einer globalen  $Z_N$ -Symmetrie interpretiert werden. Im Fall von  $SU(2)$  gibt es damit direkte Parallelen zur spontanen Magnetisierung im ISING-Modell. Numerische Untersuchungen haben gezeigt, dass die kritischen Exponenten des Phasenüberganges in beiden Theorien übereinstimmen [27] und die von SVETITSKY und YAFFE aufgestellte Vermutung [60] bestätigen, dass die  $d+1$ -dimensionalen  $SU(N)$ -YANG-MILLS-Theorien mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung in der Universalitätsklasse der  $d$ -dimensionalen verallgemeinerten  $Z_N$ -Spinmodelle liegen. Allgemeiner lautet die Aussage der Vermutung, dass es für das Verständnis des Confinement/Deconfinement-Überganges in  $d+1$  Dimensionen – unabhängig von der Ordnung des Phasenüberganges – genügt, eine skalare  $d$ -dimensionale Theorie mit einer globaler Zentrumssymmetrie zu untersuchen. Nach den vorausgegangenen Überlegungen bietet sich als deren Feldinhalt in diesem Fall der POLYAKOV-Loop unmittelbar an.

Dies ist das Programm der *effektiven* Feldtheorien. Ausgehend von der Zustandssumme mit WILSON-Wirkung (2.54a) werden vom Ordnungsparameter abgesehen alle Freiheitsgrade ausintegriert und das verbleibende Integral als Zustandssumme einer neuen, *effektiven* Theorie interpretiert [28, 53, 55]. Um dies nachzuvollziehen, betrachten wir die Zustandssumme (2.54), in die wir eine Eins einfügen:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z} &= \int \mathcal{D}\mathcal{U} \int \mathcal{D}\mathfrak{P} \delta \left( \mathfrak{P}_{\vec{x}} - \prod_{\tau=1}^{N_t} U_{\vec{x},\tau} \right) e^{-S_W[U]} \\
 &= \int \mathcal{D}\mathfrak{P} \int \mathcal{D}\mathcal{U} \delta \left( \mathfrak{P}_{\vec{x}} - \prod_{\tau=1}^{N_t} U_{\vec{x},\tau} \right) e^{-S_W[U]} \\
 &= \int \mathcal{D}\mathfrak{P} e^{-S_{\text{eff}}[\mathfrak{P}]} .
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Gleichung (3.13) dient uns als formale Definition der *effektiven* Wirkung  $S_{\text{eff}}$ . Die Hoffnung bei diesem Ansatz besteht darin, dass die abgeleitete *effektive* Theorie einfacher und leichter zu verstehen ist als die ursprüngliche Theorie, da die Freiheitsgrade erheblich reduziert wurden, ohne, wie an (3.13) deutlich wird, die Erwartungswerte der relevanten Größen zu ändern. Dennoch wird es i. Allg. keinen analytisch exakten Ausdruck für die *effektive* Wirkung geben und weiterführende Ansätze z.B. 'strong coupling expansion' [5, 11] oder numerische Berechnungen [21] sind nötig. In dieser Arbeit konzentrieren wir uns auf letztgenannten Aspekt und werden in den verbleibenden beiden Abschnitten dieses Kapitels die hierfür von uns benutzte Methode ausführlich vorstellen.

## 3.2. Schwinger-Dyson-Gleichungen

### 3.2.1. Die Zustandssumme in der effektiven Theorie

Damit (3.13) wohldefiniert ist, müssen sowohl Funktionalmaß  $\mathcal{D}\mathfrak{P}$  wie auch *effektive* Wirkung  $S_{\text{eff}}$  eichinvariant sein<sup>4</sup>. Während die Variablen der WILSON-Wirkung als Funktionen auf den 'links' des ganzen  $d+1$ -dimensionalen Gitters  $\Lambda = N_\tau \times \Lambda_S$  definiert sind, ist der POLYAKOV-Loop, der die 'link'-Variablen entlang der imaginären Zeitrichtung ausmultipliziert, eine Funktion auf den 'sites' des verbleibenden  $d$ -dimensionalen Gitters  $\Lambda_S$  (vgl. Abb. 3.1) und nach wie vor gruppenwertig. Mit dem im vorigen Abschnitt besprochenen Transformationsverhalten (3.11)

<sup>4</sup>Streng genommen genügt es, wenn das Produkt eichinvariant ist. Wir fordern aber stets die stärkere Bedingung, dass beide Faktoren einzeln invariant sind.

### 3. Inverse Monte-Carlo-Methode für effektive Wirkungen

kann im Funktionalmaß erneut das HAAR-Maß benutzt werden,

$$\mathcal{D}\mathfrak{P} = \prod_{\vec{x} \in \Lambda_S} d\mu(\mathfrak{P}_{\vec{x}}), \quad (3.14)$$

denn dessen  $SU(N)_L \times SU(N)_R$ -Symmetrie sichert insbesondere die geforderte Invarianz (3.11).

Die *effektive* Wirkung ist genau dann eichinvariant, wenn sie, wie ebenfalls im vorigen Abschnitt besprochen, in jedem Gitterpunkt konstant auf den Konjugationsklassen ist:

$$S_{\text{eff}}[\mathfrak{P}] = S_{\text{eff}}[\Omega\mathfrak{P}] = S_{\text{eff}}[\Omega\mathfrak{P}\Omega^{-1}], \quad (3.15)$$

also als ein Funktional der Spur des POLYAKOV-Loops und dessen Potenzen<sup>5</sup> entwickelt werden kann. Eine solche Entwicklung respektiert aber per se noch nicht die globale Zentrumssymmetrie (3.11), so dass diese explizit zu implementieren ist.

Die verbleibende Aufgabe besteht darin, geeignete Entwicklungsfunktionen und -koeffizienten in Abhängigkeit von inverser Temperatur und WILSON-Kopplung zu finden:

$$S_{\text{eff}} = \sum_a \lambda_a(\beta_g) S_a. \quad (3.16)$$

Mit (3.16) ist noch nichts über die konkrete Gestalt der  $S_a$  oder die Größe und Relevanz der  $\lambda_a$  gesagt, was das eigentlich schwierige und interessante Problem darstellt. An dieser Stelle legen wir jedoch noch keinen Wert auf eine mögliche Entwicklung und verweisen auf Kapitel 5.2.1, wo wir einen allgemeinen Ansatz motivieren, der als Grundlage für die in dieser Arbeit erzielten Resultate dient.

Im nächsten Abschnitt gehen wir zuvor der Frage nach, wie die *effektiven* Kopplungen numerisch bestimmt werden können. Es wird sich herausstellen, dass die Symmetrien des Funktionalintegrals hierbei von entscheidender Bedeutung sind.

#### 3.2.2. Symmetrien

Für jede Quantenfeldtheorie lassen sich unter Ausnutzung von Symmetrien des Funktionalmaßes Relationen zwischen den  $n$ -Punktfunktionen der Theorie ableiten. Im Fall reeller Felder  $(\varphi, A_\mu, \dots)$  führt die Translationsinvarianz des Maßes

$$\mathcal{D}(\varphi(x) + \varepsilon(x)) = \mathcal{D}\varphi(x) \quad (3.17)$$

---

<sup>5</sup>Gleichbedeutend wäre eine Entwicklung nach den Eigenwerten von  $\mathfrak{P}$ .



z.B. für die  $\varphi^4$ -Theorie auf folgenden Ausdruck [25]:

$$\left\langle \left( \frac{\delta}{\delta\varphi(x)} S[\varphi] \right) \varphi(x_1) \cdots \varphi(x_n) \right\rangle = \sum_{i=1}^n \langle \varphi(x_1) \cdots \delta(x - x_i) \cdots \varphi(x_n) \rangle. \quad (3.18)$$

Definieren wir eine Observable  $F$  zu  $F = \varphi(x_1) \cdots \varphi(x_n)$ , geht (3.18) in die folgende Form über:

$$\left\langle \left( \frac{\delta}{\delta\varphi(x)} S[\varphi] \right) F \right\rangle = \left\langle \frac{\delta}{\delta\varphi(x)} F \right\rangle. \quad (3.19)$$

Für unsere Zwecke ist dabei von besonderem Interesse, dass in den so entstandenen Gleichungen generisch Funktionalableitungen der Wirkung nach den Feldern auftreten und mit (3.16) somit Abhängigkeiten von den Kopplungen:

$$\frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta \mathfrak{P}_{\vec{x}}} = \sum_a \lambda_a \frac{\delta S_a}{\delta \mathfrak{P}_{\vec{x}}}. \quad (3.20)$$

Allerdings sind weder POLYAKOV-Loop  $\mathfrak{P}$  noch dessen Spur  $L$  Felder auf  $\mathbb{R}$  und die Translationsinvarianz (3.17) ist durch die Symmetrie des HAAR-Maßes (3.18) zu ersetzen. Diese ist durch Rechts- bzw. Linksmultiplikation gegeben und wird von infinitesimalen Generatoren erzeugt, die gerade den links- bzw. rechtsinvarianten Vektorfeldern auf der Gruppenmannigfaltigkeit entsprechen. Bezeichnen wir die Generatoren mit  $\mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha$ , wobei  $\alpha$  die 2·rk  $SU(N)$  Generatoren unterscheidet, so finden wir (3.19) entsprechend die folgenden SCHWINGER-DYSON-Gleichungen für die *effektive* Theorie<sup>6</sup>:

$$0 = \int \mathcal{D}\mathfrak{P} \mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha \left( F e^{-S_{\text{eff}}} \right) = \int \mathcal{D}\mathfrak{P} \left( \mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha F - F(\mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha S_{\text{eff}}) \right) e^{-S_{\text{eff}}}. \quad (3.21)$$

Diese können als Erwartungswerte der enthaltenen Operatoren geschrieben werden:

$$\langle \mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha F - F(\mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha S_{\text{eff}}) \rangle = 0 \quad (3.22)$$

und führen schließlich mit (3.16) auf

$$\sum_{a=1}^n \lambda_a \langle F(\mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha S_a) \rangle = \langle \mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha F \rangle. \quad (3.23)$$

Wählen wir  $m$  verschiedene Operatoren  $F_i$  aus, geht (3.23) in ein Gleichungssystem von  $n$  Unbekannten  $\lambda_a$  in  $m$  Gleichungen ( $a = 1 \dots n, i = 1 \dots m$ ) über und kann für  $m = n$  nach den Kopplungen aufgelöst werden.

<sup>6</sup>Die oben definierte Observable  $F$  ist in (3.21) entsprechend als Operator auf dem POLYAKOV-Feld  $\mathfrak{P}$  gegeben.

### 3.2.3. Schwinger-Dyson-Gleichungen für SU(2)

Um mit (3.23) arbeiten zu können, ist es notwendig die Generatoren  $\mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha$  genauer zu beschreiben. Für den Fall von  $SU(2)$  gibt es eine einfache geometrische Interpretation, die es erlaubt die Generatoren explizit anzugeben [21]<sup>7</sup>. Die Gruppe  $SU(2)$  ist als Mannigfaltigkeit diffeomorph zur  $S^3$ . Die Drehungen im  $\mathbb{R}^4$ , die die Gruppe  $SO(4)$  bilden, stellen Isometrien der  $S^3$  dar und ihre infinitesimalen Erzeuger können mit den  $\mathcal{L}^\alpha$  identifiziert werden. Wir wählen geeignete Koordinaten

$$\mathfrak{P} = P_\mu \sigma^\mu = P_0 \cdot \mathbb{1} + \vec{P} \cdot i\vec{\sigma} \quad (3.24)$$

mit

$$\mathfrak{P}^\dagger \mathfrak{P} = 1 \Rightarrow P_0^2 + \vec{P}^2 = 1, \quad (3.25)$$

was auch die erwähnte Diffeomorphie zur  $S^3$  noch einmal zum Ausdruck bringt. Die infinitesimalen Drehungen sind durch die entsprechende Drehimpulsalgebra gegeben [21]:

$$\mathcal{L}^\alpha \equiv \mathcal{L}^{\mu\nu} \stackrel{\text{df.}}{=} -i \left( P^\mu \frac{\partial}{\partial P^\nu} - P^\nu \frac{\partial}{\partial P^\mu} \right). \quad (3.26)$$

Da in den gewählten Koordinaten die Spur durch  $P_0$  gegeben ist, gilt mit (3.6)

$$L = P_0, \quad (3.27)$$

und wir erwarten nur für  $\mathcal{L}^{\mu\nu} = \mathcal{L}^{0a} \equiv \mathcal{L}^a$  nichttriviale Ausdrücke in (3.23), wofür abschließend noch geeignete Operatoren  $F$  gefunden werden müssen. Eine mögliche Wahl [21] ist

$$F \equiv F_{\vec{y}}^b[\mathfrak{P}] \stackrel{\text{df.}}{=} P_{\vec{y}}^b G[P^0] \quad (3.28)$$

mit einem zunächst unbestimmten Funktional  $G$ , das nur noch von der eichinvarianten Spur abhängen soll. Wir setzen in (3.26) ein,

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \mathcal{L}_{\vec{x}}^a F_{\vec{y}}^b - F_{\vec{y}}^b (\mathcal{L}_{\vec{x}}^a S_{\text{eff}}) \rangle \\ &= \langle \mathcal{L}_{\vec{x}}^a P_{\vec{y}}^b G - P_{\vec{y}}^b G (\mathcal{L}_{\vec{x}}^a S_{\text{eff}}) \rangle \\ &= \left\langle \delta_{\vec{x}\vec{y}} \delta^{ab} P_{\vec{x}}^0 G - P_{\vec{x}}^a P_{\vec{y}}^b \frac{\delta G}{\delta P_{\vec{x}}^0} - P_{\vec{y}}^b G \left( P_{\vec{x}}^0 \frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta P_{\vec{x}}^a} - P_{\vec{x}}^a \frac{\delta S_{\text{eff}}}{\delta P_{\vec{x}}^0} \right) \right\rangle, \end{aligned}$$

wählen  $\vec{x} = \vec{y}$  und nehmen die Spur:

$$\begin{aligned} 0 &= \langle 3P_{\vec{x}}^0 G - P_{\vec{x}}^a P_{\vec{x}}^a (G'_{\vec{x}} - GS'_{\text{eff},\vec{x}}) \rangle \\ &= \langle 3L_{\vec{x}} G - (1 - L_{\vec{x}})^2 (G'_{\vec{x}} - GS'_{\text{eff},\vec{x}}) \rangle. \end{aligned} \quad (3.29)$$

<sup>7</sup>Für eine Verallgemeinerung auf  $SU(N)$  werden wir die Ergebnisse aus [8] benutzen.

In der letzten Zeile haben wir (3.25) und (3.27) benutzt und die folgende Ableitung nach  $L_{\vec{x}}$  mit gestrichenen Größen eingeführt:

$$G'_x \equiv \frac{\delta G}{\delta L_{\vec{x}}}.$$

Für den Fall  $SU(2)$  haben wir somit (3.23) auf die folgende Form gebracht:

$$\sum_a \lambda_a \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G S'_{a,\vec{x}} \rangle = \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G' - 3L_{\vec{x}} G \rangle. \quad (3.30)$$

In der obigen Gleichung sind letztlich Erwartungswerte von Operatoren verblieben, die mit Hilfe von MONTE-CARLO-Simulationen numerisch bestimmt werden können. Dazu wurden alle verfügbaren Symmetrien ausgenutzt, so dass neben der Wahl von  $G$  keine Freiheiten oder unbestimmte (bzw. formale) Terme übrigbleiben.

### 3.3. Die Inverse Monte-Carlo-Methode

An dieser Stelle sind alle notwendigen Vorbetrachtungen abgeschlossen, um die Inverse MONTE-CARLO-Methode [30, 34] (IMC), wie sie in diesem Kontext Verwendung findet, vorstellen zu können. Ausgehend von einer WILSON-Wirkung (2.44a) mit gruppenwertigen 'link'-Variablen  $U_{x,\mu}$  suchen wir eine *effektive* Theorie, deren dynamischer Feldinhalt der POLYAKOV-Loop (3.1b) ist. Die formale Definition (3.13) lässt eine exakte analytische Auswertung nicht zu, aber numerische Methoden können ins Feld geführt werden.

Die mit üblichen MONTE-CARLO-Methoden [29, 45, 15] generierten Eichfeldkonfigurationen  $\{\mathcal{U}\}$  sind gemäß

$$P(\mathcal{U}) = \frac{1}{Z} e^{-S_W[\mathcal{U}]} \quad (3.31)$$

verteilt und werden mit (3.1b) auf Konfigurationen des POLYAKOV-Loops reduziert. Dieses Ensemble von Konfigurationen  $\{\mathfrak{P}\}$  ist mit (3.14) bereits nach

$$P(\mathfrak{P}) = \frac{1}{Z} e^{-S_{\text{eff}}[\mathfrak{P}]} \quad (3.32)$$

verteilt, d.h. beliebige Momente<sup>8</sup> des Maßes  $\mathcal{D}\mathfrak{P} e^{-S_{\text{eff}}}$  können berechnet werden, ohne dass seine explizite Gestalt bekannt ist. Wählen wir einen Ansatz für die *effektive* Wirkung, erlaubt die Inverse MONTE-CARLO-Methode die Bestimmung

---

<sup>8</sup>Was gerade den  $n$ -Punktfunktionen  $\langle \text{tr } \mathfrak{P}_{x_1} \dots \mathfrak{P}_{x_n} \rangle$  entspricht.

### 3. Inverse Monte-Carlo-Methode für effektive Wirkungen

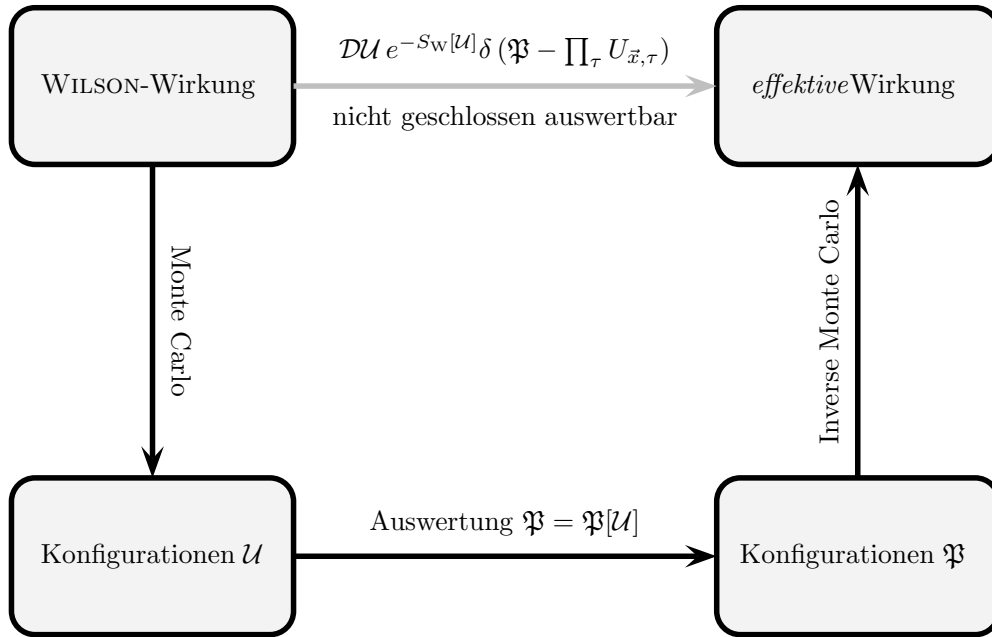


Abbildung 3.2.: Verhältnis von Monte Carlo zu Inverse Monte Carlo nach [19]. Während der direkte Zugriff auf eine *effektive* Theorie analytisch unmöglich ist, ergänzt die IMC-Methode bekannte numerische Verfahren zur indirekten Bestimmung.

der freien Parameter des Ansatzes, d.h. der *effektiven* Kopplungen  $\lambda_a$ , wobei in jeder praktischen Rechnung sicherlich nur endlich viele Terme berücksichtigt werden können und immer nur eine Approximation von  $S_{\text{eff}}$  berechnet werden kann. Um die IMC-Methode zu implementieren, benutzen wir die SCHWINGER-DYSON-Gleichungen der *effektiven* Theorie (3.23), die in der Form von (3.30) eine lineare Relation zwischen den *effektiven* Kopplungen  $\lambda_a$  und Erwartungswerten von Feldoperatoren darstellen. Um nach den  $\lambda_a$  auflösen zu können, benötigen wir genauso viele linear unabhängige Gleichungen wie unbekannte Kopplungen im gewählten Ansatz enthalten sind. Aus Gründen der numerischen Stabilität werden wir stets das bestimmte durch ein überbestimmtes Gleichungssystem ersetzen und zum Lösen 'least-square'-Methoden anwenden. Sind die Kopplungen berechnet, können durch eine MONTE-CARLO-Simulation der *effektiven* Theorie Observablen gemessen und die Qualität der Approximation im Vergleich mit den Messwerten der YANG-MILLS-Theorie diskutiert werden. Insbesondere wird damit ein Vergleich der heute zahlreich in der Literatur vorhandenen Vorschläge für eine *effektive* Wirkung untereinander und mit der YANG-MILLS-Theorie möglich [20].

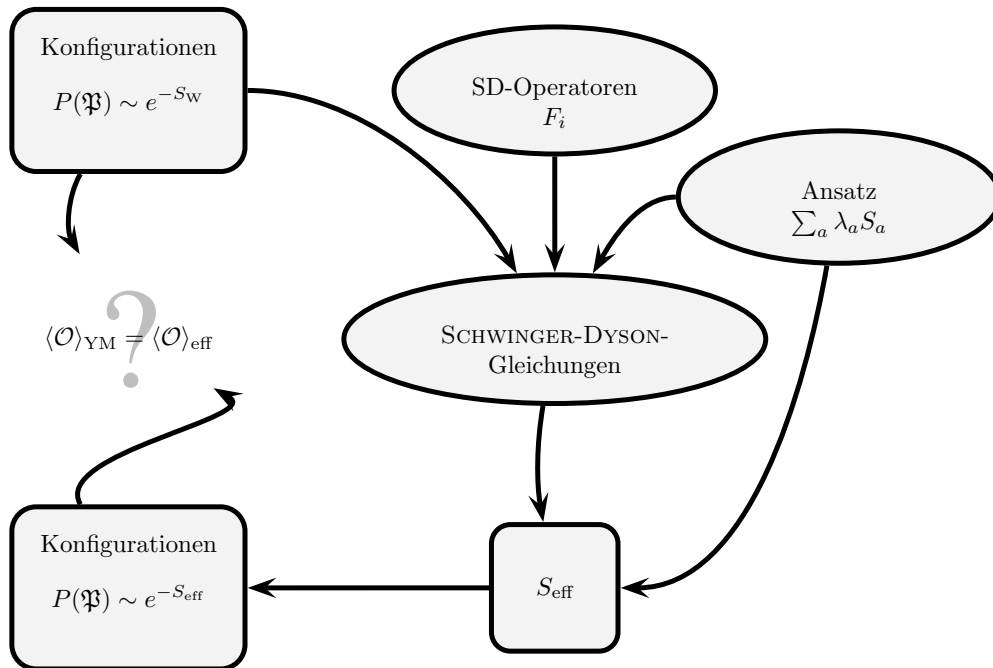


Abbildung 3.3.: Die IMC-Methode schematisch dargestellt: Das Verfahren erlaubt aus zuvor generierten Konfigurationen  $\{\mathcal{U}\}$  und nach Auswahl von Operatoren  $F_i$  sowie eines Ansatzes  $\sum_a \lambda_a S_a$  die numerische Bestimmung der Kopplungen  $\lambda_a$ . In weiteren MONTE-CARLO-Simulationen können mit der erhaltenen *effektiven* Wirkung Observablen gemessen und mit Erwartungswerten der YANG-MILLS-Theorie verglichen werden.

