
Implementierung einer Anisotropie für Hybrid-Monte-Carlo Methoden mittels GPU-Computing

Masterarbeit

**Maximilian Beuse
Fakultät für Physik**

Universität Bielefeld



7. Mai 2019

**Matrikelnummer: 2576673
Studiengang: Physik 1-Fach (fw.)
Erstgutachter: Dr. Wolfgang Unger
Zweitgutachter: Dr. Christian Schmidt**

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbständig verfasst und gelieferte Datensätze, Zeichnungen, Skizzen und graphische Darstellungen selbständig erstellt habe. Ich habe keine anderen Quellen als die angegebenen benutzt und habe die Stellen der Arbeit, die anderen Werken entnommen sind - einschl. verwendeter Tabellen und Abbildungen - in jedem einzelnen Fall unter Angabe der Quelle als Entlehnung kenntlich gemacht.

Bielefeld, den

(Unterschrift)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Motivation	7
2	Quantenchromodynamik im Kontinuum	9
2.1	Die Lagrange-Dichte der QCD	9
2.2	Der Pfadintegralformalismus	10
2.3	Symmetrien der Lagrange-Dichte und Phasendiagramm	11
2.3.1	Chirale Symmetrie und spontane Symmetriebrechung	11
2.3.2	Das Phasendiagramm der QCD	13
2.4	Chirale Observablen	15
2.4.1	Das chirale Kondensat als Ordnungsparameter	15
2.4.2	Die chirale Suszeptibilität	16
3	Quantenchromodynamik auf dem Gitter	17
3.1	Regularisierung durch das Gitter	17
3.1.1	Das Doubling Problem und Staggered Fermionen	20
3.1.2	Fermion-Determinante und Pseudofermionen	21
3.2	Chirale Symmetrie für Staggered Fermionen	22
3.3	Gitter-QCD bei endlicher Temperatur und chemischen Potential μ	23
3.3.1	QCD auf anisotropen Gittern	24
3.3.2	QCD bei endlichem chemischen Potential und Vorzeichen Problem	25
3.4	Die duale Darstellung und Strong Coupling Limit	27
4	Methodik und Algorithmen	29
4.1	Markov-Ketten und Detailed Balance Equation	29
4.2	Hybrid-Monte-Carlo Methoden	30
4.2.1	Leapfrog-Algorithmus und Metropolis-Akzeptanzschritt	31
4.2.2	Implementierung für Eichfelder und Fermionen	32
4.3	Die rationale Approximation	34
4.4	Numerische Berechnung des chiralen Kondensats in HMC und MDP	36
5	Implementierung der Anisotropie	37
5.1	Berücksichtigung des γ -Faktors im GPU-Code	37
5.2	Erste Crosschecks mit MDP	39
5.3	Fehlerbehebung und Debugging	41
6	Simulationen und Ergebnisse	46
6.1	Der Polyakov-Loop	47

6.2	Das chirale Kondensat	49
6.3	Die disconnected Susceptibility	50
6.4	Die connected Susceptibility	50
6.5	Die volle Suszeptibilität	51
7	Zusammenfassung und Ausblick	52
A	Herleitungen und weitere Rechnungen	56
A.1	Berechnung der Fermion-Kraft	56
A.2	Herleitung des chiralen Kondensats und der chiralen Suszeptibilität	59
B	Zusätzliche Messungen und Plots	62
B.1	Weitere Crosschecks zur Fehlerbehebung	62
B.2	Messungen für die Gitter $12^3 \times 4$ und $16^3 \times 4$	65
C	Code Ausschnitte	67
C.1	Anisotropie Implementierungen	67

1 Einleitung und Motivation

Die Beschreibung und Spezifizierung der Phasen stark wechselwirkender Materie stellen Experimental- und Theoretische-Physiker seit vielen Jahren vor enorme Herausforderungen. Bei der zugrunde liegenden Theorie der Quantenchromodynamik (QCD) handelt es sich dabei um eine nicht-abelsche Eichtheorie mit der Eichgruppe $SU(3)$, wodurch diese zum einen ein hohes Maß an Komplexizität und zum anderen eine reichhaltige Phänomenologie aufweist. Eines der wohl prominentesten Beispiele ist dabei das *Confinement* bei niedrigen Temperaturen ($T < T_c \approx 1.7 \cdot 10^{12} \text{ K}$), also die Tatsache, dass Quarks und Gluonen nur in farbneutralen, gebundenen Zuständen, den Hadronen, vorkommen. Weitere interessante Eigenschaften der QCD sind die *asymptotische Freiheit* der Quarks bei hohen Temperaturen, also die Tatsache, dass sich Quarks und Gluonen auf hohen Energieskalen wie nahezu freie Teilchen verhalten, sowie die spontane Brechung der chiralen Symmetrie, bei der heute davon ausgegangen wird, dass sie für einen Großteil der Massen der Hadronen verantwortlich ist.

Um die genauen Zusammenhänge zwischen diesen phänomenologischen Eigenschaften stark wechselwirkender Materie, sowie deren Eigenschaften unter extremen Bedingungen, wie im inneren von Neutronensternen, zu verstehen, ist es notwendig das Phasendiagramm der QCD zu kennen und theoretisch zu beschreiben. Da jedoch ein störungstheoretischer Ansatz, wie er sich z.B. in der QED als sehr erfolgreich erwies, aufgrund der starken Kopplungen in der QCD nur bei sehr hohen Temperaturen angewendet werden kann, ist die Entwicklung und Verwendung anderer Methoden zur Untersuchung erforderlich, da es sich bei Phasenübergängen in der QCD um nichtperturbative Phänomene handelt. Hier existieren im Prinzip mehrere Vorgehensweisen. Zum einen die Untersuchung effektiver Feldtheorien, die ähnliche Eigenschaften wie die QCD aufweisen, jedoch eine analytische Behandlung auf relevanten Skalen zulassen. Dies erlaubt es dann Rückschlüsse für die Quantenchromodynamik zu ziehen. Hierzu gehören beispielsweise das Nambu-Jona-Lasinio Modell oder die chirale Störungstheorie.

Zum anderen gewinnen, mit dem aufkommen schnellerer und leistungsfähigerer Computer, numerische Simulationen im Rahmen der Gitter-Feldtheorie immer mehr an Bedeutung. Die grundlegende Idee hierbei ist, die entsprechende Feldtheorie auf einem vierdimensionalen Raumzeit-Gitter zu diskretisieren und die bei der Berechnung von Observablen vorkommenden Pfadintegrale mittels Monte-Carlo-Simulationen auszuwerten. Die Gitter-QCD erwies sich dabei als äußerst erfolgreich, allerdings verhindert das Vorzeichen-Problem der QCD bei endlichem baryochemischen Potential, dass gängige Algorithmen, wie der Hybrid-Monte-Carlo (HMC), auf weite Bereiche des Phasendiagramms angewendet werden können. Die Gitter-QCD sieht sich somit u.a. vor der Herausforderung neue Methoden und Algorithmen zu entwickeln, die eine numerische Simulation der vollen Theorie auch im Bereich endlichen chemischen Potentials zulassen.

Einen Ansatz stellt dabei die *Strong Coupling* LQCD dar, bei der in erster Näherung die Eigendynamik der Eichfelder vernachlässigt wird indem der Grenzfall einer unendlich großen Eichkopplung betrachtet wird. Sie weist im Gegensatz zur vollen QCD nur ein mildes Vorzeichen-Problem auf, was es erlaubt das gesamte Phasendiagramm auf dem Gitter zu simulieren.[31] Weiterhin bleiben in diesem Grenzfall Eigenschaften der QCD wie Confinement und chirale Symmetriebrechung bestehen, wodurch wertvolle Einsichten in die Phasenstruktur der QCD bei nicht verschwindendem chemischen Potential gewonnen werden können. Die Idee bei der Erweiterung der SC-LQCD auf den Bereich endlicher Eichkopplungen ist nun die Effekte der Eichfelder als Korrekturen zu betrachten, um sich so sukzessiv der vollen Theorie anzunähern. Dieses Vorgehen erfordert eine Reihe von Crosschecks um zu überprüfen in welchem Bereich diese Korrekturen gültig sind. Ziel

dieser Arbeit ist es einen Teil der Daten zu liefern, die für solche Checks erforderlich sind. Dazu werden Simulationen mittels Hybrid-Monte-Carlo bei verschwindender und geringer Eichkopplung durchgeführt, wobei es jedoch zunächst nötig ist den HMC Algorithmus auf anisotrope Gitter zu verallgemeinern. Diese Implementierung einer Anisotropie in den bereits bestehenden Code der Bielefelder Gruppe, stellt den Hauptteil dieser Arbeit dar. Es folgen weiterhin noch einige Vergleiche mit Strong Coupling Resultate, sowie Diskussionen der bis dato erzeugten Daten.

Die vorliegende Arbeit ist dabei wie folgt strukturiert. Zu Beginn erfolgt eine kurze Übersicht über Quantenchromodynamik im Kontinuum, wobei hier besonders auf die Symmetrien der Theorie, sowie das Phasendiagramm nach aktuellem Wissensstand eingegangen wird. Nachfolgend wird eine allgemeine Beschreibung der Gitter-QCD gegeben, wie sie für diese Arbeit benötigt wird. Es folgt ein Kapitel über die verwendeten Methoden und Algorithmen, sowie ein weiteres Kapitel über die konkrete Implementierung der Anisotropie in den bestehenden Code. Zuletzt werden die mit dem modifizierten Code erzeugten Daten dargestellt und diskutiert.

2 Quantenchromodynamik im Kontinuum

Im ersten Abschnitt dieser Arbeit sollen die für alle späteren Herleitungen und Erklärungen benötigten theoretischen Grundlagen kurz zusammengefasst werden. Dabei wird zunächst auf die Lagrange-Dichte der QCD im Kontinuum, sowie deren Symmetrien, und den Pfadintegralformalismus eingegangen. Anschliessend soll ein kurzer Überblick über das Phasendiagramm der QCD gegeben werden. Zuletzt folgt eine Herleitung und Erläuterung der später benötigten chiralen Observablen.

2.1 Die Lagrange-Dichte der QCD

Ohne großartige Herleitungen soll direkt die Lagrange-Dichte der Euklidischen QCD angegeben werden. Sie lautet [1]

$$\mathcal{L}_{QCD} = \sum_{i=1}^{N_f} \bar{\psi}_i(x) (\not{D} + m_i) \psi_i(x) - \frac{1}{2} \text{Tr} [F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] , \quad (2.1)$$

wobei Farb- und Dirac-Indizes durch eine Matrix-Vektor Notation unterdrückt wurden. Hier bezeichnet nun $\psi_i(x)$ das zu einem Quark-Flavor i gehörende Dirac-Feld (mit Masse m_i), $\not{D} = \gamma^\mu [\partial_\mu - igA_\mu(x)]$ die kovariante Ableitung und $A_\mu(x)$ das Gluon-Feld, welches sich schreiben lässt als

$$A_\mu(x) = \sum_a T^a A_\mu^a(x) . \quad (2.2)$$

Der Feldstärke-Tensor ist gegeben durch

$$F_{\mu\nu}(x) = \sum_a T^a F_{\mu\nu}^a(x) , \quad (2.3)$$

wobei dieser durch die Beziehung

$$F_{\mu\nu}^a(x) = \partial_\mu A_\nu^a(x) - \partial_\nu A_\mu^a(x) + gf_{abc} A_\mu^b(x) A_\nu^c(x) \quad (2.4)$$

mit den Eichfeldern zusammenhängt. Die T^a bezeichnen die Generatoren der Eichgruppe $SU_c(3)$ und hängen über

$$T^a = \frac{\lambda^a}{2} \quad (2.5)$$

mit den Gell-Mann Matrizen zusammen. Sie erfüllen die Kommutatorrelationen

$$[\lambda^a, \lambda^b] = if_{abc} \lambda^c \quad (2.6)$$

und bilden die Lie-Algebra $\mathfrak{su}(3)$. Die Summe in (2.1) läuft dabei über alle zu betrachtenden Quark-Flavor. In der Natur gibt es sechs, allerdings reicht es üblicherweise aus nur die ersten drei oder vier Flavor zu betrachten, da Beiträge durch die schwersten Quarks, bei typischen Energieskalen, vernachlässigt werden können.

2.2 Der Pfadintegralformalismus

Die obige Betrachtung war bisher noch rein klassischer Natur. Da es sich bei der QCD jedoch, wie der Name schon sagt, um eine relativistische Quantentheorie der starken Wechselwirkung handelt, muss noch geklärt werden, wie aus der klassischen Feldtheorie eine, mit den Gesetzen der Quantenmechanik verträgliche, Quantenfeldtheorie konstruiert werden kann. Hier wird üblicherweise gerade im Falle komplexerer Theorien, wie der QCD, der Zugang über das Pfadintegral bevorzugt. Für eine Herleitung des Pfadintegrals aus der kanonisch quantisierten Theorie siehe z.B. [3][4]. Hier sollen lediglich die grundlegenden und benötigten Formeln angegeben und anschließend kurz erläutert werden.

Ausgehend vom Erwartungswert eines Operators, der sich analog zur herkömmlichen Quantenmechanik, definieren lässt durch

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \text{Tr} \left[e^{-(\beta-t)\hat{\mathcal{H}}} \hat{O} e^{-t\hat{\mathcal{H}}} \right] , \quad (2.7)$$

wobei $\hat{\mathcal{H}}$ der Hamilton-Operator, der Normierungsfaktor

$$Z(\beta) = \text{Tr} \left[e^{-\beta\hat{\mathcal{H}}} \right] \quad (2.8)$$

die Zustandssumme des Systems und β die inverse Temperatur des Systems sind, kann dieser auch durch das Pfadintegral dargestellt werden. Hierbei wird der Erwartungswert eines Operators bzw. eine Korrelationsfunktion in ein unendlichdimensionales Funktionalintegral übersetzt. Das Integral läuft dabei über alle möglichen Feldkonfigurationen der klassischen Felder

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \frac{1}{Z(\beta)} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}A \, e^{-S_E[\bar{\psi}, \psi, A]} \mathcal{O}[\bar{\psi}, \psi, A] . \quad (2.9)$$

Hier ist

$$Z(\beta) = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}A \, e^{-S_E[\bar{\psi}, \psi, A]} \quad (2.10)$$

und

$$S_E[\bar{\psi}, \psi, A] = \int_0^\beta dt \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \, \mathcal{L}_{QCD} . \quad (2.11)$$

Aufgrund der Spur in (2.7) müssen an die Felder außerdem periodische (Bosonen) bzw. anti-periodische (Fermionen) Randbedingungen in zeitliche Richtung gestellt werden. Das Exponential der Wirkung in (2.10) übernimmt hier in Analogie zur statistischen Mechanik die Rolle eines Boltzmann-Faktors, was es erlaubt Methoden, wie Monte-Carlo-Integration und Importance Sampling anzuwenden.

Weiterhin soll noch erwähnt werden, dass Korrelatoren der Form $\langle \hat{O}_2(t) \hat{O}_1(0) \rangle$ im Grenzfall $\beta \rightarrow \infty$ auf den Vakuum Erwartungswert abbilden

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle \hat{O}_2(t) \hat{O}_1(0) \rangle_\beta = \sum_n \langle 0 | \hat{O}_2 | n \rangle \langle n | \hat{O}_1 | 0 \rangle e^{-tE_n} , \quad (2.12)$$

was es ermöglicht Energieniveaus, wie z.B. Teilchen-Massen, zu extrahieren.[9]

2.3 Symmetrien der Lagrange-Dichte und Phasendiagramm

Bei Untersuchungen von Phasenstrukturen statistischer Systeme, wie es auch die euklidische QCD und insbesondere die Gitter-QCD sind, ist es sinnvoll zunächst die Symmetrien des zu betrachtenden Modells zu untersuchen. Dies hat den Hintergrund, dass in der Nähe von Phasenübergängen die Korrelationslänge des Systems divergiert und somit nur noch globale Eigenschaften, wie eben Symmetrien oder auch die Dimensionalität des Systems, im Gegensatz zu mikroskopischen Eigenschaften, wie der Form der Wechselwirkung, von Bedeutung sind. Im folgenden sollen kurz die, für diese Arbeit relevanten Symmetrien der obigen Lagrange-Dichte (2.1) dargestellt und erläutert werden. Anschließend wird das Phasendiagramm der QCD nach aktuellem Stand der Forschung vorgestellt.

2.3.1 Chirale Symmetrie und spontane Symmetriebrechung

Neben den konstruktionsbedingten Symmetrien der Lagrange-Dichte, wie Invarianz unter Poincaré-Transformationen, sowie der aus dem Eichprinzip folgenden lokalen $SU_c(3)$ -Eichsymmetrie, weist die QCD zusätzliche Symmetrien im Flavor-Raum auf. Es handelt sich dabei um die Gruppe [2]

$$SU_V(N_f) \times SU_A(N_f) \times U(1) \times U_A(1) . \quad (2.13)$$

Dies lässt sich folgendermaßen zeigen. Betrachtet man zunächst den Fall masseloser Fermionen, und verwendet auch für die Summe über Flavor die Matrix-Vektor Notation, ist die Lagrange-Dichte gegeben durch

$$\mathcal{L}_{QCD} = \bar{q} \gamma^\mu D_\mu q - \frac{1}{2} \text{Tr} [F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] . \quad (2.14)$$

Diese ist invariant unter $SU_V(N_f) \times SU_A(N_f)$ Transformationen der Form [2]

$$q \rightarrow q' = \exp \left\{ i \vec{\Theta}^V \cdot \vec{T} + i \gamma^5 \vec{\Theta}^A \cdot \vec{T} \right\} q , \quad (2.15)$$

wobei das Skalarprodukt formal definiert ist durch

$$\vec{\Theta} \cdot \vec{T} = \sum_a \Theta^a T^a . \quad (2.16)$$

Hierbei bezeichnen die t^a die Generatoren der $SU(N_f)$ und die Θ^a die jeweils $N_f^2 - 1$ reellen Parameter, die nötig sind, um ein Element dieser Gruppe zu parametrisieren. Definiert man $X^a = \gamma^5 T^a$ erfüllen diese beiden Sätze von Generatoren die Kommutatorrelationen

$$[T^a, T^b] = i f_{abc} T^c , \quad [T^a, X^b] = i f_{abc} X^c , \quad [X^a, X^b] = i f_{abc} T^c , \quad (2.17)$$

was sich leicht überprüfen lässt.[2] Man spricht hier von einer Vektor- und einer Axialen- $SU(N_f)$, da sich die zugehörigen Noether-Ströme

$$V_a^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu T^a \psi , \quad A_a^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \gamma_5 T^a \psi \quad (2.18)$$

unter Paritätstransformationen wie Vektoren bzw. Axialvektoren transformieren. Durch die Definition der Projektionsoperatoren

$$P_{R/L} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma^5) \quad \text{mit} \quad P_{R/L}^2 = P_{R/L}, \quad P_R \cdot P_L = 0 \quad (2.19)$$

sowie den Identifikationen

$$\psi_R = P_R \psi, \quad \psi_L = P_L \psi \quad (2.20)$$

$$\bar{\psi}_R = \bar{\psi} P_L, \quad \bar{\psi}_L = \bar{\psi} P_R, \quad (2.21)$$

lässt sich die Lagrange-Dichte (2.14) durch Einfügen zweier Einheitsoperatoren der Form $\mathbb{1} = P_R + P_L$ umschreiben zu

$$\mathcal{L}_{QCD} = \bar{q}_R \not{D} q_R + \bar{q}_L \not{D} q_L - \frac{1}{2} \text{Tr} [F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] . \quad (2.22)$$

Anhand dieser Lagrange-Dichte ist zu sehen, dass sich die so nun erhaltenen links- und rechtshändigen Felder separat unter $SU(N_f)$ -Transformationen transformieren lassen

$$q_R \rightarrow \exp \{ i \vec{\Theta}_R \cdot \vec{T}_R \} q_R, \quad q_L \rightarrow \exp \{ i \vec{\Theta}_L \cdot \vec{T}_L \} q_L \quad (2.23)$$

Auch hier resultiert also insgesamt eine Invarianz unter $SU_R(N_f) \times SU_L(N_f)$ Transformationen. Die Generatoren $\vec{T}_R$ und $\vec{T}_L$ hängen dabei durch

$$\vec{T}_L = \frac{1}{2} (\vec{T} + \vec{X}), \quad \vec{T}_R = \frac{1}{2} (\vec{T} - \vec{X}) \quad (2.24)$$

mit den Generatoren $\vec{T}$ und $\vec{X}$ zusammen. Hier ist zu sehen, dass sich durch diese Symmetrietransformation die links- und rechtshändigen Felder ineinander überführen lassen, was auch den Namen *chirale Symmetrie* begründet (*chiral*, abgeleitet von griechisch $\chi\epsilon\iota\rho \sim \text{ch[e]ir} \sim \text{Hand}$). Falls diese Symmetrie exakt und nicht gebrochen ist, hat dies zur Folge, dass zu jedem Hadron ein Partner mit identischen Quantenzahlen, aber umgekehrter Parität existieren muss. Dies wird jedoch in der Natur nicht beobachtet, was nun zwei Gründe haben kann. Entweder ist die Symmetrie explizit oder spontan gebrochen. Hierfür lässt sich folgende Bedingung aufstellen: Die Lagrange-Dichte der QCD ist genau dann invariant unter chiralen Transformationen der Form (2.23), falls gilt

$$\not{D} \gamma_5 + \gamma_5 \not{D} = 0 . \quad (2.25)$$

Da in der bisherigen Betrachtung die Massen der Quarks vernachlässigt wurden, stellt sich die Frage, wie sich dieses Symmetrieverhalten der Lagrange-Dichte durch Hinzunahme eines Massenterms ändert. Die Lagrange-Dichte (2.22) nimmt dann die Form

$$\mathcal{L}_{QCD} = \bar{q}_R \not{D} q_R + \bar{q}_L \not{D} q_L + \bar{\psi}_R M \psi_L + \bar{\psi}_L M \psi_R - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (2.26)$$

an, wobei $M = \text{diag}(m_1, \dots, m_{N_f})$ ist. Hieran ist zu sehen, dass ein solcher Massenterm die obige Symmetrie explizit bricht. Sind die Massen der verschiedenen Quarkflavor jedoch entartet, können die links- und rechtshändigen Felder mit der selben $SU(N_f)$ -Trafo transformiert werden und die $SU_R(N_f) \times SU_L(N_f)$ -Symmetrie wird somit auf eine einfache $SU(N_f)$ gebrochen.

Da die beiden leichtesten Quarks nahezu identische und fast verschwindende Massen haben, betrachtet man in der Praxis üblicherweise den Fall $N_f = 2$. Abschätzungen, wie

sie z.B. von Weinberg gemacht wurden, zeigen, dass hier der Effekt, durch die explizite Brechung der Symmetrie, auf Grund des Massenterms, nicht groß genug ist, um die Massenunterschiede zwischen den oben erwähnten Paritätspartnern zu erklären.[2] Dies legt die Vermutung nahe, dass die chirale Symmetrie zusätzlich spontan gebrochen sein muss. Nach dem Goldstone-Theorem hätte dies die Existenz von drei (für $N_f = 2$) pseudoskalaren Pseudo-Goldstone-Bosonen zur Folge, welche heute mit den drei leichtesten Mesonen, den Pionen, identifiziert werden.[2]

Zusätzlich sei noch erwähnt, dass (2.26) ebenfalls invariant unter $U(1)$ - Transformationen ist. Diese Symmetrie ist auch für nicht entartete Massen exakt und nicht gebrochen. Die zugehörige, erhaltene Ladung ist die Baryonenzahl. Weiterhin ist (2.22) noch invariant unter axialen $U_A(1)$ -Transformationen. Diese Symmetrie ist jedoch explizit durch den Massenterm in (2.26), sowie durch Instanton-Effekte, gebrochen. Diese beiden Symmetrien sind für die nachfolgenden Betrachtungen von geringerer Bedeutung und werden somit nicht weiter betrachtet.

2.3.2 Das Phasendiagramm der QCD

Eine der wohl größten Herausforderungen aktueller, physikalischer Forschung, stellt die vollständige Entschlüsselung des Phasendiagramms der QCD dar. Dieser Abschnitt soll eine kurze Übersicht über den aktuellen Stand der Forschung geben, um so die später präsentierten Daten besser interpretieren und einordnen zu können.

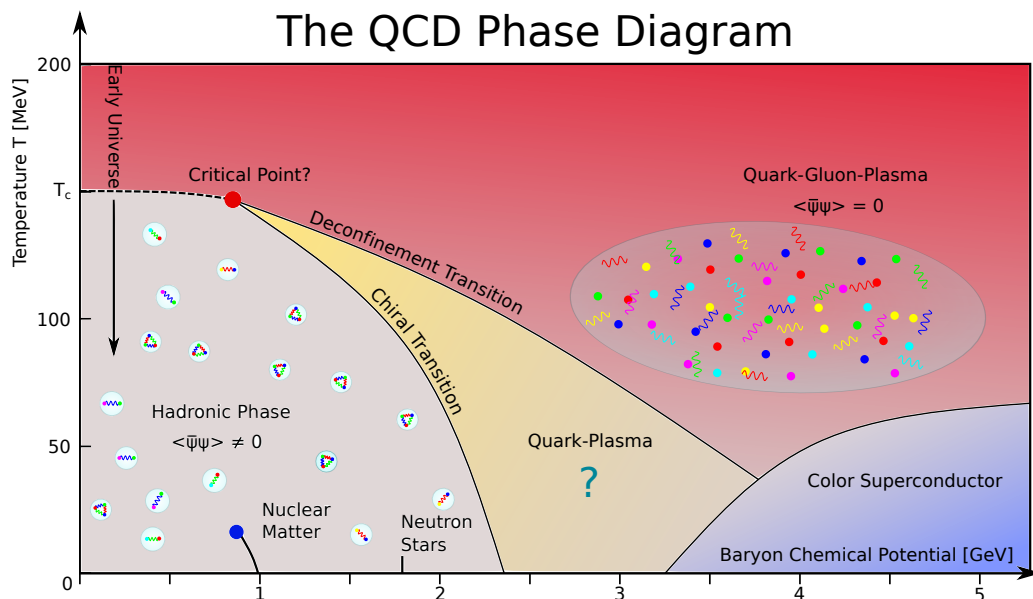


Abb. 2.1: Schematische Darstellung des vermuteten Phasendiagramms der QCD bei physikalischen Quark-Massen.

Abb. 2.1 zeigt das Phasendiagramm der QCD. Aufgetragen ist hierbei die Temperatur gegen das Baryon-chemische Potential, also die Energie die nötig ist ein Baryon aus dem Vakuum zu erzeugen. Zu sehen ist hier im Bereich niedriger Temperaturen und Dichten eine hadronische Phase. Die Quarks weisen in diesem Bereich *Confinement* auf und sind in Hadronen, also Mesonen und Baryonen, gebunden. Wie oben beschrieben, sprechen hier einige experimentelle und theoretische Befunde dafür, dass die chirale Symmetrie der

QCD in diesem Bereich spontan gebrochen ist. Da es sich bei Confinement um ein langreichweitiges Phänomen handelt, stellt sich die Frage, wie sich Materie auf immer kleineren Skalen verhält. Im Falle von zwei-Teilchen Problemen würde man dabei die Dynamik des Systems bei immer höheren Energien untersuchen. Bei makroskopischen Systemen handelt es sich jedoch um Vielteilchen Systeme, in denen sowohl die Wechselwirkungen einzelner Konstituenten, als auch kollektive Phänomene eine Rolle spielen. Es reicht also nicht, nur Systeme bei hohen Energien zu untersuchen. Es müssen ebenfalls hohe Dichten betrachtet werden, um so auch die Thermodynamik des Systems zu untersuchen.[7] Dies kann in einem relativistischen System auf zwei Wege geschehen. Zum einen kann die Netto Baryondichte des Systems, bei gleichbleibender Temperatur, erhöht werden. Dies entspricht gerade einer Kompression der vorhandenen Materie. Zum anderen können dem System, auf Grund von Paarerzeugung, durch eine Erhöhung der Temperatur, zusätzliche Quark-Antiquark-Paare hinzugefügt werden.

