Universalität im Spektrum des Dirac-Operators

Maria Elisabetta Berbenni Bitsch

Vom Fachbereich Physik der Universität Kaiserslautern
zur Verleihung des akademischen Grades
„ Doktor der Naturwissenschaften “
genehmigte Dissertation

D 386

Betreuer: Prof. Dr. S. Meyer
Zweiter Berichterstatter: Prof. Dr. V. F. Müller

Datum der wissenschaftlichen Aussprache
12. Februar 1999

Zusammenfassung

Diese Dissertation ist ein Beitrag zur Untersuchung der Anwendbarkeit der Random-Matrix-Theorie (RMT) in der Quantenchromodynamik (QCD).
Untersucht werden die Fluktuationen der kleinen Eigenwerte des Dirac-Operators mit Kogut-Susskind-Fermionen und $SU_c(2)$-Eichfeldern. Diese werden mit Hilfe eines Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus erzeugt.
Die Universalität der Fluktuationen kleiner Eigenwerte, das heißt die Übereinstimmung der numerisch berechneten Spektren mit den Vorhersagen des chiralen Random-Matrix-Modells wird in dieser Arbeit nachgewiesen.
Die Bedeutung dieses Resultats liegt in der Allgemeinheit des Ansatzes, die QCD-Zustandssumme für ein endliches Volumen durch ein Random-Matrix-Modell zu approximieren.

Abstract

This thesis is a contribution to study the application of random-matrix theory (RMT) in quantum chromodynamics (QCD).
Fluctuations of the small eigenvalues of the Dirac operator with staggered fermions and $SU_c(2)$ gauge fields generated with the hybrid Monte Carlo algorithm are studied.
The universality of fluctuations of the small eigenvalues, i.e. the agreement of numerically computed spectra with predictions of the chiral random-matrix model is verified in this thesis.
The importance of this result rests on the universality of the approach to approximate the finite volume QCD partition function with a random-matrix model.

Inhaltsverzeichnis

In Zusammenhang mit dieser Arbeit entstanden folgende Publikationen:

- M.E. Berbenni Bitsch, A.P. Gottlob, S. Meyer, M. Pütz, *Can we do better than hybrid Monte Carlo?*, Nucl. Phys. **B53** (Proc. Suppl.) (1997) 965.
- M.E. Berbenni Bitsch, S. Meyer, A. Schäfer, J.J.M. Verbaarschot, T. Wettig, *Microscopic universality in the spectrum of the lattice Dirac operator*, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 1146.
- M.E. Berbenni Bitsch, S. Meyer, *The spectrum of the QCD Dirac operator and chiral symmetry*, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **63A-C** (1998) 814.
- M.E. Berbenni Bitsch, A.D. Jackson, S. Meyer, A. Schäfer, J.J.M. Verbaarschot, T. Wettig, *Random-matrix universality in the small-eigenvalue spectrum of the lattice Dirac operator*, Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) **63A-C** (1998) 820.
- M.E. Berbenni Bitsch, S. Meyer, T. Wettig, *Microscopic universality with dynamical fermions*, Phys. Rev. **D58** (1998) 071502.
- M.E. Berbenni-Bitsch, M. Göckeler, T. Guhr, A.D. Jackson, J.-Z. Ma, S. Meyer, A. Schäfer, H.A. Weidenmüller, T. Wettig, T. Wilke, *Crossover to non-universal microscopic spectral fluctuations in lattice gauge theory*, Phys. Lett. **B438** (1998) 14.
- M.E. Berbenni-Bitsch, M. Göckeler, S. Meyer, A. Schäfer, T. Wettig, *Universal and non-universal behavior in Dirac spectra* , hep-lat/9809058, submitted to Nucl. Phys. **B** (Proc. Suppl.) (1999).

Einleitung

Einige Eigenschaften der Hadronen wie beispielsweise die kleine Pionmasse und die Abwesenheit von Paritätsdoublets im Spektrum weisen sehr stark auf die spontane Brechung der chiralen Symmetrie hin. Ein teilweiser Einblick in diese nichtperturbativen Phänomene der Quantenchromodynamik (QCD) wurde mit Hilfe groß angelegter Gittersimulationen erreicht [1]. Eine Schwierigkeit hierbei ist, daß der Ordnungsparameter des chiralen Phasenübergangs – das chirale Kondensat – erst nach einer komplizierten Extrapolation erhalten werden kann: nämlich nach dem Übergang zum thermodynamischen, zum chiralen und zum Kontinuumslimes. Hinzu kommt, daß in der Nähe des chiralen Grenzwertes die Einbeziehung dynamischer Quarks durch Berücksichtigung der Fermionendeterminante den Rechenaufwand enorm erhöht. Diese Determinante läßt sich als Produkt der Eigenwerte des Dirac-Operators ausdrücken. Das macht eine detaillierte Untersuchung seines Spektrums zum besseren Verständnis des Einflusses dynamischer Fermionen auf die QCD unumgänglich. Weiterhin steht das chirale Kondensat in direkter Beziehung zu den kleinen Eigenwerten des Dirac-Operators und zwar durch die Banks-Casher-Relation [2]. Aus ihr folgert man, daß die mittlere Lage der kleinen Eigenwerte durch das chirale Kondensat bestimmt ist. Die Anwesenheit von Eichfeldern führt zu Fluktuationen der Eigenwerte um ihre mittlere Lage. Diese Fluktuationen beeinflussen die Fermiondeterminante. Ihre Untersuchung ist Gegenstand dieser Dissertation. Shuryak und Verbaarschot äußerten 1993 [3] die Vermutung, daß diese Fluktuationen universell sind. Das bedeutet, daß sie allein von bestimmten grundlegenden Symmetrien des Dirac-Operators abhängen und nicht von der detaillierten Dynamik der QCD. Die Fluktuationen der kleinsten Eigenwerte werden in diesem Fall durch analytische Funktionen beschrieben, die im Rahmen der einfacheren Random-Matrix-Theorie (RMT) berechnet werden können. Diese analytische Information ist nicht wie die Gittersimulationen auf endliche Volumina, endliche Quarkmassen und diskretisierte Raum-Zeit beschränkt und könnte somit bei den oben erwähnten Grenzprozeduren von Nutzen sein.

Die Random-Matrix-Theorie hat ihren Ursprung in der Kernphysik. Sie wurde in den fünfziger Jahren von Wigner eingeführt [4]. Die Grundidee war dabei folgende: Im Bereich niedriger Energien ist die Zustandsdichte $\rho(E)$ des Kernspektrums klein und man kann daher die Zustände mit Hilfe einfacher Kernmodelle detailliert beschreiben. Dabei werden die Nukleonen als sich in einem Potentialtopf frei bewegende Teilchen angenommen. Mit steigender Anregungsenergie ($E \geq 6 MeV$) wird dieses Modell immer ungenauer; hier liegen die Energiezustände so dicht, daß es nicht mehr möglich ist, sie individuell zu berechnen. Daher geht man dazu über, die Eigenschaften der Kernzustände statistisch zu beschreiben. Man kommt so zur Random-Matrix-Theorie. Genauer gesagt, wird die Matrix des Hamilton-Operators durch eine stochastische Matrix mit wohldefinierten Symmetrieeigenschaften ersetzt. Die Eigenschaften des Kernspektrums werden dann durch Mittelung über ein gaußverteiltes Ensemble von stochastischen Matrizen berechnet.

Die Universalität spektraler Fluktuationen wurde in der mesoskopischen Physik nachgewiesen [5]. Dort zeigte man, daß in hinreichend ungeordneten Systemen die spektralen Korrelationen universell sind und aus der RMT dafür analytische Ausdrücke erhalten werden können mit den grundlegenden Symmetrien des Systems als einzige Eingabe. Es gibt auch in der QCD schon einige Hinweise auf die Universalität mikroskopischer Spektraleigenschaften [6, 7, 8, 9, 10, 11, 70, 91]. Ein direkter Nachweis fehlte jedoch bisher. Eine erste Untersuchung der Dirac-Spektren auf dem Gitter wurde in [59] durchgeführt. Dort wurde gezeigt, daß die Fluktuationen im Hauptteil des Spektrums auf der Skala des mittleren Niveauabstands universell sind und durch die RMT korrekt beschrieben werden. In dieser Studie standen nur wenige Spektren zur Verfügung, so daß die Fluktuation der kleinsten Eigenwerte um ihre Mittellage nicht untersucht werden konnte. Im Rahmen dieser Dissertation war es dagegen möglich, eine große Anzahl Spektren zu erzeugen. Simuliert wurde mit $SU_c(2)$-Eichfeldern und Kogut-Susskind-Fermionen. Die Konfigurationen wurden mit dem Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus erzeugt. Auf Grund der vorhandenen Ressourcen konnte bisher nur auf relativ kleinen Gittern simuliert werden. Die Antwort auf die wichtige Frage, was im Kontinuumslimes passiert, muß auf einen späteren Zeitpunkt verschoben werden.

Weiterhin stellt man im allgemeinen fest, daß die mittlere Spekraldichte des Dirac-Operators nicht universell ist und somit zu ihrer Berechnung die Kenntnis der Dynamik des speziellen Systems erforderlich ist. In dieser Dissertation wird die Frage untersucht, ob eine vergleichbare Trennung der Skalen auch in der QCD stattfindet.

Diese Arbeit ist wie folgt gegliedert: Im ersten Kapitel wird die QCD im Kontinuum sowie deren Gitterformulierung eingeführt. Es werden außerdem die chirale Symmetrie der Theorie und der Übergang zum Kontinuum diskutiert. Das zweite Kapitel erläutert die Monte-Carlo-Methode für die Simulation der QCD auf dem Gitter. Es wird insbesondere auf den Hybrid-Monte-Carlo und auf Kramers-Algorithmus eingegangen. Am Schluß des Kapitels werden die Resultate des Vergleichs beider Algorithmen dargestellt. Im dritten Kapitel werden die Symmetrieeigenschaften des Dirac-Operators erläutert, sowie bestimmte Eigenschaften seines Spektrums kurz skizziert. Desweiteren wird in diesem Kapitel das chirale Random-Matrix-Modell und dessen Vorhersagen über Korrelationen im Spektrum vorgestellt wie auch die Implementierung der Spektrumsberechnung erläutert. Das vierte Kapitel schließlich ist dem Vergleich der spektralen Fluktuationen aus den Hybrid-Monte-Carlo-Daten mit den Vorhersagen der chiralen Random-Matrix-Theorie gewidmet.

Kapitel 1

Gitterformulierung der QCD

In diesem Kapitel wird zunächst die Kontinuumsversion der Wirkung der Quantenchromodynamik eingeführt, wobei besonders auf die chirale Symmetrie eingegangen wird. Es folgt die Gitterformulierung der QCD. Zum Schluß wird der Übergang zum Kontinuumslimes der numerisch berechneten Observablen dargestellt.

1.1 Quantenchromodynamik im Kontinuum

Ziel einer Monte-Carlo-Simulation der Quantenchromodynamik ist die numerische Berechnung von Observablenerwartungswerten

$$< \Omega >= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\overline{\psi}\ \Omega(A_\mu, \psi, \overline{\psi}; g, m)\ \exp(-S(A_\mu, \psi, \overline{\psi}; g, m)), \tag{1.1}$$

wobei die Wirkung S von den Quarkfeldern ψ und $\overline{\psi}$, vom Eichfeld A_μ, von der nackten Kopplungskonstante g und der nackten Quarkmasse m abhängt. Ω ist eine Observable, z.B. die Energiedichte, und $\mathcal{Z}$ die Zustandssumme des Modells, die durch die Bedingung $< 1 >= 1$ definiert ist. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist durch das Boltzmann-Gewicht $\exp(-S)$ gegeben. Das Integrationsmaß $\mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\overline{\psi}$ ist an dieser Stelle noch nicht wohldefiniert sondern symbolisch zu verstehen.
Die Wirkung der Quantenchromodynamik setzt sich aus zwei Teilen zusammen

$$S = S_G^{\text{Kont}} + S_F^{\text{Kont}}. \tag{1.2}$$

S_G^{Kont} ist der reine gluonische Anteil, der im euklidischen Raum wie folgt gegeben ist

$$S_G^{\text{Kont}} = \frac{1}{4} \int d^4x\ F_{\mu\nu}^a(x)\ F_{\mu\nu}^a(x), \quad F_{\mu\nu}^a(x) \equiv \partial_\mu A_\nu^a(x) - \partial_\nu A_\mu^a(x) - g\ f^{abc}\ A_\mu^b(x) A_\nu^c(x). \tag{1.3}$$

f^{abc} sind die Strukturkonstanten der Gruppe $SU(N_c)$. Die reellen Felder $A^a_\mu(x)$ bilden zusammen mit den Generatoren λ^a der Eichgruppe $SU(N_c)$ das Eichfeld $A_\mu(x)$

$$A_\mu(x) = \sum_{a=1}^{N_c^2-1} A^a_\mu(x)\, \frac{\lambda^a}{2}.$$

Die euklidische Kontinuumswirkung für Fermionen lautet

$$S_F^{\mathrm{Kont}} = \int d^4x\, \overline{\psi}(x)\,(\gamma_\mu\, D_\mu + m)\,\psi(x), \qquad D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu(x). \tag{1.4}$$

Hier und im Folgenden sind die Indizes der Quarkfelder $\psi_{\alpha,f,c}$ und $\overline{\psi}_{\alpha,f,c}$ unterdrückt. Diese sind: der Dirac-Index α, der Flavorindex $f = 1,...,N_f$ und der Farbindex $c = 1,...,N_c$ (N_f ist die Anzahl der Flavors und N_c die der Farben).
In der euklidischen Formulierung der Kontinuumstheorie sind die Quarkfelder antikommutierende Grassmann Variable. Da diese quadratisch in die Wirkung eingehen, kann man $\overline{\psi}(x)$ und $\psi(x)$ mit der Matthews-Salam Formel integrieren [12], so daß man für die Zustandssumme der QCD

$$\mathcal{Z} \;=\; \int \mathcal{D}A_\mu \det(\not{D} + m)\; e^{-S_G^{\mathrm{Kont}}} \tag{1.5}$$

mit $\not{D} = \gamma_\mu\, D_\mu$ erhält.
An dieser Stelle soll vorweggenommen werden, daß die QCD-Wirkung (1.2) noch einen Term enthält, der das physikalische Vakuum charakterisiert. Es handelt sich um die ganzzahlige *topologische Ladung*[1] ν des Eichfeldes

$$\nu \;=\; \frac{g^2}{32\pi^2}\int d^4x F^a_{\mu\nu}(x)\tilde{F}^a_{\mu\nu}(x), \tag{1.6}$$

wo $\tilde{F}^a_{\mu\nu}(x)$ das duale Feldtensor zu $F^a_{\mu\nu}(x)$ ist

$$\tilde{F}^a_{\mu\nu}(x) \;=\; \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}F^a_{\alpha\beta}(x). \tag{1.7}$$

Dieser Term wird mit dem Vakuumparameter θ zur Wirkung hinzugefügt, so daß aus (1.5)

$$\mathcal{Z}_\nu \;=\; \int_\nu \mathcal{D}A_\mu \det(\not{D} + m)\; e^{-S_G^{\mathrm{Kont}} + i\theta\nu} \tag{1.8}$$

wird. $\int_\nu \mathcal{D}A_\mu$ bedeutet, daß das Integral über Feldkonfigurationen mit topologischer Ladung ν zu berechnen ist.
Für die Betrachtungen in den Kapiteln 1 und 2 spielt die Größe ν keine Rolle und wird deshalb weggelassen. Da aber das chirale Random-Matrix-Modell in seinen Vorhersagen die verschiedenen Vakuumssektoren der QCD miteinbezieht, wird die topologische Ladung im dritten Kapitel dieser Arbeit in die QCD-Zustandssumme wiedereingeführt.

[1] Eine gute Einführung in die topologischen Aspekte von Eichtheorien ist in Paragraph 3.4 und Kapitel 10 in [13] und in Kapitel 3 in [14] zu finden.

1.2 Symmetrien

Im Folgenden wird auch die x-Abhängigkeit der Felder unterdrückt.
Die fermionische Wirkung (1.4) ist invariant unter globalen Vektorflavor-Transformationen

$$\psi \to U_V \psi, \quad \overline{\psi} \to \overline{\psi} U_V^\dagger$$

$$U_V = e^{i\Theta_V}, \quad \Theta_V = \sum_{a=1}^{N_f^2-1} \Theta_V^a \frac{\lambda^a}{2} \tag{1.9}$$

wo λ^a die Generatoren der unitären Flavorgruppe $U_V(N_f)$ sind. Diese Symmetrie von (1.4) ist auch für endliche Masse m exakt, ihr entspricht die Erhaltung des Vektorstroms.
Außerdem ist (1.4) im Limes $m \to 0$ (chiraler Limes) invariant unter globalen Axialvektor-Transformationen

$$\psi \to U_A \psi, \quad \overline{\psi} \to \overline{\psi} U_A$$

$$U_A = e^{i\gamma_5 \Theta_A}, \quad \Theta_A = \sum_{a=1}^{N_f^2-1} \Theta_A^a \frac{\lambda^a}{2} \tag{1.10}$$

mit $\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$. Dieser Symmetrie entspricht die Erhaltung des Axialvektorstroms. Die Kombination von (1.9) und (1.10) ist eine *chirale Transformation*, die entsprechende $U_V(N_f) \otimes U_A(N_f)$-Symmetrie der Wirkung nennt man *chirale Symmetrie*.
Für die nähere Untersuchung der Symmetrieeigenschaften von (1.4) ist es vorteihaft, Projektionsoperatoren einzuführen

$$P_L = \frac{1}{2}(1-\gamma_5), \quad P_R = \frac{1}{2}(1+\gamma_5)$$

mit den üblichen Eigenschaften

$$P_L + P_R = 1, \quad P_L^2 = P_L, \quad P_R^2 = P_R, \quad P_L\ P_R = P_R\ P_L = 0.$$

Mit diesen Operatoren kann man die Quarkfelder in rechts- und linkshändige Komponenten zerlegen

$$\begin{aligned} \psi_L &= P_L\ \psi, \qquad \overline{\psi}_L = \overline{\psi}\ P_R, \\ \psi_R &= P_R\ \psi, \qquad \overline{\psi}_R = \overline{\psi}\ P_L. \end{aligned} \tag{1.11}$$

Da $\{\gamma_5, \gamma_\mu\} = 0$ ist, folgt für den masselosen Anteil von (1.4)

$$S_{F,m=0}^{\text{Kont}} = \int d^4x \overline{\psi}\gamma_\mu D_\mu \psi = \int d^4x \overline{\psi}_R \gamma_\mu D_\mu \psi_R + \int d^4x \overline{\psi}_L \gamma_\mu D_\mu \psi_L. \tag{1.12}$$

$S_{F,m=0}^{\text{Kont}}$ ist invariant unter voneinander unabhängigen Transformationen der rechts- und linkshändigen Quarks, also unter Transformationen der unitären Gruppe $U_L(N_f) \otimes U_R(N_f)$.
Anschaulich bedeutet das: Im chiralen Limes propagieren rechts- und linkshändige Quarks

unabhängig voneinander. Die Gruppe $U_L(N_f) \bigotimes U_R(N_f)$ kann man in Untergruppen zerlegen

$$U_L(N_f) \otimes U_R(N_f) = U_V(1) \otimes U_A(1) \otimes SU_L(N_f) \otimes SU_R(N_f).$$

Die $U_V(1)$-Symmetrie entspricht der Erhaltung der Baryon- bzw. Quarkzahl. Die axiale $U_A(1)$-Symmetrie ist nur klassisch erhalten, quantenmechanisch wird sie durch die axiale Anomalie [15] gebrochen. Es bleibt eine $Z_A(N_f)$-Symmetrie[2] übrig [16]. Insgesamt also $U_V(1) \bigotimes Z_A(N_f) \bigotimes SU_L(N_f) \bigotimes SU_R(N_f)$.
Die Invarianz der mit den transformierten Feldern gebildeten fermionischen Wirkung (1.12) unter $SU_L(N_f) \bigotimes SU_R(N_f)$-Transformationen nennt man ebenfalls *chirale Symmetrie.*
Was ist die physikalische Bedeutung dieser Symmetrie? Betrachtet man frei propagierende masselose Quarks mit Energie E und Impuls $\vec{p}$, die diese Symmetrie besitzen, so erfüllen sie die Dirac-Gleichung

$$\gamma_\mu p^\mu \psi = (\gamma_4 E + i\vec{\gamma}\vec{p})\ \psi = 0.$$

Da $i\vec{\gamma} \ = \ \gamma_4 \vec{\alpha}$ ist mit

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} -\vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$$

und $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ die Pauli-Matrizen sind, da außerdem für masselose Teilchen $E = |\vec{p}|$ gilt, erhält man nach Transformation auf rechts- bzw. linkshändige Quarkfelder

$$\frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{|\vec{p}|}\psi_R = \psi_R, \qquad \frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{|\vec{p}|}\psi_L = -\psi_L. \tag{1.13}$$

Der Ausdruck $\frac{\vec{\sigma}\vec{p}}{|\vec{p}|}$ ist nichts anderes als der Helizitätsoperator. Aus (1.13) sieht man, daß die rechts- bzw. linkshändige masselose Felder Eigenzustände des Helizitätsoperators mit Eigenwerten ± 1 sind.
Die chirale Symmetrie wird durch den Massenterm in (1.4) explizit gebrochen

$$m\ \overline{\psi}\psi = m\ \overline{\psi}[P_L + P_R]\ [P_L + P_R]\psi = m\ \overline{\psi}_R\psi_L + m\ \overline{\psi}_L\psi_R.$$

Man kann sie trotzdem als annähernd erhalten betrachten, denn die in Störungstheorie berechneten Massen der up- und down-Quarks sind sehr klein[3] verglichen mit der typischen Energieskala der starken Wechselwirkung. Schon für das strange-Quark ist die chirale Symmetrie jedoch keine gute Näherung mehr und für die schweren Quarks ist sie überhaupt nicht mehr gültig. Es existiert jedoch ein sogenanntes Entkopplungstheorem [18], aus dem hervorgeht, daß in Niederenergieprozessen nur die leichten Quarks zu berücksichtigen sind, so daß man erwarten kann, daß das niederenergetische Hadronenspektrum eine näherungsweise chirale Symmetrie besitzt.
Wenn dies so wäre, müßten die Hadronen in der Natur in Paritätdoublets vorkommen, da

[2] $Z_A(N_f) \equiv \{e^{i2\pi\frac{n}{N_f}} \mid n = 0, ...N_f - 1\}$
[3] Nach dem $\overline{MS}$-Schema ist $m_u \simeq 1.5 - 5$ MeV, $m_d \simeq 3 - 9$ MeV [17].