### 3. *Inverse Monte-Carlo-Methode für effektive Wirkungen*

# 4. Numerische Aspekte

## 4.1. Quantenfeldtheorie auf dem Computer

### 4.1.1. Grundlagen

Ziel der numerischen Methoden in der Quantenfeldtheorie ist die approximative Bestimmung von GREEN-Funktionen in EUKLIDISCHER Zeit (vgl. (2.27b) und (2.30)):

$$G(x_1, \dots, x_n) \equiv \langle \Phi_1 \dots \Phi_n \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\Phi e^{-S[\Phi]} \Phi(x_1) \dots \Phi(x_n). \quad (4.1)$$

Die Kenntnis dieser Funktionen erlaubt z.B. die numerische Bestimmung von Masseverhältnissen gebundener Zustände der Theorie [14] oder ermöglicht Aussagen über thermodynamische Größen (Erwartungswerte), wie wir sie für die in Kapitel 3 gefundenen SCHWINGER-DYSON-Gleichungen benötigen. Im Gitterformalismus entspricht (4.1) dem Lösen des folgenden Integrals

$$\langle \Phi_1 \dots \Phi_n \rangle = \mathcal{Z}^{-1} \int \prod_i D\Phi_i \Phi_1 \dots \Phi_n e^{-S_E} \quad (4.2)$$

bzw. für die hier ausschließlich betrachteten "reinen" Eichtheorien

$$\langle U_1 \dots U_n \rangle = \prod_{x,\mu} \int d\mu(U_{x,\mu}) U_1 \dots U_n e^{-S_W}. \quad (4.3)$$

Die folgende Rechnung zeigt in überzeugender Weise, dass dies mit einfachen Integrationsmethoden nicht zu bewerkstelligen ist. Für ein typisches zu simulierendes Gitter mit  $N_s = 16$  Gitterpunkten pro Richtung ergibt sich für die Dimension des Integrals im Fall der  $SU(N)$ -Eichtheorien:

$$\begin{aligned} |\Lambda| &= N_s^d = 16^4 = 65536 \\ \# \text{ 'links' } &= d \cdot |\Lambda| = 4 \cdot 65536 = 262144 \\ \Rightarrow \dim(\mathcal{DU}) &= \# \text{ 'links' } \cdot \text{rk } SU(N) = 262144 \cdot (N^2 - 1). \end{aligned}$$

#### 4. Numerische Aspekte

In Kapitel 2.3 wurde jedoch darauf hingewiesen, dass nur wenige der insgesamt möglichen Feldkonfigurationen einen nennenswerten Beitrag liefern, d.h. durch den BOLTZMANN-Faktor in (4.3) nicht unterdrückt sind<sup>1</sup>. Daher genügt es in einem numerischen Verfahren nur diese relevanten Konfigurationen zu generieren und aufzuaddieren. Das wohl wichtigste Verfahren hierfür ist das MONTE-CARLO 'importance sampling', bei dem – ausgehend von einer zunächst beliebig verteilten Feldkonfiguration  $\mathcal{U}$  – Feldkonfigurationen gemäß dem statistischen Gewicht

$$dP(\mathcal{U}) = \frac{e^{-S[\mathcal{U}]} d\mathcal{U}}{\int_{\mathfrak{U}} e^{-S[\mathcal{U}]} d\mathcal{U}} \quad (4.4)$$

erzeugt werden. Die Größe  $\mathcal{U}$  ist als eine Zufallsvariable auf der Menge aller möglichen Konfigurationen  $\mathfrak{U}$  zu verstehen und mit  $d\mathcal{U}$  bezeichnen wir auf diesem Raum das gleichverteilte Maß. Der Update-Algorithmus geht im Detail so vor, dass in jedem MONTE-CARLO-Zeitschritt  $t$  eine Konfiguration unter Zuhilfenahme der im vorigen Schritt erzeugten generiert wird:

$$\dots \longrightarrow \mathcal{U}(t-1) \longrightarrow \mathcal{U}(t) \longrightarrow \mathcal{U}(t+1) \longrightarrow \dots, \quad (4.5)$$

die mit der Wahrscheinlichkeit

$$p(\mathcal{U} = \mathcal{U}_j) \equiv p_j = e^{-S[\mathcal{U}_j]} \quad (4.6)$$

der Konfiguration  $\mathcal{U}_j$  entspricht. Die (bedingte) Wahrscheinlichkeit in einem Update-Schritt die Konfiguration  $\mathcal{U}_j$  zu erzeugen, wenn sich das System zuvor im Zustand  $\mathcal{U}_i$  befand, wird mit  $P(\mathcal{U}_i \rightarrow \mathcal{U}_j) \equiv \mathbf{P}_{ij}$  bezeichnet. Es ergeben sich zwei Bedingungen an die  $\mathbf{P}_{ij}$ :

1. Damit die  $\mathbf{P}_{ij}$  Übergangswahrscheinlichkeiten darstellen, müssen sie positiv sein:

$$\mathbf{P}_{ij} \geq 0. \quad (4.7a)$$

2. Die Wahrscheinlichkeit irgendeinen Zustand zu erreichen ist Eins:

$$\sum_j \mathbf{P}_{ij} = 1. \quad (4.7b)$$

---

<sup>1</sup>Dies kann in unmittelbarer Analogie zur statistischen Physik verstanden werden. Dort sind in der kanonischen Zustandssumme a priori alle Konfigurationen (mit beliebiger) Energie zugelassen. Es kann jedoch gezeigt werden, dass sich ein scharf begrenzter Erwartungswert für die Energie einstellt, d.h. fast alle relevanten Konfigurationen diesen Wert für die Energie annehmen. Damit wird die Korrespondenz zur mikrokanonischen Gesamtheit gesichert.



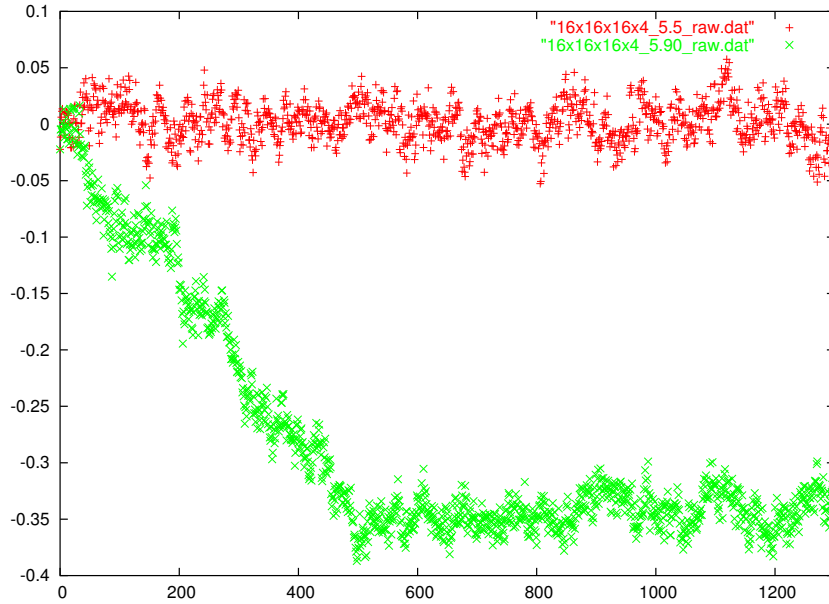


Abbildung 4.1.: Thermalisierungszeit für  $SU(3)$ -Konfigurationen für  $\beta = 5.5$  (rot) und  $\beta = 5.9$  (grün). Über der MONTE-CARLO-Zeit wurde  $\Re(L)$  aufgetragen. In beiden Fällen wurde mit einer zufälligen Verteilung ('hot start') begonnen und es ist für die gebrochene Phase deutlich zu erkennen, dass sich das Gleichgewicht erst nach ungefähr 600 'sweeps' einstellt.

Mathematisch entspricht dies einem stochastischen Prozess; (4.5) wird als MARKOV-Kette und  $\mathbf{P}_{ij}$  mit den in (4.7) beschriebenen Eigenschaften als *stochastische* Matrix bezeichnet. Weiter können Bedingungen angegeben werden, unter denen die MARKOV-Kette Konfigurationen mit dem geforderten Maß (4.4) erzeugt [52, 16]:

1. Jeder Zustand  $\mathcal{U}_j$  kann in einer endlichen Anzahl von Schritten von jedem Zustand  $\mathcal{U}_i$  aus erreicht werden, d.h. es existiert eine Zahl  $n$ , so dass gilt :

$$\sum_{k_1, \dots, k_n} \mathbf{P}_{ik_1} \mathbf{P}_{k_1 k_2} \cdots \mathbf{P}_{k_n j} \neq 0. \quad (4.8)$$

2. Die Übergangswahrscheinlichkeiten erfüllen das *detaillierte Gleichgewicht*:

$$p_i \mathbf{P}(\mathcal{U}_i \rightarrow \mathcal{U}_j) = p_j \mathbf{P}(\mathcal{U}_j \rightarrow \mathcal{U}_i). \quad (4.9)$$

Die Aussage gilt dabei im strengeren Sinne nur für  $t \rightarrow \infty$ , was in der Praxis bedeutet, dass erst nach einer gewissen Zahl von Update-Schritten die erzeugten Konfigurationen in der durch (4.4) gegebenen Verteilung vorliegen. Die Anzahl der Schritte von einer Startkonfiguration  $\mathcal{U}(0)$  bis zu den ersten nach dem Gleichge-

## 4. Numerische Aspekte

wicht verteilten Konfigurationen bezeichnet man als *Thermalisierungszeit*  $t_{\text{therm}}$ <sup>2</sup>. Sie hängt i. Allg. von der Startkonfiguration, der Kopplungsstärke und dem konkreten Update-Algorithmus ab.

Der bekannteste unter diesen ist der METROPOLIS-Algorithmus und wird in unserer Arbeit bei der Simulation der *effektiven* Theorien verwendet. Für  $SU(N)$ -Eichtheorien gibt es mit dem *Wärmebad*-Algorithmus [9] nach CREUTZ eine wesentlich effektivere Methode, die wir in Anhang A ausführlich vorstellen.

### 4.1.2. Fehleranalyse

Sobald wir über eine Anzahl  $N$  von Konfigurationen  $\mathcal{U}_i$  verfügen, können Erwartungswerte von Operatoren durch

$$\langle A \rangle_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A[\mathcal{U}_i] \quad (4.10)$$

approximiert werden. Der Schätzwert  $\langle A \rangle_N$  wird im Limes  $N \rightarrow \infty$  gegen den wahren Erwartungswert  $\langle A \rangle$  streben, so dass man in der Praxis an einer oberen Schranke für die Abweichung

$$\| \langle A \rangle - \langle A \rangle_N \| \leq \epsilon_N \quad (4.11)$$

interessiert ist. In diesem Abschnitt soll auf die verschiedenen Möglichkeiten bei der Bestimmung dieser statistischen Fehler eingegangen werden.

### Standardabweichung

Wie bereits gesagt, kann der wahre Erwartungswert in einer MONTE-CARLO-Simulation nie berechnet werden, da hierzu unendlich viele Messungen notwendig wären. Jede reale Messung entspricht damit der Erhebung eines Schätzwertes auf einem Ensemble vom Umfang  $N$  (vgl. (4.10)). Die Standardabweichung des errechneten Mittelwertes  $\langle A \rangle_N$  vom wahren Mittel  $\langle A \rangle$  ergibt sich aus [52]

$$\sigma(A) = \sqrt{\frac{1}{N-1} \left( \overline{A^2} - \overline{A}^2 \right)}, \quad (4.12)$$

---

<sup>2</sup>Die in dieser Arbeit Verwendung findenden mikrokanonischen Update-Algorithmen ändern in jedem Schritte immer nur eine Variable  $U_{x,\mu}$ . Als 'sweep' bezeichnen wir das sukzessive Anwenden des Update-Algorithmus auf alle Variablen. Sämtliche MONTE-CARLO-Zeiten sind in dieser Einheit angegeben.

woran unmittelbar ersichtlich wird, dass die Genauigkeit der Messung lediglich mit  $N^{-1/2}$  wachsen kann. Hinzu kommt, dass (4.12) statistisch unabhängige Konfigurationen voraussetzt. Für Konfigurationen, die mit den im vorigen Abschnitt besprochenen Update-Algorithmen erzeugt wurden, ist das i. Allg. nicht gegeben.

### Autokorrelationszeit

Die meisten Update-Algorithmen arbeiten lokal, d.h. in jedem Update-Schritt wird die gegebene Konfiguration  $\mathcal{U}_i(t)$  nur in wenigen Freiheitsgraden geändert, so dass in der entstehenden Konfiguration  $\mathcal{U}_j(t+1)$  noch sehr viele Informationen über die zuvor generierte enthalten sind. Ein Maß hierfür ist die Autokorrelationsfunktion [16]

$$\chi_A(t) \stackrel{\text{df.}}{=} \sum_{t'} A(t')A(t'+t) - \bar{A}^2, \quad (4.13)$$

in der wir mit  $A(t')$  den Messwert der Observablen zur Zeit  $t'$  bezeichnen. Für große Zeiten wird – wie für Korrelationsfunktionen üblich – ein exponentielles Abklingen angenommen:  $\chi_A(t) \sim e^{-t/\tau_c}$ . Die damit verbundene Zeitskala heißt Autokorrelationszeit  $\tau_c$ . Wird diese bei der Bestimmung der Standardabweichung berücksichtigt, so ändert sich (4.12) in der folgenden Weise [52]:

$$\sigma(A) = \sqrt{\frac{1 + 2\tau_c/\Delta t}{N-1} (\overline{A^2} - \bar{A}^2)}. \quad (4.14)$$

Die Autokorrelationszeit  $\tau_c$  hängt von der betrachteten Observablen ab, was heuristisch damit begründet werden kann, dass weniger stark fluktuierende Größen, wie Mittelwerte über eine gegebene Konfiguration, sicherlich weit stärker korreliert sind als Messgrößen, die nur auf einer 'site' ausgewertet werden.

Zur Quantifizierung dieses Effektes haben wir in der  $SU(3)$ -YANG-MILLS-Theorie die Autokorrelationszeiten des POLYAKOV-Loops mit der des mittleren Wertes pro Konfiguration

$$\bar{L} \stackrel{\text{df.}}{=} \frac{1}{|\Lambda_S|} \sum_{\vec{x}} L_{\vec{x}} \quad (4.15)$$

in der Nähe der kritischen Temperatur verglichen. In Abbildung 4.2 sind deutliche Unterschiede zu erkennen, die sich auch in den errechneten Zeiten niederschlagen (vgl. Tabelle 4.1.2). Mit (4.14) kann daraus die Anzahl 'sweeps', die zwischen zwei für die Messung relevanten Konfigurationen liegen muss, ermittelt werden. Nach [16] sollte der Abstand gerade der zweifachen Autokorrelationszeit entsprechen.

#### 4. Numerische Aspekte

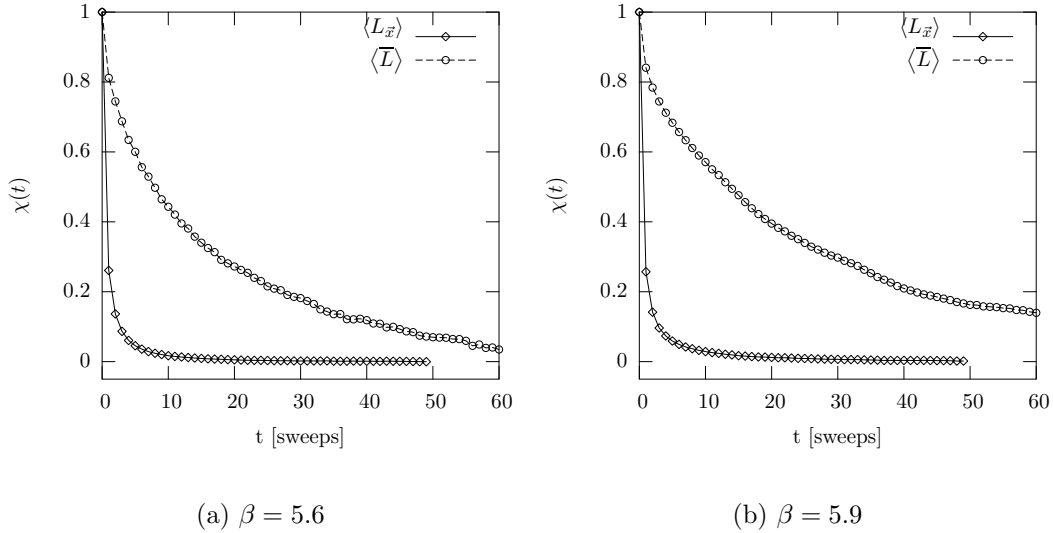


Abbildung 4.2.: Vergleich der Korrelationszeiten von  $\langle \bar{L} \rangle$  und  $\langle L_{\vec{x}} \rangle$  für zwei Kopplungen in der Nähe von  $\beta_c$ . Ein 'sweep' entspricht dem einmaligen Update aller 'links'.

Bisher wurden nur Observablen betrachtet, die auf jeder Konfiguration ausgewertet werden konnten. Sollen hingegen Observablen untersucht werden, die Mittelwerte anderer Größen enthalten (z.B. Suszeptibilitäten) oder solche die von Schätzwerten mehrerer Observablen abhängen, erweist sich die Bestimmung von Autokorrelationszeiten und der Standardabweichung als zu aufwendig bzw. unpraktikabel. In der Praxis finden in diesem Fall 'blocking'- und 'resampling'-Methoden Anwendung.

#### Binning

Die 'binning-' oder 'blocking'-Methode ist einfach zu implementieren und liefert bereits verwertbare Ergebnisse. Die Idee dabei ist, die  $N$  Konfigurationen des Ensembles in  $m$  Blöcke  $b_i$ ,  $i = 1 \dots m$  der Größe  $n$  aufzuteilen. Die Observablen werden dann zunächst auf diesen Teilblöcken  $b_i$  ausgerechnet und das Endresultat entsteht durch Mittelung über die im ersten Schritt erhaltenen  $m$  Werte. Die Standardabweichung wird mit (4.12) berechnet und von der 'bin-size', also der Anzahl Konfigurationen pro Block (oder 'bin'), abhängen. Es kann aber gezeigt werden, dass die mit diesem Verfahren errechnete Standardabweichung für größer werdende 'bins' gegen die um die Autokorrelationszeit korrigierte Form (4.14) strebt. Darin liegt der Vorteil dieser Methode, denn  $\tau_c$  muss nicht explizit berechnet werden.

$N_s$	$N_\tau$	$\beta$	$\tau_{L_x}$	$\tau_{\bar{L}}$
$16^3$	4	5.5	1.6	8.9
$16^3$	4	5.9	1.6	9.5
$20^3$	4	5.5	1.6	5.6
$20^3$	4	5.9	1.9	16.8
$20^3$	4	6.2	1.5	9.7
$20^2 \times 24$	4	5.6	2.1	26.6 (?)
$20^2 \times 24$	4	6.0	2.2	11.7

Tabelle 4.1.: Autokorrelationszeiten für den POLYAKOV-Loop in der  $SU(3)$ -YANG-MILLS-Theorie. Die erste Spalte gibt den Wert für  $L_{\bar{x}}$  wieder, bei dem über 400 zufällig ausgewählte Punkte gemittelt wurde. In einer früheren Rechnung wurde die kritische Temperatur zu  $\beta_c = 5.70[4]$  ( $20^3 \times 4$ ) bestimmt. Diese Zahlen dienen uns ebenso als Orientierung für die Untersuchungen der  $SU(2)$ -Theorie.

## Bootstrap

Bei der 'bootstrap'-Methode werden aus den  $N$  in der Simulation berechneten Messwerten für die Observable  $n$ ,  $n < N$ , zufällig ausgewählt (Ziehen *mit* Zurücklegen), der Mittelwert gebildet und abgespeichert. Nach einer genügend großen Anzahl von Wiederholungen entsteht so ein neues Ensemble aus diesen Mittelwerten, wobei sich der endgültige Schätzwert wiederum aus deren Mittelwert ergibt. Der statistische Fehler ist durch die Standardabweichung in der durch das beschriebene 'resampling' erzeugten Verteilung gegeben [52]:

$$\sigma(A) = \sqrt{\overline{A^2} - \bar{A}^2}.$$

Auch hier ist es nicht unbedingt nötig, dass die Konfigurationen im Ausgangsensemble statistisch unabhängig sind; beim 'resampling' sind Duplikate ein und derselben Konfiguration ausdrücklich zugelassen und ändern das Ergebnis nicht, wenn insgesamt genügend statistisch unabhängige Konfigurationen vorhanden sind.

## 4.2. IMC - Algorithmus und Implementation

### 4.2.1. Nomenklatur

Wir führen in diesem Abschnitt die für die weitere Diskussion benötigten Bezeichner ein. Wir erinnern an die in Kapitel 3.3 gefundene Form der SCHWINGER-DYSON-Gleichungen (3.30) für einen zunächst unbestimmten Ansatz der *effektiven*

#### 4. Numerische Aspekte

Wirkung und einen Operator  $G_b[L]$ :

$$\sum_a \lambda_a \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G_b S'_a \rangle = \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G'_b - 3L_{\vec{x}} G_b \rangle .$$

Wir werden im Folgenden die Operatoren  $G_b$  als SCHWINGER-DYSON-Operatoren bezeichnen, um die Beziehung zu (3.30) auch im Namen zu betonen. Für  $B$  dieser Operatoren  $G_b$  und  $A$  unbekanntem Kopplungen  $\lambda_a$  wird aus (3.30) ein lineares Gleichungssystem, das wir in Matrixschreibweise wie folgt notieren:

$$\mathbf{M} \cdot \vec{\lambda} = \vec{g} . \quad (4.16a)$$

Die Komponenten von  $\vec{g}$  und  $\mathbf{M}$  sind dabei durch

$$g_b = \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G'_b \rangle - 3 \langle L_{\vec{x}} G_b \rangle , \quad b = 1 \dots B \quad (4.16b)$$

und

$$(\mathbf{M})_{ab} = \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G_b S'_a \rangle , \quad a = 1 \dots A , b = 1 \dots B \quad (4.16c)$$

gegeben. Im Sinne einer systematischen Untersuchung ist es notwendig, die in ihrer Form immer noch sehr allgemeinen SCHWINGER-DYSON-Operatoren  $G_b$  weiter einzuschränken. In dieser Arbeit werden wir nur lokale Operatoren betrachten, d.h. solche, die im Gitter an einem Ort  $\vec{y}$  lokalisiert werden können. Das bedeutet, dass sie nur vom Feld an den Orten  $\vec{z}$  abhängen, für die gilt:  $|\vec{y} - \vec{z}| \leq 1^3$ . Betrachten wir so einen bei  $\vec{y}$  lokalisierten SCHWINGER-DYSON-Operator  $G_{b,\vec{y}}$ , gewinnen wir weitere Operatoren durch die Substitution  $\vec{y}' = \vec{y} + \vec{z}$  für einen beliebigen Verschiebungsvektor  $\vec{z}$ . Da die SCHWINGER-DYSON-Gleichungen in einem zuvor fixierten Punkt  $\vec{x}$  ausgewertet werden, wäre zu erwarten, dass dies für einen Operator  $G_b$  zu  $|\Lambda_S|$  Gleichungen führt. Diese Zählweise ist jedoch zu naiv, wie die folgende Überlegung zeigt. Das Gitter  $\Lambda_S$  ist in alle Richtungen periodisch<sup>4</sup> und damit homogen, so dass alle GREEN-Funktionen (oder Korrelatoren) nur vom Abstand der beteiligten Punkte abhängen. So gilt z.B. für die Zweipunktfunktion:

$$G^{(2)}(\vec{x}, \vec{y}) = G^{(2)}(|\vec{x} - \vec{y}|) \stackrel{\text{df.}}{=} \langle L_{\vec{x}} L_{\vec{y}}^\dagger \rangle .$$

<sup>3</sup>In der dadurch definierten Klasse wird später noch eine vor allen weiteren Operatoren ausgezeichnete Untermenge definiert, mit der schließlich die Rechnungen durchgeführt werden können.

<sup>4</sup>Während die Periodizität in EUKLIDISCHER-Zeitrichtung für das Einstellen einer endlichen Temperatur wichtig ist, gibt es zunächst keinerlei Einschränkungen an die Randbedingungen der Felder in den räumlichen Richtungen, so dass diese ebenfalls periodisch gewählt werden können, was neben der angesprochenen Translationsinvarianz einige algorithmische Details der MONTE-CARLO-Simulation vereinfacht und die Rechengeschwindigkeit erhöht.