Eine simple Überlegung dazu, warum bei hohen Dichten *Deconfinement* zu erwarten ist, stellen Perkulationsbetrachtungen dar. Angenommen die Dichte eines gegebenen Volumens an Kernmaterie wird durch das Hinzufügen weiterer Nukleonen stetig erhöht, dann werden diese mit steigender Dichte anfangen sich zu Überlappen und Cluster zu bilden. Sobald nun eine kritische Dichte n_p erreicht ist, wird es nicht mehr möglich sein die einzelnen Quarks ihren ursprünglichen Nukleonen zuzuordnen. Das Konzept des Hadrons an sich würde also zusammenbrechen und man erwartet einen Phasenübergang in dem Deconfinement auftritt. Betrachtet man die Nukleonen als sich überlappende Kugeln, entspräche diese Dichte gerade jener bei der sogenannte Perkulationscluster auftreten. Eine weitere Vorstellung ist, dass durch diese Erhöhung der Dichte und das einbringen weiterer Quarks, also Farb-Quellen, die Kraft zwischen zwei einzelnen Quarks effektiv abgeschirmt wird, analog dem Debye-Screening im Falle elektrischer Felder. Dies hätte zur Folge, dass bei genügend hohen Dichten der Screening-Radius unter den Hadron-Radius fallen würde und somit die Kraft zwischen zwei Quarks nicht mehr stark genug ist, diese aneinander zu binden.[7]

Neben der Deconfinement-Transition ist prinzipiell noch ein weiterer, chiraler Phasenübergang zu erwarten. Die Überlegung hierzu basiert auf der Tatsache, dass die Quarks bei hohen Energien asymptotisch frei sind und somit nur in geringem Maße mit anderen Quarks wechselwirken. In diesem Bereich ist z.B. aus störungstheoretischen Berechnungen bekannt, dass die leichtesten Quarks nur eine sehr geringe, fast verschwindende Masse besitzen. Bei niedrigen Energien hingegen sind die Quarks in Hadronen gebunden und weisen auf Grund der starken Wechselwirkung eine effektive Masse von rund 300 MeV auf. Also ca. 1/3 der Masse des Nukleons, bzw. 1/2 der Masse des ρ -Mesons.[7] Hier ist also bei dem Übergang zu hohen Energien eine Verschiebung der effektiven Teilchenmassen zu erwarten. Es ist ad-hoc nicht klar, ob die beiden oben beschriebenen Phasenübergänge zusammenfallen und dies gilt es zu untersuchen. Zumindest im Falle $\mu_B = 0$ zeigen Lattice-Daten jedoch, dass dies der Fall zu sein scheint.

Es wurden im Laufe der letzten Jahrzehnte viele effektive- sowie Näherungs-Modelle, wie das Hadron-Resonanz-Gas, das Nambu-Jona-Lasinio-Model, effektive Feldtheorien u.v.m., untersucht, um Aussagen über die Struktur des Phasendiagramms zu liefern. Von großer Bedeutung ist dabei die Gitter-QCD mit deren Hilfe bereits gezeigt wurde, dass die QCD bei verschwindendem Baryon-chemischen Potential einen Crossover-Übergang besitzt. Es stellt sich weiterhin die Frage, ob die QCD bei endlichem chemischen Potential einen Phasenübergang erster Ordnung aufweist. Dies würde implizieren, dass dieser in einem kritischen Punkt endet. Nach diesem wird aktuell intensiv gesucht. Jedoch stellt das Vorzeichen-Problem bei endlichem chemischen Potential eines der größten Hindernisse dar, die numerischen Methoden der Gitter-QCD auf diesen Bereich zu erweitern.

Bei hohen Dichten erwartet man auf Grund theoretischer Überlegungen weiterhin eine Farb-Supraleitende Phase.

2.4 Chirale Observablen

In diesem Abschnitt soll das chirale Kondensat definiert und anschließend gezeigt werden, dass dieses als Ordnungsparameter für den chiralen Phasenübergang verwendet werden kann. Dazu wird kurz skizziert, wie das chirale Kondensat mit der Pion-Masse in Relation gesetzt werden kann. Verschwindet diese im Limes der Quark-Masse gegen Null, zeigt dies an, dass die chirale Symmetrie spontan gebrochen ist, da die Pionen als Goldstone-Bosonen dieser globalen Symmetrie identifiziert werden und somit im Falle einer exakten Symmetrie masselos werden. Im weiteren soll dann die volle chirale Suszeptibilität hergeleitet werden, da diese ein Maß für Fluktuationen im Ordnungsparameter darstellt und somit zur Bestimmung der kritischen Temperatur dienen kann.

2.4.1 Das chirale Kondensat als Ordnungsparameter

Zur Herleitung wird die folgende Ward-Identität genutzt [1]

$$\langle \delta O \rangle = \langle O \delta S \rangle, \quad (2.27)$$

die sich als Konsequenz einer Variablentransformation im Pfadintegral bei der Berechnung von Erwartungswerten ergibt. Dazu wird verwendet, dass sich der Wert des Pfadintegrals unter (infinitesimalen) Transformationen der Form

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi + \delta\psi \quad (2.28)$$

nicht ändert. Unter der Voraussetzung, dass das Maß invariant unter solchen Transformationen ist, folgt für die Zustandssumme (2.10)

$$Z - Z' = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}A e^{-S_E[\bar{\psi}, \psi, A]} - \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}A e^{-S_E[\bar{\psi}', \psi', A]} = 0 \quad (2.29)$$

und mit $S_E[\bar{\psi}', \psi', A] = S_E[\bar{\psi}, \psi, A] + \delta S$ schließlich

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}A \delta S e^{-S_E[\bar{\psi}, \psi, A]} = 0. \quad (2.30)$$

Unter Verwendung dieser Relation kann für den Erwartungswert einer Observablen

$$\langle O \rangle' = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}A (O + \delta O) e^{-S_E[\bar{\psi}, \psi, A]} (1 + \delta S) \quad (2.31)$$

mit $\langle O \rangle' - \langle O \rangle = 0$ direkt auf Gleichung (2.27) geschlossen werden. Wird nun als Observable der Pion-Operator

$$O_\tau = \bar{\psi}(x) \gamma_5 \tau \psi(x) \quad (2.32)$$

gewählt, wobei τ einen der Generatoren der $\mathfrak{su}(2)$ bezeichnet, folgt insgesamt das chirale Kondensat

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle = m_q \int d^4y \langle O_\tau(x) O_\tau(y) \rangle = m_q \int d^4y G_\tau(|x-y|), \quad (2.33)$$

welches also proportional zum Integral über die Zweipunkts-Korrelationsfunktion des Pion-Operators ist. Da Korrelationsfunktionen, wie aus (2.12) hervorgeht, für große Raumzeit-Abstände auf den Grundzustand projizieren, gilt für das Integral (2.33)

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle \propto \lim_{|y| \rightarrow \infty} e^{-m_\pi(m_q) \cdot |y|} = \lim_{|y| \rightarrow \infty} e^{-\xi_\pi^{-1}(m_q) \cdot |y|}, \quad (2.34)$$

wobei $\xi_\pi = m_\pi^{-1}$ die Korrelationslänge bezeichnet. Hieraus ergeben sich nun zwei Fälle, abhängig davon, wie sich die Pion-Masse $m_\pi = m_\pi^{\pm,0}$ im Grenzfall $m_q \rightarrow 0$ verhält:

1. Im Fall $\lim_{m_q \rightarrow 0} m_\pi(m_q) = 0$ folgt also $\langle \bar{\psi}\psi \rangle \neq 0$ und somit ist die chirale Symmetrie spontan gebrochen.
2. Im Fall $\lim_{m_q \rightarrow 0} m_\pi(m_q) \neq 0$ folgt hingegen $\langle \bar{\psi}\psi \rangle = 0$ und die chirale Symmetrie ist nicht spontan gebrochen.

Es ist also zu sehen, dass das chirale Kondensat im Grenzfall verschwindender Quark-Masse einen guten Ordnungsparameter darstellt. Dreht man das Argument um, so zeigt die Existenz leichter Mesonen (den Pionen mit $m_\pi \approx 140$ MeV) im Quark-Spektrum an, dass die chirale Symmetrie in der Tat spontan gebrochen ist.

Es sei noch angemerkt, dass die obige Argumentation streng genommen nur im Fall $T = 0$ gilt, da für $T > 0$ auch angeregte Zustände einen Beitrag zu (2.34) liefern. Allerdings stellt das chirale Kondensat auch im Fall $T \neq 0$ den korrekten Ordnungsparameter dar, da es sich in jedem Fall als Ableitung der Zustandssumme nach dem symmetriebrechenden Feld, also der Quark-Masse, ergibt

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln Z(m_q, V)}{\partial m_q}. \quad (2.35)$$

Hier wurde, wie (2.34) zeigt, impliziert, dass das Volumen des Systems gegen unendlich geschickt wird. Da dies in numerischen Simulationen, auf Grund endlicher Ressourcen, nicht möglich ist, soll im folgenden noch diskutiert werden welche Auswirkungen dies auf das chirale Kondensat im Limes $m_q \rightarrow 0$ hat.

Da $\xi_\pi = m_\pi^{-1}$ gilt, divergiert die Korrelationslänge im Grenzfall verschwindender Quark-Masse in der spontan gebrochenen Phase, was aufgrund der endlichen Ausdehnung des physikalischen Volumens zur Folge hat, dass das System schon für $m_\pi \sim 1/L$ effektiv geordnet ist und das chirale Kondensat somit auch in der spontan gebrochenen Phase, in einem endlichen Volumen und für kleine Quark-Massen verschwindet. Dieser Bereich $m_\pi \ll \frac{1}{L}$ wird üblicherweise als ε -Regime bezeichnet. Der Bereich $m_\pi \gg \frac{1}{L}$ hingegen als p -Regime.

2.4.2 Die chirale Suszeptibilität

Dieser Abschnitt soll auf die Berechnung der chiralen Suszeptibilität eingehen, da diese zur Bestimmung des chiralen Phasenübergangs benötigt wird. Die Suszeptibilität ist definiert durch

$$\chi = \frac{\partial \langle \bar{\psi} \psi \rangle}{\partial m_q} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial m_q^2} = -\frac{1}{V \cdot Z^2} \left(\frac{\partial}{\partial m_q} Z \right)^2 + \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial^2}{\partial m_q^2} Z. \quad (2.36)$$

Unter Verwendung der Zustandssumme

$$Z(m_q, V) = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}A \exp \left\{ - \int d^4x \left[\bar{\psi} \not{D} \psi + m_q \bar{\psi} \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \right] \right\} \quad (2.37)$$

wird dies zu

$$\chi = -V \cdot \langle \bar{\psi} \psi \rangle^2 + \frac{1}{V \cdot Z} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}A \int d^4x d^4y \bar{\psi}_x \psi_x \bar{\psi}_y \psi_y e^{-S_E[\bar{\psi}, \psi, A]}. \quad (2.38)$$

Der erste Term ist nach (2.36) offensichtlich, bis auf einen Volumenfaktor, einfach der quadrierte Erwartungswert des chiralen Kondensats. Interessanter ist hingegen der zweite Term. Hier ist zu berücksichtigen, dass die vier Quark-Felder nach dem Wick-Theorem auf zwei verschiedene Arten kontrahiert werden müssen. So ergibt sich für den Erwartungswert

$$\langle \bar{\psi}_x \psi_x \bar{\psi}_y \psi_y \rangle = \overbrace{\langle \bar{\psi}_x \psi_x \bar{\psi}_y \psi_y \rangle} + \overbrace{\langle \bar{\psi}_x \psi_x \bar{\psi}_y \psi_y \rangle}. \quad (2.39)$$

üblicherweise wird der zweite Term als *connected susceptibility* bezeichnet, da hier die Raumzeit-Punkte x und y , in der Sprache von Feynman-Diagrammen, durch eine Quark-Linie verbunden werden. Der andere Term in (2.39) wird oft mit dem ersten Term in (2.38) zur sogenannten *disconnected susceptibility* zusammengefasst, sodass man insgesamt erhält

$$\chi = \chi_{dis} + \chi_{con} = \frac{1}{V} \cdot \left(\langle (\bar{\psi} \psi)^2 \rangle - \langle \bar{\psi} \psi \rangle^2 + \int d^4x d^4y \overbrace{\langle \bar{\psi}_x \psi_x \bar{\psi}_y \psi_y \rangle} \right) \quad (2.40)$$

Wie das chirale Kondensat und die Suszeptibilität konkret auf dem Gitter berechnet werden können, wird in Abschnitt 4.4 gezeigt.

3 Quantenchromodynamik auf dem Gitter

Um in einem mathematisch wohl definiertem Sinn Ergebnisse und Vorhersagen von Quantenfeldtheorien zu diskutieren, müssen diese zunächst regularisiert werden. Die Gitterfeldtheorie stellt eine mögliche Form dieser Regularisierung dar und wurde erstmals von Kenneth Wilson 1974 vorgeschlagen.[8] Die Idee dabei ist die Raumzeit auf ein vierdimensionales Raumzeit-Gitter zu diskretisieren. In diesem Abschnitt sollen die grundlegenden Ideen, sowie benötigte Gleichungen vorgestellt werden.

3.1 Regularisierung durch das Gitter

Der erste Schritt bei der Diskretisierung des Pfadintegrals ist die Einführung eines 4D-Raumzeit-Gitters Λ der Form

$$\Lambda = \{n = (n_1, n_2, n_3, n_4) \mid n_1, n_2, n_3 = 0, 1, \dots, N-1; n_4 = 0, 1, \dots, N_T-1\}. \quad (3.1)$$

wobei die Vektoren $n \in \Lambda$ Punkte der Raumzeit, die durch eine Gitterkonstante a getrennt sind, beschreiben. Die Fermion-Felder, die vorher Funktionen der Raumzeit-Koordinaten x waren, werden nun auf die Gitterpunkte gesetzt und sind somit Funktionen der Vektoren n

$$\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(n) = \bar{\psi}_n, \quad \psi(x) \rightarrow \psi(n) = \psi_n. \quad (3.2)$$

Die Felder tragen hier weiterhin Farb-, Dirac- und Flavor-Indizes. Zur Herleitung einer zunächst naiven Diskretisierung des Pfadintegrals, kann von der freien Fermionwirkung

$$S_F^0[\bar{\psi}, \psi] = \int d^4x \bar{\psi}(x) (\gamma^\mu \partial_\mu + m) \psi(x) \quad (3.3)$$

ausgegangen werden. Die diskrete Version nimmt dann, für ein Flavor, die Form

$$S_F^0[\bar{\psi}, \psi] = a^4 \sum_{n \in \Lambda} \bar{\psi}_n \left(\sum_{\mu=1}^4 \gamma^\mu \frac{\psi_{n+\hat{\mu}} - \psi_{n-\hat{\mu}}}{2a} + m \psi_n \right) \quad (3.4)$$

an.[9] Eine Wirkung für die wechselwirkende Theorie kann hieraus, analog zum Fall im Kontinuum, aus der Forderung nach Invarianz unter lokalen Eichtransformationen

$$\psi(n) \rightarrow \psi'(n) = \Omega(n) \psi(n), \quad \bar{\psi}(n) \rightarrow \bar{\psi}'(n) = \bar{\psi} \Omega(n)^\dagger \quad (3.5)$$

hergeleitet werden. Die $\Omega(n)$ bezeichnen hierbei Elemente der Eichgruppe $SU_c(3)$. Für eine ausführlich Herleitung siehe z.B. [9]. Insgesamt erhält man so für den fermionischen Teil der Wirkung

$$S_F[\bar{\psi}, \psi, U] = a^4 \sum_{n \in \Lambda} \bar{\psi}_n \left(\sum_{\mu=1}^4 \gamma^\mu \frac{U_\mu(n) \psi_{n+\hat{\mu}} - U_{-\mu}(n) \psi_{n-\hat{\mu}}}{2a} + m \psi_n \right). \quad (3.6)$$

Die $U_\mu(n)$ werden als Link-Variablen bezeichnet, da sie neben der Abhängigkeit vom Gitterpunkt noch eine Richtungsabhängigkeit besitzen und somit anschaulich auf den Links zwischen zwei Gitterpunkten definiert sind. Sie transformieren dabei unter lokalen Eichtransformationen wie

$$U_\mu(n) \rightarrow U'_\mu(n) = \Omega(n) U_\mu(n) \Omega(n + \mu)^\dagger \quad (3.7)$$

und gleichen dadurch das Transformationsverhalten (3.5) der Felder aus. Sie entsprechen weiterhin im Kontinuum dem sogenannten Eichtransporter, der als pfadgeordnetes Exponentialintegral der Eichfelder $A_\mu(x)$ entlang einer Kontur C_{xy} zwischen zwei Raumzeitpunkten x und y definiert ist [10]

$$G(x, y) = \text{P exp} \left(i \int_{C_{xy}} A \cdot ds \right). \quad (3.8)$$

Aus ihnen lässt sich eine diskrete Version der Eichwirkung durch [11]

$$S_G[U] = \frac{\beta}{N_c} \sum_{n \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} \text{Re} \{ \text{Tr} [1 - U_{\mu\nu}(n)] \} = \frac{\beta}{2N_c} \sum_{n \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} \text{Tr} [U_{\mu\nu}(n) + U_{\mu\nu}(n)^\dagger] \quad (3.9)$$

definieren, wobei $\beta = 2N_c/g^2$ ist. Hierbei bezeichnet

$$P[U] = U_{\mu\nu}(n) = U_\mu(n)U_\nu(n + \hat{\mu})U_\mu(n + \hat{\nu})^\dagger U_\nu(n)^\dagger \quad (3.10)$$

die elementare Plaquette und mit Hilfe des Zusammenhanges

$$U_\mu(n) = \exp(iaA_\mu(n)) \quad (3.11)$$

zwischen den Link-Variablen und den abgebrawertigen Eichfeldern $A_\mu(n)$ auf dem Gitter, lässt sich durch einsetzen und Bildung des Limes $a \rightarrow 0$ die Kontinuums-Eichwirkung zurück gewinnen.

Das Pfadintegral (2.9) geht insgesamt im diskreten Fall über in

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, U] e^{-S[\bar{\psi}, \psi, U]} O[\bar{\psi}, \psi, U] , \quad (3.12)$$

mit

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, U] e^{-S[\bar{\psi}, \psi, U]} . \quad (3.13)$$

Die Integration erstreckt sich dabei über alle möglichen Feldkonfigurationen mit dem Maß

$$\mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, U] = \prod_{n \in \Lambda} d\bar{\psi}_n d\psi_n \prod_{\mu=1}^4 dU_\mu(n) . \quad (3.14)$$

Wobei $dU_\mu(n)$ das Haar-Maß bezeichnet. Bei den Fermion-Feldern hingegen handelt es sich hier um antikommutierende Grassmann-Zahlen, über die zusätzlich integriert wird. Auf den Umgang mit solchen Grassmann-Zahlen und insbesondere die Herleitung von Regeln zur Integration soll hier nicht weiter eingegangen werden. Dazu sei auf [9] oder [1] verwiesen. Sie werden benötigt um auch im Pfadintegralformalismus die korrekte Fermi-Statistik für Fermionen zu generieren, die in der kanonischen Quantisierung hingegen durch die Antikommutator Beziehungen der Erzeuger und Vernichter generiert wird.

Da die Fermion-Felder lediglich quadratisch in die Wirkung eingehen, liegt hier ein Gauß-Integral vor, dass explizit ausintegriert werden kann. Um dies zu sehen, reicht es die Fermion-Wirkung (3.4) umzuschreiben in

$$S_F[\bar{\psi}, \psi, U] = a^4 \sum_{n, m \in \Lambda} \sum_{a, b, \alpha, \beta} \bar{\psi}(n)_a^\alpha D(n|m)_{\alpha\beta}^{ab} \psi(m)_b^\beta , \quad (3.15)$$

wobei

$$D(n|m)_{\alpha\beta}^{ab} = \sum_{\mu=1}^4 (\gamma_\mu)_{\alpha\beta} \frac{U_\mu(n)_{ab} \delta_{n+\hat{\mu}, m} - U_{-\mu}(n)_{ab} \delta_{n-\hat{\mu}, m}}{2a} + m \delta_{\alpha, \beta} \delta_{a, b} \delta_{n, m} \quad (3.16)$$

als Dirac-Operator bezeichnet wird. Das Pfadintegral nimmt nach dem Ausintegrieren der Fermion-Felder schließlich die Form

$$\begin{aligned}
\langle O \rangle &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, U] e^{-S_F[\bar{\psi}, \psi, U] - S_G[U]} O[\bar{\psi}, \psi, U] \\
&= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[U] \det(D) e^{-S_G[U]} O[U]
\end{aligned} \tag{3.17}$$

an. Für die Abhängigkeit der Observablen wurde hier angenommen, dass diese entweder nur von den Eichfeldern abhängt, oder es sich bei deren Erwartungswert um n -Punkt Funktionen, wie Hadron-Interpolatoren handelt, wobei in diesem Fall die Fermion-Felder nach dem Wick-Theorem kontrahiert werden können und somit zu Funktionalen der Eichfelder werden.[9] Die Verallgemeinerung auf mehrere Flavor ist nahezu trivial, da die einzelnen Integrale faktorisieren und man somit ein Produkt der Fermion-Determinanten der verschiedenen Flavor im Integranden erhält. Darauf wie diese Fermion-Determinante nun explizit zu behandeln ist, wird in Abschnitt 3.1.2 eingegangen.

3.1.1 Das Doubling Problem und Staggered Fermionen

Ein Problem, dass bei der bisher betrachteten, naiven Diskretisierung des Pfadintegrals auftritt, ist das sog. Fermion-Doubling. Es ergibt sich nämlich bei näherer Betrachtung, dass die so konstruierte, freie Theorie, 16 entartete Flavor von Quarks beschreibt und nicht, wie gewünscht, nur eins. Dies ist besonders gut bei der Untersuchung des Quark-Propagators im Impulsraum zu sehen, der sich aus dem freien Dirac-Operator (3.16) (mit $U_\mu(n) = \mathbb{1}$) durch Fourier-Transformation und anschließender Invertierung ergibt [11]

$$\tilde{D}(p)^{-1} = \frac{m\mathbb{1} - ia^{-1} \sum_\mu \gamma_\mu \sin(p_\mu a)}{m^2 + a^{-2} \sum_\mu \sin(p_\mu a)^2}. \tag{3.18}$$

Im masselosen Fall ist dabei gut zu sehen, dass der Propagator zum einen den korrekten naiven Kontinuumslikes liefert und zum anderen im diskreten Fall 16 Pole aufweist, genau dann wenn alle Komponenten von p entweder $p_\mu = 0$ oder $p_\mu = \pi/2$ sind

$$\tilde{D}(p)^{-1}|_{m=0} = \frac{-ia^{-1} \sum_\mu \gamma_\mu \sin(p_\mu a)}{a^{-2} \sum_\mu \sin(p_\mu a)^2} \xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{-i \sum_\mu \gamma_\mu p_\mu}{p^2}, \tag{3.19}$$

wobei Fermion-Doubling auch im Falle endlicher Quark-Masse auftritt. Um dieses Problem zu umgehen, stehen mehrere Möglichkeiten zur Verfügung. Wilson schlug so zum Beispiel vor, einen weiteren Term zum Dirac-Operator hinzuzufügen, der im Limes $a \rightarrow 0$ vom restlichen System entkoppelt und im Fall $p_\mu = \pi/2$ einen endlichen Beitrag zur Masse liefert

$$\tilde{D}(p) = m\mathbb{1} + \frac{i}{a} \sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \sin(p_\mu a) + \mathbb{1} \frac{1}{a} \sum_{\mu=1}^4 (1 - \cos(p_\mu a)). \tag{3.20}$$

Durch inverse Fourier-Transformation des letzten Terms und Kombination mit dem naiven Dirac-Operator (3.16) ergibt sich der Wilson-Dirac-Operator

$$D(n|m)_{\alpha\beta}^{ab} = \left(m + \frac{4}{a}\right) \delta_{\alpha,\beta} \delta_{a,b} \delta_{n,m} - \frac{1}{2a} \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} (\mathbb{1} - \gamma_\mu)_{\alpha\beta} U_\mu(n)_{ab} \delta_{n+\hat{\mu},m}, \tag{3.21}$$

wobei $\gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu$ definiert wurde. Diese Form des Dirac-Operators hat allerdings das Problem, dass der Wilson-Term, auch im masselosen Fall, explizit die chirale Symmetrie der Theorie bricht (siehe 3.2).

Einen Kompromiss liefern hier die sogenannten *Staggered Fermionen*, die die Anzahl an Doublern von 16 auf 4 reduzieren und gleichzeitig eine schwächere Form der chiralen Symmetrie respektieren. Zur Herleitung wird wieder von der naiven Fermion-Wirkung (3.4) ausgegangen und anschließend eine Raumzeit-abhängige Variablentransformation der Fermionfelder durchgeführt, die *Staggered Transformation*

$$\bar{\psi}(n) = \bar{\psi}'(n) \gamma_4^{n_4} \gamma_3^{n_3} \gamma_2^{n_2} \gamma_1^{n_1}, \quad \psi(n) = \gamma_1^{n_1} \gamma_2^{n_2} \gamma_3^{n_3} \gamma_4^{n_4} \psi'(n), \quad (3.22)$$

wobei die einzelnen n_μ die Koordinaten des Gitterpunktes $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$ bezeichnen. Da für die Gamma-Matrizen $\gamma_\mu^2 = 1$ gilt, ist der Massenterm offensichtlich invariant unter solchen Transformationen. Im kinetischen Term hingegen sind die Felder $\bar{\psi}$ und ψ um eine Gitterkonstante in eine der Raumzeit-Richtung getrennt, sodass diese nicht gleich transformiert werden. Diese zusätzliche Gamma-Matrix kürzt gerade den Faktor γ_μ im kinetischen Term

$$\bar{\psi}(n) \gamma_\mu \psi(n \pm \mu) = \eta_\mu(n) \bar{\psi}'(n) \mathbb{1} \psi'(n \pm \mu), \quad (3.23)$$

wobei gilt

$$\eta_\mu(n) = (-1)^{\sum_{\nu < \mu} n_\nu}. \quad (3.24)$$

Die $\eta_\mu(n)$ werden als *Staggered Phases* bezeichnet. Insgesamt ergibt sich so für die freie Wirkung nach der Transformation

$$S_F[\bar{\psi}', \psi'] = a^4 \sum_{n \in \Lambda} \bar{\psi}'(n) \left(\sum_{\mu=1}^4 \eta_\mu(n) \frac{\psi(n+\mu)' - \psi(n-\mu)'}{2a} + m \psi(n)' \right). \quad (3.25)$$

Hier ist sofort zu sehen, dass die Wirkung diagonal im Dirac-Raum und identisch für alle vier Komponenten ist. Üblicherweise wird nur eine der Komponenten behalten, wodurch sich die Anzahl an Doublern von 16 auf 4 reduziert.[12] Werden nun wieder die Eichfelder mit berücksichtigt, ergibt sich die *Staggered Action* zu

$$S_F[\bar{\chi}, \chi, U] = a^4 \sum_{n \in \Lambda} \bar{\chi}_n \left(\sum_{\mu=1}^4 \eta_\mu(n) \frac{U_\mu(n) \chi_{n+\mu} - U_{-\mu}(n) \chi_{n-\mu}}{2a} + m \chi_n \right). \quad (3.26)$$

Die χ sind hierbei Grassmann-wertige Felder mit Farbindizes, aber ohne Dirac-Struktur. Der Dirac-Operator für Staggered Fermionen lautet somit [16]

$$D^{st}(n|m) = m \delta_{n,m} + \frac{1}{2a} \sum_{\mu=1}^4 \eta_\mu(n) \left(U_\mu(n) \delta_{n+\mu,m} - U_\mu(n-\mu)^\dagger \delta_{n-\mu,m} \right). \quad (3.27)$$

3.1.2 Fermion-Determinante und Pseudofermionen

Auf die Frage, wie die Fermion-Determinante in Gleichung (3.17) formal, aber auch in numerischen Simulationen behandelt werden soll, gibt es verschiedene Antworten. Als besonders nützlich hat sich die Interpretation der Fermion-Determinante als bosonisches Pseudofermion-Feld in einer effektiven Wirkung herausgestellt.

Um dies zu sehen, wird verwendet, dass für viele Dirac-Operatoren, insbesondere für Wilson- und Staggered Fermionen, die Relation

$$(\gamma_5 D)^\dagger = \gamma_5 D \quad \text{bzw.} \quad D^\dagger = \gamma_5 D \gamma_5 \quad (3.28)$$

gilt [9], womit sich zeigen lässt, dass die Determinante des Dirac-Operators reell ist

$$\det[D]^* = \det[D^\dagger] = \det[\gamma_5 D \gamma_5] = \det[D] . \quad (3.29)$$

Wie oben bereits erwähnt, interessiert man sich häufig für den Fall einer näherungsweisen, chiralen $SU(2)$ -Symmetrie, also gerade den Fall, dass die beiden leichtesten Quarks entartete und fast verschwindende Massen haben. In diesem Fall nimmt die Zustandssumme nach dem Ausintegrieren der Fermion-Felder die Form

$$Z = \int \mathcal{D}[U] \det[D^{(u)}] \det[D^{(d)}] e^{-S_G[U]} = \int \mathcal{D}[U] \det[D^\dagger D] e^{-S_G[U]} \quad (3.30)$$

an.[16] Dies hat zur Folge, dass die Fermion-Determinante stets reell und positiv ist, was es einem erlaubt das Gauss-Integral

$$\det[D^\dagger D] = \pi^N \int \mathcal{D}[\phi_R] \mathcal{D}[\phi_L] e^{-\phi^\dagger (D^\dagger D)^{-1} \phi} \quad (3.31)$$

auszuführen, wobei es sich bei ϕ nun um ein bosonisches komplexes Feld mit (Dirac-,) Farb- und Raumzeit-Indizes handelt. Die Zustandssumme nimmt dann die Form

$$Z = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, U] e^{-S[\bar{\psi}, \psi, U]} = \int \mathcal{D}[\phi_R, \phi_L, U] e^{-S_G[U] - \phi^\dagger (D^\dagger D)^{-1} \phi} \quad (3.32)$$

an. Wie dieses hochdimensionale Integral numerisch ausgewertet werden kann wird in Abschnitt 4 erläutert.