Teilchen entgegengesetzter Helizität durch eine Paritätstransformation ineinander übergehen. Da man im Hadronenspektrum keine solche Entartung beobachtet, muß die chirale Symmetrie durch das QCD-Vakuum spontan gebrochen sein. Für Fermionen in der fundamentalen Darstellung der $SU_c(3)$ geschieht dies nach dem Schema $SU_L(N_f) \otimes SU_R(N_f) \rightarrow SU_V(N_f)$.
Nach dem Goldstone-Theorem [19] entstehen bei spontaner Brechung einer exakten globalen Symmetrie $N_f^2 - 1$ masselose Bosonen. Da die Symmetrie von (1.4) wegen des Massenterms nur annähernd realisiert ist, haben diese Bosonen eine kleine Masse. Für $N_f = 2$ identifiziert man sie mit dem Isotriplett der Pionen $(\pi^0, \pi^\pm)$, für $N_f = 3$ mit dem Oktett der pseudoskalaren Mesonen $(\pi^0, \pi^\pm, K^0, \overline{K}^0, K^\pm, \eta)$.
Was kann man als Ordnungsparameter für die spontane Brechung der chiralen Symmetrie betrachten? Am einfachsten sieht man das im Rahmen einer $U(1)$-Eichtheorie. Dort ist (1.12) invariant unter folgenden chiralen Transformationen

$$\begin{aligned} \psi_L &\rightarrow e^{i\Theta_L}\psi_L, \quad \overline{\psi}_L \rightarrow e^{-i\Theta_L}\psi_L \\ \psi_R &\rightarrow e^{i\Theta_R}\psi_R, \quad \overline{\psi}_R \rightarrow e^{-i\Theta_R}\psi_R. \end{aligned} \tag{1.14}$$

Dann transformiert sich die Bilinearform $\overline{\psi}_R\psi_L$ gemäß

$$\overline{\psi}_R\psi_L \rightarrow e^{i(\Theta_L-\Theta_R)}\overline{\psi}_R\psi_L.$$

Wenn der Vakuumerwartungswert $< \overline{\psi}_R\psi_L >$ invariant sein soll unter der Transformation (1.14), dann muß er verschwinden. Das gleiche gilt für $< \overline{\psi}_L\psi_R >$, so daß man den Erwartungswert

$$< \overline{\psi}\psi > = < \overline{\psi}_L\psi_R > + < \overline{\psi}_R\psi_L > \tag{1.15}$$

als Ordnungsparameter für die spontane Brechung der chiralen Symmetrie betrachten kann. $< \overline{\psi}\psi >$ nennt man *chirales Kondensat*. Sein Nichtverschwinden im Limes $m \rightarrow 0$ signalisiert spontane Brechung der chiralen Symmetrie.

1.3 Quantenchromodynamik auf dem Gitter

1.3.1 Die Eichfelder

Für die Gitterformulierung der oben eingeführten Wirkung diskretisiert man das Raum-Zeit-Kontinuum durch ein hyperkubisches Gitter mit Gitterkonstante a. Das Gittervolumen sei $V = L_{\hat{1}} \times L_{\hat{2}} \times L_{\hat{3}} \times L_{\hat{4}}$. Jeder Gitterpunkt i hat die Notation $i = (i_{\hat{1}}, i_{\hat{2}}, i_{\hat{3}}, i_{\hat{4}})$ mit $i_\mu = \{0, 1, ..., L_\mu - 1\}$. Der Index $\mu = (\hat{1}, \hat{2}, \hat{3}, \hat{4})$ numeriert die Einheitsvektoren im $\mathbf{R^4}$. Man nennt einen Gitterpunkt *gerade (ungerade)*, wenn $i_{\hat{1}} + i_{\hat{2}} + i_{\hat{3}} + i_{\hat{4}}$ *gerade (ungerade)* ist. Die Kontinuumsfelder $A_\mu(x)$ werden auf dem Gitter durch die Variablen $U_{i,\mu}$ ersetzt. Diese sind Elemente der Symmetriegruppe $SU(N_c)$ und sind auf den Kanten μ, die von den Gitterpunkten i ausgehen, definiert [4]. Die Quarkfelder sind bei der Gitterformulierung antikommutierende Grassmann-Variable ψ_i und $\overline{\psi}_i$, die an den Gitterpunkten i definiert sind. Mit diesen neuen Variablen konstruiert man die Gitterversion der Wirkung.

Welche Anforderungen muß eine solche Wirkung erfüllen? Zum einen erwartet man von ihr, daß sie im Kontinuumslimes $a \to 0$ die Form (1.2) mit (1.3) und (1.4) mit renormierten Größen reproduziert. Das ist der Fall, wenn die Beziehung zwischen alte und neue Eichfelder

$$U_{i,\mu} = \exp(igaA_\mu(x)) \tag{1.16}$$

ist. Außerdem sollte sie die lokale Eichinvarianz der Kontinuumstheorie bewahren, d.h. invariant sein unter lokalen Eichtransformationen der Felder

$$U_{i,\mu} \to G(i)\, U_{i,\mu}\, G^{-1}(i+\mu), \quad \psi_i \to G(i)\, \psi_i,$$

mit $G(i) \in SU(N_c)$. Diese Forderungen sind jedoch nicht sehr einschränkend, denn sie lassen viele mögliche Gitterformulierungen zu.

Die Zustandssumme in (1.1) nimmt folgende Form an

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{i,\mu} dU_{i,\mu} \prod_i d\psi_i d\overline{\psi}_i \, \exp(-S(U,\psi,\overline{\psi};\beta,m,a)). \tag{1.17}$$

Hier ist das Integrationsmaß definiert als Produkt über alle Variablen auf dem Gitter, $dU_{i,\mu}$ ist das Haar-Maß über $SU(N_c)$. Bei der Integration über $d\psi_i$ und $d\overline{\psi}_i$ muß man die Berezin-Regeln für die Integration über Grassmann-Variablen beachten [12]. In der diskretisierten Wirkung tritt noch die Abhängigkeit von der Gitterkonstante a auf. Im Folgenden wird $a = 1$ gesetzt. Eine geeignete Wahl für den gluonischen Anteil ist die Wilson-Wirkung [20].

$$S_G = \beta \sum_{i,\mu\nu} \left(1 - \frac{1}{N_c} \mathrm{Re\ Sp}\ U^P_{i,\mu\nu}\right). \tag{1.18}$$

Summiert wird hier über die Plaquetten $U^P_{i,\mu\nu}$ an den Eckpunkten i des Gitters in den $\mu\nu$-Ebenen. Die Spur ist im Farbraum zu berechnen und es gilt

$$\beta = \frac{2N_c}{g^2}.$$

Die Plaquette ist gegeben durch

$$U^P_{i,\mu\nu} = U_{i,\mu}\, U_{i+\mu,\nu}\, U^\dagger_{i+\nu,\mu}\, U^\dagger_{i,\nu}. \tag{1.19}$$

Man kann leicht nachweisen, daß (1.18) die oben genannten Anforderungen erfüllt (siehe z.B. Kapitel 6 in [21]).

[4] In der englischsprachigen Literatur nennt man die Gitterkanten *links*.

Der gluonische Anteil (1.18) der QCD-Wirkung ist nicht nur invariant unter lokalen Eichtransformationen, sondern besitzt eine zusätzliche Symmetrie. Multipliziert man nämlich alle räumlichen link-Variablen einer festen Zeitschicht mit Elementen z des Gruppenzentrums von $SU(N_c)$ [5]

$$U_{(\vec{i},i_{\hat{4}}),\hat{4}} \rightarrow zU_{(\vec{i},i_{\hat{4}}),\hat{4}} \tag{1.20}$$

für alle $\vec{i}$ und festes $i_{\hat{4}}$, so bleibt (1.18) unverändert. Das Zentrum von $SU(N_c)$ ist

$$Z(N_c) \equiv \{e^{i2\pi \frac{l}{N_c}} \mid l = 0, 1, ... N_c - 1\}. \tag{1.21}$$

1.3.2 Die Fermionfelder

Die konkrete Formulierung einer Gitterwirkung für Fermionen ist komplexer als die für die Eichfelder, da die naive Diskretisierung von (1.4)

$$S_F^{naiv} = \sum_{i,j} \overline{\psi}_i \tilde{M}_{ij} \psi_j, \quad \tilde{M}_{ij} \; = \; \frac{1}{2} \sum_{\mu} \gamma_\mu \left(U_{i,\mu} \delta_{(i+\mu)j} \; - \; U^\dagger_{i-\mu,\mu} \delta_{(i-\mu)j} \right) \; + \; m\delta_{ij} \tag{1.22}$$

aus verschiedenen Gründen für numerische Simulationen nicht geeignet ist.
Ein Grund ist, daß (1.22) zur sogenannten *Fermionverdopplung* führt. Das heißt: Wenn ein Fermion mittels (1.22) auf ein Gitter der Dimension d gesetzt wird, so führt dies im Kontinuumslimes zur Entstehung von 2^d entarteten Fermionen statt eines Fermions, wie in (1.4). Die Verdopplung kann man sich mit freien, masselosen Fermionen in zwei Dimensionen veranschaulichen. Diese erfüllen im Kontinuum:

$$(\partial_t + \alpha \partial_x)\psi \; = \; (\partial_t + \gamma_5 \partial_x)\psi \; = \; 0. \tag{1.23}$$

Setzt man ebene Wellen

$$\psi_{L,R} \; = \; e^{iEt+ikx} \; \chi_{L,R}$$

mit $\gamma_5 \chi_R = +\chi_R$ und $\gamma_5 \chi_L = -\chi_L$ in (1.23) ein, so erhält man die Dispersionsrelation

$$E \; = \; \pm k, \quad -\infty < k < +\infty.$$

Die naive Raumdiskretisierung von (1.23) auf einem (1 + 1)-Gitter ist

$$\partial_t \; \psi_j \; + \; \gamma_5 \frac{[\psi_{j+1} \; - \; \psi_{j-1}]}{2a} \; = \; 0. \tag{1.24}$$

Der Lösungsansatz

$$\psi_{L,R} \; = \; e^{iEt+ikja} \; \chi_{L,R}$$

[5] Das Zentrum C einer Gruppe G besteht aus allen Elementen z, für die $zgz^{-1} = g, g \in G$ gilt.

liefert eingesetzt in (1.24) die Dispersionsrelation

$$E = \pm \frac{\sin(ka)}{a},$$

die für $ka \ll 1$

$$E \simeq \pm k + O(k^3 a^2)$$

ergibt. Aber auch $ka = \pi - \tilde{k}a$ führt für $\tilde{k}a \ll 1$ zu

$$E \simeq \pm \tilde{k} + O(\tilde{k}^3 a^2).$$

Das bedeutet: Im Kontinuumslimes gibt es zwei zweikomponentige Dirac-Teilchen.
Das Phänomen der Fermionverdopplung auf dem Gitter beschränkt sich nicht nur auf das hier konstruierte Beispiel, es ist vielmehr eng verbunden mit der exakten chiralen Symmetrie der Dirac-Gleichung im Limes $m \to 0$. Nielsen und Ninomiya haben dies in einer Reihe von Theoremen gezeigt [22].
Die zwei bekanntesten Möglichkeiten, diese $2^d - 1$ zusätzlichen Moden zu entkoppeln, sind die Wilson-Methode [23] und die Formulierung mit *staggered Fermionen*, die auf eine Idee von Kogut und Susskind [24] zurückgeht.
In Wilsons Formulierung werden die zusätzlichen Fermionen durch addieren eines Laplace Terms zu der naiven Fermionwirkung entfernt. Das ergibt

$$S_F^W = \frac{1}{2\kappa} \sum_{i,j} \overline{\psi}_i K_{ij} \psi_j, \quad K_{ij} = \delta_{ij} - \kappa \sum_{\mu} [(1-\gamma_\mu) U_{i,\mu} \delta_{(i+\mu)j} + (1+\gamma_\mu) U^\dagger_{i-\mu,\mu} \delta_{(i-\mu)j}], \tag{1.25}$$

mit dem Hopping-Parameter

$$\kappa = \frac{1}{8+2m}. \tag{1.26}$$

Dadurch verändert man die Dispersionsrelation in der Weise, daß im Kontinuumslimes lediglich eine niederenergetische Lösung übrigbleibt, die restlichen $2^d - 1$ erhalten unendliche Masse und nehmen somit nicht an der Dynamik teil.
Die Eliminierung der überzähligen Fermionen geht auf Kosten der chiralen Symmetrie, die im Limes $m \to 0$ explizit durch den Zusatzterm gebrochen wird. Das bedeutet: für alle β ist $< \overline{\psi}\psi > \neq 0$. Für Details dieser Formulierung sei hier auf die Literatur verwiesen [21, 25, 26].
Die zugrundeliegende Idee des Kogut-Susskind-Schemas besteht darin, die Quarkfelder in folgender Weise zu transformieren

$$\psi_i \to \Gamma_i \chi_i \quad , \quad \psi_i^* \to \chi_i^* \Gamma_i^\dagger \quad \text{mit} \quad \Gamma_i = \gamma_1^{i_{\hat{1}}} \gamma_2^{i_{\hat{2}}} \gamma_3^{i_{\hat{3}}} \gamma_4^{i_{\hat{4}}}. \tag{1.27}$$

Setzt man diese Felder in die naive Wirkung (1.22) ein, so erhält man

$$S_F = \sum_{i,j} \overline{\chi}_i M_{ij} \chi_j, \quad M_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \alpha_{i,\mu} \left(U_{i,\mu} \delta_{(i+\mu)j} - U^\dagger_{i-\mu,\mu} \delta_{(i-\mu)j} \right) + m\delta_{ij}, \tag{1.28}$$

wobei $M_{ij} = \Gamma_i^\dagger \tilde{M}_{ij} \Gamma_j$ ist. Die $\alpha_{i,\mu} = \Gamma_i^\dagger \gamma_\mu \Gamma_{i+\mu}$ sind die Kogut-Susskind-Phasen, die von der Transformation (1.27) herrühren und die explizite Form

$$\alpha_{i,\mu} = (-1)^{i_{\hat{1}}+\cdots+i_{\mu-1}} \quad \text{für} \quad \mu = \hat{1},\hat{2},\hat{3} \quad \text{und} \quad \alpha_{i,\hat{4}} = 1$$

haben. Anstelle der Dirac-Matrizen (siehe (1.22)) stehen jetzt also Zahlen in der fermionischen Wirkung, so daß die Dirac-Komponenten der neuen Felder χ nicht mehr gemischt vorkommen. Die Wirkung ist durch die Transformation (1.27) spindiagonal geworden. Damit ist der Dirac-Index nicht mehr auf Werte von 1 bis 4 beschränkt, man hat jetzt die Freiheit, ihn bis zu beliebigen ganzen Zahlen laufen zu lassen. Läßt man z.B. nur den Wert 1 zu, so hat man einkomponentige Fermionfelder auf jedem Gitterpunkt.
Betrachtet man einen elementaren Hyperkubus mit 2^4 Ecken, so identifiziert man beim Kogut-Susskind-Schema die 2^4 einkomponentigen Felder darin folgendermaßen: Da in vier Dimensionen ein Dirac-Feld vier Komponenten hat, ergeben sich im elementaren Hyperkubus insgesamt vier verschiedene vierkomponentige Dirac-Felder. Man identifiziert sie im Kontinuum mit $\tilde{N}_f = 4$ Quarkflavors[6]. Diese Verhältnisse sind in Abbildung 1.1 für zwei Dimensionen veranschaulicht.

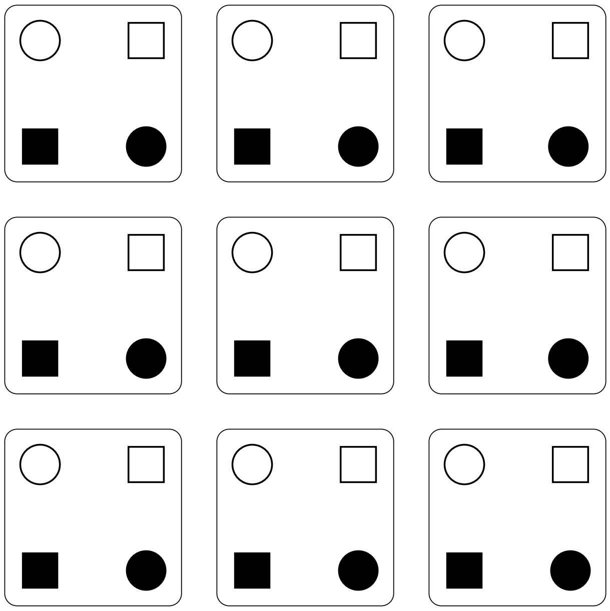

Abbildung 1.1: Auf jedem Punkt des zweidimensionalen Gitters ist ein einkomponentiges Feld χ definiert. In zwei Dimensionen haben Dirac-Felder zwei Komponenten. Aus den vier Feldern in einem Elementarquadrat ergeben sich also im Kontinuumslimes zwei Flavors von zweikomponentigen Quarks. Durch dieses Verfahren wird die effektive Gitterkonstante für Fermionfelder verdoppelt.

[6] Im Folgenden bezeichnen wir mit $\tilde{N}_f$ die Anzahl der Flavors im Kontinuum und mit N_f die Anzahl der Flavors auf dem Gitter bzw. in den Random-Matrix-Vorhersagen.

Trotz Reduzierung der Fermionenzahl mit der Transformation (1.27) bleibt das Problem, daß die neuen Fermionfelder antikommutierende Grassmann-Zahlen sind. Damit ist der Boltzmann-Faktor, der mit der entsprechenden Wirkung gebildet wird, ein Operator in einer Grassmann-Algebra und nicht als Wahrscheinlichkeitsverteilung verwendbar. Das heißt: Mit den Feldern χ so wie sie in (1.27) eingeführt werden, kann man noch keine Simulation durchführen. Da aber die Wirkung quadratisch in den Fermionfeldern ist, kann man sie - wie auch schon im Kontinuum - mit der Matthews-Salam-Formel für Gauß-Integrale über antikommutierende Variable analytisch integrieren [12]

$$\int \prod_i d\chi_i d\overline{\chi}_i \ \exp(-\sum_{i,j} \overline{\chi}_i M_{ij} \chi_j) = \det M. \tag{1.29}$$

Man erhält dann für die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{i,\mu} dU_{i,\mu} \det M(U) \ \exp(-S_G). \tag{1.30}$$

Das ist jetzt ein Integral über reelle Zahlen und daher im Prinzip zugänglich für numerische Simulationen. In Wirklichkeit ist dies nicht praktikabel wegen der Größe der Matrix M_{ij}, deren Dimension N=(Anzahl der Gitterpunkte$\times$Anzahl der Dirac-Komponenten$\times$Anzahl der inneren Freiheitsgrade) ist und deren Determinante für jede Konfiguration der Gluonfelder neu berechnet werden müßte. Allerdings ist M_{ij} eine dünnbesetzte Matrix und diese Tatsache machen sich viele Monte-Carlo-Algorithmen für Fermionen zunutze.
Ein Ausweg aus dieser Schwierigkeit, der auf Weingarten und Petcher [27] zurückgeht, ist $\det M$ durch ein Integral über Pseudofermionfelder ϕ^* und ϕ zu ersetzen, die wie Fermionen wechselwirken, jedoch ganz gewöhnliche skalare Felder sind

$$\det M \ = \ \int \prod_i d\phi_i \, d\phi_i^* \exp(-\sum_{i,j} \phi_i^* M_{ij}^{-1} \phi_j). \tag{1.31}$$

Das ersetzt die Berechnung der Determinante in (1.30) durch eine zwar kostenintensive, aber erschwingliche Matrixinversion.
Ein letzter Aspekt ist, daß M_{ij} nicht positiv definit ist und somit der Integrand in (1.31) nicht als Wahrscheinlichkeitsmaß betrachtet werden kann. Das kann korrigiert werden, indem man M_{ij} durch $(M^\dagger \ M)_{ij}$ ersetzt. Das kommt zwar einer Verdopplung der Anzahl der Fermionen gleich[7], aber man wird weiter unten sehen, daß diese durch eine weitere Überlegung wieder aufgehoben wird.
Unter Berücksichtigung von (1.27), (1.29) und (1.31) erhält man für die diskretisierte Gesamtwirkung mit Kogut-Susskind-Fermionen

$$S(U, \phi^*, \phi; \beta, m) = \beta \sum_{i,\mu\nu} \left(1 - \frac{1}{N_c} \mathrm{Re\ Tr}\ U^P_{i,\mu\nu}\right) + \sum_{i,j} \phi_i^* \ (M^\dagger \ M)^{-1}_{ij} \ \phi_j, \tag{1.32}$$

[7] Denn $\det(M^2) = (\det M)^2$.

$$M_{ij} = \not{D}_{ij} + m_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \alpha_{i,\mu} \left(U_{i,\mu} \delta_{(i+\mu)j} \; - \; U^{\dagger}_{i-\mu,\mu} \delta_{(i-\mu)j} \right) \; + \; m\delta_{ij}. \tag{1.33}$$