Mit den von uns betrachteten SCHWINGER-DYSON-Operatoren entsprechen alle Einträge in  $\mathbf{M}$  und  $\vec{g}$  solchen Korrelatoren und führen für  $\vec{y}$  und  $\vec{y}'$  auf die selben Koeffizienten, falls  $d = |\vec{x} - \vec{y}| = |\vec{x} - \vec{y}'|$  gilt. Zusammen mit den periodischen Randbedingungen, die als größten Abstand zweier Punkte die halbe Gitterlänge  $N_s/2$  zulassen, führt dies für jedes  $G_b$  auf  $N_s/2$  Gleichungen<sup>5</sup>. Wir werden daher auch von der Notation  $G_{b,d}$  mit  $d = 0, \dots, N_s/2$  Gebrauch machen.

### 4.2.2. Lineare überbestimmte Gleichungssysteme

Die Erfahrung, dass alle verfügbaren Informationen genutzt werden sollten, lehrt, dass das überbestimmte dem bestimmten Gleichungssystem vorzuziehen ist. Da aber überbestimmte Gleichungssysteme i.Allg. nicht lösbar sind, können nur (bestmögliche) Näherungslösungen gefunden werden. Wir wählen für unsere Zwecke die 'least-square'-Approximation aus, d.h. wir bezeichnen für ein lineares überbestimmtes Gleichungssystem

$$\mathbf{M}\vec{\lambda} = \vec{b}, \quad (4.17)$$

das  $\vec{\lambda}$  als ('least-square')-Lösung, welches

$$\chi^2(\vec{\lambda}) \stackrel{\text{df.}}{=} \|\mathbf{M}\vec{\lambda} - \vec{b}\|^2 \quad (4.18)$$

minimiert. Eine numerisch stabile Möglichkeit eine Lösung zu finden, nutzt die Singulärwertzerlegung einer Matrix  $\mathbf{M}$  [62]. In der linearen Algebra wird gezeigt, dass jede  $M \times N$ -Matrix  $\mathbf{M}$ , mit  $M \geq N$  in eine  $M \times N$  Matrix  $\mathbf{U}$ , eine Diagonalmatrix  $\text{diag}(s_1, \dots, s_N)$  und eine  $N \times N$ -Matrix  $\mathbf{V}^T$  zerlegt werden kann, wobei die Spalten in den Matrizen  $\mathbf{U}$  und  $\mathbf{V}$  orthonormiert sind:

$$\mathbf{M} = \left( U_{(1)} \mid \dots \mid U_{(N)} \right) \begin{pmatrix} s_1 & & \\ & \ddots & \\ & & s_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{(1)} \\ \vdots \\ V_{(N)} \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

$$U_{(i)}^T U_{(j)} = V_{(i)}^T V_{(j)} = \delta_{ij}. \quad (4.20)$$

Es ist zu beachten, dass die  $U_{(i)}$   $M$ -komponentige und die  $V_{(j)}$   $N$ -komponentige Vektoren sind. Mit der Orthogonalitätsrelation (4.20), läßt sich eine Lösung von

---

<sup>5</sup>Streng genommen müssten geradzahlige und ungeradzahlige Gitterlängen unterschieden werden und der Fall  $\vec{x} = \vec{y}$  gesondert gezählt werden. Übermäßige Genauigkeit zahlt sich in dieser Frage aber nicht aus.

#### 4. Numerische Aspekte

(4.16a) aus (4.19) berechnen:

$$\vec{\lambda} = \mathbf{V} \cdot \text{diag} \left( \frac{1}{s_1}, \dots, \frac{1}{s_N} \right) \cdot \mathbf{U}^T \cdot \vec{b}. \quad (4.21)$$

In [62] wird gezeigt, dass dieses  $\vec{\lambda}$  gerade die (4.18) minimierende 'least-square'-Lösung ist. Zu unserem Vorteil gibt es heute Programme bzw. Bibliotheken, die sowohl die Singulärwertzerlegung als auch das anschließende Lösen der Gleichung übernehmen. Wir haben bei den in dieser Arbeit erzielten Ergebnissen das frei verfügbare Programm *Octave* [1] benutzt.

### 4.2.3. Wahl der Operatoren

Wir kommen schließlich auf die konkrete Gestalt der SCHWINGER-DYSON-Operatoren zu sprechen, wie sie in den MONTE-CARLO-Simulationen benutzt wurden. Neben der Qualität und der Anzahl mitgeführter Terme in der *effektiven* Wirkung hängen die erhaltenen Ergebnisse entscheidend von der Auswahl der Operatoren ab. Die Erfahrungen früherer Arbeiten [21] haben gezeigt, dass als Erwartungswerte für die Einträge in  $\mathbf{M}_{ab}$  und  $g_b$  die zentrumssymmetrischen Operatoren besonders gut geeignet sind. Für  $SU(2)$  sind das die Operatoren, welche durch eine gerade Anzahl an Potenzen in  $L$  gegeben sind, also z.B.  $\langle L_{\vec{x}} L_{\vec{y}} \rangle$ . Betrachten wir noch einmal

$$(\mathbf{M})_{ab} = \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G_b S'_a \rangle, \quad (4.22)$$

so muss  $G_b S'_{a,\vec{x}}$  gerade sein. Berücksichtigen wir, dass die Ableitung des geraden Operators  $S_a$  ungerade ist, folgt, dass  $G_b$  ebenfalls ungerade sein muss. Man überzeugt sich leicht, dass unter dieser Einschränkung auch

$$g_b = \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G'_b \rangle - 3 \langle L_{\vec{x}} G_b \rangle \quad (4.23)$$

gerade ist. Die SCHWINGER-DYSON-Operatoren sollen also lokal und ungerade sein; eine Eigenschaft, die auch die Ableitungen der zu untersuchenden Entwicklungsterme in der *effektiven* Wirkung haben. Diese Ähnlichkeit ist uns für die folgende Festlegung Motivation genug:

$$G_{a,\vec{y}} \stackrel{\text{df.}}{=} \frac{\delta S_a}{\delta L_{\vec{y}}}. \quad (4.24)$$

Fixieren wir den Punkt  $\vec{x}$  im Gitter, an dem die SCHWINGER-DYSON-Gleichungen ausgewertet werden, erhalten wir – wie bereits ausgeführt – nur für verschiedene



Abstände  $d = |\vec{x} - \vec{y}|$  auch verschiedene Erwartungswerte und damit Koeffizienten für das Gleichungssystem (4.17):

$$G_{a,d} \stackrel{\text{df.}}{=} \frac{\delta S_a}{\delta L_{\vec{y}}}, \quad d = |\vec{y} - \vec{x}|. \quad (4.25)$$

#### 4.2.4. Korrektheit der Implementation

Die Inverse MONTE-CARLO-Methode verlangt eine Vielzahl komplexer numerischer Rechnungsschritte. Diese weisen meist mehrere und oft nicht leicht zu findende Fallstricke auf, die Ergebnisse verfälschen oder gänzlich unbrauchbar werden lassen. Wir versuchen, dem im Rahmen dieser Arbeit in zweierlei Weise zu begegnen. Der erste Punkt bezieht sich direkt auf die Implementation der Algorithmen und Programme und wird im Anhang B ausführlich dargestellt. Die zweite Sicherung besteht in der Betrachtung von Konsistenzbedingungen und -tests, auf welche wir an dieser Stelle näher eingehen wollen.

Betrachten wir die Anforderungen genauer, so ergeben sich drei Programmblöcke, die durch ihren zentralen Algorithmus charakterisiert werden können. Im Einzelnen sind dies der die YANG-MILLS-Theorie simulierende, der die *effektive* Theorie simulierende und der die IMC-Methode implementierende Block. Der erste kann durch Vergleich erhaltener Messwerte mit in der Literatur veröffentlichten Ergebnissen überprüft werden, was wir als ausreichend betrachten. Um die beiden letztgenannten Blöcke auf Korrektheit zu überprüfen, nutzen wir aus, dass die SCHWINGER-DYSON-Gleichungen auch geeignet sind, die Kopplungen aus Konfigurationen zu bestimmen, die mit einer *effektiven* Wirkung erzeugt wurden. Bei richtiger Implementation der Simulation und der IMC-Methode sollten die vorgegebenen Werte für die Kopplungen reproduziert werden. Das beschriebene Vorgehen hat sich als sehr zuverlässig und hilfreich beim Auffinden von Fehlern während der Weiterentwicklung des Programmcodes, d.h. bei der Hinzunahme neuer SCHWINGER-DYSON-Operatoren oder Wirkungsterme erwiesen. Des Weiteren kann auf diese Weise beobachtet werden, wie die Ergebnisse unter Austausch oder Weglassen bestimmter Operatoren beeinflusst werden oder in welchem Maß sich Trunkierungen, d.h. Simulation in  $n$  Kopplungen und IMC für  $m < n$  Kopplungen auswirken. Schließlich bietet das Verfahren auch für die aus der YANG-MILLS Theorie zu bestimmenden Kopplungen Anhaltspunkte zur Genauigkeit der Ergebnisse.

#### 4. Numerische Aspekte

# 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

In diesem Kapitel präsentieren wir die Ergebnisse unserer numerischen Simulationen. Die meisten Rechnungen mit direktem Bezug zu der in Kapitel 3 ausführlich vorgestellten IMC-Methode wurden dabei für den einfacheren Fall  $SU(2)$  durchgeführt. Große Teile des hierfür notwendig zu entwickelnden Programmcodes stehen jetzt auch für die Untersuchungen der  $SU(3)$ -Theorie zur Verfügung, Resultate waren im Rahmen dieser Arbeit aber noch nicht zu erzielen. Bereits vorhandene Zwischenergebnisse für  $SU(3)$  werden in Kapitel 6 dargestellt.

## 5.1. Simulation der Yang-Mills-Theorie

### Kritische Temperatur

Wir beginnen mit der Untersuchung des Phasenüberganges, um die kritische Temperatur zu bestimmen. Der in Kapitel 2.4.3 besprochene Zusammenhang zwischen WILSON-Kopplung und inverser Temperatur, führt üblicherweise auf die Bestimmung der inversen Temperatur als Größe der WILSON-Kopplung, d.h., dass im Folgenden mit  $\beta_c$  die kritische Kopplung und nicht die inverse Temperatur gemeint sein wird<sup>1</sup>. Wir haben für eine Reihe von verschiedenen Werten für  $\beta = 1.0 \dots 4.0$  zwischen 5 000 und in der Nähe des Phasenüberganges 100 000 'sweeps' zur statistischen Auswertung herangezogen. Als den Phasenübergang anzeigenden Ordnungsparameter benutzen wir den räumlich gemittelten POLYAKOV-Loop und dessen Suszeptibilität:

$$\bar{L} = \frac{1}{|N_S|} \left\langle \sum_{\vec{x}} L_{\vec{x}} \right\rangle \quad (5.1)$$

$$\chi(\bar{L}) = \langle \bar{L}^2 \rangle - \langle \bar{L} \rangle^2 . \quad (5.2)$$

---

<sup>1</sup>Die physikalische Temperatur entzieht sich der unmittelbaren Beobachtung und eine Bestimmung ist auf zusätzliche Methoden angewiesen, auf die wir hier nicht eingehen.

## 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

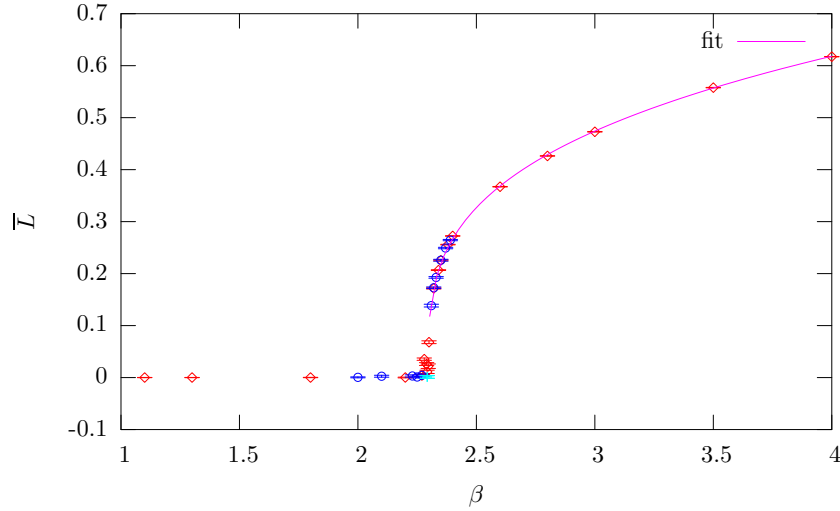


Abbildung 5.1.: Der Erwartungswert des POLYAKOV-Loops als Funktion der Kopplung. Verschiedenfarbige Messpunkte gehören zu voneinander unabhängig durchgeführten Simulationen.

Bei der in (5.1) gegebenen Definition von  $\bar{L}$  ist jedoch zu beachten, dass das mittlere Feld bei einer korrekt durchgeführten Simulation in jedem Fall einen Erwartungswert von Null aufweisen wird, da das (endliche) System stets eine endliche Tunnelwahrscheinlichkeit zwischen den beiden Minima  $\bar{L}$  und  $-\bar{L}$  haben wird. Wir definieren daher zusätzlich zu (5.1)

$$\bar{L}^2 = \lim_{d \rightarrow \infty} G^{(2)}(d). \quad (5.3)$$

Die Äquivalenz von (5.1) und (5.3) ergibt sich mit Hilfe der aus der Statistik bekannten Aussage

$$\langle L_{\vec{x}} L_{\vec{y}} \rangle \xrightarrow{|x-y| \rightarrow \infty} \langle L_{\vec{x}} \rangle \langle L_{\vec{y}} \rangle \quad (5.4)$$

und der Translationsinvarianz des Gitters

$$\bar{L} = \frac{1}{|N_S|} \sum_{\vec{x}} \langle L_{\vec{x}} \rangle. \quad (5.5)$$

Von (5.3) machen wir vor allem in der Nähe des Phasenüberganges Gebrauch, da dort auch für ausgedehnte Gitter die Tunnelwahrscheinlichkeiten zwischen den Minima groß werden. Ininigem Abstand von der kritischen Kopplung erreichen wir bei der von uns benutzten Gittergröße  $N_s = 20$  durch eine Modifikation des Update-Algorithmus<sup>2</sup>, dass sich das System praktisch nur in einem Minimum befindet und die Berechnung von  $\bar{L}$  direkt mit (5.1) vorgenommen werden kann.

<sup>2</sup>Generell werden mikrokanonische Updateschritte, wie sie METROPOLIS- oder Wärmebadalgo-

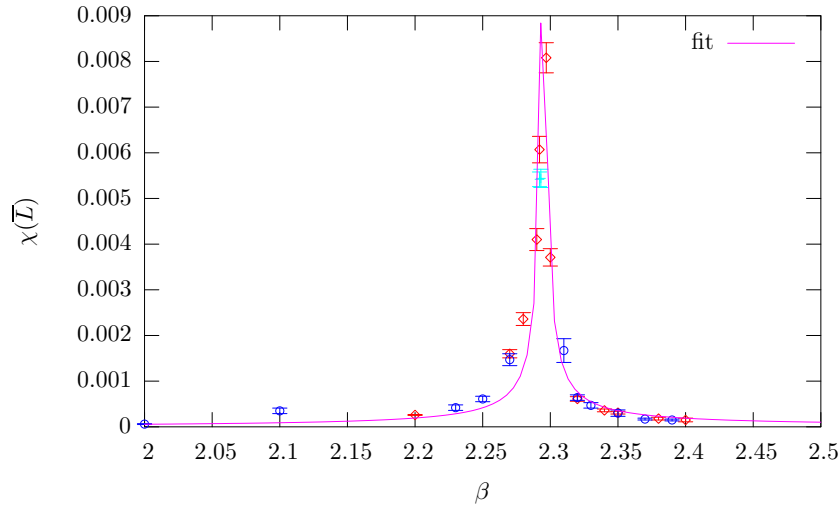


Abbildung 5.2.: Suszeptibilität als Funktion der Kopplung. Verschiedenfarbige Messpunkte gehören zu voneinander unabhängig durchgeführten Simulationen.

Fit	kritische Kopplung $\beta_c$
$\bar{L}$	2.296[2]
$\chi(\bar{L})$	2.295[3]

Tabelle 5.1.: Aus den Kurvenfits gewonnene kritische Kopplung  $\beta_c$ . Die Werte sind in guter Übereinstimmung mit [48, 49].

Die Abbildungen 5.1 und 5.2 zeigen unsere Ergebnisse. Die Kurvenfits haben die Gestalt

$$\bar{L} = a(\beta - \beta_c)^\nu \quad \text{bzw.} \quad \chi(\bar{L}) = a \frac{\beta}{\sqrt{(\beta - \beta_c)^2 + \beta_d}}$$

und dienen uns nur zur Bestimmung des kritischen Punktes (vgl. Tabelle 5.1).

### Zweipunktfunktion

Als eine mögliche Observable, an der ein Vergleich von YANG-MILLS- und *effektiver* Theorie vorgenommen werden kann, untersuchen wir in beiden Fällen die Zweipunktfunktion

$$G^{(2)}(|x - y|) = \left\langle L_{\bar{x}} L_{\bar{y}}^\dagger \right\rangle, \quad (5.6)$$

---

rithmen erzeugen, durch Überrelaxationsschritte ergänzt. In unserem Fall bedeutet dies, dass aus einer Konfiguration in der Nähe von  $\bar{L}$  eine Konfiguration in der Nähe von  $-\bar{L}$  erzeugt wird. Wir lassen diesen Schritt weg und beobachten für  $\beta \geq 2.35$  kein Tunneln mehr.

## 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

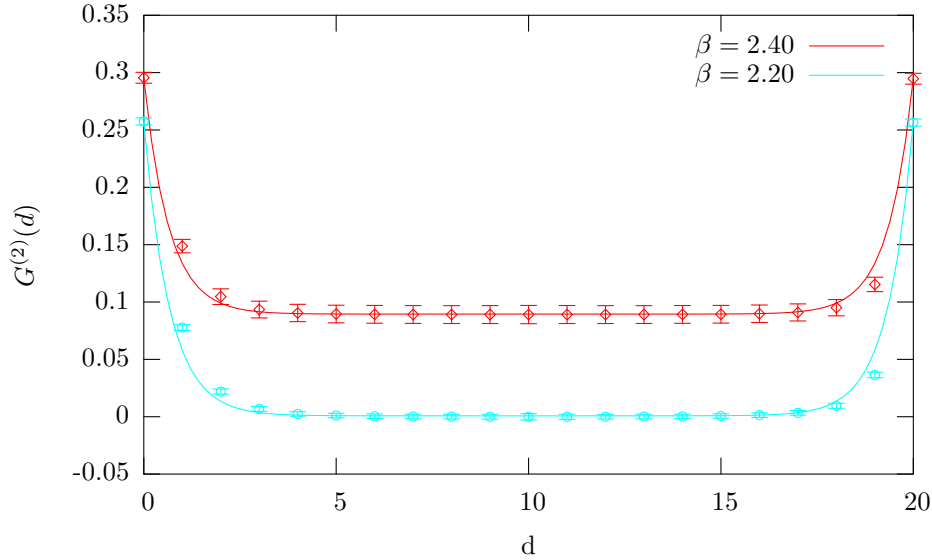


Abbildung 5.3.: Zweipunktsfunktion in gebrochener und ungebrochener Phase. Der endliche Wert für große Abstände in der gebrochenen Phase wird als *Deconfining*-Signal in der YANG-MILLS-Theorie interpretiert.

aus der wir zwei Parameter  $\xi$  und  $\bar{L}^2$  gemäß

$$G^{(2)}(|x - y|) = ce^{-|x-y|/\xi} + \bar{L}^2 \quad (5.7)$$

bestimmen können. Für die praktische Auswertung ist zu beachten, dass durch die periodischen Randbedingungen der exponentielle Abfall (5.7) in einen um die halbe Gitterausdehnung verschobenen  $\cosh(x/\xi)$  übergeht. Der Konvergenz im Kurvenfit kommt dies aber entgegen, so dass die in (5.7) eingeführten Parameter  $\xi$  und  $\bar{L}^2$  schließlich mit Hilfe von

$$G^{(2)}(d = |x - y|) = c(e^{-d/\xi} + e^{(d-N_s)/\xi}) + \bar{L}^2 \quad (5.8)$$

bestimmt wurden.

## 5.2. Simulation der effektiven Theorie

### 5.2.1. Ansatz für die Wirkung

Wir haben bisher nur wenig über die mögliche Form einer *effektive* Wirkung gesagt. Neben der bereits bestehenden Möglichkeit Ansätze aus der Literatur zu testen [20], wollen wir in diesem Abschnitt eine eigenständige systematische Entwicklung motivieren. Zu diesem Zweck erinnern wir noch zunächst an die Modellierung

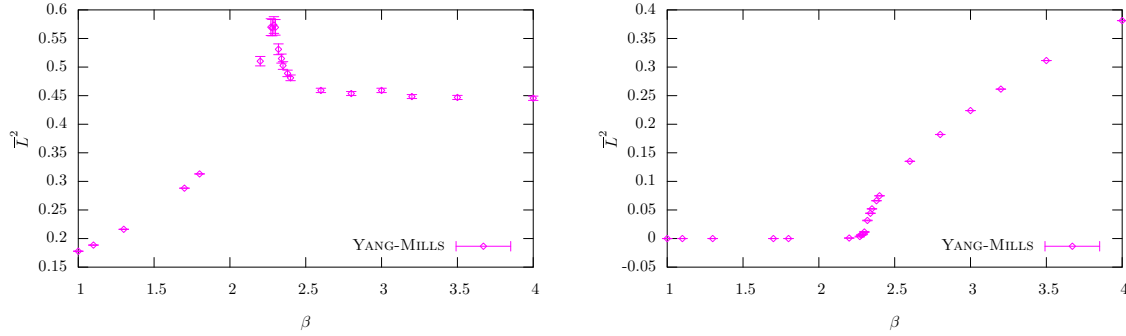


Abbildung 5.4.:  $\xi$  und  $\bar{L}^2$  als Funktion von  $\beta$ , wie sie aus den Kurvenfits bestimmt wurden. Die Werte finden sich in Anhang D.2.

”kinetischer” Kontinuumsterme auf dem Gitter. In einem zweiten Schritt werden wir den dynamischen Inhalt der betrachteten Theorie von  $\mathfrak{P}$  auf das bereits eichinvariante  $L$  reduzieren und schließlich eine Entwicklung nach den Charakteren der Gruppe angeben.

### 'hopping'-Terme

Wir betrachten für den Moment eine skalare Feldtheorie im Kontinuum. Die LAGRANGE-Dichte für EUKLIDISCHE Zeit lautet in diesem Fall (vgl. (2.29))

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi + \frac{1}{2} m^2 \varphi^2 + V(\varphi), \quad (5.9)$$

worauf wir die in Kapitel 2.3 eingeführten Diskretisierungsregeln anwenden. Wir erhalten<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_x &= \sum_\mu \frac{1}{2a^4} (\varphi_{x+\hat{\mu}} - \varphi_x)^2 + \frac{1}{2a^4} m^2 \varphi_x + \frac{1}{a^4} V(\varphi_x) \\ &= \frac{1}{a^4} \left[ \sum_\mu (\varphi_{x+\hat{\mu}}^2 - 2\varphi_x \varphi_{x+\hat{\mu}} + \varphi_x^2) + \frac{1}{2} m^2 \varphi_x + V(\varphi_x) \right]. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Indem wir die Masse geeignet umdefinieren, kann (5.10) in die folgende Form gebracht werden:

$$\mathcal{L}_x = -\frac{1}{a^4} \left[ \sum_\mu (\varphi_x \varphi_{x+\hat{\mu}}) + \frac{1}{2} m'^2 \varphi_x^2 + V(\varphi_x) \right], \quad (5.11)$$

<sup>3</sup>Um die angegebene Form zu erreichen, ist es notwendig von Feld und Masse die Dimension abzuspalten, was korrekterweise unterschieden werden müsste:  $\varphi = \frac{1}{a} \hat{\varphi}$  und  $m = \frac{1}{a} \hat{m}$ . Aus Gründen der Übersichtlichkeit bezeichnen wir trotzdem das Feld wie auch seine numerische Darstellung mit  $\varphi$ .

## 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

mit

$$m'^2 = m^2 + 2d. \quad (5.12)$$

Wir hätten den Term  $2d\varphi_x^2$  ebenso zum Potential hinzunehmen können, einzig wichtig an (5.11) ist die Beobachtung, dass kinetische Terme in Nächste-Nachbar-Wechselwirkungsterme ('hopping'-Terme) übergehen und diese die richtigen Modellierungshilfen bei der Formulierung einer dynamischen Theorie auf dem Gitter sind.