3.2 Chirale Symmetrie für Staggered Fermionen

Es wurde bereits erwähnt, dass die weiter oben konstruierten Staggered Fermionen eine schwächere Form der chiralen Symmetrie als (2.15) respektieren. Im folgenden soll kurz dargestellt werden, wie dies zu verstehen ist. Dazu muss zuerst geklärt werden, wie sich γ_5 in der, durch die Transformation (3.22) definierten Spinor-Basis darstellen lässt. Hierzu wird das Transformationsverhalten einer pseudoskalaren Bilinearform unter (3.22) betrachtet

$$\bar{\psi}(n) \gamma_5 \psi(n) = \eta_5(n) \bar{\psi}'(n) \mathbb{1} \psi'(n) , \quad (3.33)$$

wobei

$$\eta_5(n) = (-1)^{\sum_{\mu=1}^4 n_\mu} \quad (3.34)$$

definiert wurde. Werden nun wieder die Dirac-Indizes fallen gelassen, liegt es nahe, dass η_5 im Falle der Staggered Fermionen an die Stelle von γ_5 tritt und die chirale Transformation somit durch

$$q(n) \equiv (\chi_1, \dots, \chi_{N_f})^T \rightarrow q'(n) = \exp \left\{ i\eta_5(n) \vec{\Theta} \cdot \vec{T} \right\} q(n) = \Omega q(n), \quad \text{mit } \Omega \in SU(N_f) \quad (3.35)$$

definiert ist. Im Vergleich mit (2.15) wird klar, warum es sich hierbei um eine reduzierte Form der chiralen Symmetrie handelt. Da η_5 lediglich ein Skalar ist, geht die zusätzliche Dirac-Struktur der Transformation im Falle der Staggered Fermionen verloren.

Auffallend ist, dass es sich bei (3.35), auf Grund der Ortsabhängigkeit, scheinbar um eine lokale und nicht um eine globale Symmetrietransformation handelt. Da allerdings $\eta_5 \in \{-1, 1\}$ gilt, handelt es sich hierbei jedoch nur um ein, vom Gitterpunkt abhängiges, Vorzeichen. So lässt sich die obige Transformation umschreiben, wenn die Begriffe der *even*- und *odd*-Sites eingeführt werden. So entspricht ein positives Vorzeichen von $\eta_5(n)$ einer even-Site n und entsprechend umgekehrt für die odd-Sites. Nun ist recht einfach zu sehen, dass die Wirkung (3.26) im Falle verschwindender Quark-Masse invariant unter den separaten Transformationen

$$q(n) \rightarrow U_e q(n), \quad n \text{ even}; \quad q(n) \rightarrow U_o q(n), \quad n \text{ odd} \quad (3.36)$$

und

$$\bar{q}(n) \rightarrow \bar{q}(n) U_o^\dagger, \quad n \text{ even}; \quad \bar{q}(n) \rightarrow \bar{q}(n) U_e^\dagger, \quad n \text{ odd} \quad (3.37)$$

ist. Hier ergibt sich somit eine Invarianz unter der Symmetriegruppe $SU_e(N_f) \times SU_o(N_f)$ in Analogie zur Gruppe $SU_R(N_f) \times SU_L(N_f)$ im Kontinuum.

Wie bereits erwähnt, stellt sich weiterhin die Frage, wie das chirale Kondensat nun explizit auf dem Gitter berechnet werden kann. Für eine ausführliche Rechnung sei auf A.2 verwiesen. Für das chirale Kondensat folgt schließlich

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln Z(m_q, V)}{\partial m_q} = \frac{1}{V} \langle \text{Tr} D^{-1} \rangle \quad (3.38)$$

wobei hier D den Dirac-Operator bezeichnet. Für die Suszeptibilität folgt hieraus weiterhin

$$\chi = \frac{1}{V} \cdot \left(\langle (\text{Tr} D^{-1})^2 \rangle - \langle \text{Tr} D^{-1} \rangle^2 + \langle \text{Tr} D^{-2} \rangle \right), \quad (3.39)$$

wobei hier

$$\text{Tr} D^{-2} = \sum_{n,m} D_{n,m}^{-1} \cdot D_{m,n}^{-1} \quad (3.40)$$

ist. Das Problem zur Bestimmung des chiralen Kondensats reduziert sich somit auf die Berechnung des inversen Dirac-Operators D . Zur Invertierung solcher hochdimensionalen, dünn besetzten Matrizen existieren numerische Algorithmen, wie z.B. *Random Noise Estimators*, die auch in dem hier verwendeten Code benutzt werden. Auf die numerische Berechnung des chiralen Kondensats wird in Abschnitt 4.4 näher eingegangen.

3.3 Gitter-QCD bei endlicher Temperatur und chemischen Potential μ

In Abschnitt 2.2 wurde bereits erwähnt, dass das Pfadintegral (2.10) einer Euklidischen Quantenfeldtheorie die Form einer Zustandssumme der statistischen Mechanik annimmt.

In diesem Kapitel soll einmal genauer auf die Rolle, des zunächst nur formal eingeführten Parameter β aus (2.7), eingegangen werden. Dazu wird noch einmal die Euklidische Wirkung betrachtet

$$S_E [\bar{\psi}, \psi, A] = \int_0^\beta dt \int_V d^3x \mathcal{L}_E^{QCD} . \quad (3.41)$$

Das räumliche Integral läuft hierbei über das gesamte physikalische Volumen des Systems und wird im thermodynamischen Limes gegen unendlich geschickt. Die zeitliche Komponente des Systems hingegen, wurde in die komplexe Ebene rotiert. Dies sorgte für einen Übergang aus der Minkowski-Raumzeit in einen Euklidischen Raum und ließ durch einen Vergleich mit (2.8) die Interpretation von β als inverse Temperatur des Systems zu. Soll also ein System bei endlicher Temperatur untersucht werden, darf nur über eine endliche Ausdehnung in zeitlicher Richtung integriert werden.

Bei Simulationen auf dem Gitter bedeutet dies einfach, das im thermodynamischen Limes nur das räumliche Volumen gegen unendlich geschickt wird. Die zeitliche Ausdehnung hingegen wird konstant gehalten und hängt mit der Temperatur über

$$\beta = aN_T = \frac{1}{T} \quad (3.42)$$

zusammen, wobei N_T die Anzahl an Gitterpunkten in zeitlicher Richtung und a die Gitterkonstante bezeichnet. Die Temperatur kann somit prinzipiell auf zwei Arten kontrolliert werden. Zum einen durch Variation der Anzahl an Gitterpunkten in zeitlicher Richtung, zum anderen durch eine Änderung der Gitterkonstanten. Da die Gitterkonstante jedoch kein freier Parameter in solchen Simulationen ist, geschieht dies indirekt durch Variation der inversen Eichkopplung $\beta_g = 2N_c/g^2$, da diese implizit von der Gitterkonstanten abhängt. Der genaue Zusammenhang wird durch die Renormierungsgruppen-Gleichung bestimmt, worauf hier aber nicht näher eingegangen werden soll.[13]

3.3.1 QCD auf anisotropen Gittern

Bis zu diesem Punkt beschränkte sich die bisherige Betrachtung der Gitter-QCD auf isotrope Gitter, was sicherlich die natürlichste Herangehensweise ist. Allerdings weist diese in bestimmten Situationen gewisse Nachteile auf. So ist nämlich nach Gleichung (3.42) die maximale Temperatur, die auf einem isotropen Gitter erreicht werden kann $T_{max} = 1/a$ bzw. im Falle von Staggered Fermionen $T_{max} = 1/2a$. Dies ist gerade im strong-coupling limit ($\beta = 0$) von entscheidendem Nachteil, da hier die Gitterkonstante nicht durch Variation von β festgelegt werden kann.

Ein alternatives Vorgehen ist die Einführung eines anisotropen Gitters, bei dem die Gitterkonstanten in räumlicher (a_σ) und zeitlicher (a_τ) Richtung unterschiedlich gewählt werden sollen. Zu diesem Zweck wird der Anisotropie-Parameter

$$\xi = \frac{a_\sigma}{a_\tau} \quad (3.43)$$

eingeführt, der in dieser Form mit der Temperatur über

$$a_\sigma T = \frac{\xi}{N_\tau} \quad (3.44)$$

zusammenhängt.[19] Um nun ein anisotropes Gitter, zunächst für die reine Eichtheorie, zu erzeugen, werden in Gleichung (3.9) unterschiedliche Kopplungen für die räumlichen und zeitlichen Plaquettes eingeführt

$$S_G[U] = K_\sigma \sum_{n \in \Lambda} \sum_{i < j \neq 4} \text{Re} \{ \text{Tr}[1 - U_{ij}(n)] \} + K_\tau \sum_{n \in \Lambda} \sum_{i \neq 4} \text{Re} \{ \text{Tr}[1 - U_{i4}(n)] \} . \quad (3.45)$$

Vorteilhafter ist es jedoch zwei neue Kopplungen $\beta = \sqrt{K_\sigma K_\tau}$ und $\gamma_g = \sqrt{K_\tau / K_\sigma}$ einzuführen wodurch (3.45) übergeht zu

$$S_G = \frac{\beta}{\gamma_g} \sum_{n \in \Lambda} \sum_{i < j \neq 4} \text{Re} \{ \text{Tr}[1 - U_{ij}(n)] \} + \beta \gamma_g \sum_{n \in \Lambda} \sum_{i \neq 4} \text{Re} \{ \text{Tr}[1 - U_{i4}(n)] \} . \quad (3.46)$$

Sofort zu sehen ist, dass die Wirkung in dieser Parametrisierung für $\gamma_g = 1$ wieder die ursprüngliche Form annimmt. Die Kopplung γ_g bestimmt somit indirekt den Anisotropie-Parameter $\xi = \xi(\gamma_g)$, weshalb γ_g auch oft als (nackte) Anisotropie bezeichnet wird.

Der fermionische Teil der Wirkung nimmt unter Berücksichtigung der Anisotropie, für ein Flavor, die Form

$$S_F = a_\sigma^3 \cdot a_\tau \sum_{n \in \Lambda} \bar{\chi}_n \mathbb{1} \left(\sum_{\mu=1}^4 \gamma^{\delta_{\mu,4}} \eta_\mu(n) \frac{U_\mu(n) \chi_{n+\mu} - U_{-\mu}(n) \chi_{n-\mu}}{2a_\mu} + m \chi_n \right) \quad (3.47)$$

an.[21] Der Faktor γ wird also, nach dem selben Prinzip wie in der Eichwirkung, an die Link-Variablen in zeitlicher Richtung multipliziert. Abschließend stellt sich nun die Frage, wie die physikalischen Parameter ξ und $a_{\sigma,\tau}$ von den nackten Parametern in der Wirkung abhängen, wobei jedoch im folgenden $\gamma_g = 1$ angenommen wird. Aus störungstheoretischen Überlegungen findet man, dass im *Weak Coupling Limit* ($\beta \rightarrow \infty$) der $SU(N_c)$ -Eichtheorie $\xi_{\text{weak}}(\gamma) = \gamma$ ist. In Meanfield-Approximationen hingegen findet sich im Strong Coupling Bereich hingegen der Zusammenhang $\gamma_{MF} = \gamma^2$. [20] Oft wird dieser Zusammenhang auch für SC-Simulationen übernommen. Dies wird auch in der vorliegenden Arbeit so gehandhabt, wodurch sich die Temperatur wie folgt ergibt

$$a_\sigma T = \frac{\gamma^2}{N_\tau} . \quad (3.48)$$

3.3.2 QCD bei endlichem chemischen Potential und Vorzeichen Problem

Dieser Abschnitt soll kurz darauf eingehen wie ein chemisches Potential formal in den bis hier beschriebenen Gleichungen berücksichtigt werden kann. Anschließend wird auf das Vorzeichen Problem der QCD eingegangen, um so die Notwendigkeit alternativer Methoden zur Behandlung der Zustandssumme, als den im nachfolgenden Kapitel beschriebenen HMC-Algorithmus zu motivieren.

Zur Einführung eines chemischen Potentials wird (2.8) zunächst auf die Zustandssumme des Groß-kanonischen Ensembles erweitert

$$Z(\beta, \mu) = \text{Tr} \left[e^{-\beta(\hat{\mathcal{H}} - \mu \hat{N}_q)} \right] , \quad (3.49)$$

wobei hier das Quark-chemische Potential μ und der Quark-Teilchenzahl-Operator $\hat{N}_q$ eingeführt wurden. Alternativ werden oft auch das Baryon-chemische Potential $\mu_B = 3\mu$ und der Baryon-Teilchenzahl-Operator $\hat{N}_B = \hat{N}_q/3$ verwendet. Im Kontinuum ist der Teilchenzahl-Operator nun gegeben als räumliches Integral über die zeitliche Komponente des Vektorstroms $V^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ der $U_V(1)$ Symmetrie [9]

$$\hat{N}_q = \int_V d^3x \bar{\psi}\gamma^4\psi. \quad (3.50)$$

Aus (3.49) folgt, dass das chemische Potential somit über einen Term der Form $\mu\bar{\psi}\gamma^4\psi$ in der Lagrange-Dichte an den Teilchenzahl-Operator koppelt. Dies kann relativ einfach durch die Ersetzung $\partial_4 \rightarrow \partial_4 + \mu$ in (2.1) erreicht werden, woraus die Lagrange-Dichte

$$\mathcal{L}_{QCD} = \sum_{i=1}^{N_f} \bar{\psi}_i(x) [\gamma^\nu (\partial_\nu - igA_\nu(x) + \mu\delta_{\nu,4}) + m_i] \psi_i(x) - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (3.51)$$

folgt. Hier ist zu sehen, dass das chemische Potential nun als Imaginärteil der zeitlichen Komponente des Eichfeldes interpretiert werden kann. Beachtet man dies bei der Herleitung der diskreten Wirkung auf dem Gitter führt dies zu den Ersetzungen $U_4(n) \rightarrow e^\mu U_4(n)$, $U_4^\dagger(n) \rightarrow e^{-\mu} U_4^\dagger(n)$ in (3.47), sodass sich

$$S_F = a_\sigma^3 \cdot a_\tau \sum_{n \in \Lambda} \bar{\chi}_n \mathbb{1} \left(\sum_{\nu=1}^4 \gamma^{\delta_{\nu,4}} \eta_\nu(n) \frac{e^{\mu\delta_{\nu,4}} U_\nu(n) \chi_{n+\nu} - e^{-\mu\delta_{\nu,4}} U_{-\nu}(n) \chi_{n-\nu}}{2a_\nu} + m \chi_n \right) \quad (3.52)$$

ergibt, mit dem Dirac-Operator

$$D(n|m) = m\delta_{n,m} + \sum_{\nu=1}^4 \frac{\eta_\nu(n) \gamma^{\delta_{\nu,4}}}{2a_\nu} \left(e^{\mu\delta_{\nu,4}} U_\nu(n) \delta_{n+\nu,m} - e^{-\mu\delta_{\nu,4}} U_\nu(n-\nu)^\dagger \delta_{n-\nu,m} \right). \quad (3.53)$$

Hieraus ergibt sich nun allerdings ein großes Problem, da durch Hinzunahme eines chemischen Potentials der Dirac-Operator (3.53) nicht mehr γ_5 -hermitesch ist. Dies ist zu sehen indem beide Seiten des Dirac-Operators mit η_5 multipliziert werden. Man findet in diesem Fall die modifizierte Gleichung

$$\eta_5 D(e^\mu) \eta_5 = D^\dagger(1/e^\mu) \quad (3.54)$$

woraus für die Fermion-Determinante folgt

$$\det [D(e^\mu)] = \det [D(1/e^\mu)]^* . \quad (3.55)$$

Hieran ist deutlich zu sehen, dass die Fermion-Determinante somit nur im Fall $\mu = 0$ reell ist. Folglich ist das Quadrat der Determinante, wie es in (3.30) verwendet wird, nicht mehr strikt positiv ist, sondern auch negative Werte annehmen kann. Dies verhindert das der Ausdruck unter dem Integral der Zustandssumme als Boltzmann-Faktor interpretiert werden kann und somit auch die Verwendung von Monte-Carlo-Methoden und Importance Sampling. Man bezeichnet diese Schwierigkeit als Vorzeichen Problem.

3.4 Die duale Darstellung und Strong Coupling Limit

Da es in dieser Arbeit hauptsächlich um den Vergleich der oben beschriebenen Gitter-QCD auf anisotropen Gittern mit der dualen Darstellung der Gitter-QCD, die sich aus dem *strong coupling limit*, also $\beta \rightarrow 0$ ergibt, geht, soll diese im folgenden Abschnitt kurz beschrieben und erläutert werden. Ausgangspunkt ist dabei die Zustandssumme (3.13), die im Falle $\beta = 0$ die Form

$$Z(\beta, \gamma, m_q) = \int \mathcal{D}[\bar{\chi}, \chi, U] e^{S_F[\bar{\chi}, \chi, U] + S_G[U]} = \int \mathcal{D}[\bar{\chi}, \chi, U] e^{S_F[\bar{\chi}, \chi, U]} \quad (3.56)$$

annimmt. Hier ist zu beachten, dass in der Wirkung S_F , die Fermion-Felder im Vergleich zu (3.47) nach dem Schema $\chi, \bar{\chi} \rightarrow i\sqrt{2}\chi, i\sqrt{2}\bar{\chi}$ skaliert wurden. Dies hat den Hintergrund, dass sich somit das Vorzeichen vor der Fermion-Wirkung kürzt. Dies erweist sich bei der nachfolgenden Berechnung als vorteilhaft. Da nun die reine Eichwirkung verschwindet, hat dies zur Folge, dass die Eichfelder an verschiedenen Links entkoppeln und somit die Integration über diese Eichfelder faktorisiert [22]

$$\begin{aligned} Z &= \int \prod_{n \in \Lambda} \left[d\chi_n d\bar{\chi}_n e^{2m\bar{\chi}_n \chi_n} \prod_{\mu} \left(dU_{\mu}(n) e^{\gamma^{\delta_{\mu,4}} \eta_{\mu}(n)} (\bar{\chi}_n U_{\mu}(n) \chi_{n+\mu} - \bar{\chi}_{n+\mu} U_{\mu}^{\dagger}(n) \chi_n) \right) \right] \\ &= \int \prod_{n \in \Lambda} \left[d\chi_n d\bar{\chi}_n e^{2m\bar{\chi}_n \chi_n} \prod_{\mu} f(n, \mu) \right]. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Hier wurde im zweiten Schritt das Link-Integral

$$f(n, \mu) = \int dU_{\mu}(n) e^{\gamma^{\delta_{\mu,4}} \eta_{\mu}(n)} (\chi_n U_{\mu}(n) \chi_{n+\mu} - \bar{\chi}_{n+\mu} U_{\mu}^{\dagger}(n) \chi_n) = \int_G dg e^{\text{Tr}(gv^{\dagger} + vg^{\dagger})} \quad (3.58)$$

definiert, wobei $(v)_{ij} = \chi_{n,i} \bar{\chi}_{m,j}$ und entsprechend $(v^{\dagger})_{kl} = -\chi_{m,k} \bar{\chi}_{n,l}$ mit $m = n + \mu$ gesetzt wurde. Dieses Integral lässt sich exakt lösen, was hier allerdings nicht gezeigt werden soll. Für eine Herleitung siehe zum Beispiel [22]. Es ergibt sich für die Eichgruppe $SU(N_c)$

$$\begin{aligned} f(n, \mu) &= \sum_{k=0}^{N_c} \left\{ \frac{(N_c - k)!}{N_c! k!} \left((\eta_{\mu}(n) \gamma^{\delta_{0,\mu}})^2 M(n) M(m) \right)^k \right\} \\ &\quad + \rho(n, m)^{N_c} \bar{B}(n) B(m) - \rho(m, n)^{N_c} \bar{B}(m) B(n) \quad , \end{aligned} \quad (3.59)$$

wobei hier die mesonischen und baryonischen Freiheitsgrade

$$M(n) = \bar{\chi}_n \chi_n \quad \text{und} \quad B(n) = \frac{1}{N_c} \varepsilon_{i_1 \dots i_{N_c}} \chi_{n,i_1} \dots \chi_{n,i_{N_c}} \quad (3.60)$$

eingeführt wurden. Weiterhin ist $\rho(n, m) = \eta_{(m-n)}(n) \cdot \gamma^{\delta_{4,|m-n|}}$. Im nächsten Schritt kann nun auch das Integral über die Grassmann-Felder ausgeführt werden, wobei die Relation

$$\int \prod_a d\chi_{n,a} d\bar{\chi}_{n,a} e^{2m\bar{\chi}_n \chi_n} (\bar{\chi}_n \chi_n)^k = \frac{N_c!}{N_n!} (2m)^{N_n} \quad , \quad N_n = N_c - k \quad (3.61)$$

verwendet wird. Allerdings ergeben sich bei der Ausführung des Integrals (3.57), mit $f(n, m)$ wie in (3.59), auf Grund der Grassmann-Natur der Fermion-Felder Einschränkungen. So müssen die Felder $\bar{\chi}_{n,i}, \chi_{n,i}$ auf allen Sites (Gitterpunkten) kontrahiert werden, um

einen nicht verschwindenden Beitrag zur Zustandssumme zu liefern. Bei der Betrachtung von (3.59) fällt auf, dass dies nur auf drei Arten zu erreichen ist:

1. Zum einen können die Felder an einem Gitterpunkt miteinander kontrahiert werden, was als *Monomer* bezeichnet wird. So können auf einer Site bis zu N_c Monomere $M(n)^{N_n}$, mit $N_n \in \{0, \dots, N_c\}$, gebildet werden.
2. Zum anderen können Felder an benachbarten Gitterpunkten n und m kontrahiert werden, was zu einem *Dimer* $(M(n)M(m))^k$ führt. Dimere sind formal auf den Links definiert und können durch die Link-Besetzungszahl $k_\mu^n \in \{0, \dots, N_c\}$, $\hat{\mu} = m - n$ beschrieben werden. Zusammen mit dem obigen Punkt muss für jeden Gitterpunkt

$$N_n + \sum_{\hat{\mu} \in \{\pm 1, \dots, \pm 4\}} k_\mu^n = N_c \quad (3.62)$$

gelten.

3. Zuletzt besteht die Möglichkeit die Felder zu orientierten und geschlossenen Baryon-Schleifen (l) zu kontrahieren. Diese können ebenfalls durch eine Besetzungszahl $b_\nu(n) \in \{-1, 0, 1\}$ der Links charakterisiert werden, wobei das negative Vorzeichen für ein einlaufendes und umgekehrt das positive Vorzeichen für ein auslaufendes Baryon steht. Diese Besetzungszahl muss die Bedingung

$$\sum_{\nu \in \{\pm 1, \dots, \pm 4\}} b_\nu = 0 \quad (3.63)$$

erfüllen.

Berücksichtigt man diese drei Punkte, zerfällt die Zustandssumme (3.57) in eine Summe über alle möglichen Konfigurationen mit nicht verschwindendem Beitrag [22]

$$Z = \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \prod_n \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) . \quad (3.64)$$

Hier bezeichnet $w(l)$ das Gewicht einer baryonischen Weltlinie. Unter der Voraussetzung, dass diese N_4 Links und Windungszahl r_l in zeitlicher Richtung aufweist, ergibt sich $w(l)$ zu

$$w(l) = \frac{1}{\prod_{n \in l} 3!} \sigma(l) \gamma^{3N_4} \quad \text{mit} \quad \sigma(l) = (-1)^{r_l + N_-(l)+1} \prod_{b \in l} \eta_\mu(n) . \quad (3.65)$$

Hier ist $\sigma(l)$ das Vorzeichen der Baryon-Schleife und $N_-(l)$ die Anzahl an Links in alle negative Richtungen. Da es auf einem endlichen Gitter nur eine endliche Anzahl an möglichen Konfigurationen gibt, kann die Zustandssumme (3.64) prinzipiell exakt bestimmt werden. Dies ist allerdings schon auf recht kleinen Gittern sehr aufwändig und auf größeren aufgrund der hohen Zahl an Konfigurationen nicht mehr möglich. Üblicherweise werden auch hier Monte-Carlo-Methoden in Form eines Worm-Algorithmus verwendet. Für eine ausführliche Darstellung sei auf [22] verwiesen.

4 Methodik und Algorithmen

In diesem Abschnitt sollen nun die numerischen Methoden vorgestellt werden, die zum Erzeugen der nachfolgenden Daten verwendet wurden. Dabei soll zunächst ein kurzer Überblick zu Monte-Carlo Methoden im Allgemeinen gegeben und anschließend auf die Verwendung von Hybrid-Monte-Carlo Methoden zur Behandlung der Fermion-Determinante eingegangen werden. Darauf folgt eine Beschreibung der rationalen Approximation, wie sie in dieser Arbeit verwendet wurde.

4.1 Markov-Ketten und Detailed Balance Equation

Aus der Mathematik ist bekannt, dass der Erwartungswert einer Funktion $f(x)$ unter Berücksichtigung einer Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(x)$

$$\langle f \rangle_\rho = \frac{\int_a^b dx \rho(x) f(x)}{\int_a^b dx \rho(x)} \quad (4.1)$$

durch folgenden Mittelwert approximiert werden kann

$$\langle f \rangle_\rho = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(x_n) , \quad (4.2)$$

wobei die $x_n \in (a, b)$ Zufallsvariablen bezeichnen, die entsprechend der normierten Wahrscheinlichkeitsdichte

$$dP(x) = \frac{\rho(x)dx}{\int_a^b dx \rho(x)} , \quad (4.3)$$

erzeugt werden. Für Gleichung (3.12) bedeutet das, der Erwartungswert eines Operators kann durch eine endliche Summe der Form

$$\langle O \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N O[U_n] \quad (4.4)$$

angenähert werden, wenn die Feldkonfigurationen U_n entsprechend der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$dP(U) = \frac{e^{-S[U]} \mathcal{D}[U]}{\int \mathcal{D}[U] e^{-S[U]}} \quad (4.5)$$

generiert werden.[9] Man kann weiterhin zeigen, dass der Fehler von $\langle O \rangle$ dabei von der Ordnung $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$ ist, sofern die erzeugten Konfigurationen nicht korreliert sind. Was also zu tun bleibt, ist die Erzeugung von Feldkonfigurationen U_n , die der Verteilung (4.5) folgen. Um dies zu erreichen wird von einer beliebigen Startkonfiguration U_0 ausgegangen und eine stochastische Kette von neuen Konfigurationen erzeugt, die irgendwann einer Gleichgewichtsverteilung $P(U)$ folgt. Man spricht in diesem Fall von einer Markov-Kette

$$U_0 \rightarrow U_1 \rightarrow U_2 \rightarrow U_3 \rightarrow \dots . \quad (4.6)$$

Ein solcher Markov-Prozess ist dadurch charakterisiert, dass die Übergangswahrscheinlichkeit von einer Konfiguration U zu einer anderen U'

$$P(U_n = U' | U_{n-1} = U) = T(U' | U) \quad (4.7)$$

nicht vom Index n , also der Position innerhalb der Markov-Kette, abhängt. Diese Wahrscheinlichkeiten erfüllen zusätzlich die Beziehungen

$$0 \leq T(U' | U) \leq 1, \quad \sum_{U'} T(U' | U) = 1. \quad (4.8)$$

Eine hinreichende Bedingung, damit das System gegen einen Gleichgewichtszustand konvergiert, ist dass die Übergangswahrscheinlichkeit der Detailed-Balance-Equation

$$T(U' | U)P(U) = T(U | U')P(U'), \quad (4.9)$$

genügt. Hierbei bezeichnet $P(U)$ die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System im Zustand U befindet. Ein solcher Gleichgewichtszustand ist nun dadurch charakterisiert, dass er Zuständen mit hohem Boltzmann-Faktor $\exp(-S[U])$, also geringer Wirkung $S[U]$ entspricht. Es ist natürlich sinnvoll Gleichung (4.4) gerade mit solchen Gleichgewichtszuständen auszuwerten, da auch im Pfadintegral hauptsächlich solche Zustände Beiträge liefern, die nur wenig vom klassischen Zustand der extremalen Wirkung abweichen.

Da die Übergangswahrscheinlichkeit $T(U' | U)$ durch Gleichung (4.9) nicht eindeutig festgelegt ist, lassen sich, je nach Problem, verschiedene Algorithmen zur Generierung der U_n entwickeln. Im folgenden soll hier auf sogenannte Hybrid-Monte-Carlo Methoden eingegangen werden.