Aus (1.33) sieht man, daß $\not{D}_{ij}$ jeden Gitterpunkt i nur mit seinen nächsten Nachbarn $i \pm \mu$ verbindet. So verbindet $(M^{\dagger}M)_{ij}$ lediglich *gerade (ungerade)* Gitterpunkte mit *geraden (ungeraden)* und die Integration über die Pseudofermionen darf somit auf Grund dieser Symmetrie auf eines dieser beiden Untergitter beschränkt bleiben. Hiermit werden auch die entarteten Fermionen, die bei der Ersetzung von M_{ij} durch $(M^{\dagger}M)_{ij}$ entstanden waren, entfernt.
Was den fermionischen Anteil betrifft, führt man die Simulation mit den Feldern ϕ durch, wobei man diesen N_f Komponenten ($N_f \neq \tilde{N}_f$!) geben kann. Gewöhnlich setzt man $N_f = 1$. Nach der Simulation ist es möglich zu einer Darstellung der physikalischen Quarkfelder ψ zurückzugelangen, indem man gewisse Linearkombinationen der Felder ϕ eines elementaren Hyperkubus bildet [28]. Die physikalischen Quarkfelder im Kontinuum haben dann $\tilde{N}_f = 4 \cdot N_f$ Flavors, also mindestens vier Flavors.
Auf dem Gitter ist die chirale Symmetrie $U(\tilde{N}_f) \otimes U(\tilde{N}_f)$ der Kontinuumswirkung bei $m \to 0$ zu einer $U(N_f) \otimes U(N_f)$-Restsymmetrie geworden. Die Bewahrung dieser Restsymmetrie ist ein willkommenes Merkmal der Kogut-Susskind-Wirkung, wenn man deren Wiederherstellung untersuchen will. Die negativen Aspekte dieses Ansatzes sind die immer noch zu hohe Flavoranzahl im Kontinuum und eine gebrochene Flavorsymmetrie auf dem Gitter. Hier muß auch erwähnt werden, daß die Rekonstruktion der physikalischen Quarkfelder ψ aus den Feldern ϕ keineswegs einfach ist, weswegen meistens die Wilson-Formulierung für die Simulation der vollen QCD vorgezogen wird.
Aus dem rein formalen Observablenerwartungswert (1.1) wird also

$$< \Omega >= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int\limits_{RB} \prod_{i,\mu} dU_{i,\mu} \prod_{i} d\phi_i d\phi_i^* \; \Omega(U, \phi, \phi^*; \beta, m) \; \exp(-S(U, \phi, \phi^*; \beta, m)) \tag{1.34}$$

mit S aus (1.33). RB bezeichnet hier die Randbedingungen, denen die Felder unterworfen sind. Auf einem Gitter mit Volumen $V = L_{\hat{1}} \times L_{\hat{2}} \times L_{\hat{3}} \times L_{\hat{4}}$ und mit Indizes $i_\mu = \{0, 1, ..., L_{\mu-1}\}$ sind diese

$$\begin{array}{lllllll} U_{0,\mu} & = & U_{L_\mu,\mu} & & & & \text{für } \mu \; = \; \hat{1}, \hat{2}, \hat{3}, \hat{4} \\ \phi_0 & = & \phi_{L_\mu}, & \phi_0^* & = & \phi_{L_\mu}^* & \text{für } \mu \; = \; \hat{1}, \hat{2}, \hat{3} \\ \phi_0 & = & -\phi_{L_{\hat{4}}}, & \phi_0^* & = & -\phi_{L_{\hat{4}}}^*. & \end{array}$$

Für die Fermionfelder wählt man üblicherweise periodische Randbedingungen in den Raumrichtungen und antiperiodische in der Zeit. Diese Wahl hängt mit dem Minuszeichen zusammen, das bei geschlossenen Fermionenloops auftritt. Eine eingehende Untersuchung der Frage der Randbedingungen findet man z.B. in Kapitel 4 in [25].

1.3.3 Die Observablen

In dieser Arbeit wurden folgende Observablen auf dem Gitter numerisch berechnet:

- Die Plaquettewirkung

$$U_P \;=\; \beta \sum_{i,\mu\nu} \left(1 \;-\; \frac{1}{N_c} \mathrm{Re\ Sp}\ U_{i,\mu}\ U_{i+\mu,\nu}\ U^\dagger_{i+\nu,\mu}\ U^\dagger_{i,\nu}\right), \tag{1.35}$$

  die im Kontinuumslimes in $\int d^4x\ F^a_{\mu\nu}(x)\ F^a_{\mu\nu}(x)$ übergeht.

- Das chirale Kondensat, dessen Erwartungswert auf dem Gitter ein Ordnungsparameter für die spontane Brechung der Restsymmetrie $U(N_f) \otimes U(N_f)$ ist. Es ist definiert als

$$< \overline{\psi}\psi(m) > \;=\; m \sum_{i,j} \left((M^\dagger M)^{-1}_{ij} \phi_j\right)^2. \tag{1.36}$$

- Der Polyakov-Loop [29], der als Produkt aller link-Variablen entlang der Zeitrichtung bei festem $\vec{i} = (i_{\hat{1}}, i_{\hat{2}}, i_{\hat{3}})$ definiert ist

$$P(\vec{i}) \;=\; \mathrm{Sp} \prod_{i_{\hat{4}}} U_{(\vec{i},i_{\hat{4}}),\mu=\hat{4}}. \tag{1.37}$$

  Der Erwartungswert von $P(\vec{i})$ hat eine einfache physikalische Bedeutung: In [30] wurde gezeigt, daß $< P(\vec{i}) >$ ein Maß für die freie Energie eines schweren Quarks in einem Gluonfeld ist, relativ zur Energie des Gluonfeldes ohne Quark

$$< P(\vec{i}) > \;=\; e^{-\beta F_q}. \tag{1.38}$$

  Wenn $< P(\vec{i}) >= 0$ ist, dann ist die Differenz der freien Energien unendlich, was Confinement signalisiert. Bei Deconfinement ist F_q endlich und $< P(\vec{i}) > \neq\ 0$.

1.4 Der Kontinuumslimes

Aus der Störungstheorie im Kontinuum weiß man, daß der erste Schritt bei der Renormierung von Green-Funktionen die Regularisierung der entsprechenden Feynman-Integrale im Impulsraum ist, zum Beispiel durch Einführen eines Impulsabschneideparameters Λ (*cut-off*). Die regularisierten Integrale sind in der Regel stark von diesem Parameter abhängig. Der zweite Schritt der Renormierung besteht in der Definition von renormierten Green-Funktionen, die im Limes $\Lambda \to \infty$, einen endlichen Grenzwert erreichen. Wenn man die ursprüngliche Form der Green-Funktionen beibehalten will, erfordert dies, daß die nackten

Parameter der Theorie von Λ abhängig sind. Die Art dieser Abhängigkeit ergibt sich aus der Forderung, daß Kopplungskonstanten und Teilchenmassen für $\Lambda \to \infty$ ihren physikalischen Wert behalten sollen.
In der Gitterformulierung der Theorie besteht der erste Schritt der Renormierung in der Diskretisierung des Raum-Zeit-Kontinuums und in der Formulierung des Pfadintegrals (1.1) auf dem Gitter. Gleichung (1.1) nimmt dann die Form (1.34) an. Der zweite Schritt besteht dann in der Aufhebung der Diskretisierung, indem man $a \to 0$ gehen läßt. Das heißt, daß die mittels (1.34) berechneten Observablen zu ihrem Kontinuumslimes extrapoliert werden müssen. Ganz analog zur Renormierung im Kontinuum müssen dabei die nackten Parameter (z.B. g) so mit a verändert werden, daß die physikalischen Werte der Observablen unabhängig von a sind.
Betrachten wir die Bestimmung einer physikalischen Observable Ω_{phys}. Auf dem Gitter bei nackter Kopplungskonstante g wird sie numerisch bestimmt; ihr Wert sei $\Omega_{\mathrm{Gitter}}(g)$. In physikalischen Einheiten ist

$$\Omega_{\mathrm{Gitter}}(g,a) \;=\; \Omega_{\mathrm{Gitter}}(g)\cdot\left(\frac{1}{a}\right)^{\dim(\Omega)},$$

wo $\dim(\Omega)$ die kanonische Massendimension der Observable ist. Wenn ein Kontinuumslimes dieser Observablen existiert

$$\Omega_{\mathrm{phys}} \;=\; \lim_{a\to 0}\,\Omega_{\mathrm{Gitter}}(g(a),a),$$

dann muß g mit kleiner werdendem a so verändert werden, daß Ω_{phys} von a unabhängig bleibt. $g(a)$ oder äquivalent damit $a(g)$ folgt aus der Renormierungsgruppengleichung (siehe hierzu Kapitel 9 in [21]). Im Falle einer $SU(N_c)$-Eichtheorie mit $\tilde{N}_f$ Flavors gilt im Kontinuumslimes [8] [31]

$$\begin{aligned}
a\Lambda_L &= (\gamma_0 g^2)^{-\gamma_1/2\gamma_0^2}\; e^{-1/2\gamma_0 g^2}\\
\gamma_0 &= \frac{1}{16\pi^2}\left(\frac{11}{3}N_c \;-\; \frac{2}{3}\tilde{N}_f\right)\\
\gamma_1 &= \left(\frac{1}{16\pi^2}\right)^2\left(\frac{34}{3}N_c^2 \;-\; \left(\frac{10}{3}N_c \;+\; \frac{N_c^2-1}{N_c}\right)\tilde{N}_f\right).
\end{aligned} \tag{1.39}$$

Λ_L ist eine Integrationskonstante mit der Dimension einer Masse. Wenn man also eine Observable auf dem Gitter bei genügend kleinen g's bestimmt, sollte sie mit g so skalieren, wie in (1.39) angegeben. Man sagt dann, die Observable zeigt *asymptotic scaling* und weiß, daß ihr physikalischer Wert von a unabhängig ist.
Da numerische Simulationen auf endlichen Gittervolumina durchgeführt werden, ist der Bereich in g, in dem die Observable nach (1.39) skaliert (*scaling window*), klein. Wenn nämlich a bzw. g zu klein werden, dann passen die charakteristischen Längen eines stark

[8] Die Ausdrücke (1.39) sind störungstheoretisch berechnet und gelten somit für kleine Werte von g.

wechselwirkenden Teilchens nicht mehr ins Gittervolumen. Es treten dann endliche Volumeneffekte auf. Vergrößert man andererseits g, so kann das Gitter so grobmaschig werden, daß Fluktuationen auf kleiner Skala nicht mehr berücksichtigt werden.
γ_0 und γ_1 in (1.39) sind die ersten zwei Koeffizienten in der Reihenentwicklung der Callan-Symanzik-β-Funktion

$$a\frac{dg}{da} \;=\; \beta(g) \;=\; -\gamma_0 g^3 - \gamma_1 g^5. \tag{1.40}$$

Das negative Vorzeichen von $\beta(g)$ ist für die asymptotische Freiheit der QCD verantwortlich.

Kapitel 2

Algorithmen

In diesem Kapitel werden die wesentlichen Eigenschaften von Monte-Carlo-Methoden für die Simulation der QCD auf dem Gitter dargestellt. Danach wird auf die in dieser Arbeit verwendeten Algorithmen mit Pseudofermionen besonders eingegangen: Hybrid-Monte-Carlo- und Kramers-Algorithmus. Es folgt die Beschreibung der Parallelimplementierung des HMC-Algorithmus für die CRAY T3E-Rechnersysteme.

2.1 Monte-Carlo-Methoden auf dem Gitter

Hat man einmal eine konkrete Form wie (1.34) für den Erwartungswert physikalischer Observablen hergeleitet, so kann man dieses Pfadintegral analytisch oder numerisch lösen.
Analytische Methoden kann man anwenden, wenn kleine Parameter verfügbar sind, nach denen man das Pfadintegral entwickeln kann. Die *strong-coupling*-Entwicklung zum Beispiel macht richtige Vorhersagen über das statische Interquarkpotential [32], über die Stringkonstante [33] und über das chirale Kondensat [34] im Bereich sehr großer Kopplungen g bzw. kleiner β's. In der statistischen Mechanik ist das Analogon dazu die Hochtemperaturentwicklung. Eine weitere Möglichkeit ist die *Hopping-Parameter*-Entwicklung [23, 35]. Hier wird mit dynamischen Fermionen in der Wilson-Darstellung durch Entwicklung der Wirkung nach dem Hopping-Parameter κ (siehe (1.26)) der Effekt von großen Quarkmassen auf die physikalischen Observablen untersucht.
In der Region, in der die Kopplungskonstante g mittlere Werte annimmt, ist es jedoch schwierig, einen kleinen Entwicklungsparameter zu finden, so daß man hier auf numerische Verfahren zur Berechnung von (1.34) angewiesen ist. Diesen Verfahren wenden wir uns im Folgenden zu, wobei in diesem Paragraph der Einfachheit halber nur die Eichfelder als

Variable betrachtet werden, also (1.34) zu

$$< \Omega >= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \prod_{i,\mu} dU_{i,\mu} \; \Omega(U) \; \exp\left(-S(U)\right), \tag{2.1}$$

wird, mit $S = S_G$ aus (1.18) und $\mathcal{Z}$ aus der Bedingung $< 1 >= 1$.
Wollte man (2.1) mit einem geeigneten Quadraturverfahren numerisch berechnen, dann kann man den Rechenaufwand folgendermaßen abschätzen: Auf einem Gittervolumen von 16^4 Punkten gibt es 4×16^4 Gitterkanten. In Paragraph 3.3.1 wird gezeigt, daß für $N_c = 2$ die Eichfelder durch vier reelle Zahlen parametrisiert werden. Es gibt also 16^5 Eichfeldvariablen, über die integriert werden muß. Mit nur 10 Stützstellen pro Integrationsvariable bedeutet das, daß das Integral (2.1) mit einer Summe von $10^{1048576}$ Termen approximiert werden müßte.
Auf diese Weise kann man also (2.1) nicht lösen. Man greift daher zu verschiedenen Methoden, dieses Integral näherungsweise zu berechnen. Ein recht erfolgreiches Verfahren, dies zu tun, ist die Monte-Carlo-Methode. In ihrer einfachsten Ausführung besteht diese Methode in der zufälligen Erzeugung von Feldkonfigurationen aus dem Raum der Feldvariablen, mit denen man dann (2.1) approximiert. Dieser Weg wäre aber sehr ineffizient, denn tatsächlich haben viele Eichfeldkonfigurationen eine große Wirkung, so daß sie keinen großen Beitrag zu (2.1) liefern würden. Die Methode, die man hier anwendet, besteht in der Erzeugung einer Folge von Eichfeldkonfigurationen $\mathcal{U} = (U^j, \; j = 1, 2, ..., N)$, von denen jede bereits mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_{\mathrm{eq}}(U) \sim \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp\left(-S(U)\right) \tag{2.2}$$

ausgewählt wurde. Man nennt diese Technik *importance sampling*.
Welche Bedingung muß ein Algorithmus erfüllen, damit die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer stochastisch erzeugten Konfigurationenfolge gegen (2.2) konvergiert?
Im Allgemeinen resultiert jede Konfiguration U' aus einem Markov-Prozeß [36], der auf die vorhergehende Konfiguration U angewandt wird. Jeder Markov-Prozeß ist durch eine ergodische[1] Übergangswahrscheinlichkeitsmatrix $W(U \to U')$ $(W > 0)$ charakterisiert. Für diese gilt die Normierungsbedingung

$$\sum_{U'} W(U \to U') \;=\; 1. \tag{2.3}$$

Eine notwendige Bedingung an die Matrix W ist offensichtlich, daß sie die Gleichgewichtsverteilung (2.2) invariant läßt

$$P_{\mathrm{eq}}(U') \;=\; \sum_{U} W(U \to U') \; P_{\mathrm{eq}}(U). \tag{2.4}$$

[1] Bei einem ergodischen Prozeß wird jeder Punkt im Raum der Feldvariablen von jedem anderen Punkt mit endlicher Wahrscheinlichkeit und in endlich vielen Schritten erreicht.

Ist das der Fall, dann kann man Folgendes zeigen:
Sei $P_N(U)$ die Wahrscheinlichkeit, nach N Schritten eines Markov-Prozesses U zu erhalten. Der Abstand zwischen $P_N(U)$ und der Gleichgewichtsverteilung definiert man als

$$\Delta_N \;=\; \sum_U |P_N(U) \;-\; P_{\text{eq}}(U)|. \tag{2.5}$$

Der nächste Schritt des Markov-Prozesses ergibt die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_{N+1}(U') \;=\; \sum_U W(U \to U') P_N(U). \tag{2.6}$$

Für den zugehörigen Abstand Δ_{N+1} gilt mit (2.3) und (2.4)

$$\begin{aligned}
\Delta_{N+1} &= \sum_{U'} |P_{N+1}(U') \;-\; P_{\text{eq}}(U')| \\
&= \sum_{U'} |\sum_U W(U \to U')(P_N(U) \;-\; P_{\text{eq}}(U))| \\
&\leq \sum_{U'} \sum_U W(U \to U')|P_N(U) \;-\; P_{\text{eq}}(U)| = \Delta_N.
\end{aligned}$$

Dann ist

$$\Delta_{N+1} \leq \Delta_N,$$

womit gezeigt wurde, daß der Abstand der Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_N(U)$ von der angestrebten Gleichgewichtsverteilung (2.2) eine monoton fallende Folge in N bildet[2]. Das bedeutet allerdings nicht, daß für jede Konfiguration U $P_{N+1}(U)$ näher an $P_{\text{eq}}(U)$ ist, als $P_N(U)$ es war. Wie man aus der Definition (2.5) sieht, gilt diese Aussage nur für ein Ensemble von Konfigurationen.
Der Beweis von (2.4) ist im allgemeinen schwierig, man fordert stattdessen die strengere, jedoch einfachere Bedingung detaillierten Gleichgewichts

$$P_{\text{eq}}(U)\; W(U \to U') \;=\; P_{\text{eq}}(U')\; W(U' \to U). \tag{2.7}$$

Summiert man hier über U' und verwendet man (2.3), so ergibt sich Bedingung (2.4).
Damit (2.7) erfüllt werden kann, muß der Markov-Prozeß *mikroreversibel* sein, d.h. er muß mit einer endlichen Wahrscheinlichkeit innerhalb des nächsten Schrittes des Algorithmus wieder zur alten Konfiguration zurückgelangen können. Die Bedingung detaillierten Gleichgewichts, die hinreichend aber nicht notwendig ist, damit das Ensemble Gleichgewicht erreicht, bestimmt die Wahrscheinlichkeitsmatrix W nicht eindeutig. Daher hat man die Freiheit, einen für das betrachtete Problem passenden Algorithmus zu konstruieren.

[2]Dies ist noch kein Konvergenzbeweis, dazu müßte man die Ergodizität des Markov-Prozesses verwenden.

Hat man nun eine Folge von Konfigurationen $\mathcal{U} = (U^j, j = 1, 2, ..., N)$ mit Wahrscheinlichkeit P_{eq} erzeugt, dann konvergiert der Mittelwert

$$\overline{\Omega}_N \;=\; \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\Omega(U^j) \tag{2.8}$$

für $N \to \infty$ gegen den Erwartungswert (2.1). Wie erzeugt man nun eine solche Folge?
Allen exakten[3] Algorithmen für die Simulation der QCD liegt eine Prozedur zugrunde, die 1953 von Metropolis et al. [37] vorgeschlagen wurde:
Man startet von einer gegebenen Konfiguration U^{alt}. Gewöhnlich nimmt man $U^{\text{alt}} = 1$ oder eine zufällig ausgewählte Konfiguration. Die Wahl sollte getroffen werden, je nach Relaxationsgeschwindigkeit der verschiedenen Startkonfigurationen zum Gleichgewicht.
Eine neue Konfiguration U^{neu} wird meist stochastisch gewählt.
Die Änderung der Konfiguration geschieht bei *lokalen* Algorithmen so, daß eine einzige link-Variable $U_{i,\mu}$ neu gesetzt wird, während alle anderen unverändert bleiben; bei *globalen* Algorithmen werden alle Variablen des Gitters auf einmal neu gesetzt. U^{neu} ersetzt U^{alt}, falls die Wirkung dadurch vermindert wird

$$S(U^{\text{neu}}) < S(U^{\text{alt}}). \tag{2.9}$$

Ist das nicht der Fall, so wird U^{neu} nur dann akzeptiert, wenn

$$r \;<\; e^{-S(U^{\text{neu}})}/e^{-S(U^{\text{alt}})}$$

ist, wobei $r \in [0,1]$ eine (Pseudo-)Zufallszahl ist.
Trifft auch das nicht zu, so bleibt man bei der alten Konfiguration

$$U^{\text{neu}} \;=\; U^{\text{alt}}.$$

Durch dieses Verfahren wird eine vorgeschlagene Konfiguration mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_A \;\propto\; \min\{1, e^{-S(U^{\text{neu}})}/e^{-S(U^{\text{alt}})}\} \tag{2.10}$$

akzeptiert, so daß man hier die Zustandssumme $\mathcal{Z}$ nicht explizit kennen muß, um Konfigurationen direkt mit der Gleichgewichtswahrscheinlichkeit (2.2) auszusuchen. Es reicht die Kenntnis des Verhältnisses $e^{-S(U^{\text{neu}})}/e^{-S(U^{\text{alt}})}$.
Bei jedem neuen Vorschlag muß wegen der Abfrage (2.9) die Wirkung neu berechnet werden. Das heißt aber, daß lokale Algorithmen nur dann effektiv sind, wenn Systeme untersucht werden, deren Wirkung eine lokale Funktion der Feldvariablen ist. Dann kann man die Abfrage (2.9) lediglich auf die Umgebung der veränderten link-Variable beschränken.

[3] Mit dem Begriff *exakte Algorithmen* meint man die Algorithmen, bei denen die Diskretisierungsfehler in eine Metropolis-Abfrage absorbiert werden. Was eine Metropolis-Abfrage ist, wird weiter unten erklärt.

Hängt S nicht-lokal von den Feldvariablen ab, wie es der Fall ist, wenn man dynamische Fermionen einbezieht[4], dann wird ein lokaler Algorithmus sehr ineffizient, da die Matrixinversion $(M^\dagger M)^{-1}\phi$ bei jeder Änderung einer einzigen Variablen berechnet werden müßte. In diesem Fall braucht man globale Algorithmen, die alle Gittervariablen auf einmal ändern. In [21] Kapitel 15, [25] Kapitel 7 und [38] werden sehr ausführlich globale Algorithmen beschrieben und ihre Vor- und Nachteile untersucht.