Zwischen der hier betrachteten skalaren Feldtheorie und der von uns untersuchten *effektiven* Theorie gibt es jedoch einen wesentlichen Unterschied. Das skalare Feld ist eine dimensionsbehaftete Größe. Seine Dimension entspricht der einer Masse  $[\varphi] = M$ , wodurch die Dimensionen aller Kopplungen festgelegt sind. Betrachtet man die Operatoren, die eine höhere Massendimension haben, als relevanter, erhält man bereits ein Ordnungsprinzip für eine systematische Entwicklung. Der POLYAKOV-Loop  $L$  hingegen ist eine dimensionslose Größe, so dass alle Kopplungen die gleiche Dimension,  $[\lambda_a] = M^4$  (im Kontinuum), haben und uns ein solches Ordnungsprinzip nicht länger zur Verfügung steht.

### Reduziertes Haar-Maß

Als dynamische Größe wählen wir den (gespurten) *Polyakov*-Loop  $L_{\vec{x}} = \text{tr } \mathfrak{P}_{\vec{x}}$ , da die *effektive* Wirkung nach zentrumssymmetrischen Klassenfunktionen entwickelt werden kann. Das Funktionalmaß (3.14) reduziert sich in diesem Fall auf einen Volumenfaktor entlang der Konjugationsklassen und ein 'reduziertes' HAAR-Maß transversal dazu:

$$\mathcal{D}\mathfrak{P} = \prod_{\vec{x}} d\mu(\mathfrak{P}_{\vec{x}}) = (\mathcal{N})^{\Lambda_s} \prod_{\vec{x}} d\tilde{\mu}(L_{\vec{x}}) = (\mathcal{N})^{\Lambda_s} \mathcal{D}L. \quad (5.13)$$

Da wir in der numerischen Simulation nur Erwartungswerte betrachten können, ist es überflüssig den Faktor  $(\mathcal{N})^{\Lambda_s}$  mitzunehmen, da er sich stets kürzen wird. Im Fall von  $SU(2)$  lässt sich das reduzierte Maß  $d\tilde{\mu}(L_{\vec{x}})$  sofort angeben:

$$\begin{aligned} d\tilde{\mu}(L_{\vec{x}}) &= \sqrt{1 - L_{\vec{x}}^2} dL_{\vec{x}} \\ &= e^{\frac{1}{2} \ln(1 - L_{\vec{x}}^2)} dL_{\vec{x}} \\ &= e^{-S_g} dL_{\vec{x}}, \quad L_{\vec{x}} \in [-1, 1], \end{aligned} \quad (5.14)$$



wovon man sich am leichtesten in den in Kapitel 3 gewählten Koordinaten (3.24) überzeugt<sup>4</sup>. Die eingeführte Schreibweise, den vom Maß herrührenden geometrischen Faktor als additiven Term  $S_g = -1/2 \ln(1 - L_{\vec{x}}^2)$  zur weiter unten besprochenen eigentlichen *effektiven* Wirkung (5.20) zu betrachten, erweist sich im Hinblick auf die Simulation als vorteilhaft.

### Charakterentwicklung

Um eine Klassenfunktion zu entwickeln, benötigen wir ein vollständiges Funktionensystem in diesem Funktionenraum. Die aus der Gruppentheorie bekannten Charaktere bilden – über die notwendige Vollständigkeit hinaus – sogar ein orthonormiertes Funktionensystem. Sie werden daher in der im Folgenden zu besprechenden Entwicklung Verwendung finden. Die zusätzlich geforderte Zentrumsymmetrie ist hierdurch jedoch noch nicht gesichert und wir betrachten dazu das Verhalten der Charaktere unter einer solchen Transformation<sup>5</sup>:

$$\chi_p(zL) = z^p \chi_p(L). \quad (5.15)$$

Produkte von Charakteren  $\chi_p \chi_q$  sind damit genau dann invariant, wenn gilt

$$p \equiv q \pmod{2}. \quad (5.16)$$

Beschränken wir uns weiter auf Nächste-Nachbar Wechselwirkungen, wie sie im vorangegangenen Abschnitt motiviert wurden, ist

$$S_{\text{eff}}[L] = \sum_{\langle pq \rangle} \sum_{\langle \vec{x} \vec{y} \rangle} \lambda_{pq} \chi_p(L_x) \chi_q(L_y) = \sum_{\langle pq \rangle} \lambda_{pq} S_{pq}, \quad (5.17)$$

unter diesen Einschränkungen der allgemeinste Ansatz für die *effektive* Wirkung. In (5.17) haben wir

$$\langle pq \rangle \stackrel{\text{df.}}{=} p \equiv q \pmod{2}$$

als Kurzschreibweise eingeführt. Das in (5.17) angegebene  $S_{\text{eff}}$  ist mit (5.15) offensichtlich zentrumsinvariant. Für die weiteren Rechnungen ist es günstig in (5.17)

<sup>4</sup>In diesen Koordinaten entsprechen Klassenfunktionen gerade Funktionen, die nur von  $P_0 = L$  abhängen.

<sup>5</sup>Zunächst sind die Charaktere eines Gruppenelementes als die Spur  $\chi_r(\mathfrak{P}) = \text{tr}_r \mathfrak{P}$  seiner  $r$ -dimensionalen Darstellung definiert. Für  $SU(2)$  können alle höheren Charaktere als Funktion des Charakters der definierenden Darstellung, also  $L$ , geschrieben werden und das Transformationsverhalten ist durch das von  $L$  festgelegt.

## 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

noch einige Termumformungen vorzunehmen. Dazu betrachten wir zunächst

$$\begin{aligned} S_{pq} &= \sum_{\langle \vec{x} \vec{y} \rangle} \chi_p(L_{\vec{x}}) \chi_q(L_{\vec{y}}) = \sum_{\vec{x}} \sum_i \chi_p(L_{\vec{x}}) \chi_q(L_{\vec{x}+i}) \\ &= \sum_{\vec{x}} \sum_{i>0} [\chi_p(L_{\vec{x}}) \chi_q(L_{\vec{x}+i}) + \chi_p(L_{\vec{x}}) \chi_q(L_{\vec{x}-i})], \end{aligned} \quad (5.18)$$

was sich durch Umbenennen von  $\vec{x} - i \equiv \vec{y}$  und anschließende Umordnung wieder auf

$$S_{pq} = \sum_{\vec{x}} \sum_{i>0} [\chi_p(L_{\vec{x}}) \chi_q(L_{\vec{x}+i}) + \chi_q(L_{\vec{x}}) \chi_p(L_{\vec{x}+i})] \quad (5.19)$$

reduzieren lässt. Damit können die  $\lambda_{pq}$  symmetrisch gewählt und die Terme  $\lambda_{pq}S_{pq}$  und  $\lambda_{qp}S_{qp}$  zusammengefasst werden<sup>6</sup>:

$$S_{\text{eff}} = \sum_{\substack{\langle pq \rangle \\ p \leq q}} \lambda_{pq} S_{pq}. \quad (5.20)$$

Die obige Form der *effektiven* Wirkung zeigt, dass der früher verwendete Index  $a$  nun die geordneten Paare

$$a \in \{(p, q) \in \mathbb{N}^2 : p \equiv q \pmod{2}, p \leq q\}$$

durchläuft.

Die in dieser Arbeit explizit untersuchten *effektiven* Wirkungen bestehen aus den ersten zwei, drei und fünf Termen und wir führen für diese die folgenden Bezeichner ein:

$$S_{\text{eff}}^{(2)} = \lambda_{11} S_{11} + \lambda_{22} S_{22} \quad (5.21a)$$

$$S_{\text{eff}}^{(3)} = \lambda_{11} S_{11} + \lambda_{22} S_{22} + \lambda_{20} S_{20} \quad (5.21b)$$

$$S_{\text{eff}}^{(5)} = \lambda_{11} S_{11} + \lambda_{22} S_{22} + \lambda_{20} S_{20} + \lambda_{33} S_{33} + \lambda_{31} S_{31}. \quad (5.21c)$$

### 5.2.2. Effektive Theorie mit zwei Kopplungen

Um einen Eindruck von den durch (5.21) beschriebenen *effektiven* Theorien zu erhalten, simulierten wir diese zunächst ohne Bezug auf die YANG-MILLS-Theorie, um so einen ersten Überblick über die Phasenstruktur der Theorie zu gewinnen. Wir beschränkten diese Diskussion auf  $S_{\text{eff}}^{(2)}$ , da hier die Ergebnisse übersichtlich

---

<sup>6</sup>Zunächst unterscheiden sich die in (5.20) benutzten Kopplungen durch einen Faktor 2 von den vorherigen, was wir aber durch eine Neudefinition der Symbole nicht weiter berücksichtigen.

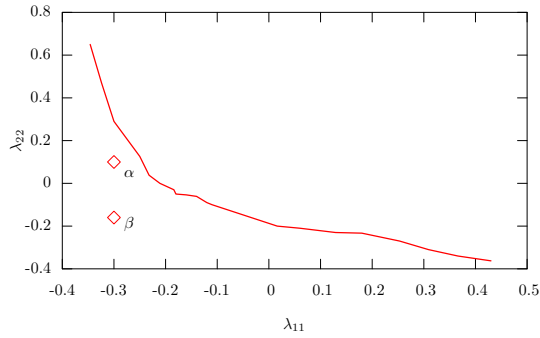


Abbildung 5.5.: Kritische Linie in der  $S_{\text{eff}}^{(2)}$ -Theorie. Die Punkte  $\alpha$  und  $\beta$  beziehen sich auf Abb. 5.6

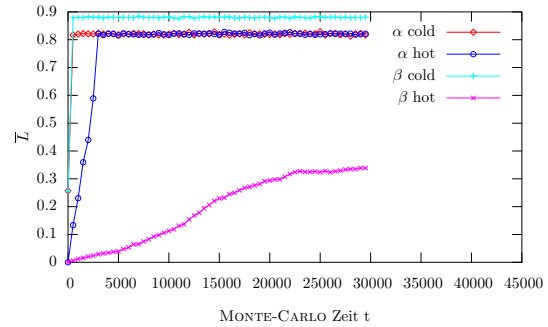


Abbildung 5.6.: Zur Illustration der Schwierigkeiten bei der Thermalisierung in der MONTE-CARLO-Simulation.

dargestellt werden können. Das Phasenportrait wurde durch systematisches Abtasten der Kopplungen  $\lambda_{11}$  und  $\lambda_{22}$  erstellt, wobei die Dichte in der Nähe der kritischen Linie erhöht wurde. Aus den so erhaltenen und in Abb. 5.7 dargestellten Daten, konnte schließlich der genaue Verlauf der kritischen Linie bestimmt werden. Die in der Simulation benutzten Parameter waren 5 000 Thermalisierungs- und 20 000 Mess-’sweeps’, wobei zwischen den einzelnen Messungen 20 bis 50 ’sweeps’ ausgelassen wurden. Wir machten dabei die Beobachtung, dass der von uns eingesetzte METROPOLIS-Algorithmus für diese konkrete Klasse von Theorien nur sehr bedingt geeignet war und anfänglich ein völlig anderes Phasenportrait ergab. Erst eine genauere Untersuchung der Thermalisierungszeiten gab Einblick in die mit dem Algorithmus verbundenen Probleme (vgl. Abb. 5.6). Insbesondere in der gebrochenen Phase der Theorie war das Einstellen des Gleichgewichts mit einer zufällig verteilten Startkonfiguration (’hot-start’) nicht zu erreichen. Interessanterweise konnte das System zwar langsam aus der gebrochenen in die symmetrische Phase gebracht werden, der gleiche Weg zurück war hingegen unmöglich und verhinderte unsere ursprüngliche Strategie mit geringeren Thermalisierungszeiten auszukommen<sup>7</sup>.

Wir gehen davon aus, dass die gemachten Erfahrungen mit Algorithmus und Implementation sinngemäß auch für die erweiterten Wirkungen  $S_{\text{eff}}^{(3)}$  und  $S_{\text{eff}}^{(5)}$  gelten.

<sup>7</sup>Dazu wollten wir eine auf  $\vec{\lambda}_i = (\lambda_{11,i}, \lambda_{22,i})$  thermalisierte Konfiguration als Ausgangspunkt für die Messung bei einem dicht benachbarten Datenpunkt  $\vec{\lambda}_{i+1} = (\lambda_{11,i} + \Delta, \lambda_{22,i})$  nutzen. Durch das im Text beschriebene Phänomen war der Erfolg dieser Strategie aber abhängig von der Richtung geworden, in der die kritische Linie überquert wurde.

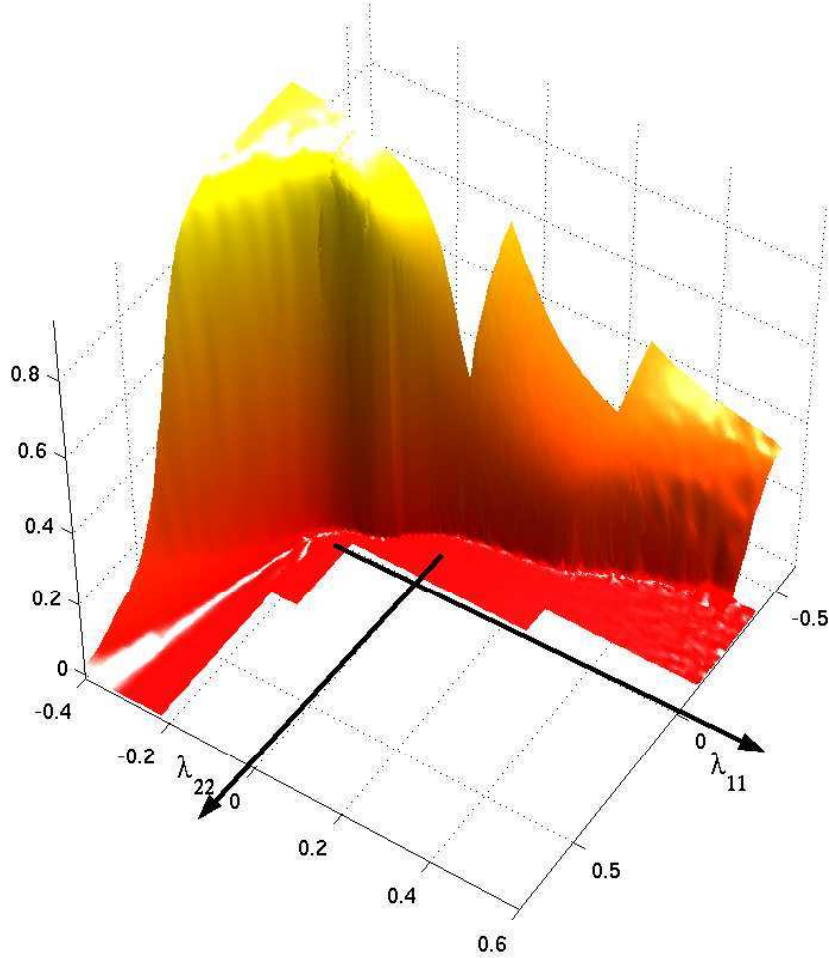


Abbildung 5.7.: Erwartungswert des räumlich gemittelten POLYAKOV-Loops  $\bar{L}$  in der durch  $S_{\text{eff}}^{(2)}$  beschriebenen Theorie als Funktion von  $\lambda_{11}$  und  $\lambda_{22}$ .

## 5.3. Inverse Monte-Carlo

### 5.3.1. Bestimmung der Kopplungen

Gemäß Abschnitt (4.2.3) verwenden wir als SCHWINGER-DYSON-Operatoren

$$G_{pq,z} = \frac{\delta}{\delta L_z} S_{pq} = \sum_i \chi'_p(L_z) \chi_q(L_{z+i}) + \chi'_q(L_z) \chi_p(L_{z+i}). \quad (5.22)$$

Zur Bestimmung der Kopplungen wurden dabei die acht Operatoren bis  $q = 4$  sowie der Operator  $G_{55,\vec{z}}$  benutzt<sup>8</sup>. Mit der bereits besprochenen möglichen Überbestimmung durch Wahl verschieden großer Abstände zwischen  $\vec{x}$  und  $\vec{z}$  ergeben sich damit bei der gewählten Gittergröße von  $N_s = 20$  insgesamt  $9 \cdot d$ ,  $d = 0 \dots 10$ ,

<sup>8</sup>In Anhang C findet sich die explizite Form aller eingesetzten Operatoren.

also 99 Gleichungen in den zu bestimmenden zwei, drei oder fünf Unbekannten. Auf jeder Konfiguration  $\{\mathfrak{P}_i\}$  wurden die Koeffizienten  $\mathbf{M}_{ab}$  und  $g_b$  durch räumliche Mittelung über das Gitter und anschließend daraus eine Lösung  $\vec{\lambda}_i$  berechnet. Das Endresultat wurde aus dem arithmetischen Mittel aller  $\vec{\lambda}_i$  und die Genauigkeit der gewonnenen Daten mit der 'bootstrap'-Methode bestimmt<sup>9</sup>. In Abbildung 5.8 haben wir die *effektiven* Kopplungen  $\lambda_{pq}$  als Funktion der WILSON-Kopplung  $\beta_g$  aufgetragen. In jedem Fall kann ein deutliches Signal in der Nähe der kritischen Temperatur beobachtet werden. Dies bedeutet jedoch nicht, dass die *effektiven* Theorien ihrerseits an dieser Stelle durch einen Phasenübergang gehen, worauf wir weiter unten zurückkommen. Ebenfalls bemerkenswert, ist die erkennbare Ordnung der Kopplungen, die mit steigendem  $p$  um jeweils eine Größenordnung von  $-2 \cdot 10^{-1}$  für  $p = 1$  auf  $4 \cdot 10^{-3}$  für  $p = 3$  abnehmen. Streng genommen gilt diese Aussage nur in der gebrochenen Phase, während in der symmetrischen alle Kopplungen bis auf  $\lambda_{11}$  faktisch verschwinden. Ob die höheren Kopplungen wirklich identisch Null sind, konnte mit der zur Verfügung stehenden Statistik<sup>10</sup> nicht zweifelsfrei festgestellt werden und ist Gegenstand weiterführender Untersuchungen. Dennoch halten wir dies für ein deutliches Indiz, dass in diesem Sektor der Theorie die *effektive* Theorie mit dem von uns vorgeschlagenen Ansatz (5.20) bereits durch die fundamentale Darstellung des POLYAKOV-Loops  $\chi_1(L)$  ausreichend beschrieben wird. Die Daten für die Kopplungen  $\lambda_{33}$  und  $\lambda_{31}$  zeigen mit den angegebenen Fehlern auf, dass für die nächste Ordnung  $p = 4$  die Statistik ebenfalls deutlich verbessert werden muss. Unter den Kapitel 4.1.2 diskutierten Gesichtspunkten ist dabei eine signifikante Verbesserung der Ergebnisse nicht unter einem Faktor 10 zu erwarten.

---

<sup>9</sup>Eine alternative Bestimmung der Genauigkeit besteht darin, bei der 'least-square' Lösung von  $\mathbf{M}\vec{\lambda} = \vec{g}$ , die Koeffizienten gemäß ihrer Genauigkeit zu wichten. Wir verzichten auf diese Betrachtung, da wir die im Text beschriebene Methode für genauso aussagekräftig halten.

<sup>10</sup>Diese hängt natürlich stark von den gegebenen technischen Möglichkeiten ab. Mit bis zu 100 000 sweeps für ein  $\beta_g$  war unsere Hardware bis an ihre Grenzen ausgelastet.

## 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

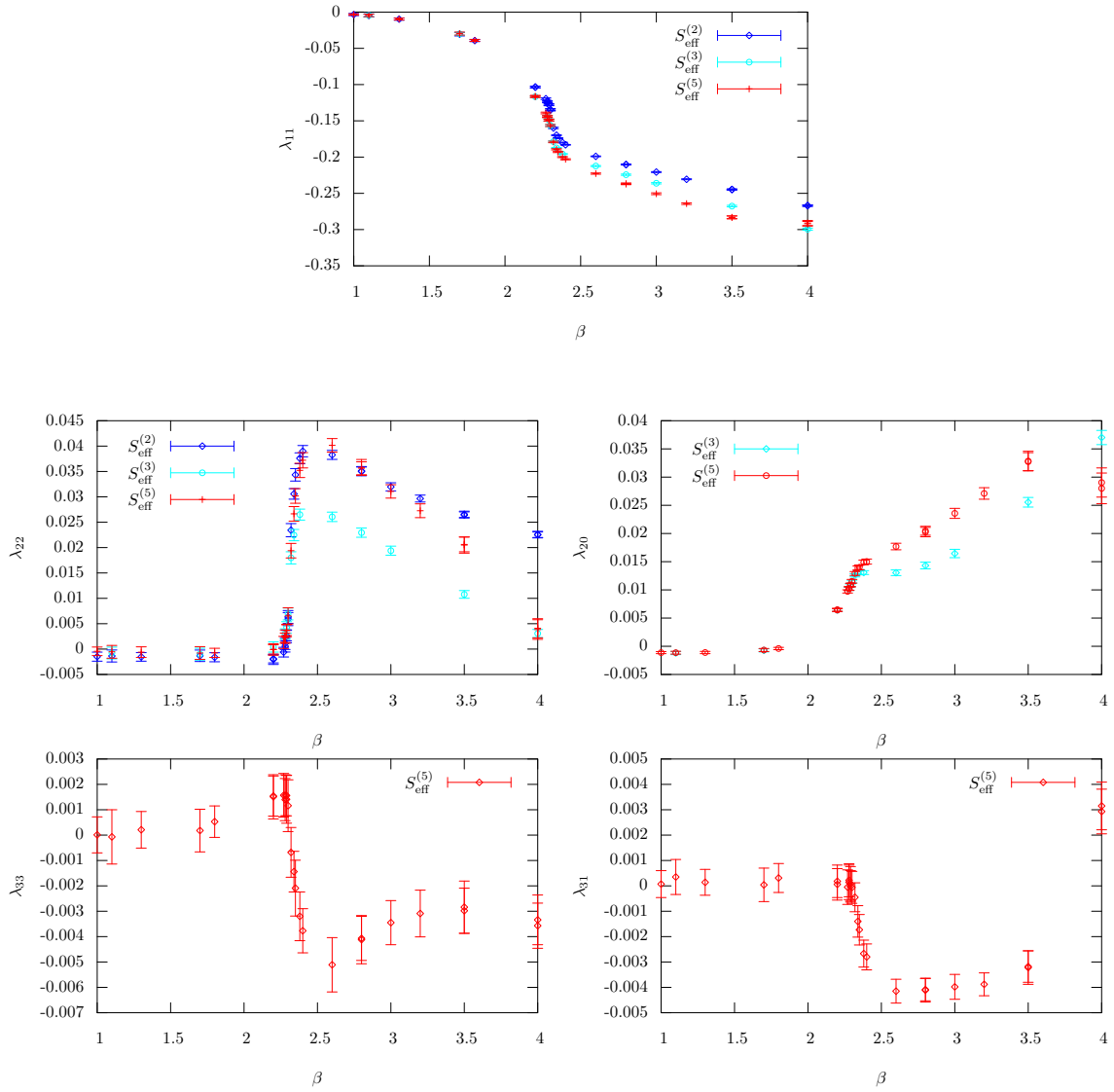


Abbildung 5.8.: Die *effektiven* Kopplungen als Funktion von  $\beta_g$ . Die zugehörigen Werte finden sich in Anhang D.1.

### 5.3.2. Vergleich mit Yang-Mills

Der Grund für unsere Untersuchungen der *effektiven* Wirkungen (5.21) war, ihre Vorhersagekraft für die ursprünglich formulierte YANG-MILLS-Theorie zu überprüfen. Wir beschreiben im Folgenden unsere Kriterien dafür und diskutieren die gewonnenen Ergebnisse.