4.2 Hybrid-Monte-Carlo Methoden

Nach den theoretischen Vorüberlegungen im letzten Kapitel, stellt sich die Frage, wie letztlich neue Feldkonfigurationen entsprechend der obigen Wahrscheinlichkeitsdichte (4.5) erzeugt werden können. Ausgehend von der effektiven Wirkung

$$S_{\text{eff}}[U, \phi] = -S_G[U] - \phi^\dagger \left(D^\dagger D \right)^{-1} \phi, \quad (4.10)$$

die in Abschnitt 3.1.2 nach dem Ausintegrieren der Fermion-Felder hergeleitet wurde, geschieht dies in zwei Schritten. Zunächst wird eine neue Feldkonfiguration mit Wahrscheinlichkeit $T_0(U' | U)$ vorgeschlagen und anschließend mit Wahrscheinlichkeit $T_A(U' | U)$ akzeptiert.[9] Die gesamte Übergangswahrscheinlichkeit im Sinne von (4.7) ergibt sich dann als Produkt dieser Amplituden

$$T(U' | U) = T_A(U' | U) \cdot T_0(U' | U). \quad (4.11)$$

Allerdings stellt es sich als nicht effizient heraus, dies in einer naiven Form, ähnlich der reinen Eichtheorie, zu tun. Dies liegt daran, dass die Wirkung (4.10) auf Grund des inversen Dirac-Operators in hohem Maße nicht lokal ist, was dazu führt, dass kleine Änderungen der Eichfelder große Änderungen der Wirkung zur Folge haben. Somit wäre die Akzeptanzrate für neue Konfigurationen jedoch nahe Null. Eine deutlich effizientere Methode besteht darin, die Feldkonfiguration, entlang einer Trajektorie im Phasenraum so zu ändern, dass

die Wirkung nahezu konstant bleibt. Um dies zu erreichen, wird benutzt, dass sich der Erwartungswert einer Observablen nicht ändert, wenn man ein weiteres, zu U konjugiertes Feld P durch

$$\langle O \rangle_U = \frac{\int \mathcal{D}[U] \exp\{-S[U]\} O[U]}{\int \mathcal{D}[U] \exp\{-S[U]\}} = \frac{\int \mathcal{D}[U] \mathcal{D}[P] \exp\left\{-\frac{1}{2}P^2 - S[U]\right\} O[U]}{\int \mathcal{D}[U] \mathcal{D}[P] \exp\left\{-\frac{1}{2}P^2 - S[U]\right\}} \quad (4.12)$$

eingeführt. Hierbei wurde in Kurzform

$$P^2 = \sum_{n,\mu} \text{Tr} \left[P_\mu(n)^2 \right] \quad (4.13)$$

geschrieben. Es fällt auf, dass der Exponent des Boltzmann-Faktors nun die Form einer Hamilton-Funktion annimmt.[13]

4.2.1 Leapfrog-Algorithmus und Metropolis-Akzeptanzschritt

Um nun Kandidaten für neue Eichfeldkonfigurationen zu generieren, werden häufig aus der Molekularodynamik bekannte Methoden zur numerischen Integration von konservativen Systemen verwendet. Sie werden benutzt, um die Hamilton'schen Bewegungsgleichungen

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_{kl.}}{\partial q} \quad , \quad \dot{q} = \frac{\partial H_{kl.}}{\partial p} \quad (4.14)$$

eines klassischen, nicht relativistischen Systems, mit Hamilton-Funktion

$$H_{kl.}[q, p] = \frac{1}{2}p^2 + V[q] \quad (4.15)$$

auszuwerten.[16] Dieses Vorgehen kann formal auf die, durch das konjugierte Feld P erweiterte, Wirkung in (4.12) angewendet werden, wobei an die Stelle der verallgemeinerten Koordinaten und Impulse q und p die Felder U und P treten. Die Bewegungsgleichungen nehmen dann die Form

$$\dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial U} \quad , \quad \dot{U} = \frac{\partial H}{\partial P} \quad (4.16)$$

mit Hamilton-Funktion

$$H[U, P] = \frac{1}{2}P^2 + S[U] \quad (4.17)$$

an. Bei der numerischen Integration eines solchen Systems wird zunächst eine diskrete Schrittweite $\varepsilon = \Delta\tau$ (in Computer Zeit) eingeführt. Die Integration wäre dann im Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ und $N \rightarrow \infty$, wobei $N \cdot \varepsilon = t$ die Länge des Integrationsintervalls bezeichnet, exakt. Da aber mit einer endlichen Rechenleistung nur eine endliche Anzahl an Iterationen möglich ist, führt dies zu numerischen Fehlern in der Entwicklung der Eichfelder. Diese werden allerdings durch den nachfolgend beschriebenen Akzeptanzschritt behoben.

Ein solches Verfahren sollte dabei die folgenden beiden Eigenschaften besitzen, um die Detailed-Balance-Equation zu erfüllen

1. Es sollte reversibel sein, so dass gilt $T_{md}(P', U'|P, U) = T_{md}(-P, U| -P', U')$.
2. Das Maß $\mathcal{D}[U]\mathcal{D}[P]$ sollte invariant unter den infinitesimalen Transformationen der (zeitlichen) Entwicklung sein.

Ein Integrationsschema, das diese beiden Eigenschaften erfüllt, ist der sog. *Leapfrog*-Algorithmus. Für einen Beweis siehe z.B. [9]. Dabei werden die beiden Felder U und P nach dem folgenden Muster entwickelt

$$\begin{array}{ccc}
 U_0 & & P_0 \\
 & & \downarrow \\
 \downarrow & & P_{\frac{\varepsilon}{2}} = P_0 - \left. \frac{\partial S}{\partial U} \right|_{U_0} \cdot \frac{\varepsilon}{2} \\
 & & \downarrow \\
 U_\varepsilon = U_0 + P_{\frac{\varepsilon}{2}} \cdot \varepsilon & & P_\varepsilon = P_{\frac{\varepsilon}{2}} - \left. \frac{\partial S}{\partial U} \right|_{U_\varepsilon} \cdot \frac{\varepsilon}{2}
 \end{array} \tag{4.18}$$

Es lassen sich natürlich auch n Leapfrog-Schritte hintereinander ausführen. Üblicherweise werden n und ε so gewählt, dass $n\varepsilon \approx 1$.

Nachdem nun eine neue Konfiguration U' mittels Leapfrog erzeugt wurde, muss diese, wie bereits erläutert, noch mit Wahrscheinlichkeit $T_A(U'|U)$ akzeptiert werden. Hier verwendet man üblicherweise einen Metropolis-Akzeptanzschritt. Dies bedeutet, dass sich die Wahrscheinlichkeit, die neue Konfiguration zu akzeptieren, nach der Änderung des Boltzmann-Faktors in (4.12) richtet. Diese ergibt sich wiederum aus der Änderung der Hamilton-Funktion (4.17) durch [13]

$$T_A(P', U'|P, U) = \min \left(1, e^{-\Delta H} \right) \tag{4.19}$$

mit

$$\Delta H = H[P', U'] - H[P, U] . \tag{4.20}$$

Es sei angemerkt, dass diese Änderung im Falle einer exakten Integration der Bewegungsgleichungen immer verschwinden würde und somit auch die vorgeschlagenen Konfigurationen mit einer Wahrscheinlichkeit von 100% akzeptiert werden. Der Metropolis-Akzeptanzschritt dient also, wie bereits erwähnt der Eliminierung von Abweichungen in der numerischen Integration.

4.2.2 Implementierung für Eichfelder und Fermionen

Da die bisherige Argumentation noch sehr allgemein gehalten war, soll dieser Abschnitt klären, wie das oben Beschriebene explizit auf dynamische (Staggered) Fermionen angewendet werden kann. Dazu wird zuerst die Wirkung betrachtet

$$S[U] = S_G[U] - \phi^\dagger (DD^\dagger)^{-1} \phi . \tag{4.21}$$

Diese beschreibt zunächst noch acht massenentartete Flavor von Quarks. Wie diese Anzahl weiterhin auf Eins reduziert wird, wird im nächsten Abschnitt geklärt. Die Pseudofermion-Felder haben hierbei die gleichen Indizes, wie die Quark-Felder ψ , also Farb- und Raumzeit-

Indizes und müssen während des Leapfrog-Algorithmus entsprechend der Verteilung (3.31) erzeugt werden.

Dies geschieht auf relativ simple Weise vor dem Update der U -Felder, indem ein komplexer Vektor χ , entsprechend der Gauß-Verteilung $\exp(-\chi^\dagger \chi)$, erzeugt und anschließend $\phi = D\chi$ berechnet wird. Denn auf diese Weise generiert man automatisch ϕ -Felder, die der gewünschten Verteilung $\exp(-\phi^\dagger (DD^\dagger)^{-1} \phi)$ folgen.[16]

Nachdem die ϕ -Vektoren erzeugt wurden, wird die Eichfeldkonfiguration entsprechend der oben beschriebenen, molekulardynamischen Trajektorie entwickelt. Jedoch muss dabei beachtet werden, dass es sich bei den Link-Variablen um Gruppenelemente der $SU(3)$ handelt und diese somit nicht in einem flachen Raum, sondern auf einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit, definiert sind. Dies kann folgendermaßen berücksichtigt werden. Anstatt des Gruppenelements selbst, verwendet man die zugehörigen Elemente des Tangential-Raums, also der Lie-Algebra, für das Update des konjugierten Feldes P . Dabei wird verwendet, dass sich ein Element der $SU(3)$ schreiben lässt, als $U = \exp\{iQ\}$, wobei Q ein Element der Algebra bezeichnet. Konkret sieht das so aus

$$\dot{Q} = P \rightarrow Q_\varepsilon = Q_0 + P_0 \cdot \varepsilon . \quad (4.22)$$

Das eigentliche Eichfeld kann nun mittels der Exponential-Map durch

$$-i \ln U_\varepsilon = i \ln U_0 + P_0 \cdot \varepsilon \quad \rightarrow \quad U_\varepsilon = e^{iP_0 \cdot \varepsilon} \cdot U_0 \quad (4.23)$$

geändert werden. Schreibt man das ganze noch etwas ausführlicher, also

$$U = \exp \left(i \sum_{i=1}^8 \omega^i T_i \right) \equiv \exp(iQ) \quad (4.24)$$

ergibt sich, dass pro Link-Variable $U_\mu(n)$ acht, zu den Variablen $\omega_\mu^i(n)$, konjugierte Impulse $P_\mu^i(n)$ generiert werden müssen. Diese werden anschließend in dem Algebra-Element

$$P_\mu(n) = \sum_{i=1}^8 P_\mu^i(n) T_i \quad (4.25)$$

zusammengefasst und für das Update (4.23) verwendet. Da die P -Felder konstruktionsbedingt quadratisch in die Hamilton-Funktion eingehen, also in der Form

$$\frac{1}{2} \sum_{n,\mu,i} \left(P_\mu^i(n)^2 \right) = \sum_{n,\mu} \text{Tr} \left[P_\mu(n)^2 \right] , \quad (4.26)$$

werden diese nach (4.12) zu Beginn der Trajektorie entsprechend einer Gauß-Verteilung erzeugt.

Zuletzt bleibt noch zu klären, wie die Ableitung der Wirkung nach dem Feld Q in Gleichung (4.14) bzw. (4.18), zu verstehen ist. So lässt sich die Ableitung einer Funktion $f(U)$ in Richtung des Algebra-Elements T_i definieren als

$$\nabla^i f(U) \equiv \frac{\partial f(U)}{\partial \omega^i} = \frac{\partial}{\partial \omega^i} f \left(e^{i\omega T_i} \cdot U \right) \Big|_{\omega=0} . \quad (4.27)$$

Mit Hilfe dieser Definition lässt sich nun die sog. *Fermion-Kraft*

$$F[U, \phi] = \sum_{i=1}^8 T_i \nabla^i \left(S_G[U] + \phi^\dagger (DD^\dagger)^{-1} \phi \right) \quad (4.28)$$

berechnen. Dies ist in A.1 einmal ausführlich gemacht worden. Da Ableitungen auf differenzierbaren Mannigfaltigkeiten Elemente des Tangential-Raums sind, handelt es sich bei der Fermion-Kraft ebenfalls um ein Element der Lie-Algebra $\mathfrak{su}(3)$. Die P -Felder werden somit nach folgendem Schema aktualisiert

$$P_{\frac{\varepsilon}{2}} = P_0 - \frac{\varepsilon}{2} F[U, \phi] \big|_{U_0} . \quad (4.29)$$

Zur besseren Übersicht ist der gesamte Algorithmus im folgenden noch einmal in Teilschritten zusammengefasst: [24] [16]

1. Die Pseudofermion-Felder werden durch $\phi = D\chi$ erzeugt, wobei die χ entsprechend der Gauß-Verteilung $\exp(-\chi^\dagger \chi)$ generiert werden.
2. Bei gegebener Eichkonfiguration U_0 werden pro (n, μ) acht reelle Zahlen, entsprechend der Gauß-Verteilung $\exp(-\text{Tr}[P^2])$ erzeugt.
3. Die konjugierten Impulse werden um den ersten Halbschritt aktualisiert

$$P_{\frac{\varepsilon}{2}} = P_0 - \frac{\varepsilon}{2} F[U, \phi] \big|_{U_0}$$
4. Es folgen die Zwischenschritte des Leapfrog-Algorithmus

$$U_k = \exp \left(i\varepsilon P_{k-\frac{1}{2}} \right) U_{k-1}, \quad P_{k+\frac{1}{2}} = P_{k-\frac{1}{2}} - \varepsilon F[U, \phi] \big|_{U_k}$$
5. Und anschließend der letzte Halbschritt

$$U_n = \exp \left(i\varepsilon P_{n-\frac{1}{2}} \right) U_{n-1}, \quad P_n = P_{n-\frac{1}{2}} - \frac{\varepsilon}{2} F[U, \phi] \big|_{U_n}$$
6. Zum Schluss wird der Metropolis-Akzeptanzschritt ausgeführt. Die neue Eichfeldkonfiguration wird akzeptiert, falls eine erzeugte Zufallszahl $r \in [0, 1)$ kleiner ist als $\Delta H = \exp \left\{ \text{Tr}[P^2] - \text{Tr}[P'^2] + S_G[U] - S_G[U'] + \phi^\dagger \left((DD^\dagger)^{-1} - (D'D'^\dagger)^{-1} \right) \phi \right\}$

Es ist recht offensichtlich, wie die Erweiterung auf mehrere Pseudofermion-Felder abläuft, da die zuzustichenden Beiträge lediglich zur Kraft und dem ΔH hinzuaddiert werden müssen. Es sei noch erwähnt, dass man bei den Zwischenschritten in Punkt 4. gewisse Freiheiten hat. So kann das Eichfeld prinzipiell unterschiedlich oft durch den Beitrag der Eichkraft und der Pseudofermion-Kraft aktualisiert werden. Hierbei ist jedoch darauf zu achten, dass die Länge der beiden Trajektorien identisch ist. Dazu ein Beispiel:

Soll z.B. die gegebene Konfiguration U_{k-1} pro Zwischenschritt 15-mal mit dem Beitrag der Eichkraft und 5-mal mit dem Beitrag der Pseudofermion-Kraft aktualisiert werden, müssten die jeweiligen Schrittweiten zu $\varepsilon_G = \varepsilon/15$ bzw. $\varepsilon_{PSF} = \varepsilon/5$ gewählt werden. Dies kann sinnvoll sein, da die Berechnung der Eichkraft sehr günstig ist und so die Genauigkeit erhöht werden kann.

4.3 Die rationale Approximation

Bevor auf die Funktionsweise der rationalen Approximation eingegangen wird, vorab einige Bemerkungen zur Verwendung während dieser Arbeit. Da, wie später noch erläutert wird, in dieser Arbeit vier massenentartete Flavor simuliert wurden, um eine Vergleichbarkeit mit Daten aus strong-coupling Simulationen (MDP) zu gewährleisten, ist es prinzipiell

ausreichend lediglich ein Pseudofermion-Feld zu verwenden. Da jedoch in dem verwendeten **Bielefelder GPU-Code** die Verwendung von zwei PSF-Feldern *hardcoded* ist, wurde diese Konvention auch in der vorliegenden Arbeit verwendet. Ein Umschreiben des Codes hätte, zusätzlich zur Implementierung der Anisotropie in den Bestehenden Code, den Rahmen einer Masterarbeit deutlich überschritten.

Wie bereits in Abschnit 3.1.1 zu Staggered Fermionen erläutert, beschreibt die Fermion-Determinante

$$Z = \int \mathcal{D}[U] \det [DD^\dagger] e^{-S_G[U]} \quad (4.30)$$

acht Flavor dynamischer Fermionen. Üblicherweise ist man jedoch eher an dem physikalischen Fall von (2+1)-Flavor (zwei leichten und einem strange Quark) oder (2+2)-Flavor interessiert. Dieses Problem kann umgangen werden, indem die $n_f/8$ -Wurzel der Fermion-Determinante innerhalb der Zustandssumme verwendet wird, also

$$Z = \int \mathcal{D}[U] \det [DD^\dagger]^{n_f/8} e^{-S_G[U]} . \quad (4.31)$$

Dies reduziert die Anzahl der Quark-Flavor effektiv auf n_f . Möchte man diese Determinante nun wieder durch ein Gauß-Integral über ein bosonisches Feld ausdrücken, wird eine rationale Approximation der Wurzel in der Form [24]

$$\det[DD^\dagger]^{n_f/8} \approx \det [r(DD^\dagger)] \propto \int d\phi d\phi^* e^{-\phi^\dagger r(DD^\dagger)^{-1} \phi} \quad (4.32)$$

verwendet, wobei

$$r(x) = \alpha_0 + \sum_{i=1}^d \frac{\alpha_i}{x + \beta_i} \quad \text{mit} \quad x = DD^\dagger \quad (4.33)$$

ist. Hier bezeichnet d die Ordnung der Approximation. Dieses Vorgehen führt also formal wieder auf eine analoge Form der Wirkung zu (4.21), wodurch sich der oben beschriebene HMC-Algorithmus in gleicher Weise anwenden lässt.

Es sei noch angemerkt, dass Gleichung (4.32) nicht die einzige Möglichkeit einer rationalen Approximation darstellt. Da sowohl das inverse, als auch beliebige Potenzen einer rationalen Funktion, ebenfalls rationale Funktionen sind, kann im Allgemeinen

$$\det[DD^\dagger]^{n_f/8} \approx \det [r(DD^\dagger)^k] \propto \int d\phi d\phi^* e^{-\phi^\dagger r(DD^\dagger)^{-k} \phi} \quad \text{mit} \quad k \in \mathbb{Z} \quad (4.34)$$

geschrieben werden. In diesem Fall ändert sich lediglich die Interpretation von $r(x)$, was in einigen Situationen von Vorteil sein kann. So geht die rationale Approximation in dem oben beschriebenen HMC-Algorithmus an drei Stellen ein: Beim Update der PSF-Felder mittels Heatbath (Schritt 1. der Aufzählung in Kap. 4.2.2), während der Berechnung der Fermion-Kraft im Leapfrog und im Metropolis-Akzeptanzschritt (Schritt 6. der Aufzählung in Kap. 4.2.2). Da numerische Abweichungen bei der Integration der Eichfelder, also während des Leapfrogs, durch den Metropolis-Akzeptanzschritt korrigiert werden, reicht zur Berechnung der Fermion-Kraft eine geringere Präzision der rationalen Approximation aus. Dies ist besonders nützlich, da der *Conjugate Gradient* zur Invertierung der Fermion-Matrix recht teuer ist und am häufigsten bei der Berechnung der Kraft aufgerufen wird.

Die Konvention, die während dieser Arbeit verwendet wurde, ist bei beiden Pseudo-Fermionen durch

$$\begin{aligned} f(x) &= x^{2/8} = x^{1/4} && \text{Heatbath (hohe Präzision)} \\ f(x) &= x^{-2/8} = x^{-1/4} && \text{Akzeptanzschritt (hohe Präzision)} \\ f(x) &= x^{-4/8} = x^{-1/2} && \text{MD-Update (niedrige Präzision)} \end{aligned} \quad (4.35)$$

gegeben, wobei in allen Fällen $x = DD^\dagger$ gilt. Zum invertieren von Gleichungssystemen der Form

$$\xi_i = (DD^\dagger + \beta_i)^{-1} \phi, \quad (4.36)$$

wie sie bei der Berechnung der Kraft auftreten (siehe [A.1]), wird ein *Multishift Solver* verwendet, wie er von Beat Jegerlehner in [18] vorgeschlagen wurde, der es erlaubt alle ξ_i gleichzeitig zu berechnen.

4.4 Numerische Berechnung des chiralen Kondensats in HMC und MDP

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels soll noch erläutert werden wie das chirale Kondensat konkret berechnet werden kann. Sowohl im Falle der Hybrid-Monte-Carlo, als auch der MDP-Simulationen. Dabei wird im ersteren Fall von Gleichung (3.38) ausgegangen

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln Z(m_q, V)}{\partial m_q} = \frac{1}{V} \langle \text{Tr} D^{-1} \rangle. \quad (4.37)$$

Theoretisch wäre es möglich die Fermion-Matrix direkt zu invertieren und anschließend die Spur zu bilden. Da es sich bei D jedoch um eine $N \times N$ -Matrix, mit $N = V \cdot N_c = N_\sigma^3 \cdot N_\tau \cdot N_c$, handelt, skaliert die Größe dieser Matrix mit dem Gitter-Volumen. So ist die Dimension von D schon bei einer Gittergröße von $V = 16^3 \cdot 8$ von der Ordnung $N \approx 10^5$. Dies ist mit gängigen Algorithmen zur Matrix-Invertierung nicht in realistischen Zeiten durchführbar.

Stattdessen bedient man sich eines stochastischen Ansatzes, um so das Inverse von D zu approximieren.[28] Dazu wird ein Ensemble von L Spaltenvektoren $\eta \equiv \{\eta^1, \dots, \eta^L\}$ mit den Eigenschaften

$$\langle \eta_i \rangle_s = 0, \quad \langle \eta_i \cdot \eta_j \rangle_s = \delta_{i,j} \quad (4.38)$$

eingeführt, wobei der stochastische Mittelwert $\langle \dots \rangle_s$ definiert ist durch

$$\langle \eta_i \cdot \eta_j \rangle_s = \frac{1}{L} \sum_{n=1}^L \eta_i^n \eta_j^n. \quad (4.39)$$

Hierbei bezeichnet η_i^n den i -ten Eintrag des n -ten Vektors von η . Den Erwartungswert des Matrix-Elements D_{ij}^{-1} erhält man durch lösen des Gleichungssystems $D \cdot X^n = \eta^n$ nach X_i mit den L Vektoren η und anschließender Mittelung über das Ensemble

$$E[D_{ij}^{-1}] = \langle \eta_j \cdot X_i \rangle_s = \sum_k D_{ik}^{-1} \langle \eta_j \cdot \eta_k \rangle_s. \quad (4.40)$$

Das lineare Gleichungssystem kann mit Hilfe des Conjugate Gradient gelöst werden, um die Vektoren $X^a = D^{-1} \cdot \eta$ zu bestimmen. Hiermit lässt sich anschließend leicht das chirale Kondensat in (4.37) berechnen. Um die connected Suszeptibilität zu approximieren, müssen Gleichungssysteme der Form $Y^n = D^{-1} \cdot D^{-1} \cdot \eta^n = D^{-1} \cdot X^a$ gelöst werden. Dies geschieht einfach rekursiv, so dass diese durch

$$E \left[D_{ij}^{-2} \right] = \langle \eta_j \cdot Y_i \rangle_s = \sum_k D_{ik}^{-1} \langle \eta_j \cdot X_k \rangle_s = D_{ik}^{-1} \cdot D_{kl}^{-1} \langle \eta_j \cdot \eta_l \rangle_s . \quad (4.41)$$

genähert wird. Zu bemerken ist noch, dass die Orthogonalitätsrelation in (4.38) nur für $L \rightarrow \infty$ strikt wahr ist und sich bei numerischen Berechnungen auch hier Abweichungen ergeben. Diese können ein wenig reduziert werden indem das Kondensat mehrmals pro Konfiguration gemessen wird. Für die Wahl der Vektoren η sind mehrere Ansätze möglich, solange diese (4.38) erfüllen. Eine Möglichkeit, die auch für die Messungen in dieser Arbeit verwendet wurde, ist die η als Gauß'sche Zufallsvariablen zu wählen.

Im Falle der MDP-Simulationen gestaltet sich die Messung des chiralen Kondensats als etwas einfacher. Ausgehend von der Zustandssumme (3.64) ergibt sich für das chirale Kondensat (vergleiche dazu A.2)

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln Z(m_q, V)}{\partial (2m_q)} = \frac{1}{2m_q V} \langle \sum_n N_n \rangle \equiv \frac{1}{2m_q V} \langle N_M \rangle \equiv \frac{1}{2m_q} \langle n_M \rangle , \quad (4.42)$$

wobei N_M die Gesamtzahl an Monomeren bezeichnet und n_M die Monomerdichte. Diese kann für eine gegebene Konfiguration einfach bestimmt werden. Die Suszeptibilität ist weiterhin durch

$$\chi = \frac{1}{V} \cdot \left[\langle (\bar{\psi}\psi)^2 \rangle - \langle \bar{\psi}\psi \rangle^2 \right] + \chi_{con} = \frac{V}{(2m_q)^2} \cdot \left[\langle n_M^2 \rangle - \langle n_M \rangle^2 \right] + \frac{1}{(2m_q)^2} \langle -n_M \rangle \quad (4.43)$$

gegeben. Zur Fehlerberechnung wurde in beiden Fällen eine Standard Jackknife-Analyse verwendet.

5 Implementierung der Anisotropie

Das nachfolgende Kapitel ist der korrekten Implementierung der Anisotropie in den bereits existierenden Bielefelder-GPU Code gewidmet. Dieses Thema soll hier einmal ausführlich behandelt werden, da es sich im Laufe der Arbeit als nicht trivial herausstellte, die Anisotropie auf korrekte Weise in den parallelisierten Teil des Programmes aufzunehmen. Dieses Kapitel ist dabei so strukturiert wie der zu Grunde liegende Arbeitsprozess. So wird zunächst erläutert, welche Funktionen und Routinen dem bestehenden Code hinzugefügt wurden und worauf im Allgemeinen zu achten ist. Anschließend werden die, mit dem modifizierten Code berechneten, vorläufigen Resultate mit MDP-Daten verglichen. Da sich diese bei $\gamma \neq 1$ als nicht korrekt herausstellten, folgt ein Abschnitt zur Fehlerermittlung und -behebung. Zuletzt soll dann gezeigt werden, dass die vorgeschlagenen Änderungen auch korrekte Resultate liefern.

5.1 Berücksichtigung des γ -Faktors im GPU-Code

Wie bereits im Abschnitt zur Anisotropie erläutert, wird diese innerhalb der Wirkung an die zeitlichen Link-Variablen multipliziert. Dies wird analog, zu Beginn der Simulation im

Code, durchgeführt, indem an die zeitlichen Links der Startkonfiguration U_0 innerhalb der Markov-Kette (4.6) der Faktor γ multipliziert wird. Dazu wurden der Wirkungs-Klasse im Bielefelder GPU-Code zwei Funktionen hinzugefügt, die in C.1 abgebildet sind. Die Funktion *setAniso()* wird nun nach der Initialisierung der Wirkung und dem Einladen der Startkonfiguration aufgerufen (Zeile 22).

Listing 1: Berücksichtigung der Anisotropie innerhalb der Main-Routine des Bielefelder GPU-Codes.

```

1  int main( int argc , char *argv[] ) {
2      [...]
3      //setting up host lattice
4      stdLogger.info() << "SETTING UP LATTICE: on host";
5      Lattice<floatTlat> lat(p.lx , p.ly , p.lz , p.lt);
6      //loading configuration on host
7      lat.readconf_prec_d( filename1.c_str() , rnd.digest );
8      //setting up on device
9      stdLogger.info() << "SETTING UP LATTICE, ACTION, RHMC,
      MEASURE: on device";
10     //copy lattice to device
11     GLattice<floatTlat ,onDevice> glat(lat);
12     gAction<floatT ,floatTlat ,onDevice>
        gact(&glat ,ACT,actparam ,p.beta ,p.mu_0,p.gamma,p.u0);
13     //set up RHMC
14     gRHMC<floatT ,floatTlat ,onDevice> grhmc(&gact , rhmcparam);
15     grhmc.ALWAYS_ACCEPT = p.always_accept;
16     //set up measurements
17     gMeasure<floatT ,floatTlat ,onDevice> gmeas(&gact);
18     gmeas._cg_max = p.cg_max;
19     gmeas._cg_residue = p.residue;
20     //KS phase + boundary , init links
21     stdLogger.info() << "SET UP KS-PHASES and Anisotropy";
22     gact.setKSPhase_Boundary();
23     gact.setAniso(p.gamma);
24     [...]
25     stdLogger.info() << "WRITE CONFIG: " << filename1;
26     gact.setKSPhase_Boundary(); // undo the phases before saving
27     gact.outAniso(p.gamma); // undo the anisotropy before
        saving
28     glat.copy_lattice(&lat); // write lattice from device to host
29     lat.writeconf( filename1.c_str() , p.beta , p.mass_ud ,
        p.mass_s , plaq , rect , filename2.c_str() , rnd.digest );
30     gact.setKSPhase_Boundary(); // redo the phases after saving
31     gact.setAniso(p.gamma); // redo the anisotropy after saving

```

Dies ist prinzipiell alles was zu tun ist, jedoch muss auf einige Besonderheiten im Code geachtet werden. Soll beispielsweise eine gegebene Konfiguration, um sie später wieder zu verwenden, abgespeichert werden, muss der γ -Faktor zuvor aus der Eichkonfiguration heraus multipliziert werden, da der Code davon ausgeht, dass es sich um Elemente der $SU(3)$ handelt und somit lediglich 6 der 9 Einträge abspeichert. Die restlichen 3 Einträge werden dann beim Einladen rekonstruiert. Eine Multiplikation mit γ führt allerdings dazu,

dass es sich bei den Link-Variablen nicht mehr um Gruppenelemente der $SU(3)$ handelt. Eine Rekonstruktion der restlichen drei Einträge würde somit falsche Ergebnisse liefern.