2.2 Der Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus

Wie ist ein effizienter, globaler Algorithmus für die QCD mit dynamischen Fermionen beschaffen?
Versucht man z.B. alle Gittervariablen auf einmal stochastisch neu zu setzen, dann würde dieses Vorgehen im allgemeinen große Änderungen der Wirkung hervorrufen[5]. Die Akzeptanzrate für Feldkonfigurationen mit erhöhter Wirkung wäre dann gering (siehe (2.10)) und das System würde sich nur sehr langsam im Konfigurationsraum fortentwickeln.
Anders sieht es aus, wenn man zu den Feldvariablen U und ϕ fiktive konjugierte Impulse π und p und die Hamilton-Funktion

$$H \;=\; \frac{1}{2}\sum_{i,\mu,k}\pi^2_{i,\mu,k} \;+\; \frac{1}{2}\sum_i p_i^* p_i \;+\; S(U,\phi,\phi^*) \tag{2.11}$$

einführt. Hier spielt die Wirkung die Rolle eines Potentials, die Impulse p_i sind komplexe Zahlen wie auch die $\pi_{i,\mu,k}$, die zusammen mit den Generatoren λ_k der $SU(N_c)$ Elemente der Lie-Algebra bilden

$$\pi_{i,\mu} \;=\; \sum_{k=1}^{N_c^2-1}\lambda_k\pi_{i,\mu,k}. \tag{2.12}$$

Mit (2.11) stellt man diskretisierte klassische Hamilton-Gleichungen für U,ϕ,π und p auf, die die Dynamik des Systems in einer neuen Zeitvariablen, der Simulationszeit τ, beschreiben. Am Endpunkt dieser klassischen Trajektorie betrachtet man die neu entstandene Konfiguration $\{U^{\rm neu},\phi^{\rm neu}\}$ als Vorschlag, der mit Metropolis-Wahrscheinlichkeit

$$P_A \;\propto \min\{1, e^{-H^{\rm neu}}/e^{-H^{\rm alt}}\} \tag{2.13}$$

akzeptiert wird. Die Ursache für die Differenz zwischen $H^{\rm neu}$ und $H^{\rm alt}$ ist der systematische Fehler, zu dem die Diskretisierung der Hamilton-Gleichungen führt.
In diesem Zusammenhang ist ein Observablenerwartungswert durch das Pfadintegral

$$<\Omega>=\frac{1}{\mathcal{Z}}\int \mathcal{D}\pi\;\mathcal{D}p\;\mathcal{D}p^*\;\mathcal{D}U\;\mathcal{D}\phi\;\mathcal{D}\phi^*\;\Omega(U,\phi,\phi^*)\exp(-H) \tag{2.14}$$

[4] S ist in diesem Fall nicht-lokal, weil $(M^\dagger M)^{-1}$ nicht-lokal ist.
[5] Die Änderung von S steigt mit der Systemgröße: $\Delta S \sim V^{1/2}$.

gegeben und ist offensichtlich äquivalent zu (1.34), da die Observablen von π und p unabhängig sind. Die Gaußintegrale über die Impulse sind daher trivial zu berechnen und die daraus resultierenden Vorfaktoren werden durch die Normierung weggekürzt.
Das ist die Idee, die dem Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus (HMC) zugrunde liegt [39, 40]. Die Bezeichnung *Hybrid* rührt daher, daß dieser Algorithmus eine Kombination aus dem stochastischen Langevin-Algorithmus [41] und aus der deterministischen Molekulardynamik- (oder mikrokanonischen) Methode ist [42].
Wie sehen die Bewegungsgleichungen für U, ϕ, π und p aus?
Setzt man in (2.11) die Wirkung (1.33) ein, so ergibt sich für die Hamilton-Gleichungen

$$\begin{aligned}
\dot{\phi}_i(\tau) &= p_i(\tau), && (2.15)\\
\dot{p}_i(\tau) &= -\sum_j (M^\dagger M)^{-1}_{ij}\phi_j(\tau), && (2.16)\\
\dot{U}_{i,\mu}(\tau) &= i\pi_{i,\mu}(\tau)U_{i,\mu}(\tau), && (2.17)\\
\dot{\pi}_{i,\mu,k}(\tau) &= -\frac{\partial S_G}{\partial U_{i,\mu}(\tau)} - \sum_{i,j}\phi_i^*(\tau)\frac{\partial(M^\dagger M)^{-1}_{ij}}{\partial U_{i,\mu}(\tau)}\phi_j(\tau). && (2.18)
\end{aligned}$$

Die Bewegungsgleichung (2.17) für $U_{i,\mu}$ ergibt sich aus der Forderung, daß die Eichfelder während der Phasenraumevolution Elemente der Eichgruppe bleiben sollen [43, 44]. Aus der Forderung, daß H eine Konstante der Bewegung sei, erhält man aus (2.18) [44]

$$i\dot{\pi}_{i,\mu,k} = \Big(\frac{1}{\beta}\; U^P_{i,\mu\nu} - 2U_{i,\mu}\big(\sum_\nu U_{i+\mu,\nu}X_{(i+\mu+\nu)i} - \sum_{\nu\neq\mu} U^\dagger_{i+\mu-\nu,\nu}X_{(i+\mu+\nu)i}\big)\Big)_{sa}, \qquad (2.19)$$

wobei der Index sa den spurfreien, antihermiteschen Teil einer Matrix A bezeichnet

$$(A)_{sa} \;=\; \frac{1}{2}(A \;-\; A^\dagger) - \frac{1}{4}\mathrm{Tr}\,(A \;-\; A^\dagger)$$

und

$$X_{ij} \;=\; \phi_i^*(M^\dagger M)^{-1}_{ik}(M^\dagger M)^{-1}_{kj}\phi_j. \qquad (2.20)$$

Die vier Gleichungen (2.15) bis (2.18) könnte man nun diskretisieren und numerisch lösen, um damit Konfigurationen $\{U, \phi\}$ zu erhalten, die als Vorschlag in die Metropolis-Abfrage eingehen. Es gibt aber einen schnelleren Weg, diese Konfigurationen zu erzeugen, bei dem man sich die Integration zweier der vier Gleichungen sparen kann, wenn man sich auf die Dynamik der Eichfelder beschränkt und die Fermionfelder währenddessen festhält. Und zwar erzeugt man an jedem Gitterpunkt einen gaußverteilten Vektor η_i[6]

$$P_\eta \;\propto\; \exp\{-\sum_i \eta_i^*\eta_i\} \qquad (2.21)$$

[6] Wie man Gauß-Verteilungen erzeugt, kann man in [25] S.420 nachlesen.

und berechnet dann

$$\phi_i \;=\; \sum_j M^\dagger_{ij}\eta_j. \tag{2.22}$$

Damit erhält man eine Quarkfeldkonfiguration $\phi^{\rm neu}$ bei *festen* $U_{i,\mu}$ mit der richtigen Verteilung

$$P_\phi \;\propto\; \exp\{-\sum_{i,j}\phi^*_i(M^\dagger M)^{-1}_{ij}\phi_j\}. \tag{2.23}$$

Nun hält man die ϕ_i *fest* und erneuert die link-Variablen $U_{i,\mu}$. Das geschieht wie folgt: Man wählt zunächst auf jedem link einen gaußverteilten Impuls $\pi_{i,\mu,k}$

$$P_\pi \;\propto\; \exp\{-\frac{1}{2}\sum_{i,\mu,k}\pi^2_{i,\mu,k}\}. \tag{2.24}$$

Dann wählt man eine Startkonfiguration $U^{\rm alt}$. Von dieser und von den oben gesetzten Impulsen läßt man $U_{i,\mu}$ und $\pi_{i,\mu,k}$ mittels (2.17) und (2.19) sich zeitlich entwickeln, wobei – wie schon erwähnt – während der gesamten Trajektorie die ϕ_i festgehalten werden. Die Konfiguration $\{U^{\rm neu},\phi^{\rm neu}\}$ wird dann mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_A \;\propto\; \min\{1, e^{-\hat{H}^{\rm neu}}/e^{-\hat{H}^{\rm alt}}\} \tag{2.25}$$

angenommen. Dabei ist $\hat{H}$ die Hamilton-Funktion für die zeitliche Entwicklung der link-Variablen bei *festgehaltenen* ϕ_i

$$\hat{H} \;=\; \frac{1}{2}\sum_{i,\mu,k}\pi^2_{i,\mu,k} \;+\; S_G(U) \;+\; \sum_{i,j}\phi^*_i(M^\dagger M)^{-1}_{ij}\phi_j. \tag{2.26}$$

Um die Integration der Gleichungen (2.17) und (2.19) numerisch durchzuführen, werden diese diskretisiert, indem man einen endlichen Zeitschritt dt einführt. Für die numerische Integration verwendet man das leapfrog-Verfahren, bei dem die Eichfelder zu Zeiten $\tau = l\cdot dt,\; l = 0,1,..$ und die Impulse in der Mitte der Zeitintervalle – also bei $\tau = l\cdot dt + \frac{dt}{2}$ – berechnet werden. Hier also für den ersten halben Integrationsschritt

$$\pi_{i,\mu,k}(\frac{dt}{2}) \;=\; \pi_{i,\mu,k}(0) + \frac{dt}{2}\;\dot{\pi}_{i,\mu,k}(U_{i,\mu}(0)), \tag{2.27}$$

für l = 0,1,...,n-1

$$U_{i,\mu}(l\cdot dt + dt) \;=\; U_{i,\mu}(l\cdot dt)\exp\{\sum_k i dt\lambda_k\pi_{i,\mu,k}(l\cdot dt + \frac{dt}{2})\}, \tag{2.28}$$

für l = 1,2,...,n-1

$$\pi_{i,\mu,k}(l\cdot dt + \frac{dt}{2}) \;=\; \pi_{i,\mu,k}(l\cdot dt - \frac{dt}{2}) + dt\;\dot{\pi}_{i,\mu,k}(U_{i,\mu}(l\cdot dt)) \tag{2.29}$$

und schließlich für den letzten halben Schritt

$$\pi_{i,\mu,k}(n \cdot dt) \;=\; \pi_{i,\mu,k}(n \cdot dt - \frac{dt}{2}) + \frac{dt}{2}\;\dot{\pi}_{i,\mu,k}(U_{i,\mu}(n \cdot dt)) \tag{2.30}$$

mit $\dot{\pi}$ aus (2.19). Man wählt gewöhnlich dieses Verfahren, weil es die einfachste Integrationsmethode darstellt, die zeitumkehrbar ist. Die Mikroreversibilität des Verfahrens ist notwendig, damit die Forderung (2.7) überhaupt erfüllt werden kann, dann weiß man sicher, daß die Gleichgewichtsverteilung Fixpunkt der Markov-Kette ist.
Beim leapfrog sind die Integrationen mit halbem Schritt mit einem Diskretisierungsfehler der Ordnung $O(dt^2)$ behaftet. Bei den Integrationen mit ganzem Schritt ist der Fehler dagegen nur $O(dt^3)$. Durch den Diskretisierungsfehler entsteht eine Differenz in der Gesamtenergie (2.26) zwischen Anfang und Ende der Trajektorie. Diese Differenz bestimmt nach (2.25), ob die neue Konfiguration akzeptiert wird oder nicht. Das heißt: Durch Verminderung des Zeitschritts dt kann man die Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Algorithmus erhöhen.
Der rechenzeitaufwendigste Schritt bei diesem Verfahren ist die Berechnung von $\dot{\pi}$, bei der man die Inversion der Matrix $M^\dagger M$ ausführen muß, um X_{ij} zu berechnen. Diese Inversion wird gewöhnlich mit der Methode des konjugierten Gradienten durchgeführt [45]. Allein dieser Schritt nimmt 88% der Rechenzeit eines HMC-Updates[7] in Anspruch. Auf dieses Verfahren wird am Ende dieses Kapitels eingegangen werden.
Zum besseren Verständnis der Ergebnisse in Kapitel 4 ist an dieser Stelle eine Bemerkung angebracht: Der HMC-Algorithmus kann auch in statischer Näherung, d.h. ohne dynamische Fermionen realisiert werden, wenn man in (2.19) $X_{ij} = 0$ setzt, was die Matrixinversion erspart und die Simulation damit deutlich billiger macht. Die Ergebnisse einer solchen Simulation werden in der englischsprachigen Fachliteratur mit *quenched* bezeichnet. Vom theoretischen Standpunkt heißt das, daß man in (1.30) $\det M(U) = 1$ setzt. Diese Näherung entspricht einer Theorie mit $m \to \infty$.

Zusammenfassend besteht ein Hybrid-Monte-Carlo-Update aus folgenden Schritten:

1. Man wählt eine Startkonfiguration U^{alt}.

2. Die fermionischen Felder werden gaußverteilt nach (2.21) gesetzt und ϕ_i aus (2.22) berechnet.

3. Man setzt $\pi_{i,\mu,k}$ gaußverteilt nach (2.24).

4. Eine leapfrog-Integration mit n Schritten wird nach den Vorschriften (2.27) bis (2.30) durchgeführt.

[7]Ohne Berechnung des Spektrums des Dirac-Operators.

5. Man berechnet die globale Änderung der Energie $\Delta\hat{H} = \hat{H}^{\text{alt}} - \hat{H}^{\text{neu}}$ und akzeptiert die aktuelle Konfiguration mit Wahrscheinlichkeit (2.25).

6. Die neue oder die alte Konfiguration wird gespeichert wie vom Metropolis-Test vorgeschrieben und die Observablen werden berechnet.

7. Mit der gespeicherten Konfiguration geht man zu 2. zurück und wiederholt die Schritte 2. bis 7. bis eine ausreichende Anzahl von Konfigurationen erzeugt worden ist.

In [21], Kapitel 15 wird gezeigt, daß diese Prozedur die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (2.7) erfüllt.

2.3 Der Kramers-Algorithmus

Bis heute ist das Hybrid-Monte-Carlo-Verfahren der meist benutzte Algorithmus für die QCD mit dynamischen Fermionen. Es stellt eine exakte Methode dar, weil der durch die Diskretisierung entstandene Fehler in den Metropolis-Akzeptanztest absorbiert wird. Er ist ein gut zu vektorisierender und zu parallelisierender Algorithmus. Aber er stellt eine sehr zeitaufwendige Methode dar, da man bei jedem Schritt der leapfrog-Integration die Inversion der Matrix $M^\dagger M$ durchführen muß.
Ein weiterer negativer Aspekt vom HMC ist sein Mangel an Umkehrbarkeit, den man vor allem auf größeren Gittern erwartet und teilweise auch schon beobachtet hat [46]. Es ist zu befürchten, daß durch die Anhäufung von Rundungsfehlern während der numerischen Integration der Hamilton-Gleichungen die Umkehrbarkeit der Trajektorie verlorengeht, welche notwendig für die Erfüllung der Bedingung des detaillierten Gleichgewichts ist.
Alternativen zum HMC sind also willkommen.
Neben dem lokalen bosonischen Algorithmus von M. Lüscher [47], auf den hier nicht weiter eingegangen werden wird, gibt es einen alternativen Vorschlag, der auf der Kramers-Gleichung basiert [48] und den man als eine Variante des HMC betrachten kann, bei der man den Metropolis-Test nach einer leapfrog-Trajektorie der Länge $n = 1$ durchführt.
Die Bewegungsgleichungen, die die Zeitevolution beschreiben, sind bei dem Kramers-Algorithmus formal gegeben durch[8]

$$\begin{aligned} \dot{\pi} &= -\frac{\partial H}{\partial \phi} - \gamma\pi + \xi(t) \\ \dot{\phi} &= \frac{\partial H}{\partial \pi}. \end{aligned} \tag{2.31}$$

[8]Die Kramers-Gleichung erhält man, wenn man (2.31) als Differentialgleichung 2. Ordnung in ϕ umschreibt.

Bis auf die gaußverteilte Variable $\xi(t)$ und einen Reibungsterm mit Kopplungsstärke γ, sehen sie fast wie Hamilton-Gleichungen aus. Das updating-Schema wird folgendermaßen realisiert:

1. Man wählt eine Startkonfiguration U^{alt}.
2. Die Pseudofermionfelder ϕ_i werden nach (2.21) und (2.22) erzeugt.
3. Gaußverteilte Impulse $\pi_{i,\mu,k}$ werden wie beim HMC-Algorithmus gesetzt.

Die Schritte 2. und 3. werden lediglich nach j leapfrog-Trajektorien ausgeführt.

4. Am Anfang jeder Trajektorie werden die Impulse nach
$$\pi_{i,\mu,k}(dt) = e^{-\gamma dt}\ \pi_{i,\mu,k}(0)\ +\ \sqrt{1\ -\ e^{-2\gamma dt}} \cdot \xi_{i,\mu,k}(0) \tag{2.32}$$
neu gesetzt, wobei $\xi_{i,\mu,k}(0)$ gaußverteilt ist wie π in (2.24) und γ ein reeller Parameter ist.
5. Man führt dann eine leapfrog-Integration wie beim HMC-Algorithmus durch jedoch mit $n = 1$.
6. Es folgt der Metropolis-Test.
7. Falls die Konfiguration nicht akzeptiert wird, stellt man die alten $U_{i,\mu}$ Felder wieder her und ändert das Vorzeichen der Impulse[9]
$$\pi^{\mathrm{neu}}_{i,\mu,k}\ =\ -\ \pi^{\mathrm{alt}}_{i,\mu,k}. \tag{2.33}$$
8. Nachdem die Observablen berechnet wurden, geht man mit der gespeicherten Konfiguration zu 4. zurück.

Hier ist zu bemerken, daß im Grenzwert $j = 1$ und $\gamma \to \infty$ dieser Algorithmus dem HMC mit $n = 1$ entspricht.

2.4 Effizienz von Algorithmen

Mit dem HMC- bzw. Kramers-Algorithmus und dem Mittelwert (2.8) hat man nun eine Möglichkeit Observablenerwartungswerte wie Plaquette und chirales Kondensat abzuschätzen. Was allerdings noch nicht heißt, daß diese effiziente Algorithmen sind.

[9] Das ist zur Erfüllung der Bedingung des detaillierten Gleichgewichts erforderlich.

Woran kann man überhaupt die Effizienz von Monte-Carlo-Algorithmen festmachen [49] ? Dieser Frage soll im Folgenden nachgegangen werden.
Die Hauptschwierigkeit bei der Berechnung von Observablenerwartungswerten besteht nämlich darin, daß die via Markov-Prozeß erzeugten Konfigurationen $U^j,\ j=1,2,...$ per Konstruktion miteinander korreliert sind, eventuell sogar sehr stark. Dadurch ist die naive Fehlerabschätzungsformel für eine Observable Ω

$$(\Delta\Omega_{\rm naiv})^2 \;=\; \frac{1}{N}(<\Omega^2> \;-\; <\Omega>^2) \;=\; \frac{\mathrm{var}(\Omega)}{N}, \tag{2.34}$$

die für N dekorrelierte Daten Ω_i gültig ist, nicht mehr richtig.
Das mittlere Fehlerquadrat ist nämlich folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned}
(\Delta\Omega)^2 &= \Big\langle\Big(\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}(\Omega_i-\langle\Omega\rangle)\Big)^2\Big\rangle \\
&= \frac{1}{N^2}\sum_{i,j}\langle\Omega_i\Omega_j\rangle - \frac{2}{N}\langle\Omega\rangle\Big\langle\sum_i\Omega_i\Big\rangle + \langle\Omega\rangle^2 \\
&= \frac{1}{N^2}\Big(\sum_i\langle\Omega_i^2\rangle \;+\; \sum_{i\neq j}\langle\Omega_i\Omega_j\rangle\Big) - \langle\Omega\rangle^2 \\
&= \frac{1}{N}\langle\Omega^2\rangle \;+\; \frac{1}{N^2}\sum_{i\neq j}\langle\Omega_i\Omega_j\rangle - \frac{1}{N}\langle\Omega\rangle^2 - \frac{N-1}{N}\langle\Omega\rangle^2 \\
&= \frac{1}{N}\Big(\langle\Omega^2\rangle-\langle\Omega\rangle^2\Big)\left(1+\frac{1}{N^2}\sum_{i\neq j}\Big(\langle\Omega_i\Omega_j\rangle-\langle\Omega\rangle^2\Big)\Big(\frac{1}{N}(\langle\Omega^2\rangle-\langle\Omega\rangle^2)\Big)^{-1}\right) \\
&= \frac{\mathrm{var}(\Omega)}{N}\left(1+\frac{1}{N}\sum_{i\neq j}\frac{\langle\Omega_i\Omega_j\rangle-\langle\Omega\rangle^2}{\mathrm{var}(\Omega)}\right).
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Sind die Daten Ω_i statistisch unabhängig, so verschwindet die Korrelationsfunktion $<\Omega_i\Omega_j> - <\Omega>^2$ und $(\Delta\Omega)^2 = (\Delta\Omega_{\rm naiv})^2$. Die Größe

$$\rho(i,j) \;=\; \frac{<\Omega_i\Omega_j> - <\Omega>^2}{\mathrm{var}(\Omega)} \tag{2.36}$$

bezeichnet man als *normierte Autokorrelationsfunktion* von Ω. Bei Markov-Prozessen läßt sich zeigen, daß diese nur von $t=|i-j|$ abhängt. Die normierte Autokorrelationsfunktion zeigt üblicherweise für große t ein exponentielles Verhalten

$$\rho(t) \propto e^{-\frac{|t|}{\tau}}, \tag{2.37}$$

oft auch eine Überlagerung von mehreren Exponentialfunktionen mit verschiedener Abklingzeit τ. Man definiert also für jede Observable eine *exponentielle Autokorrelationszeit*

$$\tau_{\exp,\Omega} = \lim_{t\to\infty}\frac{t}{-\log\rho(t)}, \qquad \tau_{\exp} = \sup_{\Omega}\tau_{\exp,\Omega}. \tag{2.38}$$

τ_{exp} ist demnach die Relaxationszeit, die die größte Zeitskala des Systems charakterisiert und damit ein Maß für die Equilibrationszeit des Markov-Prozesses, d.h. nach wievielen Monte-Carlo-Schritten die Gleichgewichtsverteilung erreicht ist. In der Praxis reichen etwa $20 \cdot \tau_{\text{exp}}$. Dann ist nämlich der Abstand von der Gleichgewichtsverteilung $e^{-20}(\approx 2 \times 10^{-9})$ mal der Anfangsabstand vom Gleichgewicht[10].
Weiterhin läßt sich für Markov-Prozesse zeigen, daß $\rho(t)$ stets asymptotisch beschränkt ist. Dann kann man das mittlere Fehlerquadrat (2.4) für große N durch

$$(\Delta\Omega)^2 = (\Delta\Omega_{\text{naiv}})^2\Big(1 + 2\sum_{t=1}^{\infty}\rho(t)\Big) \tag{2.39}$$

approximieren. Den Ausdruck in Klammern bezeichnet man als *integrierte Autokorrelationszeit* von Ω

$$\tau_{\text{int},\Omega} \;=\; \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty}\rho(t), \tag{2.40}$$

so daß sich der mittlere Fehlerquadrat in folgender Form schreiben läßt

$$(\Delta\Omega)^2 = (\Delta\Omega_{\text{naiv}})^2 \cdot 2\tau_{\text{int},\Omega}. \tag{2.41}$$

Die integrierte Autokorrelationszeit ist also von praktischer Bedeutung bei der Fehlerberechnung von korrelierten Daten. Zur Abschätzung von τ_{int} ist folgendes zu bemerken:
Würde man die Summation in (2.40) bis $N-1$ ausführen, so wäre das kein guter Schätzwert für τ_{int}, da deren Varianz für $N \to \infty$ nicht gegen Null geht. Das liegt daran, daß $\rho(t)$ für große $t \to N$ nur aus wenigen Werten $(N-t)$ bestimmt wird, so daß es stark streut. Man bricht daher die Reihe bei endlichem M ab, wodurch ein Bias eingeführt wird

$$\text{bias}(\tau_{\text{int},\Omega}) \;=\; -\frac{1}{2}\sum_{|t|>M}\rho(t) + O(\frac{1}{N}). \tag{2.42}$$

Die Varianz von $\tau_{\text{int},\Omega}$ ist andererseits

$$\text{var}(\tau_{\text{int},\Omega}) \;\approx\; \frac{2(2M+1)}{N}\tau_{\text{int},\Omega}^2. \tag{2.43}$$

Die Wahl von M stellt also ein Balanceakt zwischen Bias und Varianz dar. Die Erfahrung zeigt, daß man mindestens $M \geq 6\tau_{\text{int},\Omega}(M)$ wählen sollte.
Da auf Grund der Korrelation der Monte-Carlo-Daten von N Observablenmessungen nur $\frac{N}{2\tau_{\text{int}}}$ effektiv voneinander unabhängig sind, bedeutet das, daß die Effizienz eines Algorithmus hauptsächlich durch seine Autokorrelationszeit bestimmt ist. Wenn man also zwei Monte-Carlo-Algorithmen vergleicht, dann ist der effizientere derjenige mit der geringeren Autokorrelationszeit, wenn man diese in Einheiten der Computerzeit (CPU-Zeit) mißt.