Inwieweit die *effektiven* Theorien Observablen der Ausgangstheorie voraussagen können, hängt sicherlich von den zu untersuchenden Observablen ab. Im Sinne einer Approximation würden wir sagen, dass die YANG-MILLS- und *effektive* Theorien die gleiche Physik beschreiben, wenn sie für eine ausgewählte Klasse von Observablen die gleichen Erwartungswerte vorhersagen. Eine für die Feldtheorie besonders wichtige Observable ist dabei stets durch die Zweipunktfunktion (5.6) gegeben, die gerade dem Propagator der Theorie entspricht. Wir haben bereits in einem früheren Abschnitt die für uns relevanten Parameter der Zweipunktfunktion eingeführt (vgl. (5.7)) und für die YANG-MILLS-Theorie bestimmt (vgl. Abbildung 5.1). Indem wir für die erhaltenen Kopplungen die *effektiven* Theorien simulieren, können diese erneut bestimmt und mit denen der ursprünglichen Theorie verglichen werden. Dieser Vergleich erscheint uns besonders als Funktion der WILSON-Kopplung  $\beta_g$  interessant. Anhand der Abbildungen 5.9 und 5.10 wird deutlich, dass für kleine Kopplungen wie für große Kopplungen,  $\beta < 2.20$  bzw.  $\beta_g > 3.5$ , sowohl die Korrelationslänge  $\xi$  als auch das Quadrat des Erwartungswertes des POLYAKOV-Loops  $\bar{L}^2$  gut übereinstimmen. Im weitaus interessanteren Bereich, d.h. in der Nähe der kritischen Kopplung  $\beta_c = 2.296$  (vgl. 5.1), sind – nicht unerwartet – signifikante Unterschiede erkennbar. Zum einen wirkt sich die vorgenommene Trunkierung nach höchstens fünf Termen trotz der gefundenen Hierarchie der Kopplungen nach wie vor auf das erhaltene Ergebnis aus und zum anderen berücksichtigt der untersuchte Ansatz nur die einfachsten Wechselwirkungsterme. So wurden mit der in [21] vorgeschlagenen und insgesamt aus 14 Operatoren bestehenden *effektiven* Wirkung, die auch Übernächste-Nachbar-Wechselwirkungen berücksichtigt, bereits bessere Ergebnisse gefunden. Dennoch kann besonders in der symmetrischen Phase der YANG-MILLS-Theorie diese zumindest anhand der vorgegebenen Kriterien sehr gut durch eine *effektive* Theorie in nur einem Term  $S_{11}$  beschrieben werden. Dies folgt aus dem (numerischen) Verschwinden der höheren Kopplungen (vgl. Abbildung 5.8) und der ausgezeichneten Übereinstimmung der Zweipunktfunktion in diesem Sektor (vgl. Abbildung 5.11).

## 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

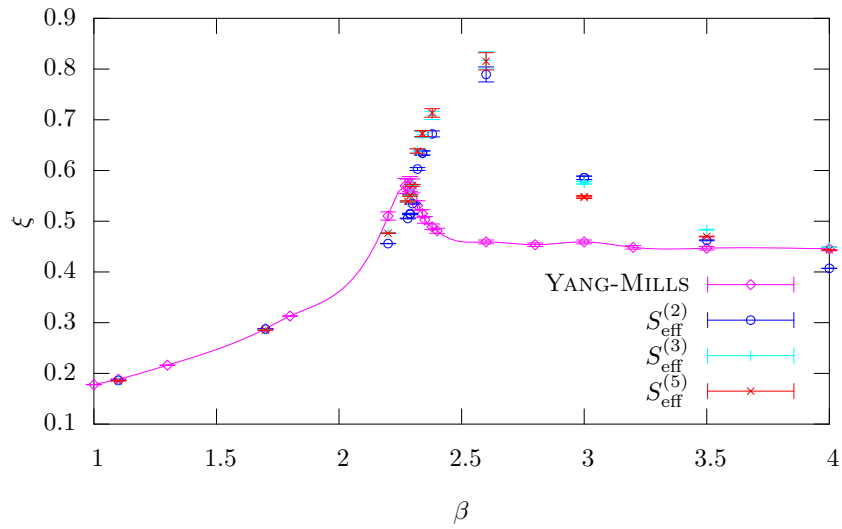


Abbildung 5.9.:  $\xi$  als Funktion von  $\beta_g$  (zur besseren Orientierung wurden die YANG-MILLS-Punkte verbunden). Wieder ist der Phasenübergang deutlich zu erkennen, obwohl der Verlauf für die *effektiven* Theorien zu größeren Kopplungen verschoben ist.

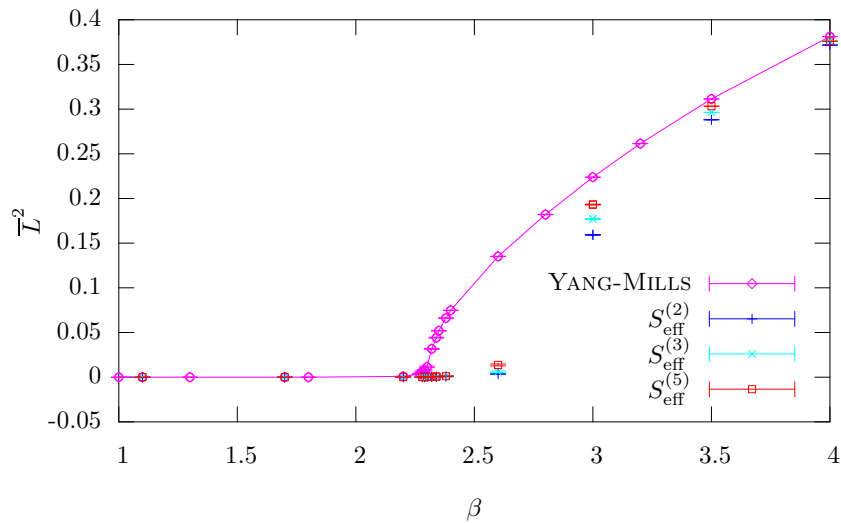


Abbildung 5.10.:  $\bar{L}^2$  als Funktion von  $\beta_g$ . Wie auch schon für  $\xi$  in Abbildung 5.9 beobachtet, sind die größten Abweichungen in der Nähe der kritischen Kopplung zu beobachten, während in der symmetrischen Phase, bzw. für hinreichend große  $\beta_g$  die Vorhersagen der *effektiven* Theorien mit denen der YANG-MILLS-Theorie übereinstimmen.



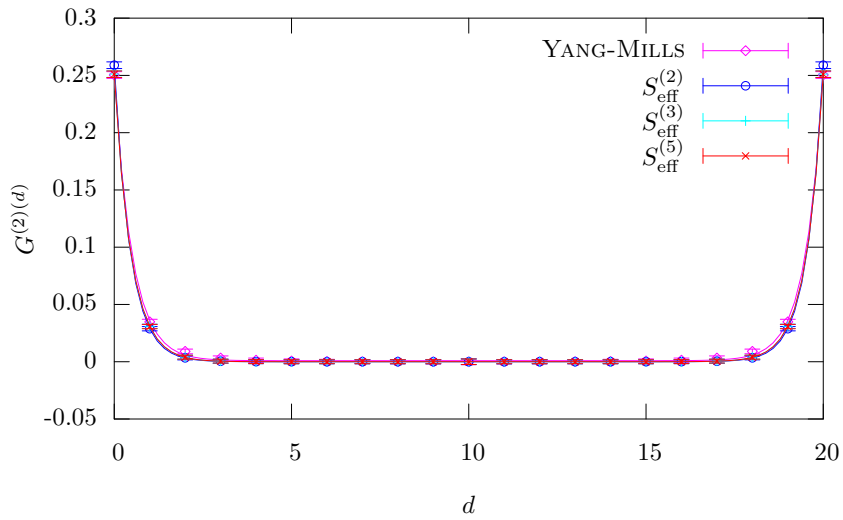


Abbildung 5.11.: Zweipunktfunktion  $G^{(2)}(d)$  für  $\beta_g = 2.20$ .

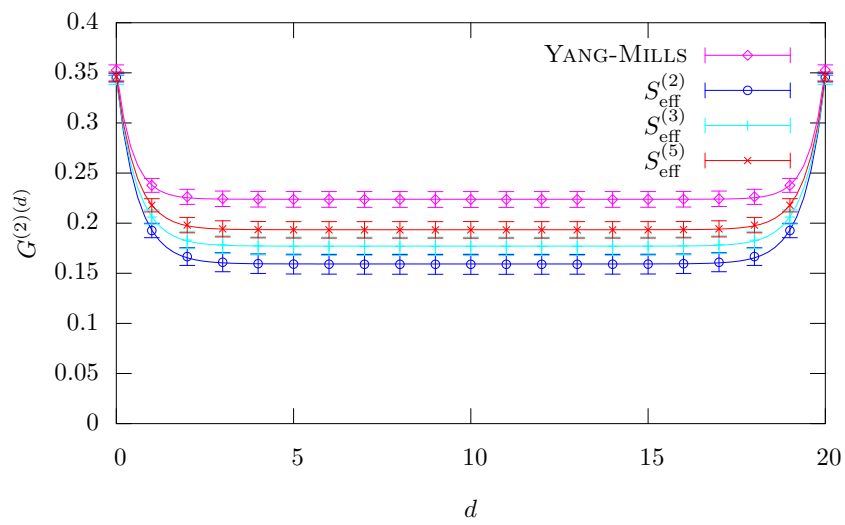


Abbildung 5.12.: Zweipunktfunktion  $G^{(2)}(d)$  für  $\beta_g = 3.00$ .

## 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

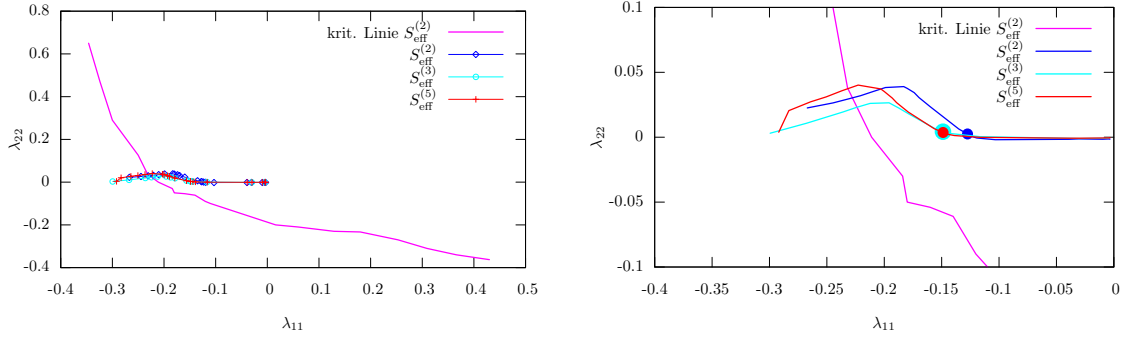


Abbildung 5.13.: Trajektorie der YANG-MILLS-Theorie im Parameterraum von  $S_{\text{eff}}^{(2)}$ . Die kritische Linie wurde bereits in Abbildung 5.5 gezeigt. In der Vergrößerung sind die Punkte für  $\beta = 2.29$ , also in unmittelbarer Nähe der kritischen YANG-MILLS-Kopplung hervorgehoben.

### 5.3.3. Yang-Mills-Trajektorie

An dieser Stelle interessieren wir uns für die Bereiche im Parameterraum der *effektiven* Theorien, in denen die aus der YANG-MILLS-Theorie gewonnenen Kopplungen liegen. Wir greifen hierzu auf das bereits in Kapitel 5.2.2 gewonnene Phasenportrait der durch  $S_{\text{eff}}^{(2)}$  beschriebenen Theorie zurück und fügen die Kopplungen als Trajektorie hinzu (vgl. Abbildung 5.13). Dieses Vorgehen ist für die tatsächlich in dieser Theorie gefundenen Werte korrekt, und wir gehen davon aus, dass für die ebenfalls hinzugefügten Trajektorien von  $S_{\text{eff}}^{(3)}$  und  $S_{\text{eff}}^{(5)}$  die kritische Linie immer noch eine gute Näherung darstellt. Eingehender betrachtet sind diese zwei Kurven als Projektionen auf die  $\lambda_{11}$ - $\lambda_{22}$ -Ebene zu verstehen, wobei Effekte der höheren Kopplungen im Nachhinein wieder vernachlässigt werden. Der Fluss der Trajektorien verläuft – wie zu erwarten – für anwachsende Kopplung  $\beta_g$  von Links (aus der symmetrischen) nach Rechts (in die gebrochene Phase). Die kritische Kopplung  $\beta_c$  liegt in allen Fällen noch deutlich in der symmetrischen Phase, ein Resultat was auch anhand der Zweipunktfunktion deutlich wird. Die *effektiven* Theorien durchlaufen ihren jeweiligen Phasenübergang für etwas größere  $\beta_g$ , als dies für die YANG-MILLS-Theorie der Fall ist. Bisher wurde von uns noch keine Begründung für dieses Verhalten gefunden. Eine erste Vermutung könnte diese Verschiebung jedoch mit der Abwesenheit von weitergehenden Wechselwirkungstermen der Form wie sie in [21] diskutiert wurden in Verbindung bringen.

## 5.4. Zusammenfassung

Die erhaltenen Ergebnisse zeigen, dass mit der vorgestellten Inverse-MONTE-CARLO-Methode die freien Parameter oder Kopplungen von *effektiven* Theorien numerisch fixiert werden können. Somit wird ein direkter Vergleich von ursprünglicher und *effektiver* Theorie auf Ebene der beiden Theorien gemeinsamen Observablen möglich. Die so gewonnenen Informationen können dazu genutzt werden, vorgeschlagene Ansätze nach ihrer Relevanz für die zu approximierende Theorie zu ordnen, bevor weitere analytische Anstrengungen ('mean-field', o.ä.) unternommen werden. Wir betrachten diese Möglichkeit als sehr hilfreich, da *effektive* Theorien von ihrer Form her zwar einfacher angelegt sein sollen als die ursprüngliche Theorie, aber auf der anderen Seite natürlich auch deren im jeweiligen Kontext interessanten Merkmale aufweisen müssen. Anhand der beschriebenen und auf einen einfachen Ansatz (5.20) angewandten Methode kann sehr früh festgestellt werden, inwieweit dieser Ansatz den vorgegebenen Vergleichskriterien (in dieser Arbeit die Zweipunktfunktion) genügt. Durch die vorgestellten Resultate ermutigt, wurde der Ansatz inzwischen auch analytisch eingehender untersucht. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse sind jedoch nicht mehr Teil dieser Arbeit und werden in [20] veröffentlicht. Das mit hoher Datendichte untersuchte Verhalten der Kopplungen wie der Parameter der Zweipunktfunktion als Funktion von  $\beta_g$  hat ein interessantes Bild ergeben. Die Kopplungsfunktionen weisen alle ein ausgeprägtes Signal bei der kritischen Kopplung  $\beta_c$  auf, was jedoch nicht direkt zum kritischen Verhalten der *effektiven* Theorien führt. Der Phasenübergang findet in diesen erst für  $\beta_g \approx 2.6$  statt, was einer prozentualen Abweichung von 13% entspricht. Über die Gründe für diese Abweichungen gibt es im Moment noch keine gesicherten Aussagen. Einen ersten Hinweis bietet der Vergleich zu [21, 19], auf den wir weiter unten noch einmal ausführlicher zurückkommen werden. Anhand der Parameter der Zweipunktfunktion können Aussagen über den Gültigkeitsbereich der untersuchten *effektiven* Theorien gemacht werden. Aus den Ergebnissen wird deutlich, dass das Verhalten der Zweipunktfunktion in der symmetrischen Phase bereits durch  $S_{11}$  – einer ISING-artigen Wirkung – sehr gut beschrieben wird. In der gebrochenen Phase kommt es erst ab  $\beta = 3.5$  wieder zu einer Übereinstimmung zwischen YANG-MILLS- und den betrachteten *effektiven* Theorien. In dieser Phase gewinnen die höheren Darstellungen an Bedeutung und verbessern signifikant die Approximation.

Ein zweites wichtiges Ergebnis dieser Arbeit ergibt sich im Vergleich zu der in [21] vorgeschlagenen Wirkung. Der dort gemachte Ansatz berücksichtigt neben der

## 5. Ergebnisse für $SU(2)$ -Eichtheorie

hier benutzten NN-Wechselwirkung zusätzlich ÜNN-Wechselwirkungsterme und koppelt auch mehr als zwei 'sites' miteinander. Mit unserem Ansatz gemein ist hingegen die Entwicklung der Kopplungsterme nach Charakteren. Dabei werden in [21] jedoch nur gleiche Darstellungen gekoppelt, d.h. es galt stets  $p = q$ . Die vorliegende Arbeit ergänzt die bisherigen Resultate, indem wir – unter Einschränkung auf NN-Wechselwirkung – den Einfluss von Kopplungen unterschiedlicher Darstellungen aneinander, wie sie in den Termen  $S_{20}$  und  $S_{31}$  zum Ausdruck kommt, eingehend studiert haben. Der Vergleich der Ergebnisse zeigt, dass mit dem Ansatz aus [21] bessere Vorhersagen gemacht werden können, wenn auch zum Preis einer komplizierteren, d.h. aus 14 statt 5 Termen bestehenden Wirkung. Insbesondere in der Nähe der kritischen Kopplung  $\beta_c \approx 2.29$  stimmen die Zweipunktfunktionen besser überein. Dies lässt uns zu dem Schluss kommen, dass in diesem Bereich der Theorie die hier betrachteten Wirkungsterme, die in ihrer Gestalt einfache 'hopping'-Terme sind, nicht ausreichen. Wir erwarten daher von qualitativ neuen Termen und weit weniger von höheren Darstellungen Verbesserungen der Approximation.

Der für die Simulation der Theorien und Berechnung der gewonnenen Daten geschriebene Programmcode ist schließlich das dritte wesentliche Resultat, dass im Rahmen dieser Arbeit erzielt wurde. Entwurf und Programmierung des in Anhang B ausführlich vorgestellten Paketes `jenLaTT` beanspruchten einen großen Teil der eingesetzten Arbeitszeit. Die enthaltenen Programmbibliotheken stellen eine Infrastruktur zur Verfügung, welche die Programmierung zukünftiger Anwendungen erheblich erleichtern wird. Noch ausstehende Ergebnisse für den Fall  $SU(3)$  sind daher in kurzer Zeit zu realisieren. Die für das Paket entworfene Implementation der IMC-Methode erlaubt darüber hinaus Aussagen über die statistische Genauigkeit der errechneten Kopplungen, die in früheren Implementationen in diesem Umfang nicht zur Verfügung standen.

## 6. Ausblick auf $SU(3)$

Nachdem die IMC Methode ausführlich am einfacheren und übersichtlicheren Fall  $SU(2)$  untersucht wurde, stellt sich im nächsten Schritt die Frage nach der Verallgemeinerung auf höhere  $SU(N)$  und dabei insbesondere auf die die starke Wechselwirkung beschreibende  $SU(3)$ -YANG-MILLS-Theorie. Im Rahmen dieser Arbeit können, wie bereits angedeutet, noch keine Ergebnisse präsentiert werden. Dennoch wollen wir die bisher unternommenen Vorbetrachtungen und Ansätze zusammenfassen, um aufzuzeigen, welche Probleme bereits als gelöst angesehen werden können und was sich im Vergleich zur bisherigen Arbeit ändert. Dieses Kapitel umfasst unsere bisherigen Simulationsergebnisse für die YANG-MILLS-Theorie, d.h. unsere Untersuchungen zur kritischen Temperatur bzw. Kopplung  $\beta_c$ . Des Weiteren werden die für diesen Kontext relevanten Ergebnisse aus [8] vorgestellt. Schließlich werden wir eine Verallgemeinerung des Ansatzes (5.20) für eine *effektive* Wirkung für  $SU(3)$  angeben.

### 6.1. Simulation der Yang-Mills-Theorie

Wie schon für die  $SU(2)$ -Theorie bestimmen wir zunächst die kritische Kopplung  $\beta_c$ . Dazu haben wir auf Gittern mit unterschiedlichen Längen  $N_\tau$  zunächst den Erwartungswert des POLYAKOV-Loops als Funktion der Kopplung gemessen. Abbildung 6.1 illustriert die Überlegungen aus Abschnitt 2.4.3, die zusammen mit (2.55c) das beobachtbare Verhalten erklären. Da die kritische Temperatur  $T_c$  physikalisch stets die gleiche ist, muss sich aus den unterschiedlichen Gitterlängen  $N_\tau$  auch jeweils eine andere Gitterkonstante  $a$  ergeben, an denen  $T_c = aN_\tau$  gilt. Kleine  $N_\tau$  bedingen ein größeres  $a(\beta_g)$  und aus Abbildung 6.1 wird ersichtlich, dass dies für kleinere  $\beta$  realisiert ist. Anders ausgedrückt ist der Kontinuumslimites – wie nach (2.59) erwartet – durch  $\beta_g \rightarrow \infty$  gegeben. Die unterschiedlichen Amplituden für die gezeigte Observable  $|\langle L \rangle|$  sind mit der Feldnormierung des POLYAKOV-Loops verbunden. Wir gehen hier nicht näher darauf ein und verweisen auf [22]. Stattdessen wenden wir uns der Natur des Phasenüberganges zu.

## 6. Ausblick auf $SU(3)$

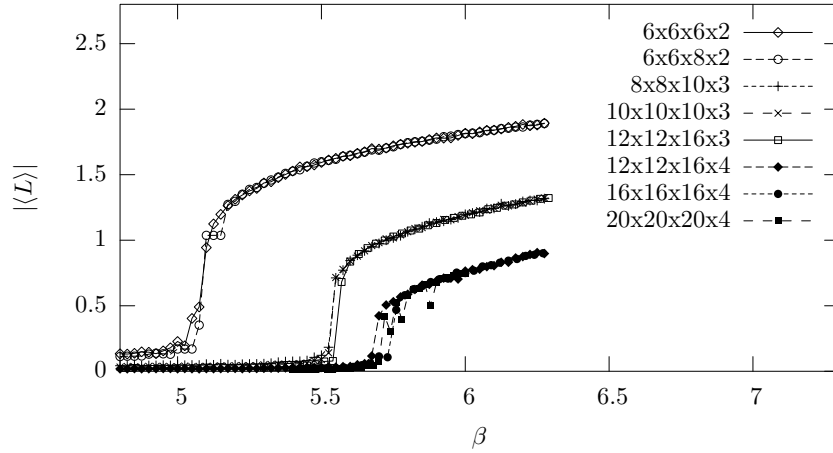


Abbildung 6.1.: Die kritische Temperatur hängt vom Produkt  $\beta = a(\beta_g) \cdot N_\tau$  ab (vgl. Abschnitt 2.4.3). Unterschiedliche räumliche Ausdehnungen machen sich erst für  $N_\tau = 4$  bemerkbar, so dass im Umkehrschluss für kleinere Werte der thermodynamische Limes  $V \rightarrow \infty$  für die gewählten Gittergrößen  $N_s = 12..20$  qualitativ realisiert ist.

Im Fall der  $SU(2)$ -Theorie liegt ein Phasenübergang 2. Ordnung vor [48], d.h. der Ordnungsparameter ist eine stetige Funktion der Temperatur. Für die hier betrachtete  $SU(3)$ -Theorie ist hingegen ein Phasenübergang (schwacher) erster Ordnung zu beobachten [65], was wir genauer untersuchen wollen. Als Ordnungsparameter wählen wir erneut den räumlich gemittelten POLYAKOV-Loop, den wir jetzt bweichend von unserer bisherigen Notation mit einem fett gesetzten  $\mathbf{L}$  notieren werden:

$$\mathbf{L} = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\vec{x}} L_{\vec{x}}. \quad (6.1)$$

Im Folgenden werden wir unter  $\bar{L}$  das komplex Konjugierte von  $L$  verstehen. Eine in der Simulation unmittelbar zugängliche Größe ist die Verteilung einer Observablen, in unserem Fall des POLYAKOV-Loops  $p(\mathbf{L})$ . Diese Verteilung steht im direkten Bezug zum 'constrained effective potential', wie es in [32] für das reelle skalare Feld eingeführt wurde. Dazu betrachten wir

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int \mathcal{D}\mathfrak{P} e^{-S_{\text{eff}}[L]} &= \int \mathcal{D}L e^{-S_{\text{eff}}[L]} \\ &= \int_D d\mathbf{L} \int \mathcal{D}L \delta\left(\mathbf{L} - \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\vec{x}} L_{\vec{x}}\right) e^{-S_{\text{eff}}[L]} \\ &= \int_D d\mathbf{L} e^{-|\Lambda| U_{\text{eff}}^{(c)}(\mathbf{L})}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

In der zweiten Zeile wurde benutzt, dass die Wirkung als Klassenfunktional konstant auf Konjugationsklassen ist und diese demnach ausintegriert werden können.