Weiterhin muss auch vor der Berechnung der Eichwirkung die Anisotropie wieder heraus multipliziert werden, da in diesem Teil der Wirkung keine Anisotropie berücksichtigt werden soll, wodurch die Erweiterung des anisotropen HMC auf endliche β nahezu trivial ist. Zuletzt ist bei der Berechnung der Fermion-Kraft auf der GPU Vorsicht geboten. Hierauf wird in den nachfolgenden Abschnitten jedoch ausführlich eingegangen.

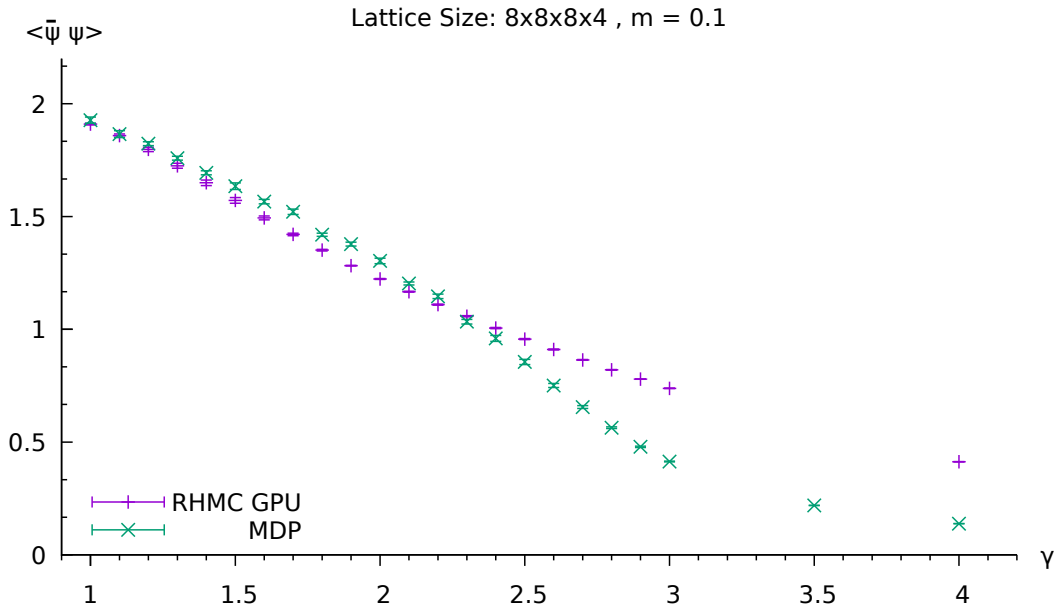


Abb. 5.1: Das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Anisotropie γ , bei festgehaltener Quark-Masse $m = 0.1$, auf einem $8^3 \times 4$ -Gitter. Verglichen werden die, mit dem Bielefelder-Code erzeugten, RHMC-Daten mit MDP-Daten.

5.2 Erste Crosschecks mit MDP

Zu Beginn dieses Abschnitts sei angemerkt, dass alle nachfolgenden Resultate bei $\beta = 0$ erzeugt wurden, um eine Vergleichbarkeit mit den MDP-Daten zu gewährleisten. Weiterhin sind alle nachfolgenden Größen in Einheiten der Gitterkonstante angegeben und somit dimensionslos. Als Hauptvergleichskriterium dient im folgenden das chirale Kondensat, da Eichobservablen, wie die Plaquette, bei $\beta = 0$ mit deutlichen Schwankungen behaftet sind und einen Vergleich erschweren. Eine Ausnahme bildet hier der Polyakov-Loop. Da jedoch die Intention ist den chiralen Phasenübergang zu bestimmen, ist das Kondensat als Ordnungsparameter der bessere Kandidat.

Für die ersten Crosschecks wurden nun Konfigurationen auf einem $8^3 \times 4$ -Gitter, bei festgehaltener Masse $m = 0.1$, im Intervall $\gamma \in [1, 4]$ erzeugt. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.1 dargestellt. Zu sehen ist hier, dass das chirale Kondensat für $\gamma \approx 1$ noch Übereinstimmungen zeigt, aber mit wachsender Anisotropie Abweichungen auftreten. Auffallend ist auch, dass das chirale Kondensat ein völlig anderes Verhalten zeigt und nicht konsequent oberhalb oder unterhalb der MDP-Daten liegt. Somit lässt sich eine andere Konvention in den Messungen ausschließen, bspw. eine unterschiedliche Skalierung der Messergebnisse.

Um diese Abweichungen näher zu untersuchen, wurden weitere Messungen durchgeführt. So ist vor allem das Verhalten des chiralen Kondensats in Abhängigkeit von der Quark-Masse, bei festgehaltenem γ , interessant. Für diese Messungen wurde eine Anisotropie gewählt, die nach $a_\sigma T = \frac{\gamma^2}{N_\tau}$ eine Temperatur deutlich überhalb T_c erzeugt, da hier zu erwarten ist, dass das chirale Kondensat für kleine Massen gegen Null geht, was hierdurch überprüft werden sollte.

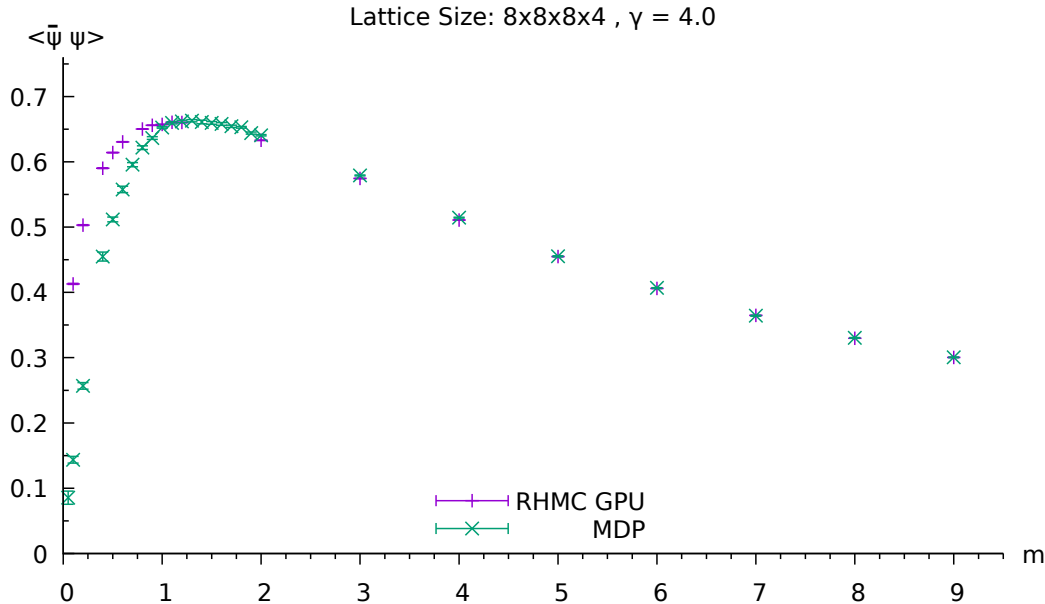


Abb. 5.2: Das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Masse m , bei festgehaltenem $\gamma = 4.0$, auf einem $8^3 \times 4$ -Gitter. Verglichen werden die, mit dem Bielefelder-Code erzeugten, RHC-Daten mit MDP-Daten.

Die in Abb. 5.2 dargestellten Ergebnisse zeigen, dass dies nicht zwangsläufig der Fall zu sein scheint. Interessanter scheint jedoch die Übereinstimmung der Daten für große Massen. Diese Übereinstimmung konnte durch einen weiteren Run bei $m = 9.0$ bis zu sehr hohen γ -Werten bestätigt werden. Dies ist in Abb. B.1 gezeigt und lässt sich folgendermaßen erklären: Mit der Erhöhung der Quark-Masse fängt, innerhalb der Fermion-Matrix, nach und nach der Teil proportional zur Einheitsmatrix an zu dominieren. Man nähert sich somit dem *quenched limit*, dem Grenzfall unendlich schwerer, statischer Quarks, in dem diese effektiv vom System entkoppeln. Da die Anisotropie jedoch lediglich im kinetischen Teil der Wirkung auftritt, führt eine Erhöhung der Masse dazu, dass der Einfluss eben dieser immer stärker unterdrückt wird. Ein solcher Effekt ist also bis zu einem gewissen Grad zu erwarten.

Nach den bisherigen Vergleichen kam die Frage auf, ob die obigen Abweichungen auch auf kleineren Gitter-Volumina auftreten würden. Daher war der nächste Schritt analoge Messungen zu Abb. 5.1 auf einem 2^4 -Gitter durchzuführen. Dies ist in Abb. 5.3 dargestellt. Wie zu sehen ist, sind die Daten zwischen RHC und MDP innerhalb der Fehler konsistent. Wie anhand der Abbildung jedoch weiter zu erkennen ist, wurden diese Daten, wegen der sehr geringen Gitter-Größe, auf einer CPU erzeugt. Dies brachte Zweifel daran auf, ob der CPU- und GPU-Teil des Programmes auch wirklich identische Resultate liefern.

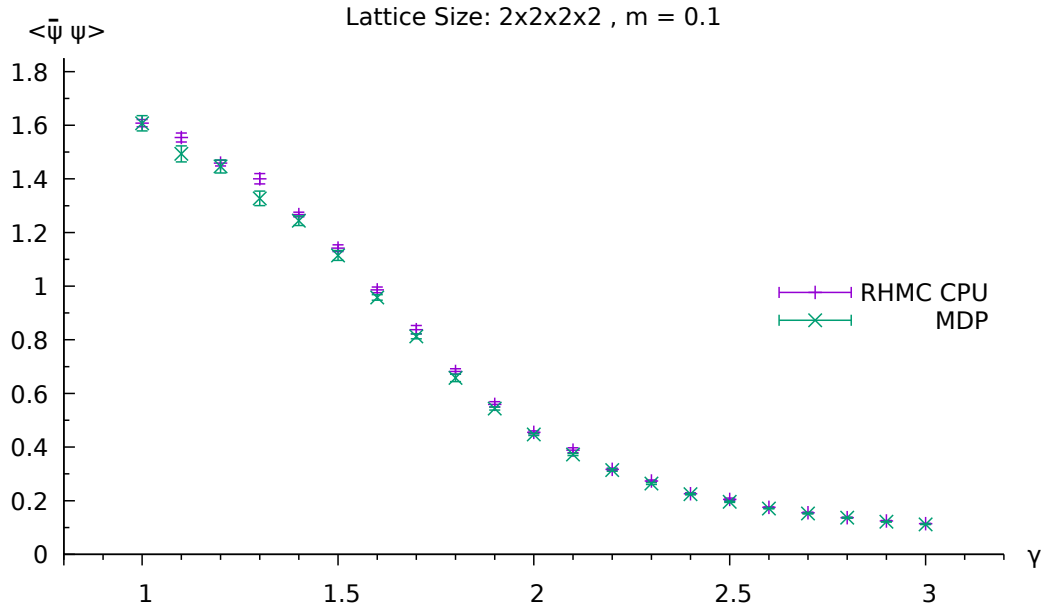


Abb. 5.3: Das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Anisotropie γ , bei festgehaltener Quark-Masse $m = 0.1$, auf einem 2^4 -Gitter. Verglichen werden die, mit dem Bielefelder-Code erzeugten, RHMC-Daten mit MDP-Daten.

Um dies zu überprüfen, musste jedoch zu einem etwas größerem Gitter-Volumen übergegangen werden, da ein 2^4 -Gitter nicht auf der GPU simuliert werden konnte. (Grund hierfür war, dass der *cuda reduce*-Kernel für so wenig Punkte auch mit einer geringeren BLOCK-Size keine korrekten Resultate lieferte.) Daher wurde auf einem $2^3 \times 4$ -Gitter simuliert. Abb. 5.4 zeigt hierbei deutlich, dass CPU- und GPU-Code keine übereinstimmenden Resultate liefern und das Problem offenbar die Implementierung der Anisotropie innerhalb des GPU-Teils des Bielefelder Codes ist.

5.3 Fehlerbehebung und Debugging

Dieser Abschnitt soll sich nun der Identifizierung des Fehlers bei der Implementierung der Anisotropie in den Bielefelder GPU-Code befassen und erläutern, wie dieser konkret ermittelt und anschließend behoben wurde. Ausgangspunkt ist dabei Abb. 5.4, wobei die CPU-Daten im folgenden als korrekt angesehen werden. Einen ersten Hinweis auf die Ursache für die Abweichungen zwischen CPU- und GPU-Resultaten lieferten die Input-Parameter der Simulationen. Hier fiel sofort auf, dass die Stepsize ε für den Leapfrog-Algorithmus (4.18) auf der GPU signifikant kleiner gewählt werden musste, um eine zur CPU vergleichbare Akzeptanzrate von ca. 80-90% zu erreichen. Die Rede ist hier von einem Faktor 60-70. Dies war in den vorherigen Simulationen nicht direkt aufgefallen, da hier kein Vergleich gegeben war und lediglich von einer starken Abhängigkeit der Stepsize von der Anisotropie ausgegangen wurde. Dies gab nun Anlass dazu die *Time Histories* von CPU- und GPU Simulationen zu vergleichen.

Untersucht wurde also die Entwicklung des chiralen Kondensats, ausgehend von verschiedenen Startkonfigurationen auf der GPU. Die Startkonfigurationen wurden dabei einmal zufällig (Hot-Start) und einmal als Einheitskonfiguration (Cold-Start) gewählt und mit den CPU-Resultaten verglichen. Weiterhin wurde noch die Entwicklung einer bereits auf

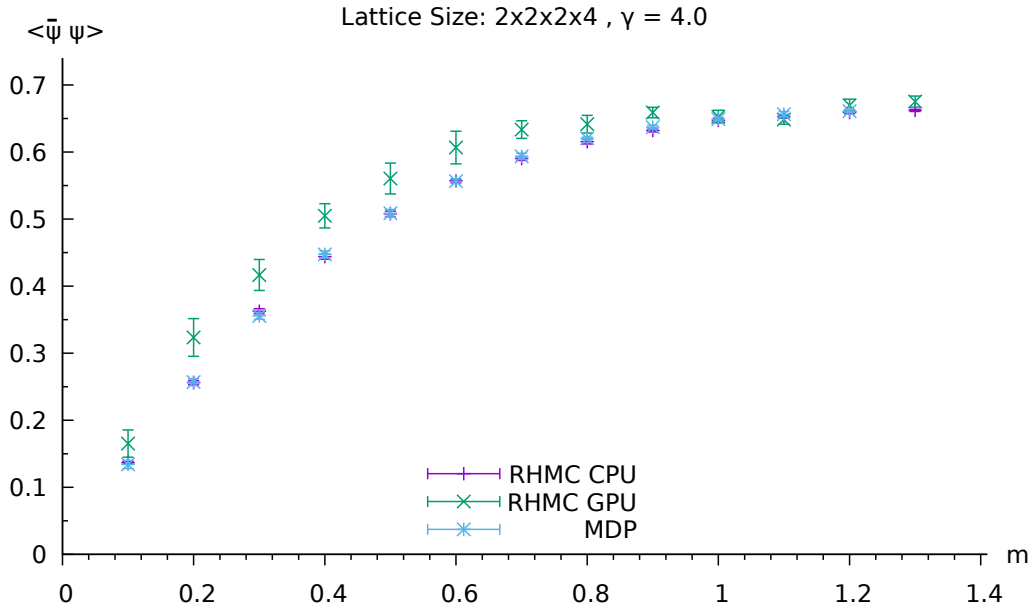


Abb. 5.4: Das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Masse m , bei festgehaltenem $\gamma = 4.0$, auf einem $2^3 \times 4$ -Gitter. Verglichen werden die, mit dem Bielefelder-Code erzeugten, RHMC-Daten mit MDP-Daten.

der CPU thermalisierten Konfiguration betrachtet. All dies wurde jeweils bei einer Masse von $m = 0.1$ und zwei verschiedenen Anisotropien, $\gamma = 1.0$ bzw. $\gamma = 4.0$, durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.5 dargestellt.

Zu sehen ist, dass die Daten auf der CPU und der GPU bei $\gamma = 1.0$, wie erwartet, ein identisches Verhalten zeigen. Auch sind hier, zumindest nach einer Thermalisierungsdauer von circa 100 Konfigurationen, keine Abweichungen zwischen den Entwicklungen der verschiedenen Startkonfigurationen zu erkennen. Anders sieht dies jedoch bei $\gamma = 4.0$ aus. Hier scheinen in den GPU-Daten starke Autokorrelationen zu entstehen, was deutlich an den Spikes in den Daten des Hot-Starts zu sehen ist. In dem Load-Datensatz sind diese weniger stark ausgeprägt. Die Daten aus dem Cold-Start hingegen scheinen nur sehr langsam zu thermalisieren und fluktuieren nahezu gar nicht.

Die eben beschriebenen Resultate sind offenbar eine Konsequenz der äußerst geringen Stepsize, die während des Leapfrog-Algorithmus verwendet wird. Da die Stepsize so klein gewählt werden musste, um eine vernünftige Akzeptanzrate zu erhalten, läuft die molekulardynamische Trajektorie nur sehr langsam durch den Konfigurationsraum. Dies hat zur Folge, dass aufeinander folgende Konfigurationen kaum voneinander abweichen, was wiederum zu den oben erwähnten Korrelationen führt. Dies erklärt außerdem, warum die Messungen nur sehr schwach fluktuieren und somit auch die ausgeprägten Fehler in den RHMC-GPU Daten aus Abb. 5.4.

Interessant ist, dass solche Korrelationen in den Daten des $8^3 \times 4$ -Gitters nicht mit bloßem Auge zu erkennen waren. Dies lässt sich wahrscheinlich darauf zurückführen, dass die Ausdehnung des Gitters in zeitlicher Richtung, relativ zur räumlichen, in diesem Fall deutlich kleiner war. Hier hätte vermutlich nur eine Messung der Autokorrelationszeit Aufschluss gegeben, woran zu diesem Zeitpunkt jedoch noch nicht gedacht wurde. Eine beispielhafte Time-History ist in Abb. B.3 dargestellt.

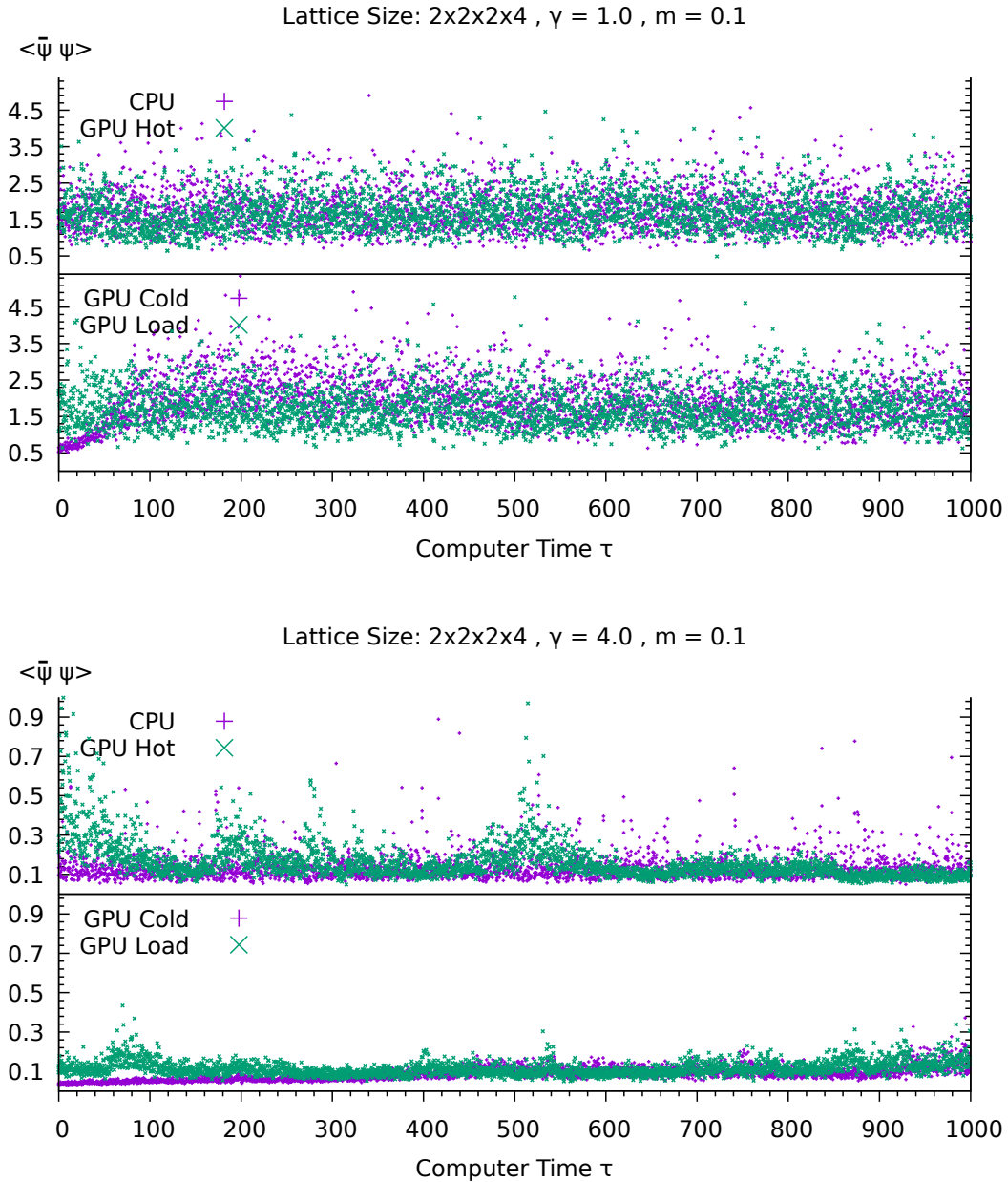


Abb. 5.5: Time Histories der auf dem $2^3 \times 4$ -Gitter erzeugten Datenpunkte bei $m = 0.1$ und $\gamma = 1.0$ und $\gamma = 4.0$. Dargestellt sind die Time Histories, der auf der CPU erzeugten Daten, im Vergleich mit der GPU. Für die GPU wurde die Entwicklung von drei verschiedenen Startkonfigurationen untersucht. 1. Hot: Eine Zufallskonfiguration, 2. Cold: Die Einheitskonfiguration, 3. Load: Eine bereits auf der CPU thermalisierte Konfiguration.

Auf Grund dieser Überlegungen lässt sich vermuten, dass der Fehler durch eine Routine verursacht wird, die während des Leapfrog-Algorithmus verwendet wird. In der Tat kann sogar schon erahnt werden, dass die Fermion-Kraft zu groß abgeschätzt wird, da die Stepsize lediglich an die Kraft multipliziert wird. Um diese Vermutung zu bestätigen wurden nun die Input-Parameter, insbesondere auch die Stepsize, auf der GPU und der CPU identisch gewählt. Im nächsten Schritt wurde das Programm durch setzen eines

CPU/ GPU	γ	$\langle \Delta H \rangle$	$\langle \bar{F}_1 \rangle$	$\langle \bar{F}_2 \rangle$
CPU	1	0.01387	5.57109	5.64812
GPU	1	0.01219	5.63709	5.64014
CPU	4	0.00552	2.83996	2.87702
GPU	4	97.29787	23.18035	23.20843

Tab. 1: Dargestellt sind die Änderung des Hamiltonians, sowie die durchschnittliche Kraft pro Link gemittelt über alle erzeugten Konfigurationen, für verschiedene Werte der Anisotropie auf der CPU und GPU. Zu sehen ist, dass die Werte für $\gamma = 4.0$ auf der GPU deutlich größer sind, als in den anderen Fällen.

Flags so eingestellt, dass neue Konfigurationen im Metropolis-Akzeptanzschritt mit einer Wahrscheinlichkeit von 100% akzeptiert wurden. Dies hat den folgenden Hintergrund. Das Programm berechnet nach Punkt 6 in (4.18) die Änderung des Hamiltonians ΔH , sowie die durchschnittliche Kraft pro Link

$$\bar{F} = \frac{1}{V} \sum_{\mu, n} |\text{Tr}[F[U_\mu(n)]]|, \quad (5.1)$$

und gibt diese aus. Um eine Vergleichbarkeit dieser Ausgaben zu gewährleisten, muss die Stepsize identisch gewählt werden. Da dies ohne den oben erwähnten Flag auf der GPU jedoch eine Akzeptanzrate von 0% zur Folge hätte, würde sich die Konfiguration, und somit auch die berechnete Kraft, niemals ändern, was auch hier einen Vergleich sinnlos machen würde. Die so erhaltenen Daten wurden anschließend über alle Konfigurationen gemittelt. Die Ergebnisse sind in Tab.1 dargestellt.

Hier fällt nun sofort auf, dass im Fall $\gamma = 4.0$ auf der GPU das ΔH deutlich größer ist als in den drei anderen Fällen in denen korrekte Ergebnisse produziert werden. Da die Akzeptanzrate durch $p = \exp(-\Delta H)$ gegeben ist, erklärt dies auch warum die Stepsize in diesem Fall so klein gewählt werden musste. Weiterhin zeigt Tab.1 auch, dass die anfängliche Vermutung, die Fermion-Kraft werde zu groß abgeschätzt, korrekt zu sein scheint.

Um dies genauer nachvollziehen zu können, ist die Fermion-Kraft in A.1 einmal ausführlich hergeleitet worden. Insbesondere wurde hier auch die Anisotropie berücksichtigt. Ausgehend von der Fermion-Kraft

$$F[U, \phi] = \sum_{i=1}^8 T_i \nabla^i \left(S_G[U] + \phi^\dagger (DD^\dagger)^{-1} \phi \right) \quad (5.2)$$

kann man sich nun zwei Gründe vorstellen, warum diese falsch berechnet werden könnte. Zum einen kann die eigentlich Berechnung, also die Auswertung des Ausdrucks (5.2) an sich, unter Verwendung eines anisotropen Gitters falsch durchgeführt werden. Zum anderen könnten aber auch die zur Berechnung verwendeten Pseudo-Fermion-Felder oder die Anwendung des Dirac-Operators falsche Ergebnisse produzieren, was somit auch eine falsche Fermion-Kraft zur Folge hätte. Um beide Fälle zu überprüfen, wurden auf der GPU und CPU jeweils eine vorgegebene Konfiguration geladen und anschließend einmal

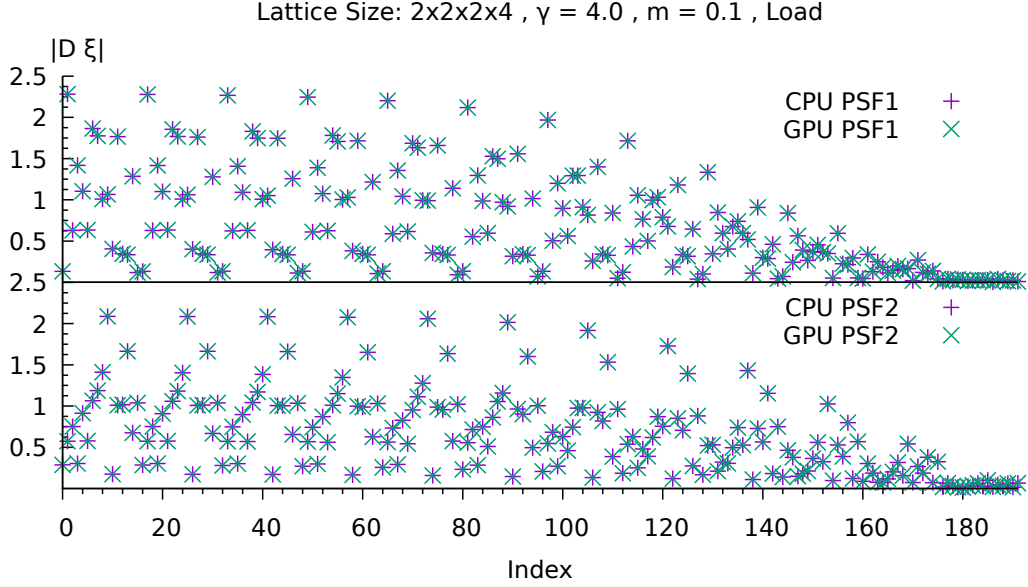


Abb. 5.6: Dargestellt ist die Norm des Vektors $D \cdot \xi_{e,j}$, wie er aus einer geladenen Konfiguration während des Leapfrog, auf der CPU und GPU berechnet wird. Der Index i setzt sich dabei folgendermaßen zusammen: $i = j \cdot 16 + e$, wobei $j \in \{0, 1, \dots, 11\}$ den betrachteten Grad der rationalen Approximation und $e \in \{0, 1, \dots, 15\}$ den Site-Index bezeichnet.

der Leapfrog-Algorithmus aufgerufen sowie die entsprechenden Größen pro Link ausgegeben. Dies beinhaltet die Norm der Kraft, sowie die Norm des Vektors $\chi_{e,j} = D\xi_{e,j}$. (Vergleiche dazu A.1.)