[10] Zur Abschätzung von τ_{exp} siehe [49].

2.5 Beschreibung der Parallelimplementierung

Für die Simulation der QCD mit $SU_c(2)$-Eichfeldern und dynamischen Kogut-Susskind-Fermionen stand uns ein vektorisierter Fortran-Code des HMC-Algorithmus zur Verfügung. Damit liefen Simulationen ohne Spektrumsberechnung auf Gittern mit $V = 8^3 \cdot 16$, mit Massen $m = 0.1$ und bei $\beta = 2.0$ mit ca 200 MFLOPS auf einer CRAY Y-MP4E. Wie man weiter unten sehen wird, kann man bei dieser Masse noch kein Vergleich mit den Vorhersagen der Random-Matrix-Theorie anstellen. Hierzu braucht man kleinere Massen, was dazu führt, daß der konjugierte Gradient für die Matrixinversion mehr Iterationen braucht. Man braucht auch eventuell eine größere Flavoranzahl ($N_f > 1$) und die Möglichkeit auch auf größere Volumina zu simulieren. Damit wäre jedoch die Y-MP überlastet: Ein Update mit Gittergröße 16^4, Masse $m = 0.1$ bei $\beta = 2.0$ braucht eine CPU-Zeit von ca 4000 sec ebenfalls ohne Spektrumsberechnung. Um die Simulationen im obigen Sinn ausweiten zu können, entschieden wir uns daher, den vorhandenen Programmcode für massiv parallele Rechensysteme umzuschreiben.

Im Falle eines Gittermodells ist die Aufteilung der Berechnungen auf mehreren Prozessoren besonders einfach: man teilt das physikalische vierdimensionale Gitter in nichtüberlappende Untergitter gleicher Größe und gibt jeder Prozessoreinheit ein solches Gitter zu berechnen (Abb. 2.1). Alle Prozessoreinheiten arbeiten also gleichzeitig und unabhängig voneinander mit dem gleichen Programm.

Wie im Folgenden klar werden wird, erfordert die Simulation der QCD einige Kommuni-

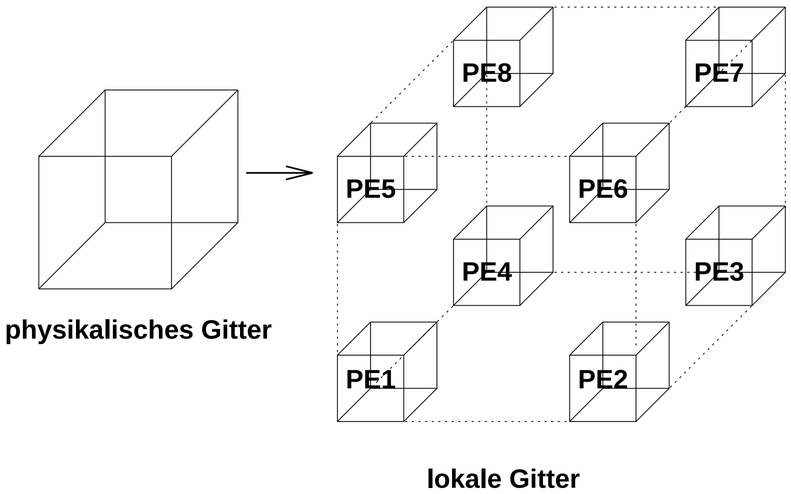

Abbildung 2.1: Verteilung des physikalischen Gitters auf acht PEs in drei Dimensionen. Es werden mindestens zwei PEs pro Gitterdimension benötigt.

kation unter den einzelnen Knoten. Dieser Aufwand wird minimiert, wenn man die Oberfläche der lokalen Gitter minimiert. Man sollte daher für diese möglichst eine kubische Form wählen.

Der hohe Kommunikationsaufwand bei der Simulation der QCD war auch ein Grund für die Wahl der CRAY T3E-Rechensysteme[11] für die Parallelimplementierung: Neben der hohen Leistung ihrer DEC ALPHA Mikroprozessoren[12] verfügen diese Rechner über einen sehr effizienten Datenaustausch unter den einzelnen Prozessoreinheiten. Dieser wird unter anderem durch das leistungsfähige Verbindungsnetz zwischen den verschiedenen Knoten gewährleistet. Das Netz bildet einen 3D-Torus, dessen Verbindungskanäle in jeder Dimensionsrichtung bidirektional Daten transferieren können und zwar mit einer Latenzzeit von ca 1 μs. Damit ist die Zeit gemeint, die vergeht, bis das erste Wort, welches von einem Prozessor abgeschickt wurde, von einem anderen Prozessor empfangen wird.
Die Simulation der QCD ist in dieser Arbeit auf zwei Farben beschränkt, es ist also $N_c = 2$. Das heißt, die Gluonfreiheitsgrade $U_{i,\mu}$ sind Elemente der Eichgruppe $SU_c(2)$. Diese werden von Elementen der $SU_c(2)$-Algebra erzeugt, welche eine wohldefinierte Darstellung der Pauli-Matrizen $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ hat. Mit der Einheitsmatrix $\sigma_0 \in \mathbf{C^2}$ kann jedes Element $g \in SU_c(2)$ auf folgender Weise geschrieben werden

$$g = u^0\sigma_0 + i\ \vec{\sigma} \cdot \vec{u} = \begin{pmatrix} u^0 + i\ u^3 & u^2 + i\ u^1 \\ -u^2 + i\ u^1 & u^0 - i\ u^3 \end{pmatrix}, \tag{2.44}$$

wobei u^α ein reeller Vektor aus $\mathbf{S^3}$ und $\alpha = 0, 1, 2, 3$ der Farbindex in dieser Darstellung ist. Da die Eichfelder auf den Gitterkanten definiert sind, haben sie noch den Index μ, der von $\hat{1}$ bis $\hat{4}$ läuft und die Raum-Zeit-Richtung der Gitterkanten bezeichnet. Damit werden die Eichfelder als $u^\alpha_{i,\mu}$ auf dem Computer realisiert, wobei i der Gitterpunkt ist, von dem die Gitterkanten μ ausgehen.
Die Pseudofermionfelder η_i bzw. ϕ_i (siehe (2.22)) sind zweidimensionale komplexe Vektoren. Wir verwenden dafür eine reelle Darstellung und implementieren sie als

$$\eta = \begin{pmatrix} \eta^0 + i\eta^3 \\ -\eta^2 + i\eta^1 \end{pmatrix}. \tag{2.45}$$

Da die Fermionfelder auf den Gitterpunkten definiert sind, braucht man zu deren Kennzeichnung lediglich einen zusätzlichen Farbindex α, so daß man dafür η^α_i hat.
Mit dieser Implementierung ist die Berechnung vieler Observablen besonders leicht.
Da $(M^\dagger M)$ nur gerade (ungerade) Gitterpunkte mit geraden (ungeraden) verbindet, ist es naheliegend das Gitter in ein gerades und ein ungerades Untergitter aufzuteilen. Den Gitterpunktindex i läßt man dann bis zur halben Gittergröße laufen und man führt noch einen Paritätsindex *par* ein, der es ermöglicht, zwischen den beiden Untergittern umzuschalten. Somit sieht die Darstellung der Felder auf jeder Prozessoreinheit (also lokal) folgendermaßen aus

```
real eta (alpha=0..3,          i=1..sites/2, par=0,1)
real u   (alpha=0..3, mu=1..4, i=1..sites/2, par=0,1).
```

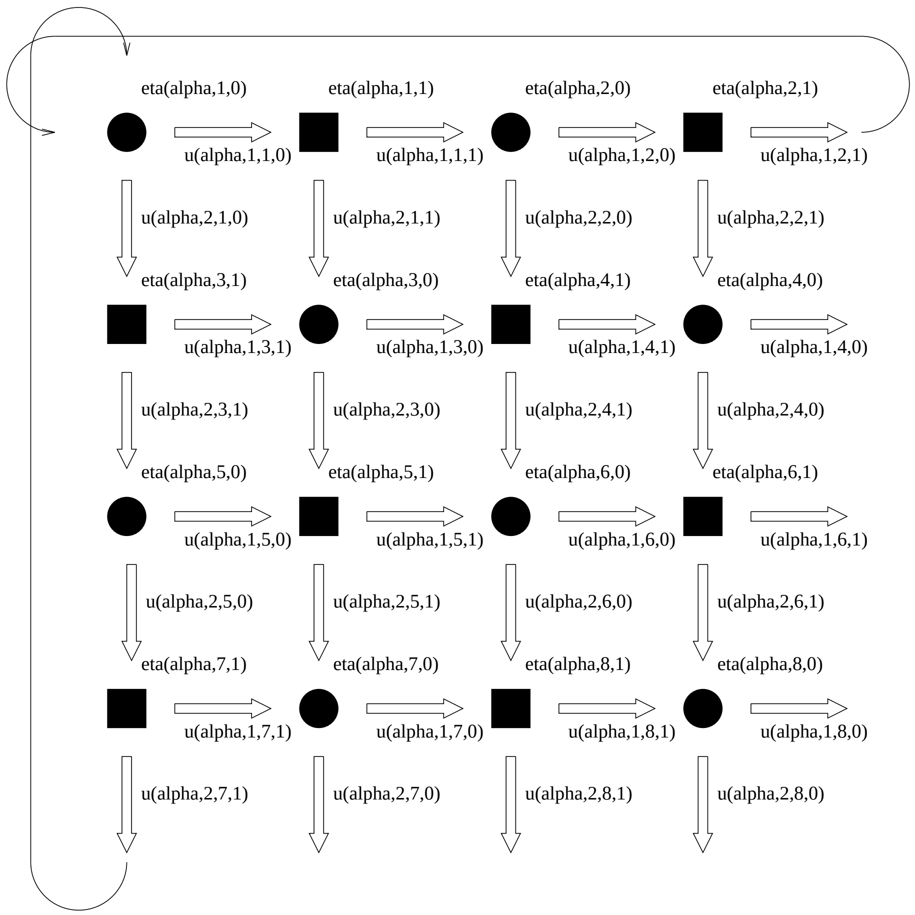

Abbildung 2.2: Diese Abbildung zeigt die Indizierung der Felder auf einem zweidimensionalen Gitter mit periodischen Randbedingungen. Die ungeraden Gitterpunkte werden durch Quadrate, die geraden durch Kreise wiedergegeben. Die Pfeile stehen für die Gitterkanten, auf denen die Elemente der Eichgruppe definiert sind.

Die Feldindizierung ist in Abbildung 2.2 veranschaulicht.
Der $SU_c(2)$-Index `alpha` steht in den Feldern an erster Stelle, weil diese Elemente bei einer Gruppenmultiplikation, z.B. $(u_{i,\mu} \cdot \eta_{i+\mu})^{\alpha=0} = u^0_{i,\mu}\eta^0_{i+\mu} - u^3_{i,\mu}\eta^3_{i+\mu} - u^2_{i,\mu}\eta^2_{i+\mu} - u^1_{i,\mu}\eta^1_{i+\mu}$ alle gebraucht werden. Der Speicherzugriff ist bei der T3E schneller, wenn man linear mit Schrittweite 1 von einem Element zum nächsten geht. Aus dem gleichen Grund ist der Index `mu` an zweiter Stelle positioniert. Bevor man nämlich bei der Berechnung von $M^\dagger\eta$ zum nächsten Gitterpunkt weitergeht, berechnet man die Summe über alle vier Dimensionsrichtungen `mu` (siehe (2.46)).
Hier ist das Matrix-Vektor-Produkt $\phi = M^\dagger\eta$ aus (2.22) nochmal ausführlich ausgeschrie-

[11] Für technische Details dieser Rechnersysteme siehe die sehr ausführliche Dokumentation [50].
[12] 600 MFLOPS bei der T3E und 900 MFLOPS bei der neueren T3E-900.

ben

$$\phi_i \;=\; \sum_j M^\dagger_{ij}\eta_j \;=\; \frac{1}{2}\sum_\mu \alpha_{i,\mu}\left(U^\dagger_{i-\mu,\mu}\eta_{i-\mu} \;-\; U_{i,\mu}\eta_{i+\mu}\right) \;+\; m\eta_i. \qquad (2.46)$$

Um es zu berechnen braucht jede Prozessoreinheit eine bestimmte Anzahl von $u^\alpha_{i,\mu}$- und η^α_i-Felder, die sich auf den Randflächen der Gitter seiner Nachbarprozessoren befinden, wobei die Felder auf den Ecken und Kanten der benachbarten Prozessoreinheit nicht benötigt werden.
Dagegen müssen bei der Berechnung der Plaquette (1.19) die $u^\alpha_{i,\mu}$-Felder auf Ecken und Kanten der Randflächen ebenfalls den lokalen Speichern der Nachbareinheiten mitgeteilt werden[13] (Abb. 2.3).

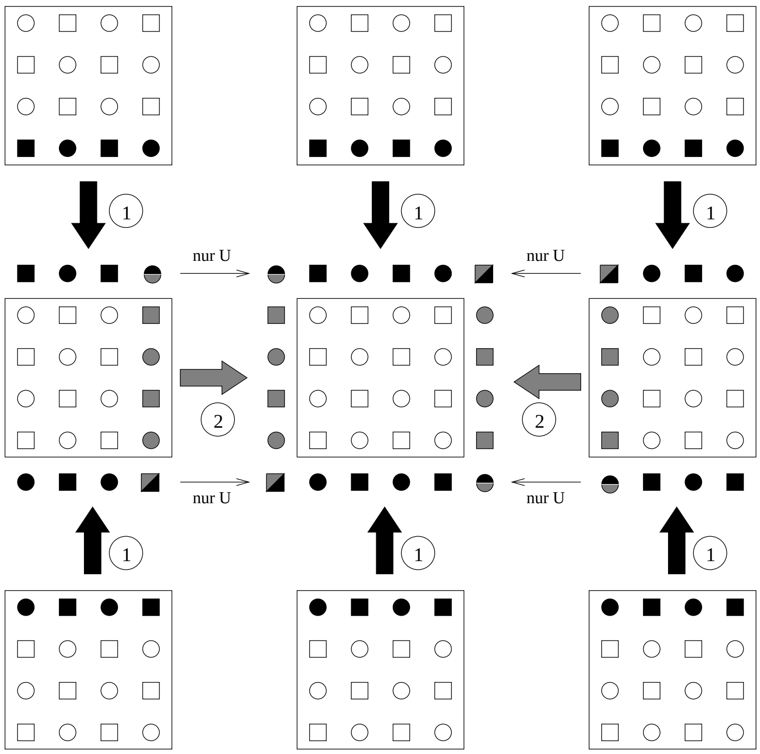

Abbildung 2.3: Diese Abbildung zeigt in zweidimensionalem Schnitt die Randfelder, die von den Nachbareinheiten in den lokalen Speicher des mittleren Knotens kopiert werden müssen. Der erste Schritt der Kommunikation ist in t-Richtung (schwarz), der zweite in x-Richtung (grau). Die Ecken (schwarz/grau), die beim ersten Schritt kopiert wurden, werden im zweiten Schritt nochmal weitergegeben. Die Erweiterung dieses Prinzips auf die fehlenden Dimensionsrichtungen ist sofort ersichtlich.

[13] Das Senden der Daten geschieht mittels CRAY spezifischen Shared-Memory-Routinen [51]

2.6 Das Verfahren des konjugierten Gradienten

Der rechen- und kommunikationstechnisch aufwendigste Teil des HMC-Algorithmus ist die Berechnung der Matrixinversion $(M^\dagger M)^{-1}\phi$, die mit der Methode des konjugierten Gradienten (cg) berechnet wird [45]. Wie schon oben erwähnt, braucht dieser Schritt allein 88% der Rechenzeit eines Updates. Der cg ist ein iterativer Algorithmus zur Lösung eines symmetrischen positiv definiten Gleichungssystem $Ax = y$, wobei A eine $n \times n$ Matrix ist. Zur Vollständigkeit sei hier eine kurze Beschreibung dieses Algorithmus wiedergegeben:

1. Wähle einen Startvektor x_0.
2. Berechne $\boxed{y_0 = A\ x_0}$ und $p_0 = r_0 = b - y_0$.
3. Berechne bis $(r_k, r_k) < \epsilon$ wird:

$$
\begin{aligned}
&\boxed{y_k = A\ p_k} \\
&\boxed{\alpha_k = (r_k, r_k)/(p_k, y_k)} \\
&x_{k+1} = x_k + \alpha_k\ p_k \\
&r_{k+1} = r_k - \alpha_k\ y_k \\
&\boxed{\beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1})/(r_k, r_k)} \\
&p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k.
\end{aligned}
$$

Die eingerahmten Operationen erfordern Kommunikation unter den einzelnen Prozessoreinheiten, die übrigen werden lokal ausgeführt. Skalare Variablen werden mit griechischen Buchstaben bezeichnet, Vektoren mit kleinen und Matrizen mit großen lateinischen Buchstaben.

Wie man sieht, beinhaltet der cg eine Matrix-Vektor-Multiplikation für jeden Iterationsschritt. Deshalb ist dieses Verfahren nur für dünnbesetzte Matrizen günstig.

Der cg geht davon aus, daß die Lösung x das Funktional $F(z) = \frac{1}{2}(Az - y)^T A^{-1}(Az - y)$ $(F : \Re^n \to \Re)$ minimiert. Das folgt daraus, daß das Residuum $r = y - Az$ nur für $z = x$ verschwindet.

Die Residuen $r_i = y - Ax_i,\ i \leq k$ sind bei diesem Verfahren linear unabhängig, solange $r_k \neq 0$ ist. Da im $\Re^n$ höchstens n Vektoren linear unabhängig sind, gibt es ein $k \leq n$ bei dem erstmals $r_k = 0$ wird. x_k ist dann die gesuchte Lösung. Bei exakter Arithmetik wäre also spätestens $r_n = 0$ und x_n die gesuchte Lösung. Wegen Rundungsfehlern ist jedoch $r_n \neq 0$. Man muß also das Verfahren über n Iterationsschritte hinaus fortsetzen bis r_n kleiner als eine vorgegebene Schranke ϵ wird.