Das anschließende Einschleiben einer  $\mathbb{1}$  reduziert das Funktionalintegral auf ein gewöhnliches Integral. Im letzten Schritt haben wir einen Volumenfaktor abgespalten, um der verbleibenden Größe einen sinnvollen thermodynamischen Limes zuordnen zu können. Mit den Überlegungen aus 4.1.1 lesen wir somit aus (6.2)

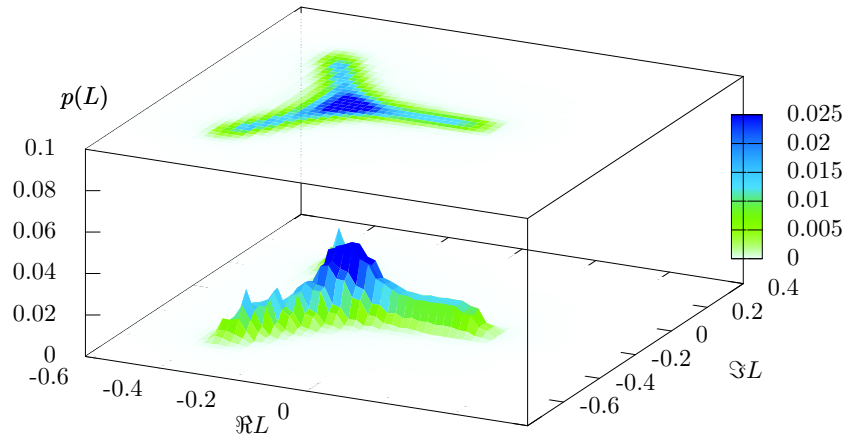
$$p(\mathbf{L}) \sim e^{-|\Lambda| U_{\text{eff}}^{(c)}(\mathbf{L})} \quad (6.3)$$

ab. Eventuell vom Maß herrührende geometrische Faktoren wurden dabei unberücksichtigt gelassen. Die entscheidende Aussage von (6.3) ist vielmehr, dass die Maxima der Verteilung  $p(\mathbf{L})$  gerade den Minima des Potentials  $U_{\text{eff}}^{(c)}(\mathbf{L})$  entsprechen. Indem wir MONTE-CARLO-Simulationen mit sehr großer Statistik (100 000 'sweeps') durchgeführt haben, konnte diese Verteilung bestimmt werden, was in Abbildung 6.2 dargestellt ist. Für  $\beta = 5.690$  sind deutlich vier Maxima der Verteilung zu unterscheiden, und was physikalisch der Koexistenz von symmetrischer und gebrochener Phase entspricht. Anhand des zuvor eingeführten 'constrained effective potentials' bedeutet dies, dass sich, neben dem Minimum für  $\mathbf{L} = 0$ , weitere Minima für  $\mathbf{L} \neq 0$  gebildet haben, die bei der kritischen Temperatur alle den gleichen Wert annehmen  $U(\mathbf{L} = 0) = U(\mathbf{L}_i)$ <sup>1</sup>. Die zusätzlichen Minima entstehen dabei von Anfang an in einem endlichen Abstand von  $\mathbf{L} = 0$ , wie deutlich an 6.2(b) zu erkennen ist. Dies entspricht genau den Charakteristika eines Phasenüberganges 1. Ordnung, der dadurch ausgezeichnet ist, dass der Erwartungswert des Ordnungsparameters (das absolute Minima des 'constrained effective potentials') unstetig einen von Null verschiedenen Wert annimmt.

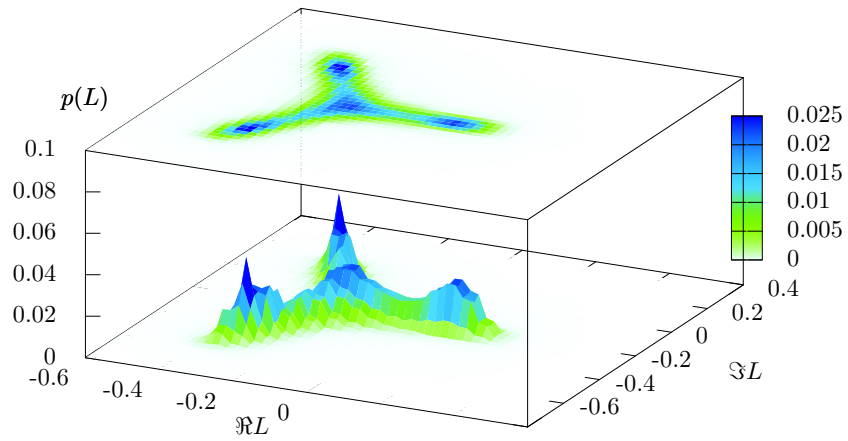
---

<sup>1</sup>Natürlich sind die Minima  $\mathbf{L}_i$  durch die Zentrumssymmetrie miteinander verbunden. Bei der Auswertung wurde dies ausgenutzt, um jedes gemessene Datum  $\mathbf{L}$  durch diese Symmetriertransformationen zu verdreifachen, was die Statistik verbesserte. Zuvor waren aber auch ohne diese nachträgliche Symmetrisierung die wiedergegebenen Strukturen erkennbar.

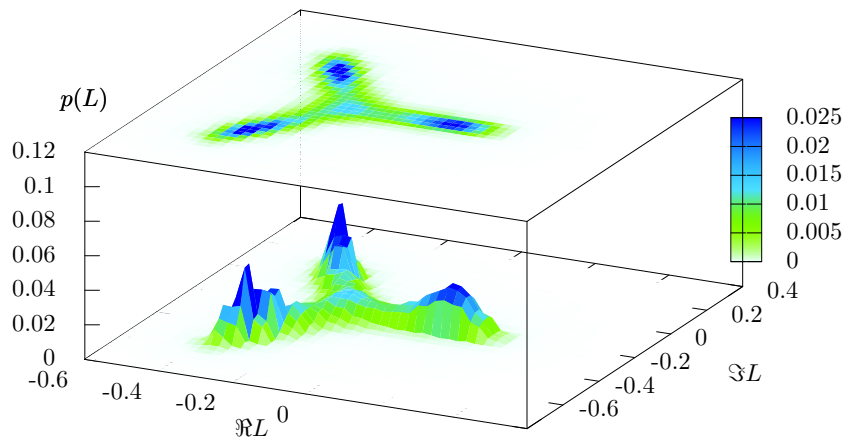
6. Ausblick auf  $SU(3)$



(a)  $\beta = 5.688$

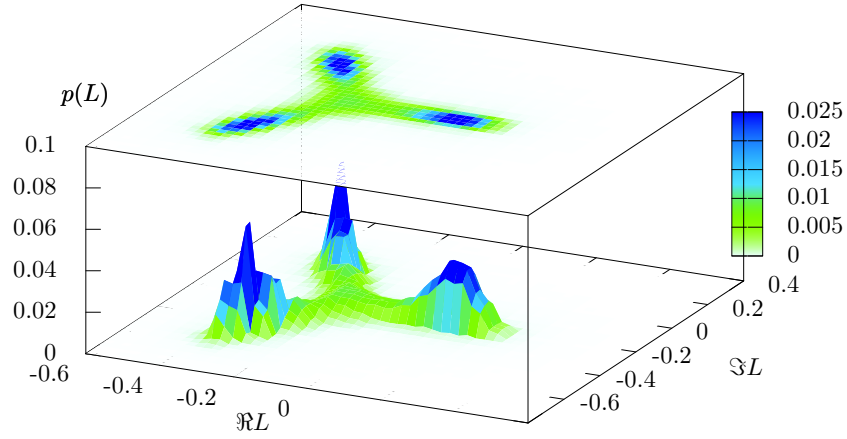


(b)  $\beta = 5.690$

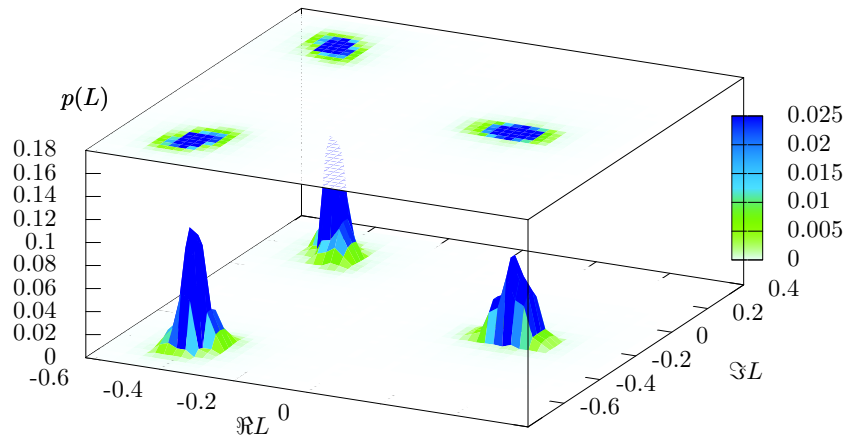


(c)  $\beta = 5.692$





(d)  $\beta = 5.695$



(e)  $\beta = 5.800$

Abbildung 6.2.: Der Phasenübergang in der  $SU(3)$ -YANG-MILLS-Theorie auf einem  $12^3 \times 4$ -Gitter. Die Nebenmaxima in der Verteilung entstehen von Anfang an in endlichem Abstand zum Ursprung und weisen damit auf einen Phasenübergang 1. Ordnung hin. Die Abbildungen 6.2(a), 6.2(b) und 6.2(c) erlauben es uns, die kritische Kopplung mit  $\beta_c = 5.690[2]$  anzugeben. Dieser Wert stimmt hervorragend mit den in [7, 22, 49] gefundenen Werten überein.

## 6.2. Ansatz für die Wirkung

Da der POLYAKOV-Loop (3.1b) in diesem Kontext ein Element der Gruppe  $SU(3)$  ist, werden Spur  $L$  und alle weiteren Klassenfunktionen nun i. Allg. komplexe Werte annehmen und von den beiden unabhängigen Eigenphasen  $\theta_1$  und  $\theta_2$  gemäß

$$L = \frac{1}{3} \operatorname{tr} \mathfrak{P} = \frac{1}{3} \operatorname{tr} \begin{pmatrix} e^{i\theta_1} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\theta_2} & \\ 0 & 0 & e^{-i(\theta_1+\theta_2)} \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

abhängen. Diesen zwei Freiheitsgraden ist die Betrachtung von  $L$  und  $\bar{L}$  äquivalent. Die für  $SU(2)$  geltende einfache Relation  $L = \cos \theta$  wird durch ein analytisch nicht mehr auflösbares Gleichungssystem ersetzt, so dass, um die Eigenphasen  $\theta_1$  und  $\theta_2$  aus einer Messung zu erhalten, die Wurzeln des charakteristische Polynoms numerisch bestimmt werden müssen. Das Zentrum der Gruppe  $SU(3)$  ist die Menge der dritten Einheitswurzeln

$$Z = \left\{ 1, z = e^{\frac{2\pi i}{3}}, \bar{z} = e^{-\frac{2\pi i}{3}} \right\}, \quad (6.5)$$

wobei die Gruppenmultiplikation auf die folgenden nützlichen Relation führt:  $z^2 = z^{-1} = \bar{z}$ ,  $z\bar{z} = 1$  sowie  $z^q = \bar{z}^{-q}$ . Die Charaktere für  $SU(3)$  werden durch zwei Zahlen, die wir  $p$  und  $q$  nennen werden, klassifiziert. Da sie Klassenfunktionen sind, werden wir sie im Folgenden als Funktion von  $L$  und  $\bar{L}$  auffassen:  $\chi_{pq} = \chi_{pq}(L, \bar{L})$ . Ihr Transformationsverhalten verallgemeinert sich ausgehend von der für  $SU(2)$  gefundenen Form (5.15) auf

$$\chi_{pq}(L, \bar{L}) \rightarrow z^p \bar{z}^q \chi_{pq}(L, \bar{L}). \quad (6.6)$$

Damit existieren neben  $\chi_{00}$  eine ganze Klasse von invarianten Charakteren, denn

$$z^p \bar{z}^q = 1 \Leftrightarrow p - q \equiv 0 \pmod{3}. \quad (6.7)$$

Für die in Kapitel 5.2.1 betrachteten 'hopping'-Terme finden wir

$$\chi_{pq} \bar{\chi}_{p'q'} \rightarrow z^{p-p'} \bar{z}^{q-q'} \chi_{pq} \bar{\chi}_{p'q'}. \quad (6.8)$$

Damit lautet die (5.16) entsprechende Bedingung für einen zentrumssymmetrischen Term nunmehr

$$(p - p') - (q - q') \equiv 0 \pmod{3}. \quad (6.9)$$

Ein systematischer Ansatz wird diese Terme allesamt zu berücksichtigen haben, wobei in [8] gezeigt werden konnte, dass tatsächlich alle Terme in natürlicher Weise aus einer Störungsentwicklung für starke Kopplung hervorgehen<sup>2</sup>. Ebenfalls in [8] findet sich ein Vorschlag für eine möglichst effiziente Zusammenfassung der Terme und Berücksichtigung weiterer Symmetrien in den Indizes  $p, q, p', q'$ . Für die SCHWINGER-DYSON-Operatoren können analog zu (4.24) die Ableitungen der Wirkungsterme verwendet werden.

### 6.3. Schwinger-Dyson-Gleichungen für $SU(N)$

An dieser Stelle soll kurz auf die in [8] gefundene Möglichkeit eingegangen werden, wie ausgehend von den SCHWINGER-DYSON-Gleichungen (3.23)

$$\sum_{a=1}^n \lambda_a \langle F(\mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha S_a) \rangle = \langle \mathcal{L}_{\vec{x}}^\alpha F \rangle ,$$

die für  $SU(2)$  gefundene Form (3.30)

$$\sum_a \lambda_a \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G S'_{a,\vec{x}} \rangle = \langle (1 - L_{\vec{x}})^2 G' - 3L_{\vec{x}} G \rangle$$

auf beliebige  $SU(N)$  verallgemeinert werden kann. Die Ableitung der zweiten Gleichung war dadurch gelungen, dass die infinitesimalen Erzeuger der Links- bzw. Rechtsmultiplikation mit der Drehimpulsalgebra der  $SO(4)$  identifiziert werden konnten<sup>3</sup>. Diese einfache geometrische Interpretation geht jedoch bereits beim Übergang zur nächstgrößeren Gruppe, der  $SU(3)$ , verloren. Wir betrachten für den Moment das Integral einer Klassenfunktion  $f$  über eine Gruppe  $G$ :

$$\int_G d\mu(g) f(g) . \tag{6.10}$$

Da  $f$  eine Klassenfunktion ist, d.h.  $f(g) = f(hgh^{-1})$ , zerfällt das Integral (6.10) in das Produkt der Integrale entlang der Konjugationsklassen und transversal dazu:

$$\int_G d\mu(g) f(g) = \int_{G/G_0} \int_{G_0} d\tilde{\mu}(g_0) f(g_0) . \tag{6.11}$$

---

<sup>2</sup>In diesem zunächst paradox anmutenden Ansatz wird sich auf die Kontinuumskopplung bezogen, so dass starke Kopplung kleinen  $\beta_g$  entspricht. Dennoch ist dies gerade der für die normale Störungstheorie unzugängliche Infrarotsektor der Theorie und einmal mehr ein Beispiel für die Stärken der Gitterformulierung.

<sup>3</sup>Die eigentlichen Erzeuger der Links- bzw. Rechtsmultiplikation sind dabei Linearkombinationen der angegebenen Operatoren [21].

## 6. Ausblick auf $SU(3)$

Das erste Integral ist für die betrachtete Funktion ein Volumenfaktor und kann in der Definition des reduzierten HAAR-Maßes untergebracht werden. Das Integral über  $G_0$  lässt sich nun wesentlich einfacher parametrisieren als das ursprüngliche Integral über die ganze Gruppe. Die bevorzugten Parameter hierzu sind die Eigenphasen  $\theta_1 \dots \theta_{N-1}$ . Das reduzierte HAAR-Maß lässt sich in der kompakten Form

$$d\tilde{\mu}(g) \equiv d\theta_1 \cdots d\theta_{N-1} \boldsymbol{\mu}(\theta_1, \dots, \theta_{N-1}) \quad (6.12)$$

schreiben. Damit kann das Integral (6.11) wie folgt geschrieben werden:

$$\int_G d\mu(g) f(g) = \int_0^{2\pi} d\theta_1 \cdots \int_0^{2\pi} d\theta_{N-1} \boldsymbol{\mu}(\theta_1, \dots, \theta_{N-1}) f(\theta_1, \dots, \theta_{N-1}). \quad (6.13)$$

Die rechte Seite von (6.13) kann auch als Integral der Funktion

$$(\boldsymbol{\mu}f)(\theta_1, \dots, \theta_{N-1})$$

über den flachen Torus

$$\mathbb{T}^{N-1} = \underbrace{S^1 \times \dots \times S^1}_{N-1} \quad (6.14)$$

verstanden werden. Wichtig ist, dass sie ebenso wie  $\boldsymbol{\mu}$  und  $f$  periodisch in allen Variablen ist:

$$(\boldsymbol{\mu}f)(\dots, \theta_i + 2\pi, \dots) = (\boldsymbol{\mu}f)(\dots, \theta_i, \dots). \quad (6.15)$$

Mit dieser Eigenschaft folgt für jeden Differentialoperator  $\partial^*$  der Gestalt

$$\partial^* = \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i \frac{\partial}{\partial \theta_i}, \quad \alpha = \text{const.} \quad (6.16)$$

unmittelbar

$$0 = \int_0^{2\pi} d\theta_1 \cdots \int_0^{2\pi} d\theta_{N-1} \partial^* \boldsymbol{\mu}f. \quad (6.17)$$

Damit gelingt die Realisierung der Symmetriegenatoren erst auf dem von den Eigenphasen  $\theta_i$  aufgespannten eichinvarianten Torus  $\mathbb{T}$ , was die numerischen Auswertung jedoch nicht beeinträchtigt, da die Funktion  $\boldsymbol{\mu}$  für  $SU(N)$  bekannt ist. In Kapitel 3.2.3 wurde durch die Einschränkung der Generatoren auf  $\mathcal{L}^{0a}$  letztlich analog verfahren, d.h. die  $\Lambda^{0a}$  sind von der Gestalt (6.16).

# A. Wärmebad-Algorithmus

Neben dem immer existierenden METROPOLIS-Algorithmus gibt es für die YANG-MILLS-Eichtheorien einen weiteren mikrokanonischen Update-Algorithmus, der erstmals von CREUTZ [12] für  $SU(2)$  vorgeschlagen und von CABIBBO und MARI-NARI [9] später auf  $SU(N)$  verallgemeinert wurde. Wir betrachten im Folgendem den Update-Algorithmus für  $SU(2)$ .

Allen mikrokanonischen Update-Algorithmen gemein ist das Vorgehen in einem Update-Schritt jeweils nur einen Freiheitsgrad zu ändern. Da für dessen Verteilung nur der von ihm abhängige Anteil der Wirkung von Bedeutung ist, reduziert sich das gestellte Problem erheblich. Wir bezeichnen die für einen Update-Schritt ausgewählte 'link'-Variable mit  $U_{x,\mu}$  und spalten in der WILSON-Wirkung (2.44a) den von  $U_{x,\mu}$  abhängigen Anteil ab:

$$S_W = \beta_g \sum_{\substack{P \\ U_{x,\mu} \in \partial P}} \left(1 - \frac{1}{2} \text{tr} U_P\right) + S' . \quad (\text{A.1})$$

Damit besteht die Aufgabe darin, für den ausgewählten 'link' ein neues Element  $U'$  aus  $SU(N)$  zu finden, das mit

$$dP(U') \sim e^{\frac{1}{2}\beta_g \text{tr} U_P} \quad (\text{A.2})$$

verteilt ist<sup>1</sup>. In (A.2) wurden alle für die 'link'-Variable konstanten Terme nicht länger berücksichtigt, da sie in der Normierung verschwinden. Indem der Algorithmus aus der ganzen Gruppe ein Element auswählt, das mit (A.2) verteilt ist, bringt er den 'link' anschaulich in Kontakt mit einem Wärmebad, da die Auswahl eines neuen Elementes der Thermalisierung des 'links' mit seiner *unmittelbaren* Umgebung entspricht. Dies erklärt den Namen Wärmebad- oder 'heatbath'-Algorithmus. Wir betrachten (A.1) genauer:

$$\sum_{\substack{P \\ U_{x,\mu} \in \partial P}} \text{tr} U_P = U_{x,\mu} \sum_{\alpha} U_{\alpha} = U_{x,\mu} \tilde{U} , \quad (\text{A.3})$$

---

<sup>1</sup>Für  $U_P \in SU(2)$  ist die Spur stets reell.

## A. Wärmebad-Algorithmus

wobei die  $U_\alpha$  für das Produkt der drei verbleibenden Seiten der 'plaquette stehen:

$$U_\alpha \in \left\{ \begin{array}{c} \text{↙} \\ \text{↘} \end{array}, \begin{array}{c} \text{↗} \\ \text{↘} \end{array}, \begin{array}{c} \text{↖} \\ \text{↗} \end{array}, \begin{array}{c} \text{↗} \\ \text{↖} \end{array}, \dots \right\}. \quad (\text{A.4})$$

Für  $U$  führen wir die auch schon in Kapitel 3.2.2 verwendete Parametrisierung ein:

$$U = a_0 \cdot \mathbb{1} + \vec{a} \cdot i\vec{\sigma} \quad a^2 = a_0^2 + \vec{a}^2 = 1 \quad (\text{A.5})$$

und nutzen eine interessante Eigenschaft der  $SU(2)$ -Matrizen aus, die es erlaubt, die Summe zweier Matrizen als Vielfaches einer dritten  $SU(2)$ -Matrix zu schreiben:

$$U + V = (a_0 + b_0) \cdot \mathbb{1} + (\vec{a} + \vec{b}) \cdot i\vec{\sigma} = k \cdot (c_0 \cdot \mathbb{1} + \vec{c} \cdot i\vec{\sigma}). \quad (\text{A.6})$$

Um die Proportionalitätskonstante  $k$  zu bestimmen, berechnen wir auf beiden Seiten die Determinante:

$$k = |\det(U + V)| = (a_0 + b_0)^2 + (\vec{a} + \vec{b})^2. \quad (\text{A.7})$$

Wir setzen in (A.3) ein und erhalten

$$U_{x,\mu} \tilde{U} = k U_{x,\mu} \bar{U} \quad (\text{A.8})$$

mit  $k = |\det \tilde{U}|$  und  $\bar{U} \in SU(2)$ .