Abb. 5.6 zeigt, dass die berechneten Resultate für $\chi_{e,j}$ auf CPU und GPU für alle Ordnungen der rationalen Approximation und alle Sites übereinstimmen. Es sei noch angemerkt, dass auch die Vektoren φ_e und $\xi_{e,j}$ auf analoge Weise überprüft wurden, dies ist hier jedoch nicht explizit dargestellt. Da es sich bei $\chi_{e,j}$ um eine aus diesen abgeleitete Größe handelt, kann angenommen werden, dass auch diese korrekt berechnet werden. Zu überprüfen bleibt nun noch die Fermion-Kraft. In Abb. 5.7 sind einmal nur die Beiträge der zeitlichen Links dargestellt. Die Beiträge der räumlichen Links finden sich in Abb. B.2.

Hier lassen sich deutliche Abweichungen der Fermion-Kraft zwischen GPU und CPU erkennen. Man beachte vor allem die Größenunterschiede der Norm der Kraft zwischen den räumlichen und zeitlichen Links. Es handelt sich dabei in etwa um den gleichen Faktor den die Stepsize nach unten korrigiert werden musste. Dies bedeutet, dass offenbar in der Routine zur Berechnung der Fermion-Kraft die Anisotropie nicht korrekt eingeht. Innerhalb des RHMC-Algorithmus wird die Anisotropie nun größtenteils indirekt über die modifizierten Link-Variablen berücksichtigt (vergleiche dazu C.1). Dies scheint in Funktionen, wie dem Multishift-Solver oder dem Conjugate Gradient auch hervorragend zu funktionieren. Bei der Berechnung der Kraft muss jedoch offenbar anders verfahren werden. Betrachtet man die in A.1 berechnete Fermion-Kraft

$$F[U] = -i \frac{\gamma^{\delta_{\mu,0}} \eta_{\mu}(k)}{2} \sum_{j=1}^d \alpha_j (B - C)_{TA} \quad (5.3)$$

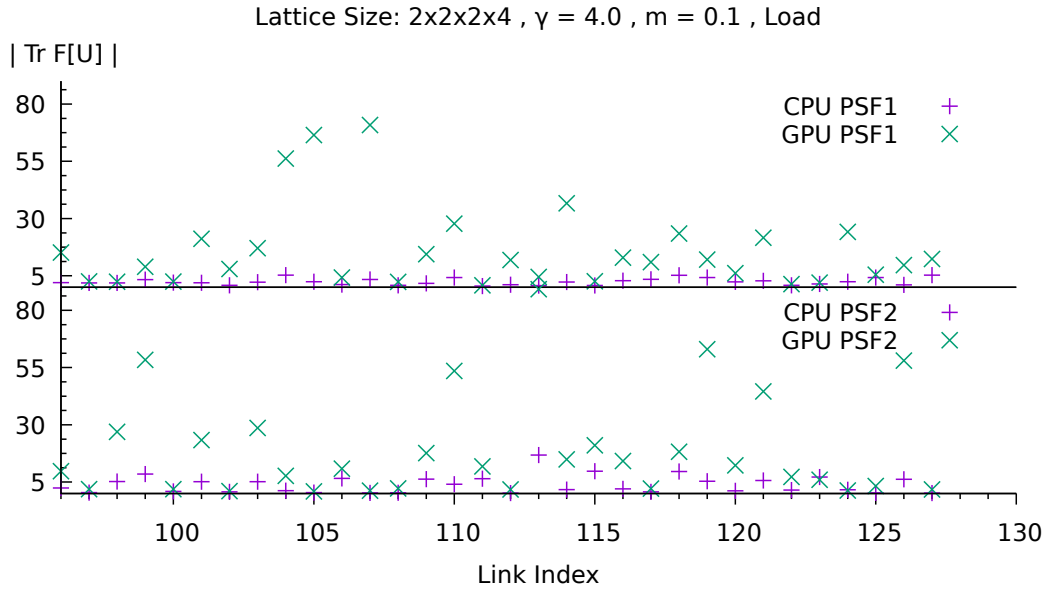


Abb. 5.7: Dargestellt ist die Norm der Fermion-Kraft $F[U_\mu(n)]$, wie sie aus einer geladenen Konfiguration während des Leapfrog, auf der CPU und GPU berechnet wird, aufgetragen gegen den Link-Index. Abgebildet sind, der Übersichtlichkeit halber, nur die zeitlichen Links.

ist zu sehen, dass sich der Faktor γ hier komplett aus der Berechnung herausziehen lässt. Dies ist offenbar auch der korrekte Weg, die Anisotropie in die Berechnung mit einzubringen. So stellte sich heraus, dass der γ -Faktor zunächst aus den Links heraus multipliziert, anschließend die Kraft berechnet und letztlich wieder an diese heran multipliziert werden muss, um korrekte Resultate zu produzieren. Abb. 5.8 zeigt, dass sich so Übereinstimmungen zwischen Berechnungen auf der CPU und der GPU ergeben. Interessant ist allerdings, dass dies nur auf der GPU notwendig zu sein scheint, da die CPU von Anfang an korrekte Ergebnisse lieferte. Daher ist es wohl so, dass die, durch den γ -Faktor modifizierten, Link-Variablen mit einer für die GPU optimierten Funktion in Konflikt geraten. Der Verdacht fiel dabei auf die Berechnung des Tensor-Produktes in (A.19). Dies ist jedoch Spekulation und konnte aus zeitlichen Gründen nicht näher untersucht werden.

6 Simulationen und Ergebnisse

Dieser Abschnitt soll nun letztlich einen Überblick über die bisher durchgeführten Simulationen geben und die daraus gewonnenen Daten mit MDP-Daten vergleichen, um so zu zeigen, dass die Implementierung der Anisotropie in den Bielefelder-Code korrekt durchgeführt wurde. Leider ist die hier dargestellte Menge an Daten sehr begrenzt, da über einen längeren Zeitraum, bis zur Fertigstellung dieser Arbeit, keine Rechenzeit auf dem Bielefelder Cluster zur Verfügung stand. Dies führte leider dazu, dass das ursprüngliche Ziel, die Vermessung der Phasengrenze in der Ebene (T, β) nicht erreicht werden konnte. Hierauf wird in Abschnitt 7 nochmal ausführlicher eingegangen.

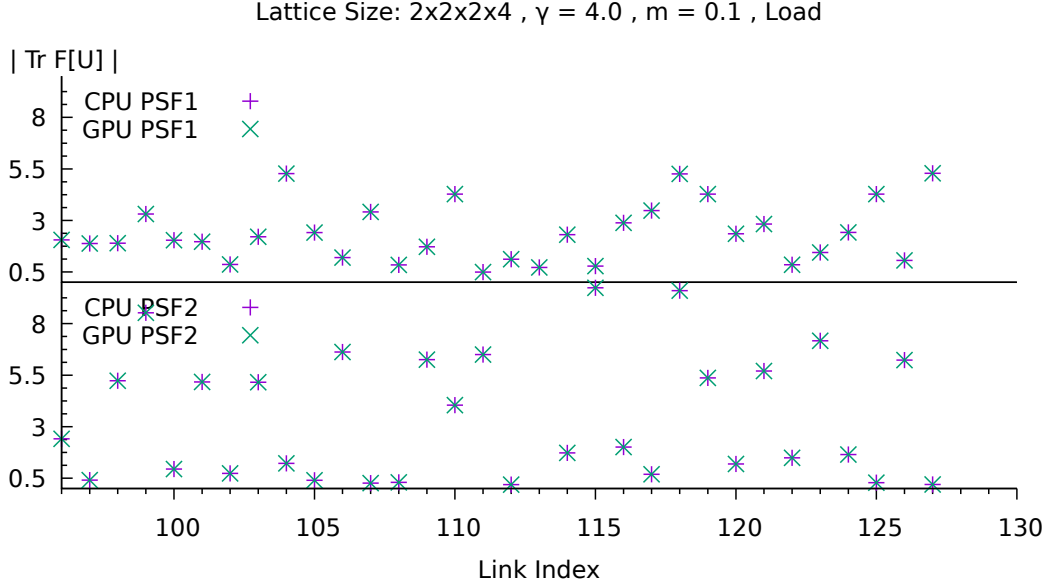


Abb. 5.8: Dargestellt ist die Norm der Fermion-Kraft $F[U_\mu(n)]$, wie sie aus einer geladenen Konfiguration während des Leapfrog, auf der CPU und GPU berechnet wird, aufgetragen gegen den Link-Index. Abgebildet sind nur die zeitlichen Links. Hier zeigen sich nach den besprochenen Änderungen des Codes exakte Übereinstimmungen.

6.1 Der Polyakov-Loop

Begonnen werden soll mit dem Polyakov-Loop. Dieser ist dabei definiert durch

$$P(\mathbf{n}) = \text{Tr} \left[\prod_{j=0}^{N_T-1} U_4(\mathbf{n}, j) \right], \quad (6.1)$$

also als Spur über das zeitgeordnete Produkt der Link-Variablen in zeitlicher Richtung ausgehend vom Gitterpunkt $\mathbf{n}$. Durch die periodischen Randbedingungen der Eichfelder in zeitlicher Richtung handelt es sich bei dem Produkt innerhalb der Spur in (6.1) um eine geschlossene Schleife von Link-Variablen, wodurch der Polyakov-Loop an sich Eichinvariant ist. Der Polyakov-Loop ist dabei von Bedeutung, da er im Falle der reinen Eichtheorie den Ordnungsparameter für den Phasenübergang zum Deconfinement darstellt. Dies liegt daran, dass der Korrelator $\langle P(\mathbf{m})P(\mathbf{n})^\dagger \rangle$ mit der freien Energie eines statischen Quark-Antiquark Paares, und somit in erster Näherung mit dem Potential, über

$$\langle P(\mathbf{m})P(\mathbf{n})^\dagger \rangle = e^{-a N_T F_{\bar{q}q}(a|\mathbf{m}-\mathbf{n}|)} \propto e^{-a N_T V(a|\mathbf{m}-\mathbf{n}|)} + \mathcal{O}(e^{-a N_T \Delta E}) \quad (6.2)$$

zusammenhängt. Im Grenzfall großer Abstände ist dabei zu erwarten, dass der Korrelator faktorisiert und die Beiträge höherer Ordnungen unterdrückt werden

$$\lim_{a|\mathbf{m}-\mathbf{n}| \rightarrow \infty} \langle P(\mathbf{m})P(\mathbf{n})^\dagger \rangle = \langle P(\mathbf{m}) \rangle \langle P(\mathbf{n})^\dagger \rangle = |\langle P \rangle|^2 \quad (6.3)$$

wobei hier aufgrund der Translationsinvarianz des Korrelators das räumliche Mittel des Polyakov-Loops

$$P = \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{m}} P(\mathbf{m}) \quad (6.4)$$

verwendet wurde. Hieran ist nun zu sehen, dass im Falle eines unbegrenzt mit dem Abstand wachsendem Potentials der Polyakov-Loop verschwindet. In diesem Fall ($\langle P \rangle = 0$) liegt somit Confinement vor. Andersherum ist im Falle eines mit großen Abständen verschwindenden Potentials mit einem nicht verschwindendem Polyakov-Loop zu rechnen, so dass in diesem Falle davon ausgegangen werden kann, dass kein Confinement vorliegt.[9]

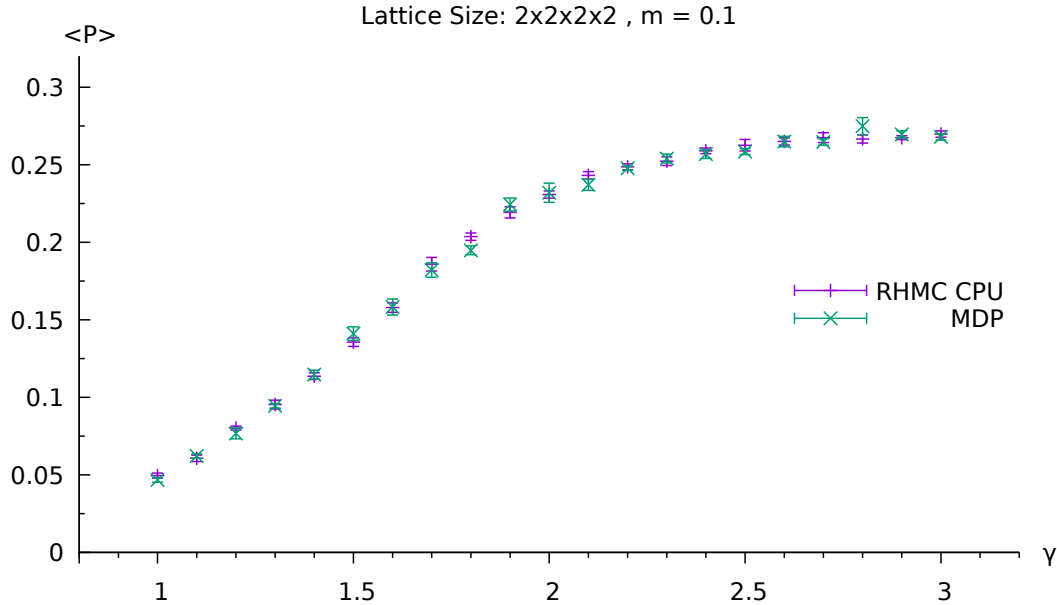


Abb. 6.1: Der Polyakov-Loop in Abhängigkeit von der Anisotropie γ bei festgehaltener Quark-Masse $m = 0.1$ auf einem Gitter der Größe 2^4 . Zu sehen sind die, mit dem RHMC erzeugten, Daten im Vergleich mit MDP-Daten.

Eine andere interessante Möglichkeit den Polyakov-Loop zu interpretieren ist ihn mit einer spontan gebrochenen Zentrums-Symmetrie in Verbindung zu bringen. Da die reine Eichwirkung invariant unter Z_3 -Transformationen der Link-Variablen ist, der Polyakov-Loop jedoch nicht, signalisiert ein nicht verschwindender Polyakov-Loop eine spontane Brechung dieser Symmetrie in der Deconfinement Phase. Da dynamische Fermionen die Z_3 -Symmetrie explizit brechen, stellt der Polyakov-Loop jedoch bei endlicher Quark-Masse keinen Ordnungsparameter mehr dar. Jedoch kann das Verhalten des Polyakov-Loops auch in diesem Bereich Hinweise auf einen Phasenübergang geben.

Abb. 6.1 zeigt den Polyakov-Loop auf einem kleinen Gitter der Größe 2^4 gemessen auf Eichfeldkonfigurationen die jeweils mit dem RHMC-, sowie MDP-Algorithmus erzeugt wurden. Zu sehen ist erst einmal, dass die erzeugten Daten innerhalb der Fehler übereinstimmen, was ein weiterer Beleg für die korrekte Implementierung und Berücksichtigung der Anisotropie darstellt.

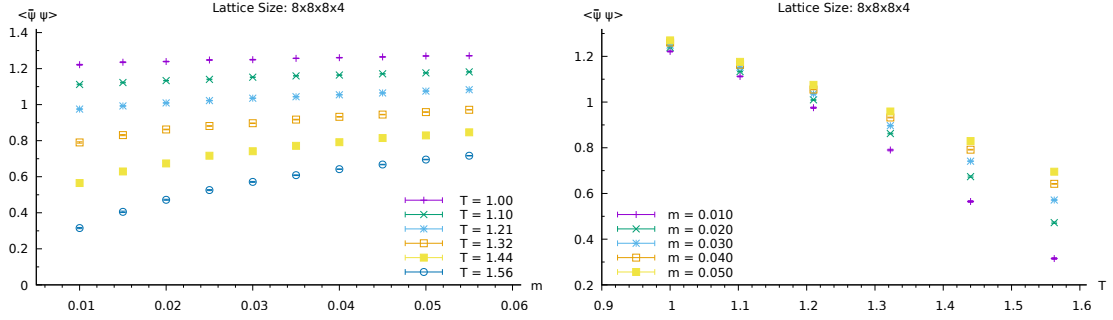


Abb. 6.2: Das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Quark-Masse für verschiedene Temperaturen (links), sowie in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Massen (rechts) auf einem $8^3 \times 4$ -Gitter.

6.2 Das chirale Kondensat

In diesem Abschnitt sollen die bisherigen Messungen des chiralen Kondensats dargestellt und diskutiert werden. Alle nachfolgenden Daten beschränken sich dabei jedoch auf den Fall $\beta = 0.0$, da aus den oben genannten Gründen keine Messungen mehr bei $\beta \neq 0$ möglich waren. Gemessen wurde das chirale Kondensat auf drei Gittern der Größe $8^3 \times 4$, $12^3 \times 4$ und $16^3 \times 4$. Ein Vergleich mit den MDP-Daten findet sich in Abb. B.4. Hier ist deutlich zu sehen, dass die Daten innerhalb der Fehler übereinstimmen und somit die Messung des chiralen Kondensats ebenfalls korrekt durchgeführt wurde.

In Abb. 6.2 ist das chirale Kondensat weiterhin als Funktion der Quark-Masse für das kleinste Gitter-Volumen aufgetragen. Die Grafiken für die beiden anderen Volumina finden sich in Abschnitt B.2. Es ist gut zu erkennen, dass sich das Kondensat bei Temperaturen, die erwartungsgemäß deutlich unterhalb der kritischen Temperatur liegen, im dargestellten Massenbereich kaum ändert. Dies weist darauf hin, dass die Massen hier noch nicht so klein gewählt sind, als das man sich im ε -Regime befände und das Kondensat aufgrund von Finite Size Effekten gegen Null läuft. Das solche Effekte bei den vorliegenden Gittern nur schwach ausgeprägt sind, zeigt sich auch in den äußerst geringen Abweichungen der Daten auf den verschiedenen Gittern. Bei höheren Temperaturen hingegen, beginnt das Kondensat mit sinkender Masse stärker abzufallen, was eine Annäherung an die kritische Temperatur anzeigt und so zu erwarten ist, dass dieses beginnt im Grenzfall verschwindender Masse gegen Null zu laufen. Dies scheint bei Betrachtung von Abb. 6.2 im Falle $T = 1.56$ zumindest bei einer simplen Extrapolation der Fall zu sein.

Dieses Verhalten ist deutlicher zu sehen, wenn das chirale Kondensat für mehrere Massen gegen die Anisotropie aufgetragen wird. Dies ist in dem rechten Teil von Abb. 6.2 gemacht worden. So zeigt sich bei niedrigeren Massen eine deutlich stärkerer Abfall in Abhängigkeit von der Anisotropie. Hier ist zu erwarten, dass sich das chirale Kondensat mit kleineren Massen deutlich rapider einem Wert von Null annähert und im Grenzfall $m_q \rightarrow 0$ zu einer nicht analytischen Funktion im Punkt γ_{pc} wird, ähnlich wie im Falle der Magnetisierung eines Ferromagneten an der Curie-Temperatur. Dies wäre deutlicher zu sehen, wenn noch etwas größere Werte für γ , sowie vielleicht eine etwas kleinere Masse, simuliert worden wären. Allerdings waren Simulationen bei kleineren Massen auf den großen Gittern bereits so teuer, dass in der vorhandenen Zeit nicht ausreichend Statistik generiert werden konnte.

6.3 Die disconnected Susceptibility

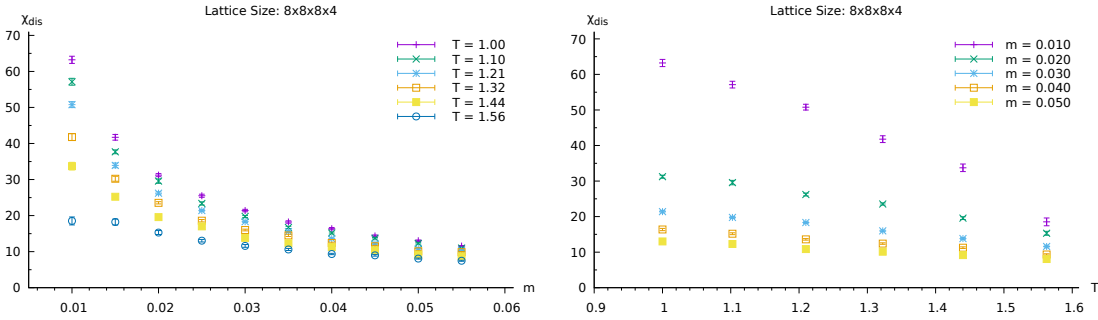


Abb. 6.3: Die disconnected Susceptibility in Abhängigkeit von der Quark-Masse für verschiedene Temperaturen (links), sowie in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Massen (rechts) auf einem $8^3 \times 4$ -Gitter.

Aus dem chiralen Kondensat lässt sich leicht die disconnected Susceptibility berechnen. Sie ist in analoger Weise, wie das Kondensat, in Abb. 6.3 abgebildet und ist ein Maß für die Schwankungsbreite des chiralen Kondensats, um den in Abb. 6.2 abgebildeten Mittelwert. Zu sehen ist im linken Teil der Abb. 6.3, dass diese für alle Temperaturen mit steigender Quark-Masse abnimmt. Dies hat den folgenden Hintergrund. Da sich das chirale Kondensat als Spur der inversen Fermion-Matrix ergibt und die Eigenwerte des Dirac-Operators aufgrund der γ_5 - und Anti-Hermitizität rein imaginär sind und in komplex konjugierten Paaren auftauchen, können die Eigenwerte der Fermion-Matrix in der Form $\tilde{\lambda}_{\pm n} = m_q \pm i\lambda_n$ geschrieben werden, womit für das chirale Kondensat

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle = \frac{1}{V} \langle \text{Tr} D^{-1} \rangle = \frac{1}{V} \left\langle \sum_n \frac{1}{m_q \pm i\lambda_n} \right\rangle \quad (6.5)$$

folgt. Hier hängen die λ_n natürlich von der gegebenen Eichfeldkonfiguration ab. Nun bedeutet ein Abfallen der disconnected Susceptibility, dass das chirale Kondensat auf einer gegebenen Konfiguration in geringerem Maße vom Erwartungswert abweicht. Betrachtet man (6.5) hat dies im Falle steigender Quark-Masse den Grund, dass der Realteil der Eigenwerte anfängt zu dominieren und somit die Fluktuationen in den Eigenwerten des Dirac-Operators unterdrückt. Umgekehrt bedeutet dies, dass die Eigenwerte der Fermion-Matrix im Bereich kleiner Massen sehr stark fluktuieren. Dies ist ebenfalls der Grund dafür, warum die RHMC-Simulationen für kleine Massen sehr teuer werden, da Algorithmen zur Matrix Invertierung, wie der Conjugate Gradient und der Multishift Solver, in diesem Fall deutlich mehr Iterationen benötigen, um zu konvergieren.

In dem rechten Plot in Abb. 6.3 ist zusätzlich zu beobachten, dass die disconnected Susceptibility auch mit steigender Temperatur abnimmt. Dieses Verhalten ist, durch die Übereinstimmung der Daten in Abb. B.5, auch in den MDP-Daten vorhanden.

6.4 Die connected Susceptibility

Zusätzlich zum chiralen Kondensat und der disconnected Susceptibility wurde auch der connected Part der Suszeptibilität gemessen. Hier zeigen sich allerdings, wie Abb. B.6

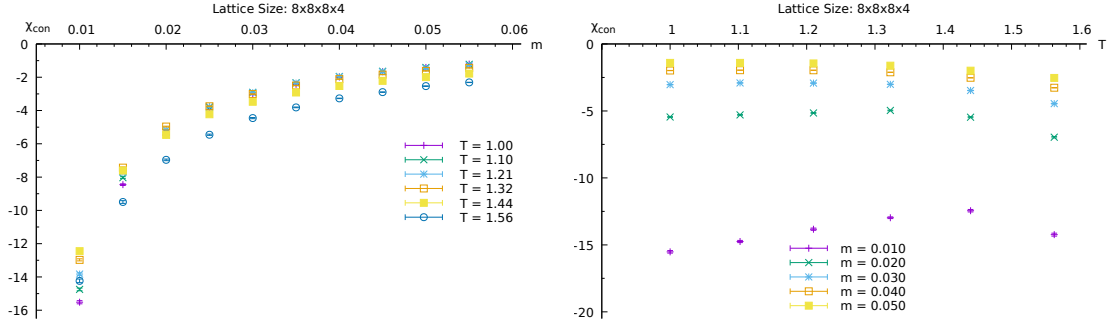


Abb. 6.4: Die connected Suszeptibilität in Abhängigkeit von der Quark-Masse für verschiedene Temperaturen (links), sowie in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Massen (rechts) auf einem $8^3 \times 4$ -Gitter.

zeigt, deutliche Abweichungen zwischen den RHMC- und MDP-Daten. Warum dies so ist, ist nicht ganz klar, kann prinzipiell allerdings nur zwei Gründe haben.

Zum einen besteht die Möglichkeit, dass die Messungen nicht korrekt durchgeführt werden. Allerdings erscheint dies eigentlich als eher unwahrscheinlich, da bereits gezeigt wurde, dass die Anisotropie bei der Messung des chiralen Kondensats korrekt berücksichtigt wird. Da sich die connected Suszeptibilität jedoch rekursiv aus der Messung des Kondensats ergibt, ist fraglich wieso die zweite Invertierung in (4.41) unter einer identischen Berücksichtigung der Anisotropie, falsche Ergebnisse produzieren soll. Zum anderen könnte es sein, dass es nicht ausreicht die Anisotropie auf die Selbe Weise, wie bei der Berechnung des chiralen Kondensats, einzubringen. In Abb. 6.4 ist zu sehen, dass χ_{con} zwar eine deutliche Abhängigkeit von der Quark-Masse aufweist, aber nahezu keine Abhängigkeit von der Temperatur. Dies scheint nach Abb. B.6 in den MDP-Daten anders zu sein. Zumindest in der vollen Theorie, also nahe dem Kontinuumslimites, ist jedoch bekannt, dass der connected Part der Suszeptibilität nur eine geringe Abhängigkeit von der Quark-Masse und der Temperatur aufweist und nicht zum singulären Verhalten der vollen Suszeptibilität beiträgt.[30] Wie sich dies jedoch in den Strong Coupling Bereich überträgt ist nicht bekannt, was einen direkten Vergleich erschwert.

Letztlich kann diese Frage nur durch weitere Vergleiche und Messungen aufgeklärt werden. So ist es zunächst nötig zu überprüfen, ob sich im isotropen Fall ($\gamma = 1.0$) Übereinstimmungen in den Daten ergeben. Ist dies nicht der Fall weist dies auf Fehler im Code hin. Ist dies jedoch der Fall könnten hier nicht triviale Abhängigkeiten von der Anisotropie, die in den vorliegenden Messungen nicht korrekt berücksichtigt wurden, eine Rolle spielen.

6.5 Die volle Suszeptibilität

Der Vollständigkeit halber soll hier noch die volle Suszeptibilität angegeben werden, auch wenn vermutlich zu erwarten ist, dass diese aufgrund der Abweichungen im connected Part nicht korrekt ist. Da bereits bekannt ist, dass der chirale Phasenübergang der SC-LQCD, bei verschwindendem chemischen Potential, zweiter Ordnung ist, würde man im rechten Teil der Abb. 6.5 eher einen Anstieg der Suszeptibilität mit steigender Anisotropie erwarten. Bzw. eine Peak-Struktur falls noch Daten bei höheren Werten für γ vorhanden wären, wie sie in [29] gefunden wurde.

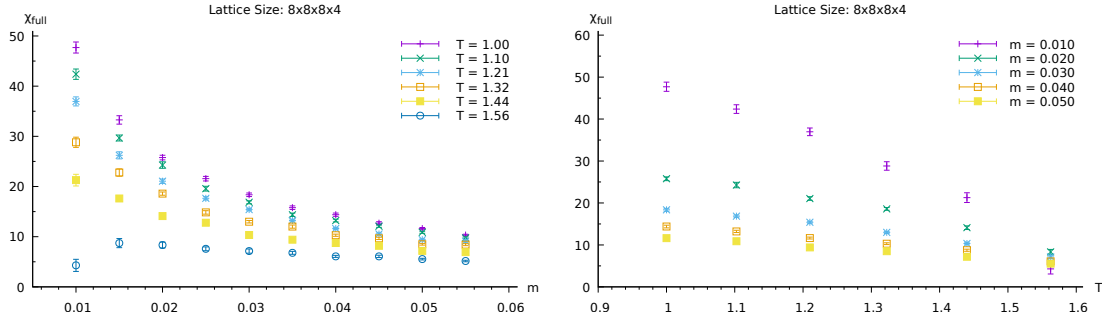


Abb. 6.5: Die volle Suszeptibilität in Abhängigkeit von der Quark-Masse für verschiedene Temperaturen (links), sowie in Abhängigkeit der Temperatur für verschiedene Massen (rechts) auf einem $8^3 \times 4$ -Gitter.