Dieses Verfahren konvergiert um so schneller, je kleiner die Konditionszahl von A ist, wobei die Konditionszahl der Quotient zwischen größtem und kleinstem Eigenwert von A

ist. Diese Tatsache wird benutzt, um durch Vorkonditionierung der Matrix A die Konvergenz des cg zu beschleunigen. Die Vorkonditionierung wird vor allem im Falle der Wilson-Fermionen angewandt. Wie schon im vorausgegangenen Kapitel erwähnt, braucht man mit Kogut-Susskind-Fermionen $(M^\dagger M)^{-1}\phi$ für nur ein Untergitter zu berechnen (hier wurde das gerade Untergitter gewählt). Das umgeht das Problem der Vorkonditionierung bei dieser Art der Fermionenimplementierung.
Bei Wilson-Fermionen hat sich gezeigt, daß eine geeignete Wahl des Startvektors x_0 die Anzahl der Iterationsschritte des cg um bis zu einer Größenordnung reduzieren kann [52]. Und zwar wird x_0 als Überlagerung von Lösungsvektoren der vorhergehenden Molekulardynamik-Trajektorien gewählt. Mit Kogut-Susskind-Fermionen konnten wir insbesondere für Molekulardynamik-Trajektorien mit kleinem Zeitschritt dt auch eine gewisse Verminderung der Anzahl der Iterationsschritte beobachten, wenn man beim Startvektor vergangene Lösungsvektoren miteinbezieht (Abb. 2.4). Das heißt: Auf größeren Gittern, bei denen man den Zeitschritt sehr klein wählen muß, um die Akzeptanz hoch genug zu halten, würde es sich eventuell lohnen, für die Startvektoren solche Ansätze zu implementieren. Für $dt = 0.01$ z.B. konnte die CPU-Zeit bei Miteinbeziehung der Lösungen bis zu 7 Zeitschritten in der Vergangenheit um 30% reduziert werden.
Bei größeren Zeitschritten, konnte keine solche Rechenzeitersparnis festgestellt werden. Auf kleineren Gittern also, bei denen größere Zeitschritte benutzt werden können, ist unsere Wahl für den Startvektor: $x_0(t + dt) = 2x(t) - x(t - dt)$. Im Startvektor des aktuellen Zeitschrittes gehen also lediglich die Lösungen des letzten und vorletzten Zeitschrittes ein. Man bemerke, daß dieses Vorgehen keineswegs die Konvergenz des konjugierten Gradienten beschleunigt, es liefert lediglich einen günstigeren Startpunkt für das Verfahren.
Die Wahl der Schranke ϵ wurde so getroffen, daß die Observablen (Plaquette und chirales Kondensat) in der fünften Dezimalstelle unverändert bleiben, wenn man ϵ vergrößert. Bei unseren genauesten Observablenmessungen war diese Dezimalsstelle mit einem statistischen Fehler behaftet. Wir benutzten üblicherweise Werte $\epsilon = 10^{-14} - 10^{-16}$.
Der Hauptgrund, weswegen man für die Matrixinversion das cg Verfahren gegenüber z.B. Relaxationsmethoden vorzieht, ist, daß für kleine Massen m $M^\dagger M$ nicht diagonaldominant ist. In diesem Fall konvergiert der cg signifikant schneller als andere Verfahren [53].

2.7 Vergleich von HMC und Kramers

Für dynamische Fermionen mit Masse $m = 0.1$ und $\beta = 2.0$ wurden im Rahmen dieser Arbeit die integrierten Autokorrelationszeiten für Plaquette, Polyakov-Loop und chiralen Ordnungsparameter gemessen [54]. Diese Untersuchungen wurden für verschiedene Gittergrößen und für verschiedene Monte-Carlo-Trajektorienlängen $\tau_0 = n \cdot dt$ durchgeführt.

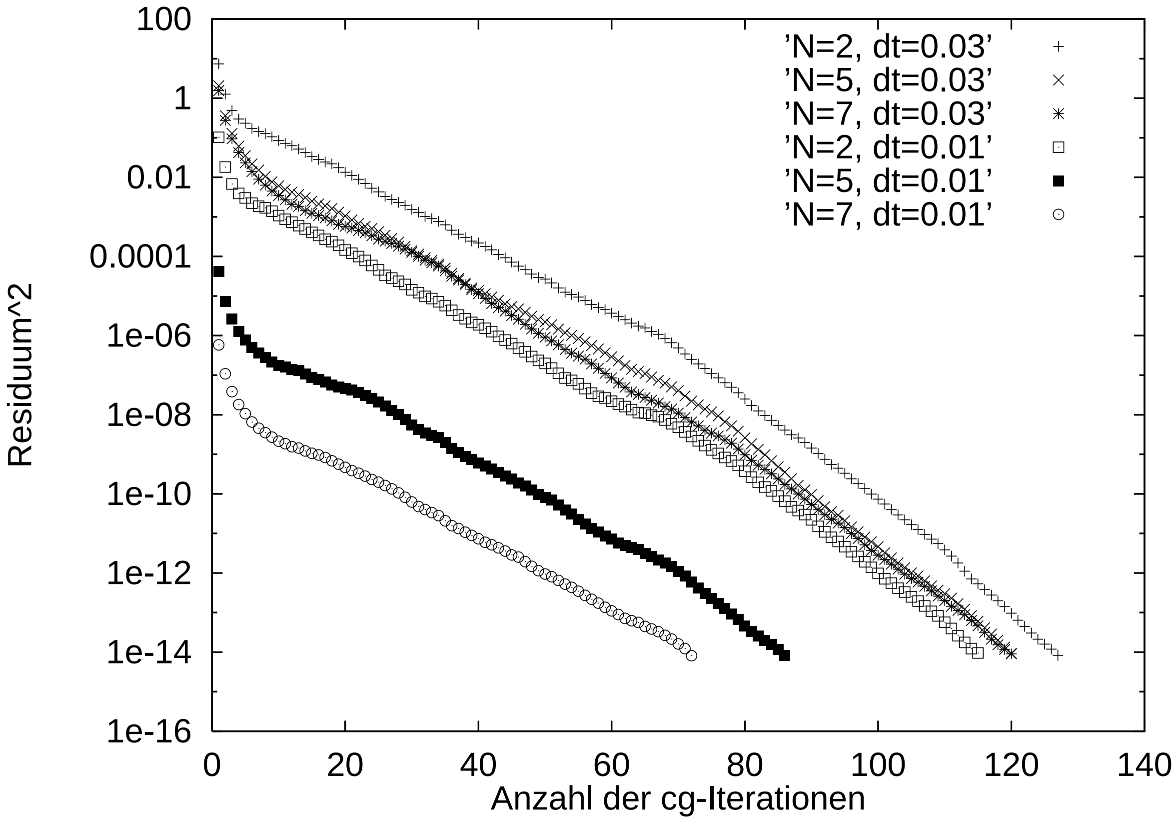

Abbildung 2.4: In dieser Abbildung kann man für zwei verschiedene Zeitschritte und drei verschiedene Startvektoren die Anzahl der Iterationsschritte ablesen, die nötig sind, damit das Residuum kleiner als $\epsilon = 10^{-14}$ wird. Die Simulationsparameter sind $V = 6^4$, $\beta = 2.0$ und $m = 0.1$.

Die Stichproben hatten eine Statistik von $\approx 1000\tau_{\rm int}$.

Algorithmus	V	Trajektorien	$< U_P >$	$< P >$	$< \overline{\psi}\psi >$
HMC	4^4	12500	.5837(2)	.259(2)	.2282(5)
KRA ($j = 4$)	4^4	40000	.5835(3)	.246(7)	.2291(8)
HMC	6^4	10000	.5762(3)	.085(2)	.333(2)
KRA ($j = 12$)	6^4	22000	.5769(2)	.083(6)	.329(2)

Tabelle 2.1: Plaquette, Polyakov-Loop und chirales Kondensat bei $\beta = 2.0, m = 0.1$. Beim HMC ist die Trajektorienlänge $\tau_0 = 1$ und beim Kramers-Algorithmus ist $\gamma = 2.0$. Die Akzeptanzrate ist bei allen Datensätzen 80-90%.

In Tabelle 2.1 sind die Werte von Plaquette $< U_P >$, Polyakov-Loop $< P >$ und chirales Kondensat $< \overline{\psi}\psi >$ aufgelistet. Die Fehler der Observablen wurden nach (2.41) abgeschätzt. Beide Algorithmen liefern konsistente Resultate.
In Tabelle 2.2 sind die Resultate der integrierten Autokorrelationszeiten für die gleichen

Algorithmus	$\tau_{int}(U_P)$	Kosten(U_P)	$\tau_{int}(P)$	Kosten(P)	$\tau_{int}(\overline{\psi}\psi)$	Kosten$(\overline{\psi}\psi)$
HMC	2.3(2)	92(8)	3.5(3)	140(12)	1.3(1)	52(4)
KRA ($j = 4$)	10(1)	80(8)	73(26)	584(208)	10(1)	80(8)
HMC	7(1)	462(66)	6(1)	396(66)	7(1)	462(66)
KRA ($j = 12$)	24(5)	576(120)	49(8)	1176(192)	33(8)	792(192)

Tabelle 2.2: Vergleich von HMC- und Kramers-Algorithmus für die gleichen Datensätze wie in Tabelle 2.1.

Datensätze wie in Tabelle 2.1 aufgelistet. In den Spalten neben den integrierten Autokorre-

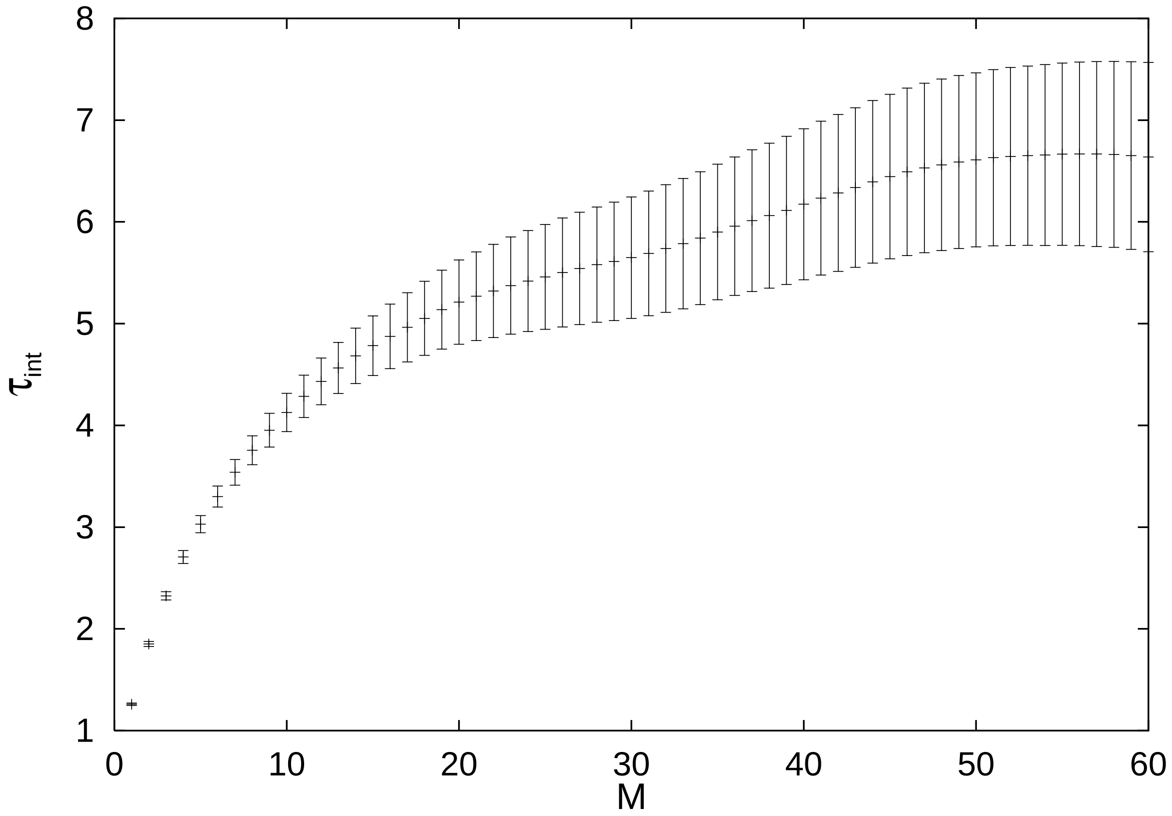

Abbildung 2.5: Integrierte Autokorrelationsfunktion für die HMC-Plaquettedaten auf dem 6^4 Gitter. Die Fehler sind mit der Jackknife-Methode berechnet (siehe weiter Text).

lationszeiten sind die jeweiligen Kosten für die Datenproduktion aufgelistet. In Anlehnung an [55] sind die Kosten als $2\tau_{\rm int} \cdot n$ für HMC und $2\tau_{\rm int} \cdot j$ für den Kramers-Algorithmus definiert. Diese Größen sind gute Schätzwerte für die verwendete Computerzeit. $\tau_{\rm int}$ wurde nach (2.40) bestimmt, wobei die Reihe bei M abgebrochen wurde und M so gewählt wurde, daß die integrierte Autokorrelationsfunktion gerade ein Plateau erreichte, wie in Abbildung 2.5 dargestellt. Für diese Datensätze liegen die Kosten für die Berechnung von

$< P >$ und $< \overline{\psi}\psi >$ höher als beim HMC. Lediglich für $< U_P >$ scheinen beide Algorithmen vergleichbar effizient zu sein.

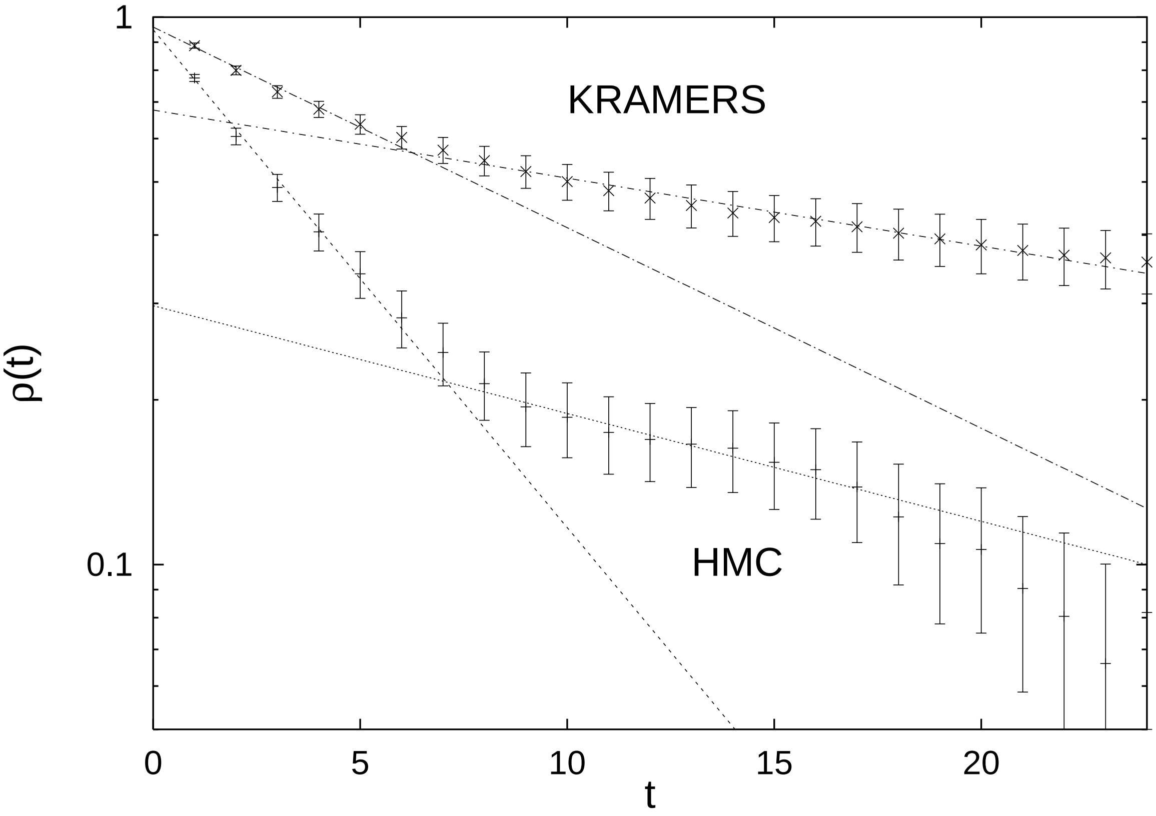

Abbildung 2.6: Normierte Autokorrelationsfunktionen für die Plaquettedaten. Für beide Algorithmen ist $m = 0.1, \beta = 2.0$ und $V = 8^4$. Bei HMC ist die Trajektorienlänge $\tau_0 = 1$ und beim Kramers-Algorithmus ist $j = 12$ und $\gamma = 2.0$.

In Abb. 2.6 ist die normierte Autokorrelationsfunktion $\rho(t)$, wie in (2.37) definiert, für die Plaquettedaten aufgetragen. t ist hier in Einheiten der Molekulardynamikzeit gegeben, was der Computerzeit entspricht. Die Fehlerbalken für $\rho(t)$ sind mit der Jackknife-Methode[14] berechnet. Die Geraden wurden mittels Marquardt-Levenberg-Algorithmus an die Autokorrelationsfunktion gefittet. Daraus ergeben sich die Werte aus Tabelle 2.3 für die exponentielle Autokorrelationszeit τ_{exp}. Wie schon in Paragraph 2.4 erwähnt, ist $\rho(t)$ eine Überlagerung aus mehreren Exponentialfunktionen mit verschiedenen exponentiellen Autokorrelationszeiten, hier τ^1_{exp} und τ^2_{exp}. Für den Kramers-Algorithmus zeigt die erste Exponentialfunktion einen erheblich langsameren Abfall als diejenige für HMC. Dieses Verhalten wurde auch für nichtlokale Observablen wie der Polyakov-Loop beobachtet.

[14]Das ist eine Methode zur Bestimmung des statistischen Fehlers einer Funktion von Observablenschätzwerten, siehe [56].

Algorithmus	$\tau_{\rm exp}^1$	$\tau_{\rm exp}^2$
HMC	4.8(2)	22(2)
KRAMERS	12(1)	35(1)

Tabelle 2.3: Abschätzung von $\tau_{\rm exp}$ für beide Algorithmen. Die Datensätze sind die von Abb. 2.6.

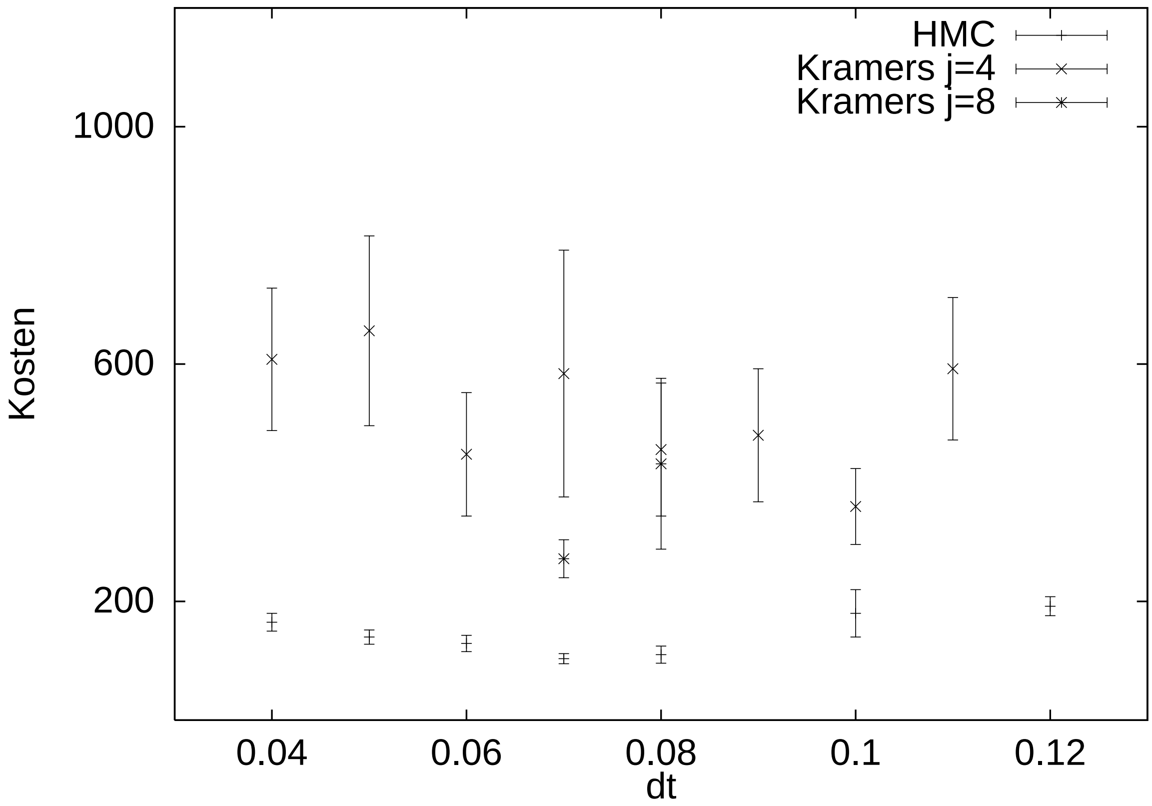

Abbildung 2.7: Kostenvergleich zwischen Kramers-Algorithmus und HMC für die Berechnung des Polyakov-Loops. Für beide Algorithmen ist $V = 4^4, \beta = 2.0, m = 0.1$. Beim Kramers-Algorithmus ist $\gamma = 2.0$.

γ	0.025	0.05	0.1	0.25	0.5	1.0	2.0
$\tau_{\rm int}(U_P)$	4.8(4)	4.9(5)	4.2(3)	4.4(3)	4.4(4)	4.6(3)	4.5(4)

Tabelle 2.4: Abhängigkeit von $\tau_{\rm int}(U_P)$ von γ für $V = 4^4,\ dt = 0.07,\ j = 8$.

In Abb. 2.7 werden die Kosten für die Berechnung des Polyakov-Loops mit beiden Algorithmen für verschiedene Integrationsschrittweiten dt verglichen.
Für den Kramers-Algorithmus mit $V = 4^4,\ dt = 0.07,\ j = 8$ (dem entspricht der Datensatz

mit den niedrigsten Kosten in Abbildung 2.7.) wurde γ variiert und $\tau_{\text{int}}(U_P)$ gemessen. In Tabelle 2.4 sind die Ergebnisse aufgelistet.
Aus den durchgeführten Untersuchungen kann man folgendes schließen:

- Die Kosten für die Erzeugung von HMC-Daten scheinen nach Abb. 2.7 für diesen Satz von Parametern geringer als jene für Kramers-Daten zu sein. Auch die Ergebnisse in Tabelle 2.2 für andere Parameter und Observablen lassen diesen Schluß zu.

- Das unterschiedliche Abfallverhalten von $\rho(t)$ bei beiden Algorithmen in Abb. 2.6 ist ein starker Hinweis auf die größere Effizienz des HMC-Algorithmus.