Dies Ergebnis vereinfacht die in (A.2) angegebene Verteilung, wenn wir zusätzlich die Rechtsinvarianz des HAAR-Maßes ausnutzen:

$$\begin{aligned} dP(U') &\sim e^{\frac{1}{2}\beta_g \text{tr} U_P} dU' \\ &\sim e^{\frac{1}{2}\beta_g k \text{tr} U' \bar{U}} dU' \\ dP(U' \bar{U}^{-1}) &\sim e^{\frac{1}{2}\beta_g k \text{tr} U'} dU' \\ &\sim e^{\frac{1}{2}\beta_g k a_0} \delta(a^2 - 1) d^4 a. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Im letzten Schritt haben wir noch einmal von der gewählten Parametrisierung Gebrauch gemacht, in der die Spur durch  $a_0$  und das HAAR-Maß durch das Integral über die  $S^3$  gegeben ist. Gleichung (A.9) bedeutet, dass nur in der  $a_0$ -Richtung ein von der Gleichverteilung abweichendes Wahrscheinlichkeitsmaß für  $U' \bar{U}^{-1}$  gefordert wird, aus dem sich schließlich durch Multiplikation mit  $\bar{U}$  von rechts das

neue  $U'$  ergibt<sup>2</sup>. Zunächst kann in (A.9) weiter vereinfacht werden, da das Gewicht  $\exp\{\frac{1}{2}\beta_g k a_0\}$  nicht von  $\vec{a}$  abhängt:

$$e^{\beta_g k a_0} \delta(a^2 - 1) d^4 a = \frac{1}{2} e^{\beta_g k a_0} \sqrt{1 - a_0^2} da_0 d\Omega. \quad (\text{A.10})$$

Das Differential  $d\Omega$  bezeichnet die Gleichverteilung auf der  $S^2$ , also die Richtung von  $\vec{a}$ , während die Länge mit (A.5) durch  $|\vec{a}| = \sqrt{1 - a_0^2}$  gegeben ist. Die verbleibende Aufgabe besteht in der Auswahl eines  $a_0 \in [-1, 1]$  das nach

$$dP(a_0) \sim e^{\beta_g k a_0} \sqrt{1 - a_0^2} \quad (\text{A.11})$$

verteilt ist. Da dieser Ausdruck analytisch nicht invertierbar ist, kann nicht ohne Weiteres von einer Gleichverteilung zurückgerechnet werden. Daher wird meist in zwei Schritten vorgegangen. Als Erstes wird eine gleichverteilte Zufallszahl  $x$  aus dem Intervall  $[e^{-2\beta_g k}, 1]$  und daraus ein Vorschlag

$$a_0 = 1 + \frac{1}{\beta_g k} \ln x$$

für den zweiten Schritt bestimmt<sup>3</sup>. Im zweiten Schritt wird dieser nur mit einer Wahrscheinlichkeit  $\sqrt{1 - a_0^2}$  akzeptiert und anderenfalls wieder zum ersten Schritt zurückgekehrt. Man kann sich leicht überzeugen, dass die schließlich akzeptierten  $a_0$  der gewünschten Verteilung (A.11) genügen. Die obigen Ausführungen fassen wir abschließend noch einmal in einer Übersicht zusammen:

Für die Erweiterung auf  $SU(N)$  betrachtet man die blockdiagonalen  $2 \times 2$ -Untermatrizen und wendet in einem iterativen Schema den obigen Algorithmus an. Für Details sei auf [9] verwiesen. Eine insbesondere für große  $\beta_g$  nicht unwesentliche Verbesserung des Algorithmus ergibt sich durch die von KENNEDY und PENDLETON [45]

---

<sup>2</sup>Der gleiche Trick wird auch angewandt, wenn eine GAUSS-Verteilung mit Mittelwert  $x_0$  erzeugt werden soll

$$\begin{aligned} dP(x) &\sim e^{-(x-x_0)^2} dx \\ dP(x+x_0) &\sim e^{-x^2} d(x+x_0) \\ &\sim e^{-x^2} dx \end{aligned}$$

und man zunächst eine Verteilung um Null erzeugt, die entsprechend verschoben wird. Die Translationsinvarianz des Maßes  $dx$  entspricht hier die Rechtsinvarianz des HAAR-Maßes.

<sup>3</sup>Das ist gerade der invertierbare Faktor in (A.11), für den von einer Gleichverteilung zurückgerechnet werden kann. Die Intervallgrenzen werden nur aufgrund numerischer Belange verschoben.

## A. Wärmebad-Algorithmus

Input :	$\beta_g$ , Summe der 'staples' (das Wärmebad) $S_{x,\mu}$
Output:	neue Belegung $U_{x,\mu}$
1.	Berechne $k = \det S_{x,\mu}$
2.	Berechne $a_0$ wie im Text.
3.	Berechne $\vec{a}$ wie im Text. Damit ist $U'\bar{U}^{-1}$ bestimmt.
4.	Berechne $\bar{U} = \frac{1}{k}S_{x,\mu}$
5.	Berechne das Inverse von $\bar{U}$ (für die Quaternionendarstellung (A.5) entspricht dies der Konjugation)
6.	Gib $U'\bar{U}^{-1}$ zurück.

Tabelle A.1.: 'heatbath'-Algorithmus für SU(2)

eingeführten Modifikationen bei der Bestimmung von  $a_0$ . Die hierfür ausschlaggebende Beobachtung ist, dass sich für eine große Kopplungsstärke die Verteilung immer stärker bei  $a_0 = 1$  konzentriert. Dies führt während der Bestimmung von  $a_0$  zu einem schlechten Akzeptanzverhalten im zweiten Schritt und kann durch eine zusätzliche Koordinatentransformation verbessert werden. Für die Details verweisen wir ebenfalls auf die Originalarbeit [45].



# B. IMC mit dem Softwarepaket jenLaTT

## B.1. Objektorientierter Softwareentwurf in der numerischen Simulation

Für das in diesem Anhang zusammengestellte Material wird vorausgesetzt, dass der Leser mit Syntax und Sprachumfang der Programmiersprache C++ vertraut ist. Zu den Standardreferenzen gehören [59] und [54]. Insbesondere werden auch fortgeschrittene Aspekte wie generische Programmierung ('templates') oder der Umgang mit der *Standard Template Library* (STL) zur Sprache kommen, die in [26, 4, 42, 3] ausführlich dargestellt sind. Wir geben zunächst eine Begründung für den von uns gewählten objektorientierten Ansatz und stellen im Anschluss die durch diese Entscheidung verfügbaren und für den Entwurf der Software benutzten Entwurfsmuster ('design patterns') vor. Der zweite Abschnitt dieses Anhangs geht ausführlicher auf Aufbau und Organisation des von uns entwickelten Programmcodes ein.

### Grundlagen

Numerische Simulationen sind bis heute Aufgabe von Hochleistungsrechnern. Oberste Devise lautet dabei nach wie vor: Geschwindigkeit vor Flexibilität vor Ästhetik. Sieht man sich jedoch die Anforderungen genauer an, wird schnell klar, dass, obwohl schnelle Algorithmen und schnelle maschinennahe Implementationen<sup>1</sup> unabdingbar bleiben, diese zeitkritischen Programmteile nur einen kleinen Teil der insgesamt benötigten Software ausmachen. Darüber hinaus sind moderne Compilersuiten längst in der Lage Binärkompilate unterschiedlicher Hoch- und Maschinensprachen in einem Programm zusammenzubinden ('linken'), so dass es

---

<sup>1</sup>Aus mehrererlei Hinsicht ist die Optimierung eines Algorithmus dabei stets der Optimierung der Implementation vorzuziehen.

nicht länger sinnvoll erscheint, aufgrund benötigter zeitkritischer Komponenten ein ganzes Programm in nur einer Sprache zu verfassen<sup>2</sup>. Für weniger zeitkritische Aufgaben wie die Handhabung von Dateien ('file-io'), die Speicherverwaltung ('memory-management'), die Programmablaufsteuerung ('execution control') und den Betriebssystemschnittstellen ('os-interfaces') können damit sehr wohl objektorientierte Lösungen eingesetzt werden, was bei minimalen Laufzeitverzögerungen große Vorteile zur Folge hat. Da im objektorientierten Entwurfsmodell Daten und Methoden aufgabenspezifisch gekapselt sind, ist objektorientierter Code robuster und einfacher zu warten ('maintenance') und die Einarbeitungszeit sowie Benutzung durch am Projekt beteiligter Entwickler verkürzt bzw. vereinfacht sich ('usability'). Nicht zuletzt profitiert von dieser Art der Programmierung auch die Fehlersuche ('debugging'). Die Sprache C++ stellt des Weiteren generische Datentypen ('templates') bereit und erlaubt damit die Implementation generischer Algorithmen (z.B. für 'file-io' oder 'memory-management'). Die jüngere Entwicklung im Softwareentwurf hat zudem eine ganze Reihe von immer wiederkehrenden Problemen abstrahiert und Lösungen in Form von Entwurfsmustern bereitgestellt [24], die in ihrer Komplexität und Vielschichtigkeit in prozeduralen Sprachen nur schwer bis gar nicht umzusetzen wären. Wir gehen im Folgenden kurz darauf ein.

## Entwurfsmuster

Entwurfsmuster sind allgemeinsprachlich verfasste Lösungen für häufig und an vielen Stellen des Softwareentwurfs auftretende Fragen. Diese umfassen z.B. die Darstellung von Daten, auf diesen wirkende Operationen, die Speicherverwaltung oder auch die Umsetzung von Schnittstellen zwischen verschiedenen Programmteilen, zu Drittbibliotheken oder dem Betriebssystem. Wenngleich es neben den genannten noch eine Vielzahl weiterer Beispiele gibt, tauchen die genannten in der von uns entwickelten Software auf. Das im Zusammenhang mit der Darstellung von Daten stehende Entwurfsmuster findet man in der Literatur unter dem Namen VISITOR [24, 4]. Dieses ermöglicht es zu einer gegebenen Klassenhierarchie (den Daten) eine weitere anzulegen, die völlig transparent auf der ersten arbeitet (die VISITORS). Zu den Aufgaben dieser Objekte gehört es zum Beispiel, gesammelte Daten aufzuarbeiten und in verschiedenen Formaten (*Gnuplot*, *Maple*, ASCII, etc.

---

<sup>2</sup>Ein schönes – wenn auch sehr verschiedenes – Beispiel sind die Mathematikprogramme *Matlab* und *Maple*. Während die Kernel sicherlich maschinennah programmiert sind, präsentieren sich Benutzerschnittstelle und Dateiverwaltung in modernem graphischem Gewand und sind in *Java* implementiert.

) auszugeben oder für nachfolgende Objekte innerhalb der Software aufzubereiten. Das eingesetzte Entwurfsmuster trennt dadurch sauber die Repräsentation der Daten von den darauf definierten Operationen sowie zusätzlich diese auch untereinander. Die sich dadurch im Quelltext niederschlagende Transparenz ermöglicht eine zügige und fehlerresistente Weiterentwicklung, ohne bereits funktionierende Programmteile modifizieren oder in ihrer Einsatzfähigkeit beschränken zu müssen. Das zweite Entwurfsmuster, auf das kurz eingegangen werden soll, vermittelt die Schnittstelle zwischen Datenerfassung (als Ergebniss des Messprozesses) und Weiterverarbeitung (Lösen des Gleichungssystems). Der ADAPTER [24] erlaubt es, eine abstrakt formulierte Aufgabe von deren konkreter Realisierung zu trennen, ohne dass andere Bestandteile der Software von dieser Zweiteilung Notiz nehmen müssen. Das Programm benötigt z.B. für die Weiterverarbeitung im Statistikmodul die Lösung in einem bestimmten Datenformat<sup>3</sup>, welche von einem als ADAPTER entworfenen Objekt zur Verfügung gestellt wird. Wie dieses die Lösung generiert ist einzig und allein seine Aufgabe und nach außen nicht sichtbar. Die Trennung von Schnittstelle und Implementation ermöglicht es u.a. verschiedene Lösungsstrategien durch verschiedene Realisierungen eines einzigen ADAPTERS zu testen und zu vergleichen. Von dieser Möglichkeit wird aber zur Zeit noch kein Gebrauch gemacht, da bisher die Lösung nur durch die Bibliotheksfunktionen von *Octave* berechnet werden kann. Das dritte Entwurfsmuster ist mit der Speicher-verwaltung verbunden und wird häufig als SMARTPOINTER [3, 4] bezeichnet. Wir werden hier nicht näher darauf eingehen.

## B.2. *jenLaTT* - Eine Übersicht

Die Software *jenLaTT* ist eine Sammlung von größtenteils unabhängigen Bibliotheken, die zum einen Dienste für 'memory-management' oder 'file-io' zur Verfügung stellen und andererseits den "Messprozess" auf eine Klassenhierarchie abbilden. Diese ist unabhängig von der konkret betrachteten Theorie (z.B.  $SU(2)$ ,  $SU(3)$  oder *effektive* Theorien) und realisiert elementare Aufgaben wie die Darstellung einer Konfiguration im Speicher und auf der Festplatte. Diesen Teil der Software bezeichnen wir als Infrastruktur. Darauf aufbauend kann sowohl die Simulation als auch die Auswertung realisiert werden. Die folgenden drei kurzen Abschnitte gehen näher auf die einzelnen Blöcke ein.

---

<sup>3</sup>An dieser Stelle sollte korrekter von Datentyp gesprochen werden.

## Infrastruktur

Die Infrastruktur ist in einem eigenen 'namespace' `JenLatt` untergebracht und stellt das 'template' `Lattice` zur Verfügung:

```
namespace JenLatt
{
template<class Site , class Link , int DIMENSION, class Param>
class Lattice;
}; .
```

Die 'template'-Parameter bezeichnen in dieser Reihenfolge den mit den 'sites' assoziierten Datentyp, den mit den 'links' assoziierten Datentyp, die Dimension des Gitters und eine Klasse, die für die jeweilige Theorie relevante Parameter (Größe des Gitters, Kopplung  $\beta_g$ , ...) aufnimmt. Für die  $SU(2)$ -Theorie werden damit in einem separaten 'namespace' `SU2` die relevanten Gittertypen definiert:

```
namespace SU2
{
using namespace JenLatt;
typedef Lattice<TEmpty, matSU2,4, SU2:: Parameter> Gaugefield ;
typedef Lattice<TComplex, TEmpty,3, SU2:: Parameter> trPolyakovfield;
}; .
```

Mit den von `Lattice<>` bereitgestellten Methoden können Speicherfelder für die Gitter verwaltet und die Elemente auf dem Gitter angesprochen werden:

```
//reserviere Speicher fuer ein 20x20x20x4 Eichfeld
Gaugefield* U= new Gaugefield(20,4,new SU2:: Parameter());
```

```
for (int pos=0;pos<gauge->Volume(); pos++)
  for (dir=0;dir<4;dir++){
    //und initialisiere alle Linkvariablen
    //mit der Einheitsmatrix;
    (*U)(pos, dir)=matSU2:: one;
  }
```

```
Gaugefield:: N_Tupel coord={10,0,0,0};
matSU2 PLoop_x=matSU2:: one;
```

```
for (coord[3]=0; coord[3]<U->Geometry()[3]; coord[3]++){
  //berechne den Polyakovloop bei (10,0,0)
```

```
//durch Ausmultiplizieren der "Zeit"-Richtung
PLoop_x *= (*U)(coord,3);
}
```

Des Weiteren gibt es ein 'template' `LatticeContainer`, das Konfiguration entgegennimmt, auf Festplatte speichert und sie zu einem späteren Zeitpunkt von dort wieder laden kann. Die Serialisierung ist völlig transparent implementiert und kann in jedem konkreten Anwendungsfall ohne weitere Anpassungen eingesetzt werden. Das folgende Beispiel zeigt die notwendigen Anweisungen für ein Eichfeld:

```
GaugefieldContainer box=new GaugefieldContainer;
bool Simulation;

box->set_FileName("somefile.txt")
while(Simulation){
  //Eichfeld bereits frueher definiert.
  update(U);
  box->append(U);
};
delete box;

//zu einem spaeteren Zeitpunkt
box = new GaugefieldContainer("somefile.txt");
GaugefieldContainer::Iterator it=box->begin();

while(it){
  //lade die Konfigurationen einzeln von der Festplatte
  U=it->data();
  //hier steht in U die Konfiguration zur Verfuegung

  //schalte auf den naechsten Eintrag weiter
  it=it->next();
}
```

Die restlichen zur Infrastruktur zählenden Klassen abstrahieren das eigentliche 'file-handling' und sind für den internen Gebrauch bestimmt.

## Simulation

Die Flexibilität der Architektur erlaubt es, in die bestehende Infrastruktur andere Module einzubinden. Ein solches Modul ist auch der von uns für die Simulation

der YANG-MILLS-Theorie benutzte Sourcecode. Die in C geschriebenen Routinen implementieren den von uns in Anhang A vorgestellten Algorithmus und können von [51] bezogen werden. Wir haben diese um einen C++-Wrapper ergänzt und führen damit die YANG-MILLS-Simulationen durch. Für die *effektiven* Theorien wurde in ähnlicher Weise auf – diesmal selbstgeschriebene – hoch optimierte C-Routinen zurückgegriffen.

## Messung & Auswertung

Eine ausführliche Darstellung aller an Messung und Auswertung beteiligten Klassen würde den Rahmen dieses Anhangs sprengen. Wir müssen an dieser Stelle auf eine spätere Veröffentlichung des Quelltextes und seiner Dokumentation verweisen. Dennoch wollen wir hier kurz die umgesetzte Idee skizzieren. Eine Observable wird durch eine Klasse `JenLatt::Observable` repräsentiert. Die für die IMC zentrale Observable ist dabei `SU2::M_l`, welche das Gleichungssystem (4.16a) repräsentiert. Dazu verwaltet dieses Objekte für jede Zeile des Gleichungssystems, also für jeden SCHWINGER-DYSON-Operator  $G_{b,d}$  (vgl. (4.25)) eine weitere Observable `SU2::M_l.b`. In diese kann nun ein beliebiger Operator  $G_{b,d}$ , der ebenfalls als ein `JenLatt::Observable` dargestellt wird, eingesetzt werden. Die für das spätere Auflösen des Gleichungssystems relevante Klasse bleibt aber stets `SU2::M_l`, die auf Anfrage eine Ergebnissklasse<sup>4</sup> `JenLatt::SD_Eqn_Collection` zurückgibt. Dieses Objekt kann einem `JenLatt::ISD_Eqn_Solver` übergeben werden, das abhängig von seiner Konfiguration die Lösung z.B. mittels *Octave* bestimmt und in einem `JenLatt::SD_Solution` an seinen Aufrufer zurückgibt. Die erhaltenen Lösungen werden in einer `JenLatt::TResultCollection` gesammelt und, nachdem alle Konfigurationen abgearbeitet wurden, statistisch ausgewertet (Mittelwert, 'boot-strap', Ausgabe,...). Diese sehr knapp gehaltene Darstellung lässt selbstredend viele Fragen offen. Ein wesentlicher Punkt wird dennoch deutlich: Die drei an der Bestimmung der Lösung beteiligten Module kommunizieren nur über zwei definierte Schnittstellen und können ansonsten beliebig ausgetauscht, optimiert und erweitert werden. Die Simulation als erster Block generiert Konfigurationen vom Typ `JenLatt::Lattice` (die erste Schnittstelle). Auf diesen können Observablen `SU2::M_l` ausgewertet werden und unabhängig, welche Operatoren zum Einsatz kommen ist die zweite Schnittstelle stets durch die Klasse `JenLatt::SD_Eqn_Collection` gegeben und dient als Input für das Lösen des Gleichungssystems. Ob die zu simulierende

---

<sup>4</sup>Diese wird von `JenLatt::TResult` abgeleitet und ist Teil der schon mehrfach erwähnten Datentyphierarchie.

Theorie dabei eine  $SU(2)$ –,  $SU(3)$ – oder  $SU(4)$ – Theorie sein soll, ist nur für die Simulation relevant. Welche Operatoren betrachtet werden, wird einzig bei der Auswertung der Konfigurationen im zweiten Block spezifiziert. Wie schließlich das Gleichungssystem gelöst wird, ist alleinige Aufgabe des dritten und letzten Blocks.

*B. IMC mit dem Softwarepaket jenLaTT*



# C. $SU(2)$ -Wirkungsterme und IMC-Operatoren

## Charaktere für $SU(2)$

Die explizite Gestalt der Charaktere kann z.B. mit Hilfe der WEYL-Formel berechnet werden und liefert für den Fall  $SU(2)$  zunächst

$$\chi_p(\theta) = \frac{\sin((p+1)\theta)}{\sin\theta}, \quad p \in \mathbb{N}.$$

Das Argument  $\theta$  bezeichnet das Argument des Eigenwertes von  $\mathfrak{P}$ , so dass der folgende Zusammenhang zu  $L$  besteht:

$$L = \frac{1}{2} \operatorname{tr} \mathfrak{P} = \frac{1}{2} \operatorname{tr} \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} = \cos\theta$$

Für die im Programm verwendeten Charaktere sind untenstehend die expliziten Ausdrücke aufgeführt:

$$\begin{aligned} \chi_1 &= 2L \\ \chi_2 &= 4L^2 - 1 \\ \chi_3 &= 8L^3 - 4L \\ \chi_4 &= 16L^4 - 12L^2 + 1 \\ \chi_5 &= 32L^5 - 32L^3 + 6L \\ &\vdots \end{aligned}$$

### Schwinger-Dyson Operatoren

Um (5.22) zu rechtfertigen, berechnen wir<sup>1</sup>

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta}{\delta L_z} S_{pq} &= \frac{\delta}{\delta L_z} \sum_{x,i>0} \chi_p(L_x) \chi_q(L_{x+i}) + \chi_p(L_{x+i}) \chi_q(L_x) \\
 &= \sum_{x,i>0} \left( \frac{\delta}{\delta L_x} \chi_p(L_x) \delta_{xz} \right) \chi_q(L_{x+i}) + \chi_p(L_x) \left( \frac{\delta}{\delta L_{x+i}} \chi_q(L_{x+i}) \delta_{x+i,z} \right) + [p \leftrightarrow q] \\
 &= \sum_{i>0} \chi'_p(L_z) \chi_q(L_{z+i}) + \chi_p(L_{z-i}) \chi'_q(L_z) + \chi'_q(L_z) \chi_p(L_{z+i}) + \chi_q(L_{z-i}) \chi'_p(L_z) \\
 &= \sum_i \chi'_p(L_z) \chi_q(L_{z+i}) + \chi'_q(L_z) \chi_p(L_{z+i}).
 \end{aligned}$$

Außerdem benötigen wir für die SCHWINGER-DYSON-Gleichungen (3.30) noch die Ableitungen der Operatoren:

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta}{\delta L_x} G_{pq,z} &= \frac{\delta}{\delta L_x} \sum_i \chi'_p(L_z) \chi_q(L_{z+i}) + \chi'_q(L_z) \chi_p(L_{z+i}) \\
 &= \delta_{xz} \left( \chi''_p(L_z) \sum_i \chi_q(L_{z+i}) + \chi''_q(L_z) \sum_i \chi_p(L_{z+i}) \right) \\
 &\quad + \delta_{x+i,z} \left( \chi'_p(L_z) \chi'_q(L_{z+i}) + \chi'_q(L_z) \chi'_p(L_{z+i}) \right).
 \end{aligned}$$

Dieser Term trägt nur bei, wenn für den Abstand der Punkte  $\vec{x}$ , und  $\vec{y}$ , wo die SCHWINGER-DYSON-Gleichungen ausgewertet werden bzw. der Operator lokalisiert ist, gilt:  $d = |\vec{x} - \vec{y}| \leq 1$ . Die im Programm Verwendung findenden Operatoren und ihre Ableitungen sind in den Tabellen C.1 und C.2 angegeben:

---

<sup>1</sup>Abweichend von der in der ganzen Arbeit einheitlichen Konvention, Dreivektoren mit einem Pfeil auszuzeichnen, also  $\vec{x}$  zu schreiben, verzichten wir in diesem Anhang darauf.

$$G_{11,z} = 4 \sum_i L_{z+i}$$

$$G_{22,z} = 32L_z \sum_i (L_{z+i}^2 - 0.25)$$

$$G_{20,z} = 48L_z$$

$$G_{33,z} = 192(L_z^2 - 1/6) \sum_i (L_{z+i}^3 - 0.5L_{z+i})$$

$$G_{31,z} = 48(L_z^2 - 1/6) \sum_i (L_{z+i}) + 16 \sum_i (L_{z+i}^3 - 0.5L_{z+i})$$

$$G_{44,z} = 1024(L_z^3 - 0.375L_z) \sum_i (L_{z+i}^4 - 0.75L_{z+i}^2 + 0.0625)$$

$$G_{42,z} = 768(L_z^3 - 0.125L_z) \sum_i (L_{z+i}^2 - 0.25) + 128L_z \sum_i (L_{z+i}^4 - 0.75L_{z+i}^2 + 0.0625)$$

$$G_{40,z} = 384(L_z^3 - 0.375L_z)$$

$$G_{55,z} = 5120(L_z^4 - 0.6125L_z^2 + 0.0375) \sum_i (L_{z+i}^5 - L_{z+i}^3 + 0.1875L_{z+i})$$

Tabelle C.1.: SCHWINGER-DYSON-Operatoren für die niedrigsten Ordnungen.