7 Zusammenfassung und Ausblick

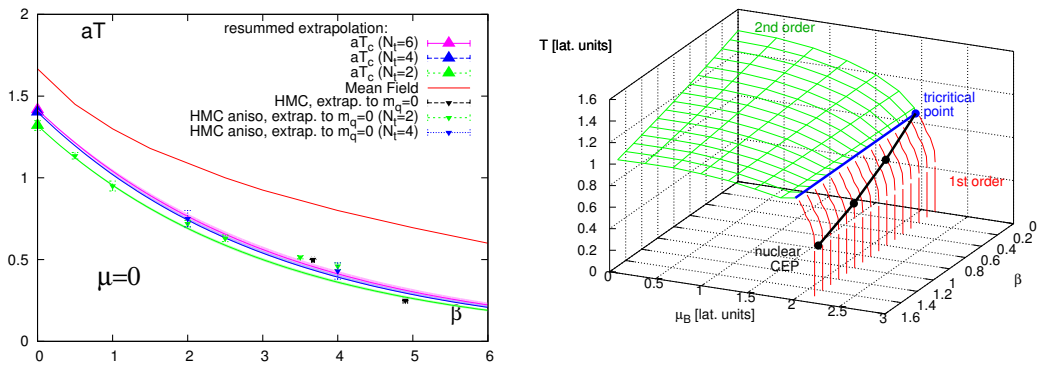


Abb. 7.1: Links: Die Phasengrenze des chiralen Phasenübergangs in der Ebene β - T bei $\mu = 0$, wie sie mittels Meanfield-, HMC- und SC-Methoden bestimmt wurde. Rechts: Das Phasendiagramm in Strong Coupling unter Hinzunahme von Korrekturen der $\mathcal{O}(\beta)$.

In den vergangenen Kapiteln wurde ausführlich dargestellt und erläutert wie der vorhandene Rational Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus für die Standard Wirkung mit Staggered Fermionen auf anisotrope Gitter verallgemeinert werden kann. Hierzu wurde zunächst der Algorithmus unter Berücksichtigung des Anisotropie-Faktors γ gründlich besprochen und anschließend erklärt an welchen Stellen der vorhandene Bielefelder GPU-Code modifiziert und erweitert werden musste. Da sich dies im parallelisierten Teil des Codes als nicht trivial herausstellte und hier einige Komplikationen auftraten, wurde hierauf besonders ausführlich eingegangen.

Verschiedene Crosschecks, wie z.B. die Messung des chiralen Kondensats und des Polyakov-Loops auf verschiedenen Gitter-Größen und der Vergleich mit MDP-Daten, zeigten schließlich, dass die durchgeführte Implementierung letztlich jedoch korrekt durchgeführt wurde. Lediglich der connected Part der chiralen Suszeptibilität zeigt Abweichungen, wobei nicht klar ist welchen Ursprung diese haben. Weiterhin ist es leider auch so, dass die vorhandene Datenmenge äußerst begrenzt ist, da keine Simulationen bei $\beta \neq 0$ durchgeführt werden konnten.

So war ursprünglich geplant die Phasengrenze des chiralen Phasenübergangs in der Ebene β - T mittels eines anisotropen HMC für $N_\tau = 4$ zu vermessen. Dies wurde bereits in [31] für $N_\tau = 2$ durchgeführt. Da diese Daten jedoch noch starke Finite Size Effekte aufweisen, sind Simulationen bei größeren Ausdehnungen des Gitters in zeitliche Richtung nötig. Abb. 7.1 zeigt hierbei die Phasengrenze bei $\mu = 0$, wie sie durch verschiedene Methoden wie Mean-Field Berechnungen, isotrope und anisotrope Hybrid-Monte-Carlo- sowie Strong Coupling-Simulationen ermittelt wurde. Zu sehen ist hier zunächst, dass die Resultate für $N_\tau = 2$ deutlich unterhalb der für $N_\tau = 4$ u. 6 liegen, was ein Ausdruck der eben erwähnten Finite Size Effekte ist. Weiterhin sind zwei Datenpunkte im Falle des isotropen HMC vorhanden, die noch einmal deutlich machen wieso eine Erweiterung auf anisotrope Gitter notwendig ist. Die Datenpunkte liegen dabei nach $aT = 1/N_\tau$ genau bei $aT = 0.5$ und $aT = 0.25$, wobei es aufgrund der Tatsache, dass N_τ eine natürliche Zahl sein muss, nicht möglich ist höhere Temperaturen zu simulieren. Es sind zwar Datenpunkte vorhanden, die mit einem anisotropen HMC bei $N_\tau = 4$ erzeugt wurden, allerdings nur wenige, die zusätzlich recht große Fehler aufweisen. Dies hat den Hintergrund, dass der hierfür verwendete Code nicht parallelisiert war, was die Simulationen somit sehr zeitaufwändig und teuer machte. Durch die in dieser Arbeit beschriebene Implementierung einer Anisotropie in ein parallelisiertes Programm ist es nun jedoch möglich hier deutlich präzisere Messungen durchzuführen, falls nötig auch auf noch größeren Gittern.

Diese höhere Präzision ist nötig, um besser abschätzen zu können in welchen Bereichen der inversen Eichkopplung Korrekturen zum Strong Coupling Limit, wie sie in [31] beschrieben werden, Gültigkeit besitzen. Hintergrund ist dabei herauszufinden wie sich das Strong Coupling Phasendiagramm unter Hinzunahme von Eichkorrekturen ändert und in welcher Weise seine Phasenstruktur in die der vollen QCD übergeht. Dies ist im linken Teil von Abb. 7.1 dargestellt. Zu sehen ist, dass die 2nd-Order Linie mit steigendem β beginnt abzuflachen, wobei die 1st-Order Linie nahezu unverändert bleibt. Weiterhin zeigt sich, dass der kritische Endpunkt der Nuclear-Transition, der in Strong Coupling mit dem chiralen Phasenübergang zusammenfällt, entlang der First-Order Linie zu kleineren Temperaturen wandert.[31] Eine wichtige Größe in diesem Zusammenhang, die durch HMC-Simulationen geliefert werden kann, ist die Krümmung der Phasengrenze in der β - T Ebene. Diese ergibt sich durch

$$\kappa = \frac{d aT_c(\beta)}{d\beta} . \quad (7.1)$$

Die nächsten Schritte wären somit zunächst weitere Messungen der connected Susceptibility, vorallem bei $\gamma = 1$, um so herauszufinden wie die obigen Abweichungen zustande kommen. Nachdem somit auch die volle Suszeptibilität korrekt bestimmt wird, kann ein Finite Size Scaling der in Kapitel 6 dargestellten Daten mit anschließender Extrapolation in den chiralen Limes durchgeführt werden, um so die kritische Temperatur T_c zu bestimmen, wobei vermutlich noch Datenpunkte bei etwas höheren Temperaturen benötigt werden. Dieses Vorgehen wird anschließend für verschiedene Werte von β wiederholt, wodurch sich die Phasengrenze in Abb. 7.1 ergibt.

Leider war es nicht mehr möglich diese Schritte im Rahmen dieser Masterarbeit durchzuführen, da der Bielefelder GPU-Cluster über einen längeren Zeitraum abgestellt wurde und somit keine Rechenzeit verfügbar war. Ich hoffe jedoch dies noch nachholen zu können.

Literatur

- [1] Thomas DeGrand, Carleton DeTar: *Lattice Methods for Quantum Chromodynamics*. World Scientific Publishing Company, 2006.
- [2] Steven Weinberg: *The Quantum Theory of Fields Volume 2*. Cambridge University Press, 2014.
- [3] Michael E. Peskin, Daniel V. Schroeder: *An Introduction to Quantum Field Theory*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1994.
- [4] Richard P. Feynman, Albert Hibbs: *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [5] H.B. Nielson, M Ninomiya (1981): *A no-go theorem for regularizing chiral fermions*. In Phys. Lett. B 105, S.219-223.
- [6] http://www.gauss-centre.eu/ gauss-centre/EN/Projects/ElementaryParticlePhysics/2015/philipsen_PDNM.html?nn=1236240
last visited: 10.11.2018 17.00.
- [7] Helmut Satz: *Extreme States of Matter in strong Interaction Physics*. Springer, 2018.
- [8] Kenneth G. Wilson (1974): *Confinement of Quarks*. In: Physical Review D, 2445, S. 37.
- [9] C. Gattringer, C.B. Lang: *Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation*. Springer, 2010.
- [10] István Montvay, Gernot Münster: *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, 1994.
- [11] Jan Smit: *Introduction to Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, 2002.
- [12] Maarten F. L. Golterman, Jan Smit (1984): *Self-energy and flavor interpretation of staggered fermions*. Nucl Phys B245, 61-88.
- [13] Heinz J. Rothe: *Lattice Gauge Theories: An Introduction*. World Scientific Publishing 2005.
- [14] Tom Lancaster, Stephen J. Blundell: *Quantum Field Theory for the Gifted Amateur*. Oxford, 2014.
- [15] David Griffiths: *Introduction to Elementary Particles*. WILEY-VCH, 2008.
- [16] Claudio Bonati, Guido Cossu, Massimo D’Elia, Pietro Incardona (2012): *QCD Simulations with staggered fermions on GPUs*. Computer Physics Communications 183, 853-863.
- [17] Martin Gutknecht (2007): *A Brief Introduction to Krylov Space Methods for Solving Linear Systems*. 10.1007/978-3-540-46375-7_5
- [18] Beat Jegerlehner (1996): *Krylov space solvers for shifted linear systems*. arXiv:hep-lat/9612014 .
- [19] Frithjof Karsch (1981): *SU(N) Gauge Theory Couplings on Asymmetric Lattices*. Nuclear Physics B205 [FS5] 285-300.

- [20] Göran Fäldt, Bengt Petersson (1986): *Strong Coupling Expansion of Lattice Gauge Theories at finite Temperature*. Nuclear Physics B265, 197-222.
- [21] Philippe de Forcrand, Wolfgang Unger, Helvio Vairinhos (2017): *Strong-Coupling Lattice QCD on Anisotropic Lattices*. Phys. Rev. D 97, 034512 (2018).
- [22] Michael Fromm (2010): *Lattice QCD at strong coupling: Thermodynamics and nuclear physics*. Dissertation, ETH Zürich, Zürich Switzerland (2010).
- [23] Paul H. Ginsparg and Kenneth G. Wilson (1982): *A remnant of chiral symmetry on the lattice*. Phys. Rev. D 25, 2649.
- [24] M. A. Clark, A. D. Kennedy (2004): *The RHMC Algorithm for 2 Flavours of Dynamical Staggered Fermions*. Nucl. Phys. B 129 130, 850-852.
- [25] A. D. Kennedy (2005): *Algorithms for Lattice QCD with Dynamical Fermions*. Nucl. Phys. B140, 190-203.
- [26] Xiang-Quian Luo (1996): *Molecular Dynamics for full QCD simulations with an improved action*. Computer Physics Comm. 94, 119-127.
- [27] Daming Li (2018): *Calculation of Force in Lattice QCD*. arXiv:1808.02281 .
- [28] Shao-Jing Dong, Keh-Fei Liu (1993): *Stochastic estimation with Z_2 noise*. Phys. Lett. B328, 130-136.
- [29] G. Boyd, J. Fingberg, F. Karsch, L. Kärkkäinen, B. Petersson (1992): *Critical exponents of the chiral transition in strong coupling QCD*. Nucl. Phys. B376, 199-217.
- [30] HotQCD Collaboration (2014): *The QCD phase transition with physical-mass, chiral quarks*. Phys. Rev. Lett. arXiv:1402.5175v1 [hep-lat].
- [31] Ph de Forcrand, J. Langelage, O. Philipsen, W. Unger (2014): *Lattice QCD Phase Diagram In and Away from the Strong Coupling Limit*. Phys. Rev. Lett. 113, 152002.

A Herleitungen und weitere Rechnungen

In diesem Bereich des Appendix werden weiterführende Rechnungen und Herleitungen beschrieben, die aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht mit in den Hauptteil aufgenommen wurden.

A.1 Berechnung der Fermion-Kraft

Dieser Abschnitt beschäftigt sich im folgenden mit der Berechnung der Fermion-Kraft, wie sie während des Leapfrog-Updates der Eichfeldkonfiguration benötigt wird. Die Fermion-Kraft ist dabei definiert durch

$$F[U] = \sum_{i=1}^8 T_i \nabla^i \left(S_G[U] + \phi^\dagger (D D^\dagger)^{-1} \phi \right) \in \mathfrak{su}(3) . \quad (\text{A.1})$$

Hier bezeichnen die T_i die Generatoren der Eichgruppe $SU(3)$, die die zugehörige Lie-Algebra $\mathfrak{su}(3)$ aufspannen. Die Wirkung des Nabla-Operators auf eine Funktion $f(U)$ eines Gruppen-Elements U ist dabei definiert durch

$$\nabla^i f(U) = \frac{\partial f(U)}{\partial \omega^i} = \frac{\partial}{\partial \omega} f \left(e^{i\omega T_i} U \right) \Big|_{\omega=0} , \quad (\text{A.2})$$

wobei die ω^i die acht reellen Parameter bezeichnen, die nötig sind um ein Element der $SU(3)$ zu parametrisieren. Ausgehend von dieser Definition kann nun recht einfach der Anteil der Eichwirkung zur Fermion-Kraft berechnet werden.[26] So ergibt sich mit der Eichwirkung (3.9) die Ableitung nach einem spezifischen Link (n, μ) in Richtung T_i durch

$$\nabla^i S_G[U_\mu(n)] = \nabla^i \text{Tr} \left[U_\mu(n) A + A^\dagger U_\mu^\dagger(n) \right] = \text{Tr} \left[iT_i (U_\mu A - A^\dagger U^\dagger) \right] , \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \text{mit } A = \sum_{\mu \neq \nu} & (U_\nu(n + \hat{\mu}) U_{-\mu}(n + \hat{\mu} + \hat{\nu}) U_{-\nu}(n + \hat{\nu}) \\ & - U_{-\nu}(n + \hat{\mu}) U_{-\mu}(n + \hat{\mu} - \hat{\nu}) U_\nu(n - \hat{\nu})) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

den Staples, woraus die Kraft

$$F_G[U] = -\frac{\beta}{6} \sum_{i=1}^8 T_i \text{Tr} \left[iT_i (U A - A^\dagger U^\dagger) \right] = -\frac{\beta}{12} i (U A - A^\dagger U^\dagger) \quad (\text{A.5})$$

resultiert. Hier wurde im letzten Schritt verwendet, dass $i(U A - A^\dagger U^\dagger)$ spurlos und antihermitesch ist und sich somit als Linearkombination der Generatoren T_j schreiben lässt. Somit kann die Beziehung

$$\sum_j T_j \text{Tr} \left[T_j \sum_k c_k T_k \right] = \frac{1}{2} \sum_j c_j T_j \quad (\text{A.6})$$

verwendet werden.

Zur Berechnung des Beitrags der Pseudo-Fermionen werden zunächst einige Vorüberlegungen angestellt. So wird die folgende Formel benötigt

$$\frac{\partial M^{-1}}{\partial \omega} = -M^{-1} \left(\frac{\partial M}{\partial \omega} \right) M^{-1} \quad (\text{A.7})$$

und weiterhin verwendet, dass sich die Fermion-Matrix nach dem Schema

$$D = \begin{pmatrix} m\mathbb{1}_{ee} & B_{eo} \\ B_{oe} & m\mathbb{1}_{oo} \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

aufspalten lässt.[26] Hierbei werden die einzelnen Gitterpunkte in even-Sites und odd-Sites eingeteilt, je nachdem ob die Summe der in (3.1) definierten n_i gerade oder ungerade ist. Nummeriert man nun zuerst die geraden Gitterpunkte und anschließend die ungeraden durch, ergibt sich die obige Aufspaltung, da durch den kinetischen Term in (3.27) nur Fermion-Felder unterschiedlicher Parität und durch den Massenterm nur Felder gleicher Parität aneinander gekoppelt werden. Somit folgt nun für die Determinante der Fermion-Matrix

$$\det(D) = \det(m\mathbb{1}_{oo}) \det(m\mathbb{1}_{ee} - B_{eo}B_{oe}) = \det(m\mathbb{1}_{oo}) \det(D_{ee}) \quad (\text{A.9})$$

und

$$\det(DD^\dagger) = \det(m\mathbb{1}_{oo}m\mathbb{1}_{oo}^\dagger) \det(D_{ee}D_{ee}^\dagger) . \quad (\text{A.10})$$

Hier wurde

$$D_{ee} = m\mathbb{1}_{ee} - B_{eo}B_{oe} \quad (\text{A.11})$$

gesetzt. Da die erste Determinante hier nur eine Konstante darstellt, kann diese bei der Berechnung von Observablen im Pfadintegral vernachlässigt werden. In Kombination mit (4.34) folgt dann

$$\begin{aligned} \det(DD^\dagger)^{n_f/8} &\propto \det(D_{ee}D_{ee}^\dagger) \approx \det(r(D_{ee}D_{ee}^\dagger)) \\ &\propto \int d\phi_e^\dagger d\phi_e \exp \left(-\phi_e^\dagger r \left(D_{ee}D_{ee}^\dagger \right)^{-1} \phi_e \right) \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Wodurch mit (4.33) für den Beitrag eines spezifischen Links zur Fermion-Kraft folgt

$$\begin{aligned} F[U] &= \sum_{i=1}^8 T_i \nabla^i \left[\phi_e^\dagger \left(\alpha_0 + \sum_{j=1}^d \frac{\alpha_j}{D_{ee}D_{ee}^\dagger + \beta_j} \right) \phi_e \right] \\ &= \sum_{i=1}^8 T_i \nabla^i \left[\phi_e^\dagger \left(\alpha_0 + \sum_{j=1}^d \alpha_j \left(D_{ee}D_{ee}^\dagger + \beta_j \right)^{-1} \right) \phi_e \right] \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Unter Verwendung von (A.7) ergibt sich

$$\begin{aligned}
&= - \sum_{i=1}^8 T_i \left\{ \sum_{j=1}^d \alpha_j \phi_e^\dagger (D_{ee} D_{ee}^\dagger + \beta_j)^{-1} [\nabla^i (D_{ee} D_{ee}^\dagger + \beta_j)] (D_{ee} D_{ee}^\dagger + \beta_j)^{-1} \phi_e \right\} \\
&= - \sum_{i=1}^8 T_i \left\{ \sum_{j=1}^d \alpha_j \xi_{e,j}^\dagger [\nabla^i (D_{ee} D_{ee}^\dagger + \beta_j)] \xi_{e,j} \right\} \\
&= - \sum_{i=1}^8 T_i \left\{ \sum_{j=1}^d \alpha_j (\xi_{e,j}^\dagger \nabla^i D_{ee}^\dagger \chi_{e,j} + \chi_{e,j}^\dagger \nabla^i D_{ee} \xi_{e,j}) \right\} .
\end{aligned} \tag{A.14}$$

Wobei hier zuerst $\xi_j^e = (D_{ee} D_{ee}^\dagger + \beta_j)^{-1} \phi_e$ und im letzten Schritt $\chi_{e,j} = D_{ee} \xi_{e,j}$ definiert wurde. Die ξ -Felder können mit Hilfe eines Multishift Solvers aus den zuvor bereits ermittelten ϕ -Feldern berechnet werden. Gerade an dieser Stelle wird der Vorteil der even-odd-decomposition deutlich, da für diese Invertierung nur die halbe Dirac-Matrix benötigt wird. Dies liefert einen signifikanten Geschwindigkeitsvorteil. Ausgehend hiervon wird nun weiter (A.11) benutzt, sowie die Definition $\chi_{o,j} = D_{oe} \cdot \chi_{e,j}$ (analog für ξ)

$$\begin{aligned}
&= - \sum_{i=1}^8 T_i \left\{ \sum_{j=1}^d \alpha_j [\chi_{e,j}^\dagger (\nabla^i D_{eo}) D_{oe} \xi_{e,j} + \chi_{e,j}^\dagger D_{eo}^\dagger (\nabla^i D_{oe}) \xi_{e,j} \right. \\
&\quad \left. + \xi_{e,j}^\dagger (\nabla^i D_{eo}^\dagger) D_{oe} \chi_{e,j} + \xi_{e,j}^\dagger D_{eo}^\dagger (\nabla^i D_{oe}) \chi_{e,j}] \right\} \\
&= - \sum_{i=1}^8 T_i \left\{ \sum_{j=1}^d \alpha_j [\chi_{e,j}^\dagger (\nabla^i D_{eo}) \xi_{o,j} + \chi_{o,j}^\dagger (\nabla^i D_{oe}) \xi_{e,j} \right. \\
&\quad \left. + \xi_{e,j}^\dagger (\nabla^i D_{eo}^\dagger) \chi_{o,j} + \xi_{o,j}^\dagger (\nabla^i D_{oe}) \chi_{e,j}] \right\} \\
&= - \sum_{i=1}^8 T_i \left\{ \sum_{j=1}^d \alpha_j [\chi_j^\dagger (\nabla^i D) \xi_j + \xi_j^\dagger (\nabla^i D^\dagger) \chi_j] \right\} .
\end{aligned} \tag{A.15}$$

An dieser Stelle wird nun konkret die Ableitung des Dirac-Operators benötigt. Unter Verwendung von (3.27) sowie (A.2) findet man

$$\frac{\partial D(n|m)}{\partial \omega_\mu^i(k)} = \frac{i}{2} \eta_\mu(n) \gamma^{\delta_{\mu,0}} T_i U_\mu(n) \delta_{m,n+\mu} \delta_{n,k} - \frac{i}{2} \eta_\mu(n) \gamma^{\delta_{\mu,0}} U_\mu(n-\mu)^\dagger T_i \delta_{m,n-\mu} \delta_{m,k} . \tag{A.16}$$

Einsetzen und ausführen der Matrix-Vektor Multiplikation liefert

$$F[U] = - \sum_{j=1}^d \alpha_j \left\{ \sum_{i=1}^8 \frac{T_i}{2} \gamma^{\delta_{\mu,0}} \eta_\mu(k) [\chi_k^{j\dagger} (i T_i U_\mu(k)) \xi_{k+\mu}^j - \chi_{k+\mu}^{j\dagger} (U_\mu(k)^\dagger i T_i) \xi_k^j + \text{h.c.}] \right\} \tag{A.17}$$

und mit Hilfe der Formel $Y^\dagger (i T_i) X = \text{Tr} [i T_i (X \otimes Y^\dagger)]$, wobei $\otimes$ das dyadische Produkt bezeichnet, lässt sich dies umformen zu [27]

$$F[U] = - \sum_{j=1}^d \alpha_j \left\{ \sum_{i=1}^8 \frac{T_i}{2} \gamma^{\delta_{\mu,0}} \eta_\mu(k) [\text{Tr} (i T_i (B - C)) + \text{h.c.}] \right\} \tag{A.18}$$

wobei

$$B = \left(U_\mu(k) \cdot \xi_{k+\mu}^j \right) \otimes \chi_k^{j\dagger} \quad \text{und} \quad C = \xi_k^j \otimes \left(\chi_{k+\mu}^{j\dagger} \cdot U_\mu(k)^\dagger \right) . \quad (\text{A.19})$$

Nun kann wieder (A.6) verwendet werden, um dies letztlich als

$$F[U] = -i \frac{\gamma^{\delta_{\mu,0}} \eta_\mu(k)}{2} \sum_{j=1}^d \alpha_j (B - C)_{TA} \quad (\text{A.20})$$

zu schreiben. Hierbei steht das Subskript TA für die spurlose und anti-hermitesche Form von $(B - A)$.

A.2 Herleitung des chiralen Kondensats und der chiralen Suszeptibilität

Hier soll einmal das chirale Kondensat, sowie die chirale Suszeptibilität, explizit aus den Zustandssummen für Hybrid-Monte-Carlo und Strong-Coupling QCD hergeleitet werden. Dazu wird im ersten Fall von der Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}[U] \det [D_{(u)}]^{\frac{1}{4}} \det [D_{(d)}]^{\frac{1}{4}} \det [D_{(s)}]^{\frac{1}{2}} e^{-S_G[U]} = \int \mathcal{D}[U] \det [D] e^{-S_G[U]} \quad (\text{A.21})$$

ausgegangen, wobei hier der in dieser Arbeit vorliegende Fall $m_l = m_s$ angenommen wurde. Mit Hilfe der Formel

$$\det [D] = e^{\text{Tr}[\ln D]} \quad (\text{A.22})$$

wird dies zu

$$Z = \int \mathcal{D}[U] \det [D] e^{-S_G[U]} = \int \mathcal{D}[U] e^{\text{Tr}[\ln D]} e^{-S_G[U]} . \quad (\text{A.23})$$

Das chirale Kondensat ist definiert durch

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln Z}{\partial m_q} = \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial Z}{\partial m_q} \quad (\text{A.24})$$

woraus sich mit (A.23) ergibt

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi} \psi \rangle &= \frac{1}{V \cdot Z} \int \mathcal{D}[U] \frac{\partial}{\partial m_q} e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} \\ &= \frac{1}{V \cdot Z} \int \mathcal{D}[U] \text{Tr} \left[D^{-1} \frac{\partial D}{\partial m_q} \right] e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} \\ &= \frac{1}{V \cdot Z} \int \mathcal{D}[U] \text{Tr} [D^{-1}] e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} \\ &= \frac{1}{V} \langle \text{Tr} D^{-1} \rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

Die chirale Suszeptibilität folgt hieraus durch

$$\chi = \frac{\partial \langle \bar{\psi} \psi \rangle}{\partial m_q} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial m_q^2} = -\frac{1}{V \cdot Z^2} \left(\frac{\partial}{\partial m_q} Z \right)^2 + \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial^2}{\partial m_q^2} Z. \quad (\text{A.26})$$

Der erste Term ist bis auf einen Volumenfaktor offensichtlich lediglich das Quadrat des chiralen Kondensats, woraus folgt, dass nur der zweite Term explizit berechnet werden muss. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial^2}{\partial m_q^2} Z &= \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial}{\partial m_q} \int \mathcal{D}[U] \text{Tr} [D^{-1}] e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} \\ &= \frac{1}{V \cdot Z} \left[\int \mathcal{D}[U] \text{Tr} [D^{-1}] \frac{\partial}{\partial m_q} e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} + \int \mathcal{D}[U] \text{Tr} \left[\frac{\partial D^{-1}}{\partial m_q} \right] e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} \right] \\ &= \frac{1}{V \cdot Z} \left[\int \mathcal{D}[U] \text{Tr} [D^{-1}]^2 e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} - \int \mathcal{D}[U] \text{Tr} \left[D^{-1} \frac{\partial D}{\partial m_q} D^{-1} \right] e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} \right] \\ &= \frac{1}{V \cdot Z} \left[\int \mathcal{D}[U] \text{Tr} [D^{-1}]^2 e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} - \int \mathcal{D}[U] \text{Tr} [D^{-2}] e^{\text{Tr}[\ln D] - S_G[U]} \right] \\ &= \frac{1}{V} \left\langle \left(\text{Tr} D^{-1} \right)^2 \right\rangle - \frac{1}{V} \left\langle \text{Tr} D^{-2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Insgesamt ist die chirale Suszeptibilität somit durch

$$\chi = \frac{1}{V} \left[\left\langle \left(\text{Tr} D^{-1} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \text{Tr} D^{-1} \right\rangle^2 - \left\langle \text{Tr} D^{-2} \right\rangle \right] = V \left[\left\langle \left(\bar{\psi} \psi \right)^2 \right\rangle - \left\langle \bar{\psi} \psi \right\rangle^2 \right] - \frac{1}{V} \left\langle \text{Tr} D^{-2} \right\rangle \quad (\text{A.28})$$

gegeben.