Trotz intensiver Suche konnte für den Kramers-Algorithmus kein Satz von Parametern gefunden werden, bei dem dieser mit dem HMC vergleichbar effizient wäre[15]. Somit wurde die Berechnung des Spektrums des Dirac-Operators mit Konfigurationen vorgenommen, die mittels HMC erzeugt wurden.

[15]Zu einem ähnlichen Schluß im zweidimensionalen Gross-Neveu-Modell mit Kogut-Susskind-Fermionen kommen die Autoren in [57].

Kapitel 3

Dirac-Operator und Random-Matrix-Modell

In diesem Kapitel werden zunächst die Symmetrieeigenschaften des Dirac-Operators im Kontinuum und auf dem Gitter dargestellt, sowie auf einige Merkmale seines Spektrums eingegangen. Es folgt die Einführung spektraler Korrelationen im Random-Matrix-Modell. Zum Schluß wird die numerische Implementierung der Spektrumsberechnung beschrieben.

3.1 Theoretische Grundlagen

3.1.1 Symmetrien des Dirac-Operators

Gegenstand unseres Interesses ist im Folgenden das Spektrum des masselosen euklidischen Kogut-Susskind-Dirac-Operators, wie er in (1.33) definiert ist. Die Eigenwerte λ_n und die Eigenvektoren ϕ_n von $i\not{D}^{KS}$ sind durch die Gleichung

$$i\not{D}^{KS}\phi_n \;=\; \lambda_n\phi_n \tag{3.1}$$

definiert oder komponentenweise geschrieben

$$i\not{D}^{KS}_{ij}(\phi_n)_j = \frac{i}{2}\sum_{\mu=\hat{1}}^{\hat{4}} \alpha_{i,\mu}[U_{i,\mu}(\phi_n)_{i+\mu} - U^{\dagger}_{i-\mu,\mu}(\phi_n)_{i-\mu}] = \lambda_n(\phi_n)_i. \tag{3.2}$$

Wie in Paragraph 1.3.2 gezeigt wurde, geht in die diskretisierte Wirkung (1.32) die Fermionenmatrix quadratisch ein: $M^{\dagger}M$ mit $M = \not{D}^{KS} + m$ und somit kommt der Dirac-Operator in der Wirkung ebenfalls quadratisch vor. Wie man sich leicht überzeugt, ist

$(\not{D}^{KS})^\dagger = -\not{D}^{KS}$, so daß $(\not{D}^{KS})^\dagger \not{D}^{KS} = -(\not{D}^{KS})^2$ gilt.
Bevor wir uns den Symmetrieeigenschaften von $\not{D}^{KS}$ zuwenden, fassen wir die Symmetrien des euklidischen Dirac-Operators im Kontinuum zusammen [58, 82].
Für den Dirac-Operator im Kontinuum gilt die chirale Symmetrie

$$\{\not{D}^{\mathrm{Kont}}, \gamma_5\} = 0. \tag{3.3}$$

Das heißt, daß mit ϕ_n auch $\gamma_5\phi_n$ Eigenvektor von $i\not{D}^{\mathrm{Kont}}$ ist. Das führt dazu, daß dessen Eigenwerte in Paaren $\pm\lambda_n$ vorkommen oder Null sind und man chirale Eigenvektoren $\gamma_5\phi_n^R = \phi_n^R$ bzw. $\gamma_5\phi_n^L = -\phi_n^L$ wählen kann. Wegen der Symmetrie (3.3) wird die Matrixdarstellung von $i\not{D}^{\mathrm{Kont}}$ in dieser Basis besonders einfach

$$i\not{D}^{\mathrm{Kont}} = \begin{pmatrix} 0 & T \\ T^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.4}$$

Die Matrixelemente von T sind $T_{nm} = \int d^4x \; \phi_n^{R*} i\not{D}^{\mathrm{Kont}} \phi_m^L$. Die Anzahl links– und rechtshändiger Nullmoden ist nicht unbedingt gleich groß, so daß im allgemeinen die Matrix T rechteckig ist.
In Abhängigkeit von der Farbanzahl N_c und von der Darstellung der Fermionen gibt es drei mögliche Symmetrieklassen:

- Für $N_c \geq 3$ und Fermionen in der *fundamentalen Darstellung* der Eichgruppe ist $\not{D}^{\mathrm{Kont}} = \gamma_\mu(\partial_\mu + ig\frac{\lambda^a}{2}A_\mu^a)$, wo λ^a die Erzeugende der Gruppenalgebra sind. Dieser Dirac-Operator hat keine zu (3.3) zusätzliche Symmetrie. Seine Matrixelemente sind in diesem Fall komplex.

- Für $N_c = 2$ und Fermionen in der *fundamentalen Darstellung* ist $\not{D}^{\mathrm{Kont}} = \gamma_\mu(\partial_\mu + ig\frac{\sigma^a}{2}A_\mu^a)$, wo σ^a die Pauli-Matrizen sind. In diesem Fall hat $\not{D}^{\mathrm{Kont}}$ zusätzlich zu (3.3) die Ladungskonjugationssymmetrie [60]

$$[\not{D}^{\mathrm{Kont}}, C\sigma_2 K] = 0. \tag{3.5}$$

  Hier ist $C = \gamma_2\gamma_4$ die Ladungskonjugationsmatrix und K der Operator für komplexe Konjugation. Für den Operator $C\sigma_2 K$ gilt $(C\sigma_2 K)^2 = 1$. In Analogie zur Zeitumkehrsymmetrie in der Quantenmechanik ist es daher möglich, eine Basis zu finden, in der $\not{D}^{\mathrm{Kont}}$ reell ist [73].

- Für $N_c \geq 2$ und Fermionen in der *adjungierten Darstellung* ist $(\not{D}^{\mathrm{Kont}})^{bc} = \gamma_\mu(\delta^{bc}\partial_\mu + gf^{abc}A_\mu^a)$. Der Dirac-Operator besitzt die zusätzliche Symmetrie [60]

$$[\not{D}^{\mathrm{Kont}}, CK] = 0. \tag{3.6}$$

Da $(CK)^2 = -1$ ist, lassen sich wieder in Analogie zur Zeitumkehrsymmetrie die Matrixelemente in reellen Quaternionen anordnen [73]. Ein reelles Quaternion ist eine Linearkombination aus vier 2×2 Matrizen mit reellen Koeffizienten $(q_0, \vec{q})$

$$q \;=\; q_0 \cdot 1_{2\times 2} \;+\; \vec{q} \cdot \vec{e}, \tag{3.7}$$

$$e_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad e_3 = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}. \tag{3.8}$$

Auf dem Gitter besitzen die Fermionen folgende Symmetrien:

- Für *naive Fermionen* in (1.22) mit $N_c = 2$ gilt neben (3.3)[1] die Symmetrie (3.5).
- Für *Wilson-Fermionen* in (1.25) mit $N_c = 2$ gilt wegen dem Wilson-Zusatzterm die Symmetrie (3.3) nicht sondern lediglich [61]

$$[\gamma_5 \not{D}^W, \gamma_5 C K \sigma_2] = 0. \tag{3.9}$$

  Die Matrixelemente sind reell, da $(\gamma_5 C K \sigma_2)^2 = 1$ ist.

- Für *Kogut-Susskind-Fermionen* mit $N_c = 2$ gilt (3.3). Die zu (3.5) entsprechende Symmetrie ist [62]

$$[\not{D}^{KS}, \sigma_2 K] = 0. \tag{3.10}$$

  Da $(\sigma_2 K)^2 = -1$ ist, lassen sich die Matrixelemente von $\not{D}^{KS}$ in reellen Quaternionen anordnen. Durch die Ladungskonjugationssymmetrie (3.10) ist mit $(\phi_n, i\lambda_n)$ auch $(\sigma_2\phi_n^*, -i\lambda_n)$ Eigenmode von $\not{D}^{KS}$. Die Eigenmoden von $-(\not{D}^{KS})^2$ sind dann (ϕ_n, λ_n^2) und $(\sigma_2\phi_n^*, \lambda_n^2)$. Somit ist das Spektrum von $-(\not{D}^{KS})^2$ wegen (3.10) zweifach entartet.

Eine weitere Entartung von $-(\not{D}^{KS})^2$ wird sichtbar, wenn man folgende Matrix [63]

$$\overline{\gamma}_{5ij} \;=\; \begin{cases} +1, & i = j, \quad i \;\; \text{gerade (G)} \\ -1, & i = j, \quad i \;\; \text{ungerade (U)} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \tag{3.11}$$

und die Projektionsoperatoren

$$P^G_{ij} \;=\; \frac{1}{2}(1 + \overline{\gamma}_{5ij}) \qquad P^U_{ij} \;=\; \frac{1}{2}(1 - \overline{\gamma}_{5ij}) \tag{3.12}$$

einführt, die die Eigenvektoren von $\not{D}^{KS}$ auf die jeweiligen Unterräume projizieren

$$P^G \phi_n \;=\; \phi_n^G, \qquad P^U \phi_n \;=\; \phi_n^U. \tag{3.13}$$

[1] Eine mögliche Definition von γ_5 auf dem Gitter ist weiter unten in (3.11) gegeben.

Dann gilt $\{\not{D}^{KS}, \overline{\gamma}_5\} = 0$, woraus folgt

$$\not{D}^{KS} P^G = P^U \not{D}^{KS}, \qquad \not{D}^{KS} P^U = P^G \not{D}^{KS} \tag{3.14}$$

und

$$\begin{aligned} i\not{D}^{KS}\phi_n^G &= i\not{D}^{KS}P^G\phi_n = P^U i\not{D}^{KS}\phi_n = \lambda_n\phi_n^U, \\ i\not{D}^{KS}\phi_n^U &= i\not{D}^{KS}P^U\phi_n = P^G i\not{D}^{KS}\phi_n = \lambda_n\phi_n^G, \end{aligned} \tag{3.15}$$

sodaß

$$-(\not{D}^{KS})^2\phi_n^G = \lambda_n^2\phi_n^G, \qquad -(\not{D}^{KS})^2\phi_n^U = \lambda_n^2\phi_n^U. \tag{3.16}$$

Das bedeutet: Das Spektrum von $-(\not{D}^{KS})^2$ ist auf beiden Untergittern identisch. Wenn also keine weiteren Entartungen vorliegen, dann gibt es auf einem Gitter mit Volumen V genau $\frac{V}{2}$ verschiedene Eigenwerte.
Das Spektrum des freien[2] Kogut-Susskind-Dirac-Operators auf einem Gitter mit Volumen $V = 2N_{\hat{1}} \times 2N_{\hat{2}} \times 2N_{\hat{3}} \times 2N_{\hat{4}}$ mit periodischen Randbedingungen in den räumlichen Richtungen und antiperiodischen in Zeitrichtung ist [64]

$$\lambda_i = 2\left[\sin^2\left(\frac{\pi i_{\hat{1}}}{N_{\hat{1}}}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi i_{\hat{2}}}{N_{\hat{2}}}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi i_{\hat{3}}}{N_{\hat{3}}}\right) + \sin^2\left(\frac{\pi (i_{\hat{4}} + 0.5)}{N_{\hat{4}}}\right)\right]^{1/2}, \tag{3.17}$$

mit $i_\mu \in \{0, 1, \cdots, [\frac{N_\mu}{2}]\}$ für $\mu = \hat{1}, \hat{2}, \hat{3}$ und $i_{\hat{4}} \in \{0, 1, \cdots, [\frac{(N_{\hat{4}}+1)}{2}]\}$ [3]. Für $V = 16^4$ ist beispielsweise $\lambda_{\mathrm{min}}^{\mathrm{frei}} = 0.346$.
Die Spektraldichte ist allgemein definiert als

$$\rho(\lambda) = < \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) >_U . \tag{3.18}$$

Sie entspricht der Anzahl der Eigenwerte in einem Intervall $d\lambda$. Gemittelt wird über Eichfeldkonfigurationen. Für den freien Dirac-Operator erhält man die Spektraldichte, wenn man alle Eigenwerte in einer Schale mit Radius $\lambda N_\mu/\pi$ zählt. Das Ergebnis ist dann

$$\rho^{\mathrm{frei}}(\lambda) \sim \lambda^3. \tag{3.19}$$

Die Spektraldichte dieser Eigenwerte ist in Abbildung 3.1 zusammen mit der Spektraldichte der Eigenwerte von $i\not{D}^{KS}$ mit Eichfeldkonfigurationen dargestellt, die bei $\beta = 2.4$ auf einem 16^4 Gitter erzeugt wurden. Wenn man die Wechselwirkung einschaltet, sieht man hier eine klare Anhäufung von kleinen Eigenwerten.

[2] Das bedeutet, daß alle $U_{i,\mu} = 1$ gesetzt sind, was $\beta = \infty$ entspricht.
[3] $[\frac{N_\mu}{2}]$ ist $\frac{N_\mu}{2}$, wenn N_μ gerade ist und $\frac{(N_\mu - 1)}{2}$, wenn N_μ ungerade ist.

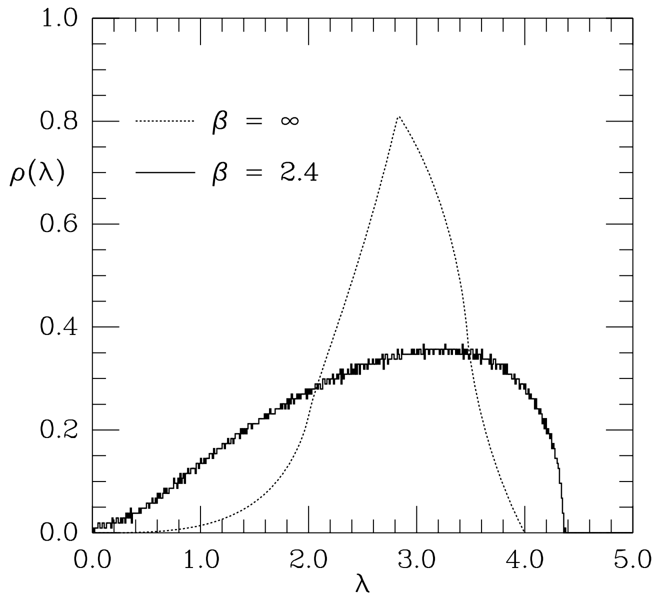

Abbildung 3.1: Die Spektraldichte der Eigenwerte des freien Dirac-Operators (gestrichelte Kurve) und die Spektraldichte des Kogut-Susskind-Dirac-Operators mit Eichfeldkonfigurationen bei $\beta = 2.4$ (Histogramm). Beide Spektren sind auf einem 16^4 Gitter berechnet. Die Spektraldichte ist auf Eins normiert.

3.1.2 Die Banks-Casher-Relation

Wie Gittersimulationen der QCD in den letzten zehn Jahren gezeigt haben [1], beträgt das chirale Kondensat für $\tilde{N}_f = 2$

$$< \overline{\psi}\psi > \approx \; -(220MeV)^3 \tag{3.20}$$

unterhalb einer kritischen Temperatur

$$T_c \; \approx \; 140MeV. \tag{3.21}$$

Oberhalb dieser Temperatur verschwindet das Kondensat. Banks und Casher [2] haben 1980 gezeigt, daß $< \overline{\psi}\psi >$ im Grenzwert verschwindender Quarkmasse und unendlichen Volumens in direkter Beziehung zur Spektraldichte des Dirac-Operators bei $\lambda = 0$ steht. Um das zu zeigen, geht man von der Kontinuums-Green-Funktion für die Quarks in einer endlichen Box aus. Diese ist durch

$$S(x, y) =< \psi(x)\overline{\psi}(y) >_A = \sum_n \frac{\phi_n(x)\phi_n^\dagger(y)}{m - i\lambda_n} \tag{3.22}$$

gegeben. $\phi_n(x)$ und λ_n sind Eigenfunktionen und Eigenwerte des Dirac-Operators. Gemittelt wird über die Gluonfelder $A_\mu^a(x)$. Setzt man $x = y$ und integriert über x, dann erhält man

$$\frac{1}{V}\int_V d^4x < \overline{\psi}(x)\psi(x) >_A = -\frac{1}{V}\sum_n \frac{1}{m - i\lambda_n}. \tag{3.23}$$

Benutzt man weiterhin die Tatsache, daß die Eigenwerte wegen der Symmetrie (3.3) in Paaren mit entgegengesetztem Vorzeichen vorkommen, dann erhält man für (3.23)

$$\frac{1}{V}\int_V d^4x < \overline{\psi}(x)\psi(x) >_A = -\frac{2m}{V}\sum_{\lambda_n > 0} \frac{1}{m^2 + \lambda_n^2}. \tag{3.24}$$

Das Quarkkondensat $< \overline{\psi}\psi(m) >$ für endliche Masse ist genau der Grenzwert $V \to \infty$ der linken Seite von (3.24). In diesem Grenzwert werden die Eigenwerte dichter, da ihre Anzahl pro gegebenem Intervall dem Volumen proportional ist. Also erhält man für (3.24) im Limes $V \to \infty$

$$< \overline{\psi}\psi(m) > = -\frac{2m}{V}\int_0^\infty d\lambda \frac{\rho(\lambda)}{m^2 + \lambda^2}, \tag{3.25}$$

Das Integral (3.25) divergiert für große λ: Wenn $\lambda \gg \Lambda_{QCD}$ ist[4], dann gilt

$$\rho(\lambda) \approx \rho^{\text{frei}}(\lambda) \sim \lambda^3, \tag{3.26}$$

da die QCD eine asymptotisch freie Theorie ist. Diese Tatsache führt zu einer quadratischen Divergenz des Integrals (3.25), die allerdings proportional zur Quarkmasse ist und somit im chiralen Limes verschwindet. Dieser perturbative Effekt großer λ liefert also keinen Beitrag zum Ordnungsparameter $< \overline{\psi}\psi(m = 0) >$, er hängt direkt mit der *expliziten* Brechung der chiralen Symmetrie durch den Massenterm in der QCD-Wirkung zusammen.
Um das nichtperturbative Kondensat zu erhalten, den Ordnungsparameter für die *spontane* Brechung der chiralen Symmetrie, muß man den divergenten Anteil subtrahieren. Das chirale Kondensat ist dann durch den Beitrag kleiner λ, den Infrarotbeitrag, bestimmt

$$\lambda \sim m \ll \Lambda_{QCD}. \tag{3.27}$$

Wenn $\rho(0) \neq 0$, dann ergibt die Integration über λ in (3.25) die Banks-Casher-Relation

$$\Sigma \equiv | < \overline{\psi}\psi(m = 0) > | = \frac{\pi\rho(0)}{V}. \tag{3.28}$$

Hier wurde der Limes $m \to 0$ ausgeführt. Die rechte Seite von (3.28) ist unabhängig von m, das bedeutet, daß der Ausdruck im chiralen Limes nicht verschwindet. Wäre z.B. für kleine λ $\rho(\lambda) \sim \lambda^\alpha$ und damit $\rho(0) = 0$, dann würde - wie man sich leicht überzeugt - die Integration in (3.25) einen Beitrag proportional zu m^α liefern, der im chiralen Limes verschwindet. Für die spontane Brechung der chiralen Symmetrie muß also die Eigenwertdichte bei $\lambda = 0$ einen endlichen Wert haben.
Wichtig bei diesen Betrachtungen ist, daß sie zunächst einmal im thermodynamischen

[4] Λ_{QCD} ist eine typische hadronische Massenskala der QCD.

Limes gültig sind. Bei endlichem Volumen zeigt Gleichung (3.24), daß für $m \to 0$ das Kondensat verschwindet und die chirale Symmetrie wiederhergestellt ist. Es ist also wichtig zunächst den Grenzwert $V \to \infty$ auszuführen und erst danach $m \to 0$ gehen zu lassen, um $\Sigma \neq 0$ zu erhalten.
Wenn aber die Quarkmasse nicht zu klein ist, dann gilt die Banks-Casher-Relation (3.28) auch für endliche Volumina. Das kann man sich folgendermaßen klar machen [60]:
Eine wichtige Folge von (3.28) ist, daß in der Nähe von $\lambda = 0$ der mittlere Abstand der Eigenwerte

$$\Delta\lambda \simeq \frac{1}{V\rho(0)} = \frac{\pi}{\Sigma V} \tag{3.29}$$

beträgt. Wenn nun die Masse m viel größer als der Abstand $\Delta\lambda$ ist, wenn also

$$mV\Sigma \gg 1 \tag{3.30}$$

ist, dann ändert sich $(m^2 + \lambda_n^2)^{-1}$ in (3.24) nur langsam mit n, so daß man dort die Summe durch das entsprechende Integral ersetzen darf. Wenn also m die Bedingung (3.30) erfüllt, gilt (3.28) auch für endliche Volumina und man kann auch hierfür spontane Symmetriebrechung beobachten.
Es gibt in der Festkörperphysik ein Analogon zur Banks-Casher-Formel und zwar Kubo's Formel, die die Leitfähigkeit σ des Festkörpers mit der Spektraldichte an der Fermi-Kante in Beziehung setzt

$$\sigma = e^2 D\rho(E_F). \tag{3.31}$$

D ist die Diffusionskonstante, e die Elektronenladung. σ spielt hier die Rolle eines Ordnungsparameters für den Übergang des Festkörpers vom Isolator zum Leiter.