C.  $SU(2)$ -Wirkungsterme und IMC-Operatoren

$$\begin{aligned}
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{11,z} &= \begin{cases} 0 \\ 4 \end{cases} \\
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{22,z} &= \begin{cases} 32 \sum_i (L_{z+i}^2 - 0.25) \\ 16(L_{z+i}^2 - 0.25)(L_z^2 - 0.25) \end{cases} \\
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{20,z} &= \begin{cases} 48 \\ 0 \end{cases} \\
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{33,z} &= \begin{cases} 384 L_z \sum_i (L_{z+i}^3 - 0.5 L_{z+i}) \\ 576(L_z^2 - 1/6)(L_{z+i}^2 - 1/6) \end{cases} \\
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{31,z} &= \begin{cases} 96 L_z \sum_i L_{z+i} \\ 48(L_z^2 - 1/6 + L_{z+i}^2 - 1/6) \end{cases} \\
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{44,z} &= \begin{cases} 3072(L_z^2 - 0.125) \sum_i (L_{z+i}^4 - 0.75 L_{z+i}^2 + 0.0625) \\ 4096(L_z^3 - 0.375 L_z)(L_{z+i}^3 - 0.375 L_{z+i}) \end{cases} \\
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{42,z} &= \begin{cases} 768(L_z^2 - 0.125) \sum_i (L_{z+i}^2 - 0.25) + 128 \sum_i (L_{z+i}^4 - 0.75 L_{z+i}^2 + 0.0625) \\ 512(L_z^3 - 0.37 L_z)(L_{z+i}^3 - 0.375 L_{z+i}) \end{cases} \\
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{40,z} &= \begin{cases} 1152(L_z^2 - 0.125) \\ 0 \end{cases} \\
\frac{\delta}{\delta L_x} G_{55,z} &= \begin{cases} 20480(L_z^3 - 0.30625 L_z) \sum_i (L_{z+i}^5 - L_{z+i}^3 + 0.1875 L_{z+i}) \\ 256000(L_z^4 - 0.6125 L_z^2 + 0.0375)(L_{z+i}^4 - 0.6125 L_{z+i}^2 + 0.0375) \end{cases}
\end{aligned}$$

Tabelle C.2.: Ableitungen der SCHWINGER-DYSON-Operatoren für die niedrigsten Ordnungen.

In der ersten Zeile findet sich der Ausdruck für  $z = x$ , in der zweiten für  $z = x + i$ . Für alle anderen Abstände  $d = |x - z|$  ist die Ableitung identisch Null.

# D. Zusammenfassung der Messdaten

Um den Haupttext übersichtlich zu halten, sind alle aus den Messungen direkt oder durch 'fits' bzw. IMC gewonnenen Daten hier aufgeführt.

## D.1. IMC

**Kopplungen für  $S_{\text{eff}}^{(2)}$ ,  $S_{\text{eff}}^{(3)}$  und  $S_{\text{eff}}^{(5)}$  als Funktion der Wilson-Kopplung  $\beta_g$**

$\beta$	$\lambda_{11}$	$\lambda_{22}$	$\lambda_{20}$	$\lambda_{33}$	$\lambda_{31}$
1.10	-0.004[2]	-0.001[1]			
	-0.004[1]	0.000[1]	-0.0012[2]		
	-0.004[1]	0.000[1]	-0.0011[2]	0.000[1]	0.0003[6]
1.70	-0.030[2]	-0.001[1]			
	-0.030[2]	-0.001[1]	-0.0007[2]		
	-0.029[2]	0.000[1]	-0.0006[2]	0.0001[8]	0.0000[6]
2.20	-0.103[1]	-0.0019[7]			
	-0.116[1]	0.000[1]	0.0064[2]		
	-0.116[1]	0.000[1]	0.0064[2]	0.0015[7]	0.0000[6]
2.28	-0.123[1]	0.000[1]			
	-0.144[1]	0.0029[9]	0.0101[2]		
	-0.143[1]	0.002[1]	0.0102[3]	0.0015[8]	0.0002[6]
2.29	-0.127[1]	0.002[1]			
	-0.148[1]	0.004[1]	0.0108[2]		
	-0.148[1]	0.003[1]	0.0108[3]	0.0015[8]	0.0000[6]

Tabelle D.1.: Die durch IMC bestimmten Kopplungen für  $S_{\text{eff}}^{(2)}$  (jeweils 1. Zeile),  $S_{\text{eff}}^{(3)}$  (jeweils 2. Zeile) und  $S_{\text{eff}}^{(5)}$  (jeweils 3. Zeile) (vgl. auch Abbildung 5.8). In eckigen Klammern ist der Fehler der letzten Stelle angegeben.

D. Zusammenfassung der Messdaten

$\beta$	$\lambda_{11}$	$\lambda_{22}$	$\lambda_{20}$	$\lambda_{33}$	$\lambda_{31}$
2.30	-0.135[1]	0.006[1]			
	-0.156[1]	0.006[1]	0.0114[2]		
	-0.156[1]	0.006[1]	0.0115[3]	0.001[1]	0.0000[6]
2.32	-0.1598[9]	0.023[1]			
	-0.1787[9]	0.017[1]	0.0125[2]		
	-0.179[1]	0.019[1]	0.0129[3]	-0.0006[9]	-0.0004[5]
2.34	-0.1697[6]	0.030[1]			
	-0.1873[6]	0.022[1]	0.0130[3]		
	-0.1892[8]	0.026[1]	0.0138[3]	-0.0014[8]	-0.0014[6]
2.38	-0.1799[4]	0.037[1]			
	-0.1958[5]	0.026[1]	0.0130[3]		
	-0.1999[6]	0.035[1]	0.0148[4]	-0.0032[9]	-0.0026[5]
2.60	-0.1989[4]	0.0382[8]			
	-0.2123[7]	0.0260[9]	0.0130[5]		
	-0.2227[8]	0.040[1]	0.0176[5]	-0.005[1]	-0.0041[4]
2.80	-0.2103[5]	0.0350[8]			
	-0.2242[8]	0.0229[9]	0.0143[5]		
	-0.236[1]	0.035[1]	0.0202[8]	-0.0041[9]	-0.0040[4]
3.00	-0.2206[6]	0.0319[8]			
	-0.2361[9]	0.0193[8]	0.0164[7]		
	-0.250[1]	0.031[1]	0.0235[8]	-0.0034[8]	-0.0039[4]
3.50	-0.2446[6]	0.0264[6]			
	-0.267[1]	0.0107[7]	0.0255[8]		
	-0.283[1]	0.020[1]	0.032[1]	-0.002[1]	-0.0032[6]
4.00	-0.2670[9]	0.0225[6]			
	-0.299[1]	0.0030[8]	0.037[1]		
	-0.291[3]	0.003[1]	0.029[2]	-0.0033[9]	0.0029[8]

Tabelle D.1.: Die durch IMC bestimmten Kopplungen für  $S_{\text{eff}}^{(2)}$  (jeweils 1. Zeile),  $S_{\text{eff}}^{(3)}$  (jeweils 2. Zeile) und  $S_{\text{eff}}^{(5)}$  (jeweils 3. Zeile) (vgl. auch Abbildung 5.8). In eckigen Klammern ist der Fehler der letzten Stelle angegeben.

## D.2. Zweipunktfunktion

Der Zusammenhang der angegebenen Werte zur Zweipunktfunktion  $G^{(2)}(x, y)$  wird durch (5.7) gegeben:

$$G^{(2)}(|x - y|) = ce^{-|x-y|/\xi} + \bar{L}^2.$$

Alle Fits wurden mit einem nichtlinearen 'least-squares'-Verfahren (MARQUARDT-LEVENBERG) wie es in der frei verfügbaren Software *GNUPlot* [2] implementiert ist, durchgeführt. Die aufgeführten Fehler ergeben sich dabei aus den statistischen Gewichten der für den Fit verwendeten Datenpunkte.

### Korrelationslänge $\xi$ für Yang-Mills- und effektive Theorien

$\beta$	YANG-MILLS	$S_{\text{eff}}^{(2)}$	$S_{\text{eff}}^{(3)}$	$S_{\text{eff}}^{(5)}$
1.00	0.1778[3]			
1.10	0.1885[3]	0.1861[2]	0.1858[2]	0.1853[3]
1.30	0.2162[3]			
1.70	0.2881[2]	0.28729[4]	0.28632[7]	0.28530[8]
1.80	0.3130[2]			
2.20	0.510[8]	0.4559[3]	0.4775[4]	0.4763[4]
2.27	0.56[1]			
2.28	0.56[1]	0.5054[7]	0.539[1]	0.539[1]
2.29	0.57[1]	0.5149[8]	0.550[1]	0.550[1]
2.30	0.56[1]	0.534[1]	0.570[1]	0.570[1]
2.32	0.531[9]	0.602[2]	0.638[4]	0.638[4]
2.34	0.514[7]	0.634[4]	0.670[5]	0.672[5]
2.35	0.502[6]			
2.38	0.488[5]	0.672[5]	0.708[8]	0.713[8]
2.40	0.481[4]			
2.60	0.459[3]	0.78[1]	0.81[1]	0.81[1]
2.80	0.453[3]			
3.00	0.459[3]	0.585[3]	0.576[2]	0.547[2]
3.20	0.448[3]			
3.50	0.446[3]	0.4623[8]	0.4832[7]	0.4698[6]

Tabelle D.2.: Die durch Kurvenfits erhaltenen Werte für  $\xi$  (vgl. Abbildung 5.9). In eckigen Klammern ist der Fehler der letzten Stelle angegeben.

D. Zusammenfassung der Messdaten

$\beta$	YANG-MILLS	$S_{\text{eff}}^{(2)}$	$S_{\text{eff}}^{(3)}$	$S_{\text{eff}}^{(5)}$
4.00	0.445[3]	0.4071[3]	0.4486[3]	0.4435[3]

Tabelle D.2.: Die durch Kurvenfits erhaltenen Werte für  $\xi$  (vgl. Abbildung 5.9). In eckigen Klammern ist der Fehler der letzten Stelle angegeben.

**Quadrat des Erwartungswertes des Polyakov-Loops  $\overline{L}^2$**

$\beta$	YANG-MILLS	$S_{\text{eff}}^{(2)}$	$S_{\text{eff}}^{(3)}$	$S_{\text{eff}}^{(5)}$
1.00	0.000013[3]			
1.10	0.000005[4]	0.000001[1]	0.000001[1]	0.000001[1]
1.30	0.000000[5]			
1.70	0.000002[7]	0.000000[1]	0.000000[1]	0.000000[1]
1.80	0.000004[8]			
2.20	0.0008[3]	0.00002[2]	0.00003[2]	0.00003[2]
2.27	0.0035[6]			
2.28	0.0060[7]	0.00006[3]	0.00011[5]	0.00010[5]
2.29	0.0076[8]	0.00006[3]	0.00013[6]	0.00012[5]
2.30	0.0115[8]	0.00009[5]	0.00017[8]	0.00017[7]
2.32	0.0316[5]	0.0002[1]	0.0004[1]	0.0004[1]
2.34	0.0442[4]	0.0004[1]	0.0006[2]	0.0006[2]
2.35	0.0519[3]			
2.38	0.0661[2]	0.0007[2]	0.0010[3]	0.0011[3]
2.40	0.0747[2]			
2.60	0.1351[1]	0.00350[7]	0.0059[9]	0.013[1]
2.80	0.1820[1]			
3.00	0.22386[9]	0.1593[1]	0.1770[1]	0.19346[7]
3.20	0.26144[7]			
3.50	0.31138[6]	0.28808[2]	0.29635[1]	0.30326[1]
4.00	0.38129[5]	0.371727[5]	0.376296[5]	0.375873[5]

Tabelle D.3.: Die durch Kurvenfits erhaltenen Werte für  $\overline{L}^2$  (vgl. Abbildung 5.10). In eckigen Klammern ist der Fehler der letzten Stelle angegeben.



## E. Konventionen

Wir arbeiten in natürlichen Einheiten  $\hbar = c = 1$ . Zusätzlich setzen wir auch die BOLTZMANN-Konstante  $k_B$  gleich Eins. Alle physikalischen Dimensionen lassen sich dann als Potenzen der Länge oder Masse (inverser Länge) ausdrücken. Längen werden grundsätzlich in Einheiten von  $a$ , der Gitterkonstanten gemessen. Die Einheit anderer physikalischer Größen ergibt sich nach einer Dimensionsbetrachtung der betrachteten Größe im Kontinuum als eine Potenz des Gitterabstandes. Die benutzte LORENTZ-Metrik  $\eta_{ij}$  besitzt die Signatur  $(-1, 1, 1, 1)$ , was den Übergang zur EUKLIDISCHEN-Metrik  $\delta_{ij}$  einfacher macht. Alle weiteren Bezeichner fasst Tabelle E.1 zusammen.

$a$	Gitterkonstante
$\Lambda$	Gitter als Gesamtheit
$ \Lambda , N_\Lambda$	Anzahl Gitterpunkte
$N_s$	Anzahl Gitterpunkte in räumlicher Richtung
$N_\tau$	Anzahl Gitterpunkte in EUKLIDISCHER Zeitrichtung
$\Lambda_S$	räumliches Untergitter, es gilt $\Lambda = N_\tau \times \Lambda_S$
$ \Lambda_S , N_S$	Anzahl Gitterpunkte des räumlichen Gitters
$x$	EUKLIDISCHER Vierervektor
$\vec{x}$	EUKLIDISCHER Dreiervektor
$\sum_{\langle \vec{x}\vec{y} \rangle}$	Summe über alle nächste Nachbarn. Für ein Gitter mit $N_s$ Gitterpunkten pro Raumrichtung entspricht dies $2 \cdot d$ Termen!
$\sum_{\vec{x}} \sum_i$	Summe über alle Gitterpunkte und Richtungen. Es werden pro Richtung Vorwärts- und Rückwärtsrichtung aufaddiert. Dies entspricht der Summe über alle nächste Nachbarn.
$\sum_{\vec{x}} \sum_{i>0}$	Summe über alle Gitterpunkte und positive Richtungen. Es wird pro Richtung nur die Vorwärtsrichtung aufaddiert.

Tabelle E.1.: Gebräuchliche Bezeichner

# Literaturverzeichnis

- [1] Gnu octave. [www.octave.org](http://www.octave.org).
- [2] Gnuplot. [www.gnuplot.info](http://www.gnuplot.info).
- [3] B. E. Moo A. Koenig. *Ruminations on C++*. Addison-Wesley, 1996.
- [4] A. Alexandrescu. *Modern C++ Design*. Addison-Wesley, 2001.
- [5] M. Billo, M. Caselle, A. D’Adda, and S. Panzeri. Toward an analytic determination of the deconfinement temperature in SU(2) L.G.T. *Nucl. Phys.*, B472:163–193, 1996.
- [6] D. Bleecker. *Gauge theories and Variational Principles*. Addison-Wesley, 1981.
- [7] G. Boyd et al. Thermodynamics of SU(3) Lattice Gauge Theory. *Nucl. Phys.*, B469:419–444, 1996.
- [8] Guy Buss. Analytische Aspekte effektiver SU(N)-Gittereichtheorien. Master’s thesis, FSU Jena, 2004.
- [9] N. Cabibbo and E. Marinari. A new Method for updating SU(N) Matrices in Computer Simulations of Gauge Theories. *Phys. Lett.*, B119:387–390, 1982.
- [10] Carroll. *Spacetime and Geometry*. Addison-Wesley, 2003.
- [11] M. Caselle. Recent results in high-temperature lattice gauge theories. 1995.
- [12] M. Creutz. Monte Carlo Algorithms for Lattice Gauge Theory. BNL-39747.
- [13] M. Creutz. *Quarks, gluons and lattices*. Cambridge University Press, 1985.
- [14] M. Creutz, editor. *Quantum Fields on the Computer*, volume 11 of *Advanced Series on Directions in High Energy Physics*. World Scientific, 1998.

- [15] Michael Creutz. Overrelaxation and Monte Carlo Simulation. *Phys. Rev.*, D36:515, 1987.
- [16] Kurt Binder David P. Landau. *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2000.
- [17] P. de Forcrand et al. Renormalization group flow of SU(3) lattice gauge theory: Numerical studies in a two coupling space. *Nucl. Phys.*, B577:263–278, 2000.
- [18] Thomas DeGrand, Anna Hasenfratz, and Tamas G. Kovacs. Improving the chiral properties of lattice fermions. *Phys. Rev.*, D67:054501, 2003.
- [19] Leander Dittman. *Effective Models for Confining Gauge Theories: Analytical and Numerical Tests*. PhD thesis, FSU Jena, 2004.
- [20] Leander Dittmann, Thomas Heinzl, Tobias Kästner, and Andreas Wipf. Effective Actions for the SU(2) Confinement-Deconfinement Phase Transition. *Preprint HEP-TPI/04-09*, 2004.
- [21] Leander Dittmann, Thomas Heinzl, and Andreas Wipf. An effective lattice theory for Polyakov loops. *JHEP*, 06:005, 2004.
- [22] Adrian Dumitru, Yoshitaka Hatta, Jonathan Lenaghan, Kostas Orginos, and Robert D. Pisarski. Deconfining phase transition as a matrix model of renormalized Polyakov loops. *Phys. Rev.*, D70:034511, 2004.
- [23] Stephan Durr. Gauge action improvement and smearing. 2004.
- [24] R. Johnson J. Vlissides E. Gamma, R. Helm. *Design Patterns. Elements of reusable Object-Oriented Software*. Addison-Wesley, 1997.
- [25] D. Schroeder E. Peskin. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Perseus Books, 1995.
- [26] B. Eckel. *Thinking in C++ Vol. 1 and 2*. Prentice Hall, 2003.
- [27] J. Engels, J. Fingberg, and M. Weber. Finite Size Scaling Analysis of SU(2) Lattice Gauge Theory in (3+1)-Dimensions. *Nucl. Phys.*, B332:737, 1990.
- [28] D. Stoll F. Lenz, H. Grißhammer, editor. *Lectures on QCD - Foundations*. Lecture Notes in Physics. Springer, 1997.

- [29] K. Fabricius and O. Haan. Heat Bath Method for the twisted Eguchi-Kawai Model. *Phys. Lett.*, B143:459, 1984.
- [30] M. Falcioni, G. Martinelli, M. L. Paciello, G. Parisi, and B. Taglienti. A new Proposal for the Determination of the Renormalization Group Trajectories by Monte Carlo Renormalization Group Method. *Nucl. Phys.*, B265:187, 1986.
- [31] T. Frankel. *The Geometry of Physics*. Cambridge University Press, 2001.
- [32] Yasushi Fujimoto, Andreas Wipf, and Hiroshi Yoneyama. Symmetry Restoration of scalar Models at finite Temperature. *Phys. Rev.*, D38:2625, 1988.
- [33] A. Gonzalez-Arroyo and C. P. Korthals-Altes. Asymptotic Freedom scales for any Lattice Action. *Nucl. Phys.*, B205:46–76, 1982.
- [34] A. Gonzalez-Arroyo and M. Okawa. From Block Spin Expectation Values to Renormalized Couplings. *Phys. Rev.*, B35:2108, 1987.
- [35] David J. Gross, Robert D. Pisarski, and Laurence G. Yaffe. QCD and Instantons at finite Temperature. *Rev. Mod. Phys.*, 53:43, 1981.
- [36] K. Haberland. Darstellungstheorie von Liegruppen.
- [37] K. Haberland. Vorlesungen über Algebraische Topologie.
- [38] M. Hasenbusch and S. Necco. SU(3) lattice gauge theory with a mixed fundamental and adjoint plaquette action: Lattice artefacts. *JHEP*, 08:005, 2004.
- [39] T. Heinzl. Topics in quantum gauge theories, lecture notes. unpublished.
- [40] K. Huang. *From Operators to Path integrals*. John Wiley & Sons, inc., 1998.
- [41] G. Münster I. Montvay. *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge monographs on mathematical physics. Cambridge University Press, 1994.
- [42] N. M. Josuttis. *The C++ Standard Library: A Tutorial and Reference*. Addison-Wesley, 1999.
- [43] Joseph I. Kapusta. *Finite-temperature field theory*. Cambridge monographs on mathematical physics. Cambridge University Press, 1993.
- [44] F. Karsch et al. QCD thermodynamics with improved actions. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 53:413–416, 1997.

- [45] A. D. Kennedy and B. J. Pendleton. Improved Heat Bath Method for Monte Carlo Calculations in Lattice Gauge Theories. *Phys. Lett.*, B156:393–399, 1985.
- [46] John B. Kogut. A Review of the Lattice Gauge Theory Approach to Quantum Chromodynamics. *Rev. Mod. Phys.*, 55:775, 1983.
- [47] G. Peter Lepage, Lorenzo Magnea, Charles Nakhleh, Ulrika Magnea, and Kent Hornbostel. Improved nonrelativistic QCD for heavy quark physics. *Phys. Rev.*, D46:4052–4067, 1992.
- [48] B. Lucini, M. Teper, and U. Wenger. The deconfining phase transition in  $SU(N(c))$  gauge theories. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 119:532–534, 2003.
- [49] Biagio Lucini, Michael Teper, and Urs Wenger. The high temperature phase transition in  $SU(N)$  gauge theories. *JHEP*, 01:061, 2004.
- [50] T. Schücker M. Göckeler. *Differential Geometry, Gauge Theories and Gravity*. Cambridge University Press, 1987.
- [51] T. Miller. Source Code for Monte Carlo Simulations in  $SU(2)$  and  $SU(3)$  Yang-Mills Theories. <http://hbar.wustl.edu/miller/su3c.html>.
- [52] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press Oxford, 1999.
- [53] Michael Ogilvie. An effective Spin Model for finite Temperature QCD. *Phys. Rev. Lett.*, 52:1369, 1984.
- [54] U. Kirch-Prinz P. Prinz. *C++ lernen und professionell anwenden*. mitp, 2001.
- [55] Robert D. Pisarski. Quark-gluon plasma as a condensate of  $SU(3)$  Wilson lines. *Phys. Rev.*, D62:111501, 2000.
- [56] Heinz J. Rothe. *Lattice Gauge Theories*, volume 43 of *Lecture Notes in Physics*. World Scientific, 1992.
- [57] L. H. Ryder. *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, 1996.
- [58] Jan Smit. *Introduction to Quantum Fields on a Lattice*. Number 15 in Cambridge lecture notes in physics. Cambridge University Press, 2002.

- [59] B. Stroustrup. *The C++ Programming Language, Special Edition*. Addison-Wesley, 2000.
- [60] Benjamin Svetitsky and Laurence G. Yaffe. Critical Behavior at finite Temperature Confinement Transitions. *Nucl. Phys.*, B210:423, 1982.
- [61] K. Symanzik. Continuum Limit and improved Action in Lattice Theories. 1. Principles and  $\phi^4$  Theory. *Nucl. Phys.*, B226:187, 1983.
- [62] W.T. Vetterling B.P.Flannery W.H. Press, S.A. Teukolsky. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 1994.
- [63] Kenneth G. Wilson. Confinement of Quarks. *Phys. Rev.*, D10:2445–2459, 1974.
- [64] A. Wipf. QFT2 lecture notes. unpublished, 2003.
- [65] L. G. Yaffe and B. Svetitsky. First Order Phase Transition in the SU(3) Gauge Theory at Finite Temperature. *Phys. Rev.*, D26:963, 1982.

*Literaturverzeichnis*



## **Danksagung**

Ich bedanke mich herzlich bei Prof. Dr. Andreas Wipf für die ausgezeichnete Betreuung. Das geduldige Beantworten all meiner Fragen, die mir Orientierung gebenden Impulse und die fachliche Unterstützung trugen entscheidend zum Gelingen dieser Arbeit bei. Mein Dank gebührt in gleicher Weise Dr. habil. Tom Heinzl, der mir nicht nur die für diese Arbeit wichtigen Grundlagen wieder und wieder erklärte, sondern mir auch mit seiner in vielen Jahren gesammelten Erfahrung beiseite stand. Für die Einarbeitung in die vielschichtigen numerischen Aspekte möchte ich mich bei Leander Dittmann bedanken, der immer ein offenes Ohr für meine Fragen hatte. Ich bedanke mich ebenso bei allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Quantenfeldtheorie für die stets angenehme und motivierende Arbeitsatmosphäre. Für die vielen interessanten Diskussionen gilt hierbei mein besonderer Dank Thomas Mohaupt, Jean Dominique Länge und Guy Buss. Unserem Systemadministrator Herr Dr. Martin Weiß danke ich für seine fortwährend zügige und freundliche Unterstützung bei allen technischen Belangen.

Meine liebe Frau Anja hat mir durch ihren Zuspruch und ihrem immerwährenden Verständnis die Kraft und Zuversicht geschenkt, ohne die ein solches Unternehmen nicht hätte gelingen können. Dafür danke ich Dir!



### **Erklärung**

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.

Tobias Kästner

Jena, den 7. November 2004