Im Falle der Zustandssumme für Strong-Coupling QCD

$$Z = \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \prod_n \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) \quad (\text{A.29})$$

ist zu beachten, dass die Quark-Felder vor dem Ausintegrieren der Eichfelder mit einem Faktor $\alpha = i\sqrt{2}$ reskaliert wurden. Dies hat zur Folge, dass das chirale Kondensat in diesem Fall durch

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle = \frac{1}{V} \frac{\partial \ln Z}{\partial (2m_q)} = \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial Z}{\partial (2m_q)} \quad (\text{A.30})$$

definiert werden muss. Einsetzen von (A.29) ergibt

$$\begin{aligned}
\langle \bar{\psi} \psi \rangle &= \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial}{\partial (2m_q)} \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \prod_n \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) \\
&= \frac{1}{V \cdot Z} \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \sum_m \frac{3! N_m}{N_m!} (2m_q)^{N_m - 1} \prod_{n \neq m} \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) \\
&= \frac{1}{V \cdot Z} \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \sum_m \frac{N_m}{2m_q} \prod_n \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) \\
&= \frac{1}{2m_q V} \left\langle \sum_m N_m \right\rangle = \frac{1}{2m_q} \langle n_M \rangle \quad , \tag{A.31}
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die Monomerdichte $n_M = N_M/V$, mit N_M der Gesamtzahl an Monomeren, definiert wurde. Die chirale Suszeptibilität ist gegeben durch

$$\chi = \frac{\partial \langle \bar{\psi} \psi \rangle}{\partial (2m_q)} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial (2m_q)^2} = -\frac{1}{V \cdot Z^2} \left(\frac{\partial}{\partial (2m_q)} Z \right)^2 + \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial^2}{\partial (2m_q)^2} Z \quad , \tag{A.32}$$

wobei der erste Term wieder proportional zum Quadrat des chiralen Kondensats ist. Der zweite Term liefert

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial^2}{\partial (2m_q)^2} Z \\
&= \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial}{\partial (2m_q)} \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \sum_m \frac{N_m}{2m_q} \prod_n \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) \\
&= \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial}{\partial (2m_q)} \left[\frac{1}{2m_q} \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \sum_m N_m \prod_n \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) \right] \\
&= -\frac{1}{V \cdot Z} \frac{1}{(2m_q)^2} \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \sum_m N_m \prod_n \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) \\
&\quad + \frac{1}{V \cdot Z} \frac{\partial}{\partial (2m_q)} \sum_{\{k, N, l\}} \prod_{b=(n, \mu)} \frac{(3 - k_b)!}{3! k_b!} \gamma^{2k_b \delta_{0, \mu}} \left(\sum_m \frac{N_m}{2m_q} \right)^2 \prod_n \frac{3!}{N_n!} (2m_q)^{N_n} \prod_l w(l) \\
&= -\frac{1}{(2m_q)^2} \langle n_M \rangle + \frac{V}{(2m_q)^2} \langle (n_M)^2 \rangle \quad , \tag{A.33}
\end{aligned}$$

womit die volle Suszeptibilität gegeben ist durch

$$\chi = -\frac{1}{(2m_q)^2} \langle n_M \rangle + \frac{V}{(2m_q)^2} \langle (n_M)^2 \rangle + \frac{V}{(2m_q)^2} \langle n_M \rangle^2 \quad . \tag{A.34}$$

B Zusätzliche Messungen und Plots

In diesem Teil finden sich weitere Messungen und Plots, die nicht unmittelbar relevant sind oder aus Gründen der Übersicht nicht in den Hauptteil passten.

B.1 Weitere Crosschecks zur Fehlerbehebung

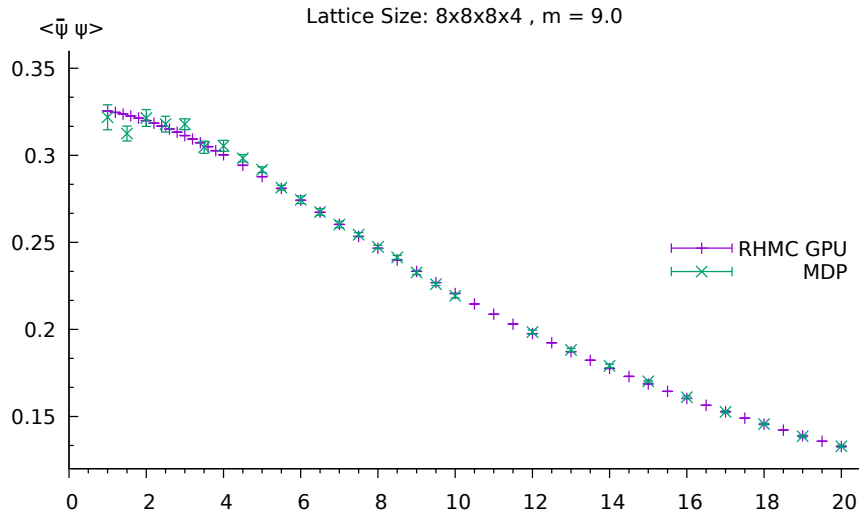


Abb. B.1: Das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Anisotropie γ , bei festgehaltener Quark-Masse $m = 9.0$, auf einem $8^3 \times 4$ -Gitter.

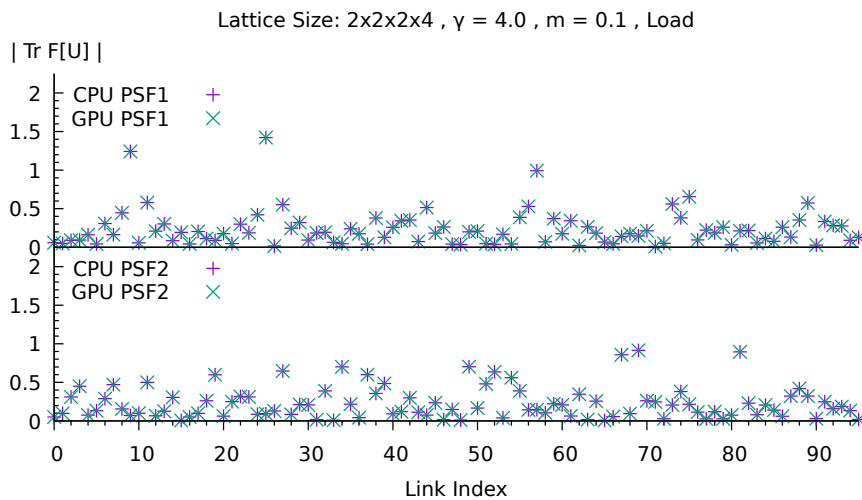


Abb. B.2: Dargestellt ist die Norm der Fermion-Kraft $F[U_\mu(n)]$, wie sie aus einer geladenen Konfiguration während des Leapfrog, auf der CPU und GPU berechnet wird, aufgetragen gegen den Link-Index. Dargestellt sind nur die räumlichen Links.

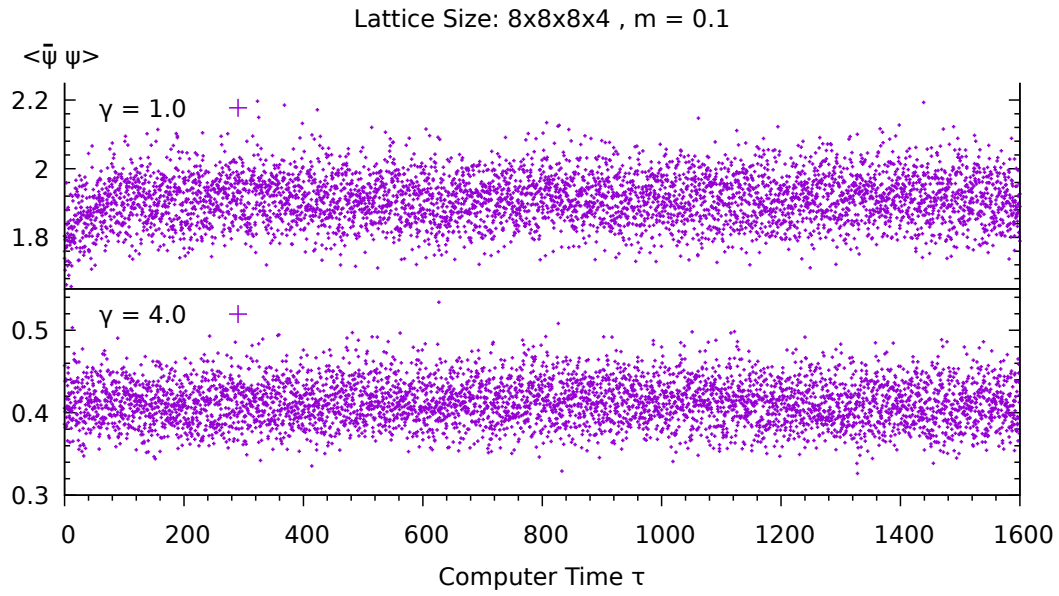


Abb. B.3: Time Histories der auf dem $8^3 \times 4$ -Gitter erzeugten Datenpunkte bei $m = 0.1$ und $\gamma = 4.0$.

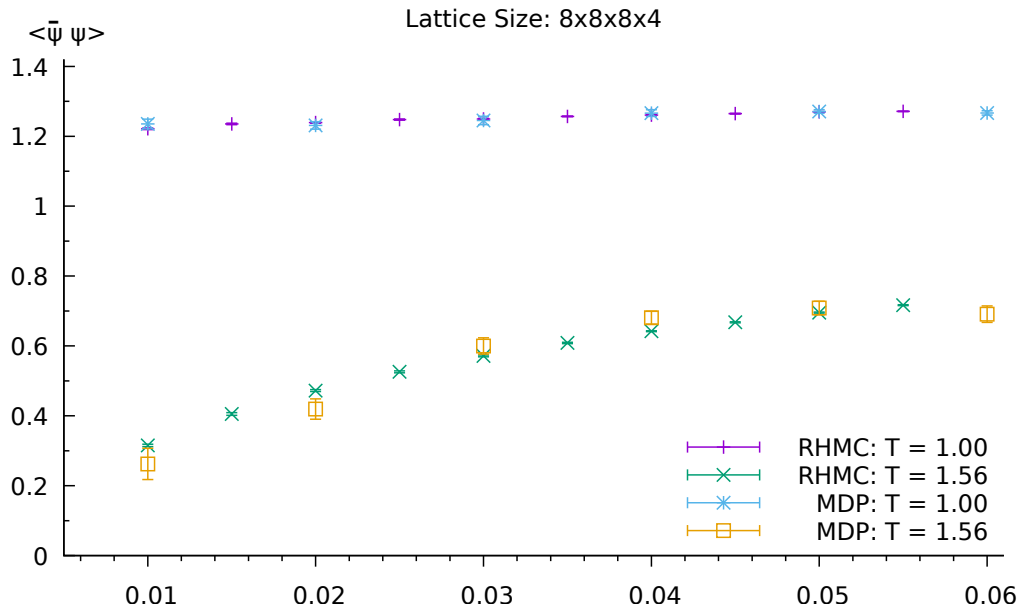


Abb. B.4: Vergleich des chiralen Kondensats zwischen RHMC und MDP-Daten in Abhängigkeit von der Masse, bei zwei verschiedenen Werten der Temperatur T .

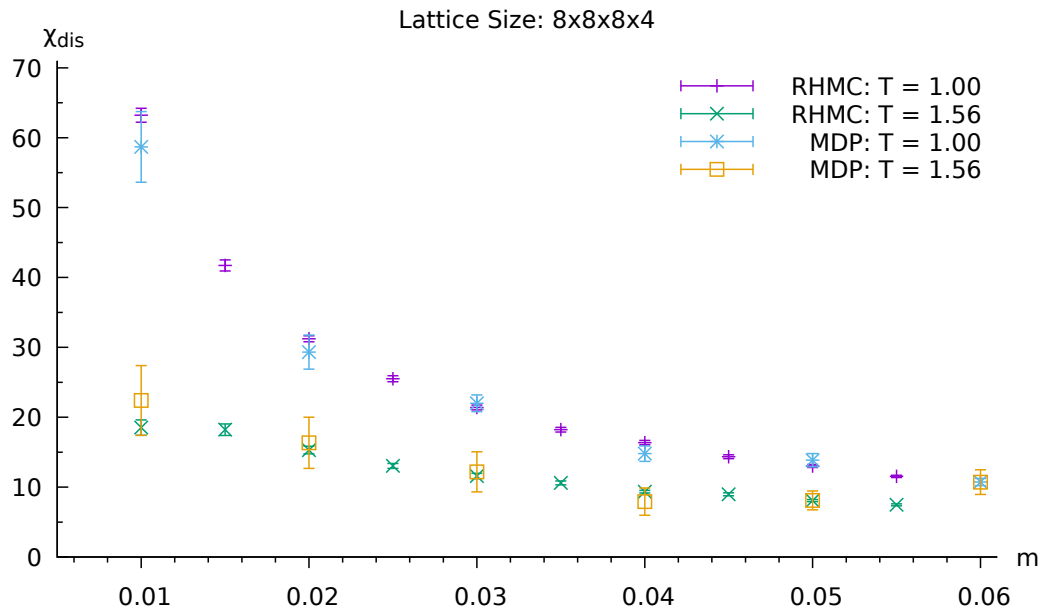


Abb. B.5: Vergleich der disconnected Susceptibility zwischen RHMC und MDP-Daten in Abhängigkeit von der Masse, bei zwei verschiedenen Werten der Temperatur T .

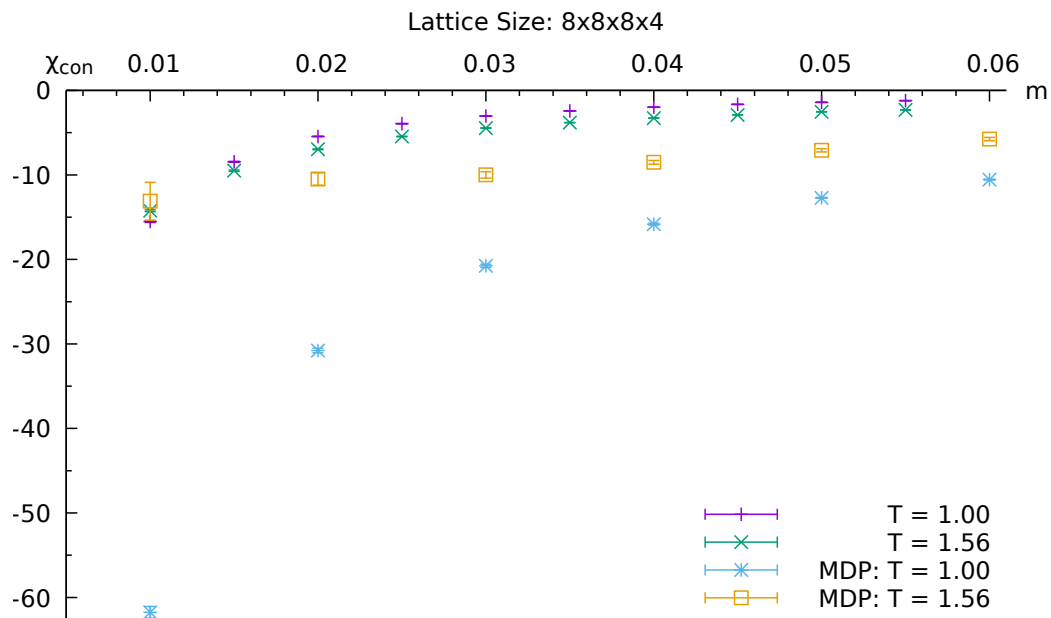


Abb. B.6: Vergleich der connected Susceptibility zwischen RHMC und MDP-Daten in Abhängigkeit von der Masse, bei zwei verschiedenen Werten der Temperatur T .

B.2 Messungen für die Gitter $12^3 \times 4$ und $16^3 \times 4$

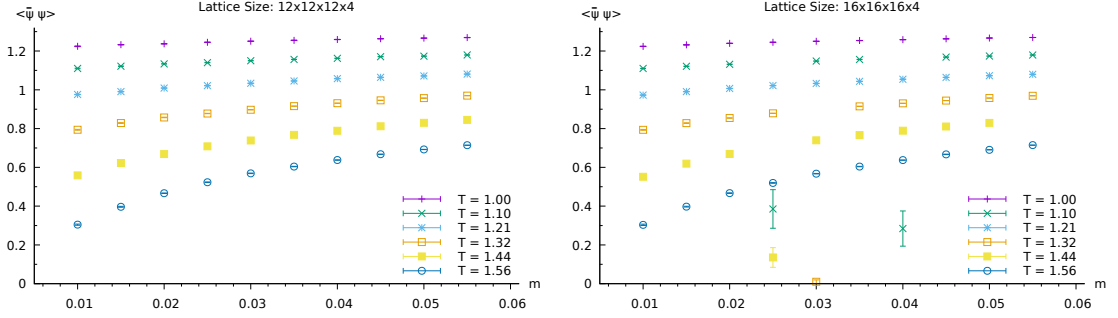


Abb. B.7: Das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Quark-Masse m für verschiedene Temperaturen auf einem $12^3 \times 4$ - und $16^3 \times 4$ -Gitter.

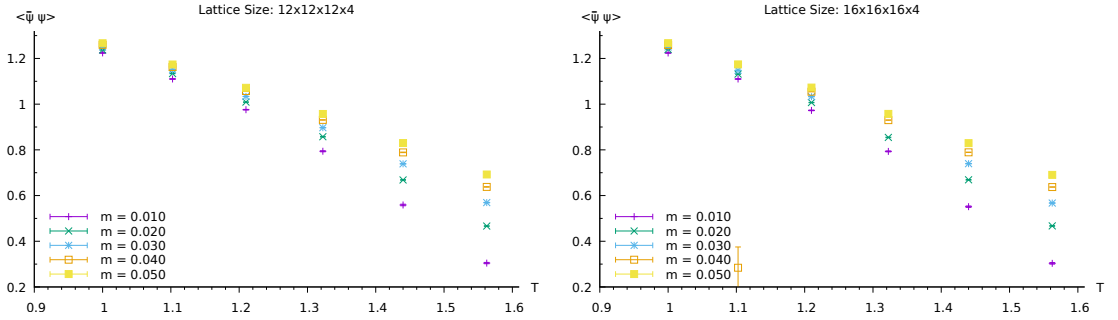


Abb. B.8: Das chirale Kondensat in Abhängigkeit von der Temperatur T für verschiedene Quark-Massen auf einem $12^3 \times 4$ - und $16^3 \times 4$ -Gitter.

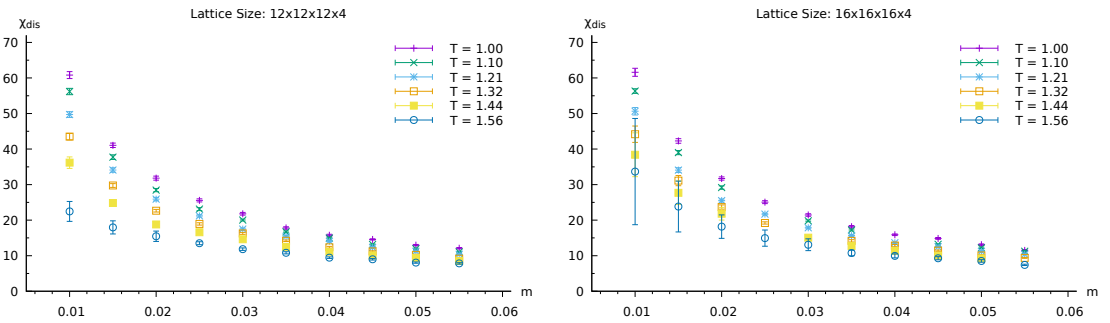


Abb. B.9: Die disconnected Susceptibility in Abhängigkeit von der Quark-Masse m für verschiedene Temperaturen auf einem $12^3 \times 4$ - und $16^3 \times 4$ -Gitter.

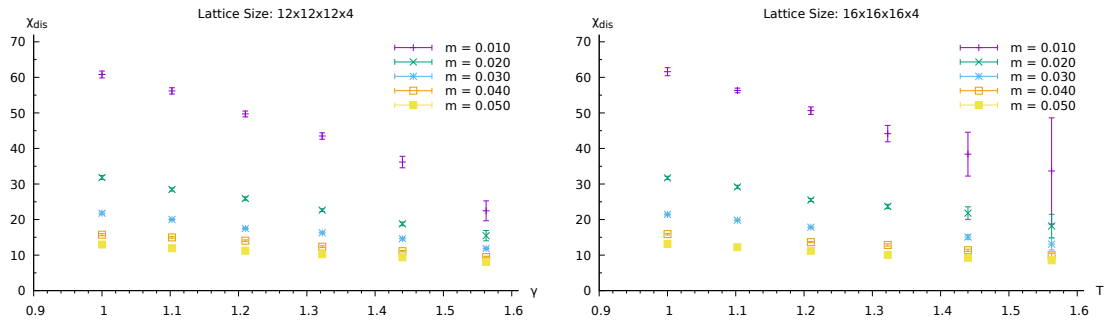


Abb. B.10: Die disconnected Susceptibility in Abhängigkeit von der Temperatur T für verschiedene Quark-Massen auf einem $12^3 \times 4$ - und $16^3 \times 4$ -Gitter.

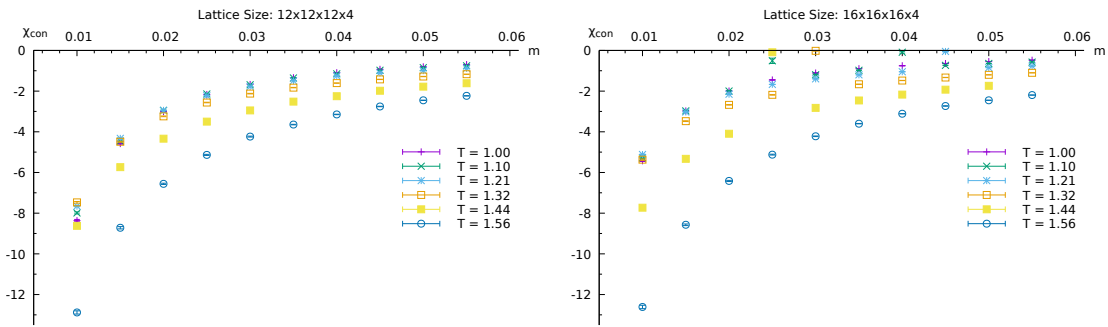


Abb. B.11: Die connected Susceptibility in Abhängigkeit von der Quark-Masse m für verschiedene Temperaturen auf einem $12^3 \times 4$ - und $16^3 \times 4$ -Gitter.

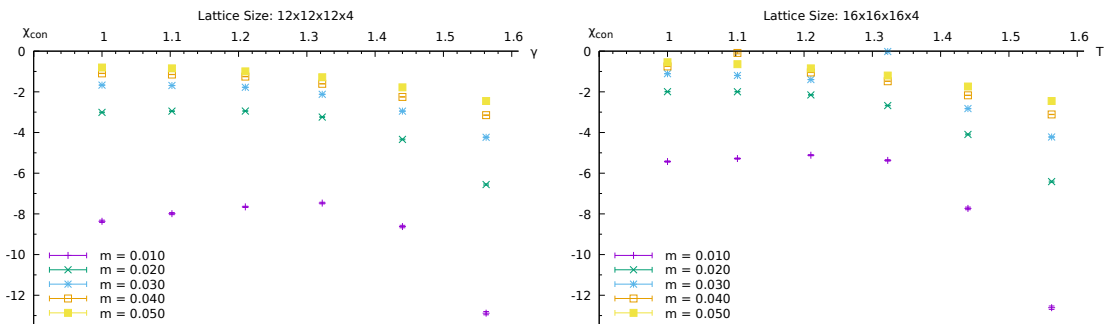


Abb. B.12: Die connected Susceptibility in Abhängigkeit von der Temperatur T für verschiedene Quark-Massen auf einem $12^3 \times 4$ - und $16^3 \times 4$ -Gitter.

C Code Ausschnitte

C.1 Anisotropie Implementierungen

Listing 2: Funktionen zum Einbringen des γ Faktors in die Eichkonfiguration

```

1 //put anisotropy to time-link gauge field
2 template<class floatT , class floatTlat , bool onDevice>
3 void gAction<floatT , floatTlat , onDevice >::setAniso(floatT
   aniso) const
4 {
5     GSU3arrayAcc<floatTlat> lat_acc = __lat->getAccessor();
6
7     if (onDevice) {
8
9         int elems = __lat->_vol4;
10        cudaError_t cudaErr =
            gaction_setAnisoKernel_Launch<floatTlat>(lat_acc , elems , aniso);
11
12        if (cudaErr)
13            throw CudaError("TEST: anisotropy Kernel error", cudaErr);
14
15    }
16    else {
17
18        int i_ind;
19        GIndexer<onDevice>* gind = __lat->gind;
20        GSU3<floatTlat> temp;
21
22
23        for ( register int tx=0; tx<__lat->_lx; tx++ )
24            for ( register int ty=0; ty<__lat->_ly; ty++ )
25                for ( register int tz=0; tz<__lat->_lz; tz++ )
26                    for ( register int tt=0; tt<__lat->_lt; tt++ ) {
27                        i_ind=gind->index(tx,ty,tz,tt,3);
28                        temp=aniso* lat_acc.getLink(i_ind); //operation*
                           defined in gsu3.h
29                        lat_acc.setLink(i_ind,temp);
30                    }
31    }
32 }
33
34 //take anisotropy out from time-link gauge field
35 template<class floatT , class floatTlat , bool onDevice>
36 void gAction<floatT , floatTlat , onDevice >::outAniso(floatT
   aniso) const
37 {
38     GSU3arrayAcc<floatTlat> lat_acc = __lat->getAccessor();
39
40     if (onDevice) {
41

```

```

42     int elems = _lat->_vol4;
43     cudaError_t cudaErr =
        gaction_outAnisoKernel_Launch<floatTlat>(_lat_acc, elems, aniso);
44
45     if (cudaErr)
46         throw CudaError("TEST: anisotropy Kernel error", cudaErr);
47
48 }
49 else {
50     int i_ind;
51     double invaniso = 1/aniso;
52
53     GIndexer<onDevice>* gind = _lat->gind;
54     GSU3<floatTlat> temp;
55
56
57     for ( register int tx=0; tx<_lat->_lx; tx++ )
58         for ( register int ty=0; ty<_lat->_ly; ty++ )
59             for ( register int tz=0; tz<_lat->_lz; tz++ )
60                 for ( register int tt=0; tt<_lat->_lt; tt++ ) {
61                     i_ind=gind->index(tx, ty, tz, tt, 3);
62                     temp=invaniso* lat_acc.getLink(i_ind);
63                     //operation* defined in gsu3.h
64                     lat_acc.setLink(i_ind, temp);
65                 }
66 }

```

Listing 3: CUDA-Kernel zum parallelen Einbringen des γ Faktors in die Eichkonfiguration

```

1  /* Kernel for multiplying gamma to the time link */
2  template<class floatTlat>
3  __global__ void
4  gaction_setAnisoKernel(GSU3arrayAcc<floatTlat> latacc, int
        elems, float aniso)
5  {
6      const int isite = blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x;
7
8      int tx, ty, tz, tt, i_ind;
9      if (isite >= elems)
10         return;
11
12     GSU3<floatTlat> temp;
13     GInd::de_site(isite, tx, ty, tz, tt);
14     i_ind=GInd::index(isite, 3);
15     temp=aniso* latacc.getLink(i_ind); /*operation defined in
        gsu3.h
16     latacc.setLink(i_ind, temp);
17 }
18
19 template<class floatTlat>

```

```

20  cudaError_t
    gaction_setAnisoKernel_Launch(GSU3arrayAcc<floatTlat>
    latacc, int elems, float aniso)
21  {
22      dim3 blockDim = DXXL_BLOCKSIZE;
23      dim3 gridDim = static_cast<int>(ceil(static_cast<float>
    (elems)
24                                          / static_cast<float>
    (blockDim.x)));
25
26      CUDA_TIME(gaction_setAnisoKernel <<< gridDim, blockDim >>>(
    latacc, elems, aniso)); //gridDim=the number of blocks and
    Blockdim= dimension of the block(individual threads)
27
28      cudaError_t cudaErr = cudaGetLastError();
29      if (cudaErr)
30          throw CudaError("TEST:gaction_setAnisoKernel_Launch Failed
    to launch kernel", cudaErr);
31
32      cudaError_t err = cudaThreadSynchronize();
33      if (err)
34          return err;
35
36      return err;
37  }
38
39  /* Kernel for taking out gamma from the time link */
40  template<class floatTlat>
41  __global__ void
42  gaction_outAnisoKernel(GSU3arrayAcc<floatTlat> latacc, int
    elems, float aniso)
43  {
44      const int isite = blockDim.x * blockIdx.x + threadIdx.x;
45
46      int tx, ty, tz, tt, i_ind;
47      double invaniso = 1/aniso;
48      if (isite >= elems)
49          return;
50      GSU3<floatTlat> temp;
51      GInd::de_site(isite, tx, ty, tz, tt);
52      i_ind=GInd::index(isite, 3);
53
54      temp=invaniso*latacc.getLink(i_ind); /*operation defined in
    gsu3.h
55      latacc.setLink(i_ind, temp);
56  }
57
58  template<class floatTlat>
59  cudaError_t
    gaction_outAnisoKernel_Launch(GSU3arrayAcc<floatTlat>
    latacc, int elems, float aniso)

```

```
60 {
61     dim3 blockDim = DXXL_BLOCKSIZE;
62     dim3 gridDim = static_cast<int>(ceilf(static_cast<float>(
        (elems)
63                                     / static_cast<float>(
        (blockDim.x))));
64
65     CUDA_TIME(gaction_outAnisoKernel <<< gridDim, blockDim >>>(
        latacc, elems, aniso)); //gridDim=the number of blocks and
        Blockdim= dimension of the block(indivuiual threads)
66
67     cudaError_t cudaErr = cudaGetLastError();
68     if (cudaErr)
69         throw CudaError("TEST:gaction_outAnisoKernel_Launch Failed
        to launch kernel", cudaErr);
70
71     cudaError_t err = cudaThreadSynchronize();
72     if (err)
73         return err;
74
75     return err;
76 }
```