3.1.3 Die Leutwyler-Smilga-Summenregeln und die mikroskopische Spektraldichte

Im Folgenden geht man generell davon aus, daß die chirale Symmetrie spontan gebrochen ist. Daraus ergeben sich Konsistenzbedingungen an das Spektrum des Dirac-Operators.
Wie Gasser und Leutwyler 1987 [66] sowie Leutwyler und Smilga 1992 [60] gezeigt haben, kann für Gittergrößen L im Bereich[5]

$$\frac{1}{\Lambda_{QCD}} \ll L \ll \frac{1}{m_\pi} = \frac{1}{\sqrt{m\Lambda_{QCD}}} \tag{3.32}$$

[5] Die linke Ungleichung führt dazu, daß nur die Goldstone-Moden Beiträge zu $\mathcal{Z}$ liefern. Durch die rechte Ungleichung wird der kinetische Anteil $\partial_\mu U^\dagger \partial_\mu U$ der Lagrange-Dichte vernachlässigbar. $1/m_\pi$ ist die Compton-Wellenlänge des Pions.

die QCD-Zustandssumme durch die Zustandssumme einer *effektiven* Theorie ersetzt werden

$$Z^{\text{eff}} \sim \int_{SU(N_f)} dU e^{mV\Sigma \text{Re}\,\text{Sp}\,U e^{i\theta/N_f}}. \tag{3.33}$$

Im Bereich (3.32) sind die $\tilde{N}_f^2 - 1$ Goldstone-Bosonen die relevanten Freiheitsgrade der Zustandssumme (3.33), die durch die unitäre Matrix U parametrisiert werden.
Mit den Eigenwerten λ_n von $i\not{D}^{\text{Kont}}$ kann man die Determinante in der Kontinuumszustandssumme (1.8) ersetzen, so daß unter Einbeziehung verschiedener topologischer Sektoren und $\tilde{N}_f$ Quarkflavors aus (1.8)

$$\mathcal{Z} \;=\; \sum_\nu e^{i\theta\nu} m^{\tilde{N}_f|\nu|} \int_\nu \mathcal{D}A_\mu \prod_n (\lambda_n^2 + m^2)^{\tilde{N}_f} \; e^{-S_G(A_\mu)} \tag{3.34}$$

wird. Entwickelt man Z^{eff} und die QCD-Zustandssumme (3.34) nach Potenzen von m und setzt anschließend die Entwicklungskoeffizienten gleich, so erhält man eine ganze Reihe von Summenregeln: die Leutwyler-Smilga-Summenregeln. Aus den Koeffizienten von m^2 erhält man die einfachste dieser Summenregeln

$$< \sum_{\lambda_n > 0} \frac{1}{\lambda_n^2} >_\nu \;=\; \frac{V^2\Sigma^2}{4(\tilde{N}_f + |\nu|)}. \tag{3.35}$$

Weitere Summenregeln erhält man durch Gleichsetzen der Koeffizienten höherer Potenzen von m [67].
Die Summenregel (3.35) kann als Integral über die Spektraldichte $\rho(\lambda)$ ausgedrückt werden[6]. Hier z.B. für $\nu = 0$

$$< \sum_{\lambda_n > 0} \frac{1}{\lambda_n^2} >_{\nu=0} \;=\; \int d\lambda \frac{\rho(\lambda)}{\lambda^2} \;=\; \frac{V^2\Sigma^2}{4\tilde{N}_f}. \tag{3.36}$$

Führt man die *mikroskopische Variable* $z = \lambda V\Sigma$ ein, so kann man das obige Integral folgendermaßen umschreiben

$$\frac{1}{V\Sigma} \int \rho(\frac{z}{V\Sigma}) \frac{dz}{z^2} = \frac{1}{4\tilde{N}_f}. \tag{3.37}$$

Der thermodynamische Limes

$$\rho_S(z) \;=\; \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V\Sigma} \rho(\frac{z}{V\Sigma}) \tag{3.38}$$

ist die *mikroskopische Spektraldichte*. Dieser Grenzwert existiert, wenn $\Sigma \neq 0$ ist. Anschaulich stellt $\rho_S(z)$ eine Vergrößerung von $\rho(\lambda)$ im Bereich kleiner Eigenwerte um einen Faktor $V\Sigma$ dar, so daß einzelne Eigenwerte sichtbar werden, wie in Abbildung 3.2 verdeutlicht wird.

[6] Höhere Summenregeln können als Integral über $\rho(\lambda_1, \lambda_2)$, $\rho(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$ usw. geschrieben werden.

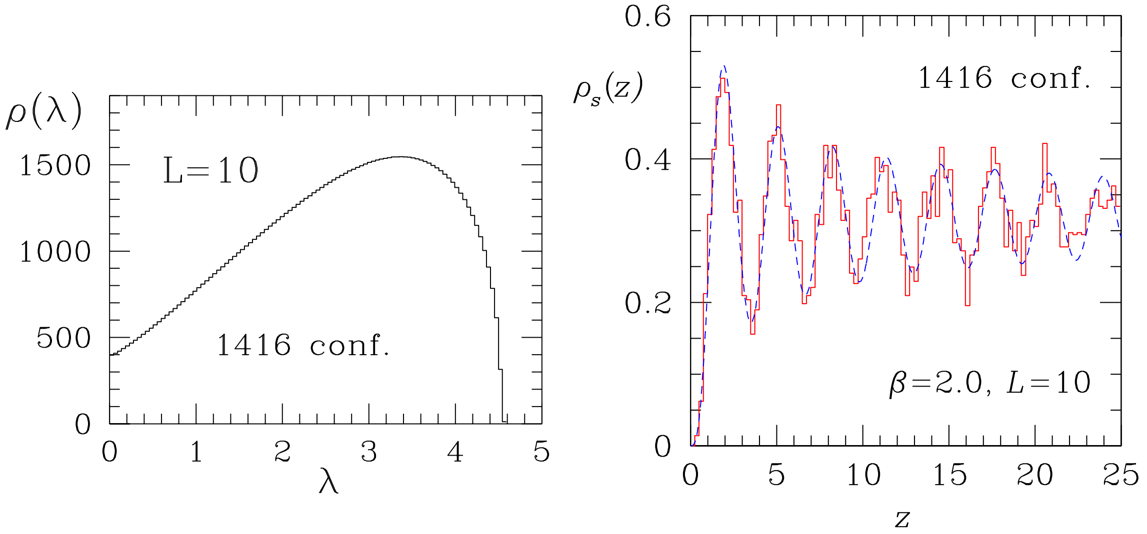

Abbildung 3.2: Die Spektraldichte $\rho(\lambda)$ (links) und die mikroskopische Spektraldichte $\rho_S(z)$ (rechts). Die Histogramme sind aus HMC-Daten mit $SU_c(2)$-Eichfeldern und Kogut-Susskind-Fermionen bei $\beta = 2.0$ und $V = 10^4$ gewonnen. Die gestrichelte Kurve im rechten Bild ist die Vorhersage der chiralen Random-Matrix-Theorie. Der Vergrößerungsfaktor $V\Sigma$ beträgt hier 1247. Die mittlere Spektraldichte ist auf V normiert.

Das Ergebnis (3.35) sowie die höheren Summenregeln basieren auf der Annahme, daß die chirale Symmetrie nach dem gewöhnlichen Schema $SU_L(\tilde{N}_f) \otimes SU_R(\tilde{N}_f) \rightarrow SU_V(\tilde{N}_f)$ spontan gebrochen ist (siehe hierzu Paragraph 1.2). Allerdings gilt dieses Schema für Fermionen in der komplexen Darstellung der Eichgruppe. Das ist der Fall, wenn $N_c \geq 3$ ist und die Fermionen nach der fundamentalen Darstellung der Eichgruppe transformieren. Gehören die Fermionen dagegen zur adjungierten Darstellung der Eichgruppe, dann ist das Schema der Symmetriebrechung für $N_c \geq 2$ $SU(\tilde{N}_f) \rightarrow SO(\tilde{N}_f)$ [68]. In diesem Fall erhält man andere Summenregeln. Die einfachste hiervon, die (3.35) entspricht, ist [67, 69]

$$< \sum_{\lambda_n > 0} \frac{1}{\lambda_n^2} >_\nu = \frac{V^2\Sigma^2}{4(|\nu| N_c + (\tilde{N}_f + 1)/2)}. \tag{3.39}$$

Die QCD ist nicht die einzige Theorie, die auf die effektive Zustandssumme (3.33) reduziert werden kann [3]. Im nächsten Paragraph wird die chirale Random-Matrix-Theorie eingeführt werden, die ebenfalls diese Eigenschaft besitzt. Theorien, die auf die gleiche niederenergetische effektive Theorie zurückgeführt werden können, haben meist Eigenschaften, die als *universell* bezeichnet werden. Die oben eingeführte mikroskopische Spektraldichte ist eine solche universelle Größe, weil sie - wie sich auf Grund der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit herausgestellt hat - lediglich von der Symmetrieklasse des Dirac-Operators abhängt und nicht von dynamischen Details. Auf Grund ihrer Universalität könnte $\rho_S(z)$ im Rahmen der einfacheren Theorie berechnet werden, hier also aus der chiralen RMT.

3.2 Spektrale Korrelationen im Random-Matrix-Modell

3.2.1 Das chirale Random-Matrix-Modell

Es soll nun das chirale Random-Matrix-Modell (chRMM) eingeführt werden. Es wird dann gezeigt, wie man daraus Vorhersagen für die spektralen Korrelationen der Eigenwerte des Dirac-Operators gewinnen kann. In den folgenden Ausdrücken ist β nicht - wie bisher - als Kopplungskonstante der Eichfelder zu verstehen sondern als *Dyson-Index*, der weiter unten eingeführt werden wird.
Man kann das Verhältnis zwischen QCD und chiralem Random-Matrix-Modell wie folgt schematisch darstellen:

$$\mathcal{Z}_{QCD} = \int \mathcal{D}A_\mu \det{}^{\tilde{N}_f}(\not{D}^{\text{Kont}} + m) e^{-S_G(A_\mu)} \tag{3.40}$$

$$\downarrow \text{ Variablentransformation}$$

$$\mathcal{Z}^{\beta}_{MM} = \int \mathcal{D}W \det{}^{N_f}(\not{D}_W + m) e^{-\frac{N\beta}{4} V(W^\dagger W)} \tag{3.41}$$

$$\downarrow \text{ Universalität}$$

$$\mathcal{Z}^{\beta}_{GMM} = \int \mathcal{D}W \det{}^{N_f}(\not{D}_W + m) e^{-\frac{N\beta}{4} \Sigma^2 \mathrm{Sp} W^\dagger W} \tag{3.42}$$

Ausgehend von $\mathcal{Z}_{QCD}$ in (3.40) führt man eine formale Transformation der Integrationsvariablen durch und erhält (3.41) [82]. Dabei wählt man hier wegen der chiralen Symmetrie (3.3) für den Random-Matrix Dirac-Operator $i\not{D}_W$ eine Matrixdarstellung in chiraler Basis, ganz analog zur Darstellung von $i\not{D}^{\text{Kont}}$, die in Paragraph 3.1.1 eingeführt wurde

$$i\not{D}_W = \begin{pmatrix} 0 & W \\ W^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.43}$$

Die Matrixelemente von W sind Zufallszahlen mit wohldefinierter Wahrscheinlichkeitsverteilung. Wenn W eine $n \times (n + \nu)$ Matrix ist, dann hat $i\not{D}_W$ n Paare von Eigenwerten $\pm\lambda_i$ und ν Nullmoden. Nimmt man $\nu << n$ an, dann kann man das Gittervolumen $V = 2n + \nu \simeq 2n$ identifizieren. Das Potential im Exponenten in (3.41) ist

$$V(W^\dagger W) = S_G(W^\dagger W) - \log J(W^\dagger W). \tag{3.44}$$

J ist die Jacobi-Determinante für die Variablentransformation $A_\mu \to W$, die nicht ohne Weiteres berechnet werden kann. An dieser Stelle macht man folgende Annahme:

> *Das Spektrum des Dirac-Operators ist im Bereich kleiner Eigenwerte unabhängig von der speziellen Form von $V(W^\dagger W)$, solange man dafür ein Polynom in* $\mathrm{Sp}(W^\dagger W)$ *wählt* [6, 70, 71].

Man ersetzt üblicherweise $V(W^\dagger W)$ in (3.41) durch das Maß $\Sigma^2\mathrm{Sp}(W^\dagger W)$, wo Σ das chirale Kondensat ist. Man erhält so das chirale RMM (3.42)[7].
Man kann zeigen, daß für Gittergrößen im Bereich (3.32) $\mathcal{Z}^\beta_{GMM}$ - wie auch $\mathcal{Z}_{QCD}$ [60] - auf $\mathcal{Z}^{\mathrm{eff}}$ reduziert werden kann [3]:

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{Z}_{QCD} & \text{und} & \mathcal{Z}^\beta_{GMM} \\ & \downarrow & \\ \mathcal{Z}^{\mathrm{eff}} & \sim & \displaystyle\int_{SU(\tilde N_f)} dU\, e^{mV\Sigma \mathrm{Re}\,\mathrm{Sp}\, U e^{i\theta/\tilde N_f}}. \end{array}$$

In Abhängigkeit von der Symmetrie des QCD-Dirac-Operators $\not{D}^{\mathrm{Kont}}$, die auch die Symmetrie von W sein muß, gibt es drei verschiedene chirale Random-Matrix-Modelle. Diese hängen von N_c und von der Darstellung von $\not{D}^{\mathrm{Kont}}$ ab. Und zwar sind es folgende:

- Für $\not{D}^{\mathrm{Kont}}$ in der fundamentalen Darstellung und $N_c \geq 3$: Das chirale unitäre Gauß-Ensemble (chGUE) mit komplexen Elementen von W. Dieses Ensemble wird durch den *Dyson-Index* $\beta = 2$ charakterisiert.

- Für $\not{D}^{\mathrm{Kont}}$ in der fundamentalen Darstellung und $N_c = 2$: Das chirale orthogonale Gauß-Ensemble (chGOE) mit reellen Elementen von W. Dieses Ensemble wird durch $\beta = 1$ charakterisiert.

- Für $\not{D}^{\mathrm{Kont}}$ in der adjungierten Darstellung und $N_c \geq 2$: Das chirale symplektische Gauß-Ensemble (chGSE). Hier lassen sich die Elemente von W in reellen Quaternionen ordnen und es ist $\beta = 4$.

Der Dyson-Index gibt demnach die Anzahl unabhängiger Variablen pro Matrixelement an. Der diskretisierte Dirac-Operator mit Kogut-Susskind-Fermionen und $N_c = 2$ wird durch das chGSE beschrieben, mit $N_c \geq 3$ durch das chGUE. Der Dirac-Operator mit Wilson-Fermionen antikommutiert nicht mit γ_5. Der Grund dafür ist der Wilson-Zusatzterm. In diesem Fall hat der Dirac-Operator nicht die chirale Struktur (3.4) und das relevante Ensemble ist das GUE für $N_c \geq 3$ und das GOE für $N_c = 2$.
Die chRMM-Zustandssumme (3.42) ist invariant bezüglich Transformationen

$$W \to X^\dagger W Y, \tag{3.45}$$

[7] Es existiert bisher kein strenger Beweis für die Richtigkeit der Universalitätsannahme (siehe jedoch hierzu [72]), so daß die Ergebnisse für die mikroskopische Spektraldichte, die aus (3.42) folgen, nicht den gleichen Status wie die Leutwyler-Smilga-Summenregeln haben, die ohne heuristische Argumente aus der chiralen Störungstheorie folgen.

wo X eine $n \times n$ und Y eine $m \times m$ Matrix ist mit $m = n + \nu$. Für $\beta = 1$ sind X und Y orthogonale Matrizen, für $\beta = 2$ unitäre und für $\beta = 4$ symplektische Matrizen. Durch die Invarianz (3.45) ist es möglich, die Zustandssumme (3.42) durch die Eigenwerte des Random-Matrix-Dirac-Operators W auszudrücken, denn man kann immer ein X und ein Y finden, so daß

$$W = X^\dagger \Lambda Y \tag{3.46}$$

ist, wobei Λ eine $n \times m$ Matrix ist: $\Lambda_{ii} = \lambda_i$ für $i = 1, \ldots, n$ und $\Lambda_{ij} = 0$ sonst. Damit wird die Zustandssumme [82]

$$\mathcal{Z}^\beta_{GMM} = \int d\lambda |\Delta(\lambda^2)|^\beta m^{N_f|\nu|} \prod_{k=1}^n (\lambda_k^2 + m^2)^{N_f} \lambda_k^{\beta|\nu|+\beta-1} e^{-\frac{n\beta\Sigma^2}{2}\lambda_k^2}, \tag{3.47}$$

wo

$$\Delta(\lambda^2) = \prod_{k<l} (\lambda_k^2 - \lambda_l^2) \tag{3.48}$$

die *Vandermonde-Determinante* ist. Die Jacobi-Determinante dieser Transformation ist

$$J \;=\; |\Delta(\lambda^2)|^\beta \prod_{k=1}^n \lambda_k^{\beta|\nu|+\beta-1}. \tag{3.49}$$

Das Modell (3.47) reproduziert alle bisher besprochenen Symmetrien der QCD-Zustandssumme wieder. Insbesondere spiegelt es ihre topologische Struktur wieder: Der Random-Matrix-Dirac-Operator W hat genau $\nu = |n - m|$ Nullmoden. ν wird in diesem Modell mit der topologischen Ladung identifiziert.

Die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte für $m = 0$ kann man aus der Zustandssumme (3.47) direkt ablesen. Für chirale Gauß-Ensembles [82] ist sie

$$\rho_\beta(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) = C_{n\beta} |\Delta(\lambda^2)|^\beta \prod_{k=1}^n \lambda_k^{2N_f+\beta|\nu|+\beta-1} e^{-\frac{n\beta\Sigma^2}{2}\lambda_k^2}. \tag{3.50}$$

$C_{n\beta}$ ist eine Normierungskonstante. $\rho_\beta(\lambda_1, \ldots, \lambda_n) d\lambda_1 d\lambda_2 \cdots d\lambda_n$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, die Eigenwerte $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ in den Intervallen $[\lambda_j, \lambda_j + d\lambda_j]$, $j = 1, \ldots, n$, zu finden. (3.50) enthält die ganze Information über Eigenwertverteilung und Korrelationen im Spektrum. Durch geeignete Integrationen können im Prinzip alle Größen erhalten werden, die für die Untersuchung eines Eigenwertspektrums von Interesse sind.

Integriert man z.B. (3.50) über $n-1$ Eigenwerte, so erhält man die mittlere Spektraldichte

$$\rho_\beta(\lambda) \;=\; n \int \prod_{k=2}^n d\lambda_k \rho_\beta(\lambda, \lambda_2, \ldots, \lambda_n). \tag{3.51}$$

Wenn man (3.50) über $n - 2$ Eigenwerte integriert, so erhält man die Zweipunkt-Korrelationsfunktion

$$\tilde{\rho}_\beta(\lambda_1, \lambda_2) \;=\; \frac{n!}{(n-2)!} \int \prod_{k=3}^n d\lambda_k \rho_\beta(\lambda_1, \ldots, \lambda_n). \tag{3.52}$$

$\tilde{\rho}_\beta(\lambda_1, \lambda_2)d\lambda_1 d\lambda_2$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, einen Eigenwert in einem der Intervalle $[\lambda_j, \lambda_j + d\lambda_j]$, $j = 1, 2$ zu finden unabhängig von der Indizierung und unabhängig von der Lage der anderen Eigenwerten. Zieht man von der n-Punkt-Korrelationsfunktion geeignete Kombinationen von Korrelatoren niedrigerer Ordnung ab, so erhält man die n-Punkt-Clusterfunktion, hier also die Zweipunkt-Clusterfunktion

$$\rho_\beta(\lambda_1, \lambda_2) \;=\; -\tilde{\rho}_\beta(\lambda_1, \lambda_2) + \rho_\beta(\lambda_1)\rho_\beta(\lambda_2). \tag{3.53}$$

Sie beschreibt die Korrelationen zweier Zustände ohne die trivialen Effekte der Korrelatoren niedigerer Ordnung und geht bei der Berechnung skalarer Suszeptibilitäten ein.

3.2.2 Vorhersagen der chiralen Random-Matrix-Theorie für das chGSE

Zur expliziten Berechnung der Spektraldichte (3.51) und der Korrelationsfunktion (3.52) aus der Verbundwahrscheinlichkeitsdichte (3.50) bedient man sich in der RMT verschiedener Methoden:
Für das chGUE ($\beta = 2$) ist es die Methode orthogonaler Polynome [73], für das chGOE ($\beta = 1$) und das chGSE ($\beta = 4$) die Methode schieforthogonaler Polynome [74, 75, 81]. Der thermodynamische Limes (3.38) der so erhaltenen Korrelatoren ergibt einen analytischen Ausdruck für die mikroskopische Spektraldichte $\rho_S(z)$ für jedes β.
Wir werden uns hier darauf beschränken, das Ergebnis für $\rho_S(z)$ für die Symmetrieklasse mit $\beta = 4$ anzugeben, da diese Vorhersage für $SU_c(2)$-Eichfelder mit Kogut-Susskind-Fermionen relevant ist[8]. Es wurde von Nagao und Forrester 1995 berechnet [74] und lautet

$$\rho_S(z) = 2z^2 \int_0^1 du u^2 \int_0^1 dv [J_{4a-1}(2uvz)J_{4a}(2uz) - vJ_{4a-1}(2uz)J_{4a}(2uvz)] \tag{3.54}$$

mit $z = \lambda V \Sigma$ und $4a = N_f + 2\nu + 1$. J_{4a-1} sind die Bessel-Funktionen.
Eine weitere spektrale Eigenschaft, über die das chRMM Vorhersagen macht, ist die Verteilung des kleinsten Eigenwertes $P(\lambda_{\min})$. Ausgehend von der mit $x = \lambda^2$ reskalierten Verbundverteilung (3.50) führt man die Größe [76]

$$E_\beta(s) \;=\; \lim_{n\to\infty} \int_s^\infty \prod_{l=1}^n dx_l \; \rho_{n\beta}(x_1, \cdots, x_n) \tag{3.55}$$

ein. $E_\beta(s)$ ist die Wahrscheinlichkeit, daß das Intervall $[0, s]$ frei von Eigenwerten ist. Daraus erhält man die Verteilung des kleinsten Eigenwertes

$$P_\beta(x_{\min}) \;=\; -\frac{d}{ds}\, E_\beta(s)|_{s=x_{\min}}. \tag{3.56}$$

[8] $\not{D}^{KS}$ läßt sich nämlich wie auch W für $\beta = 4$ in reellen Quaternionen anordnen. Auf den Kontinuumsübergang der Theorie mit Kogut-Susskind-Fermionen wird weiter unten eingegangen.

Für $N_f = \nu = 0$ wurde $P(\lambda_{\min})$ 1993 von Forrester berechnet [77]. Für $\beta = 4$ erhält man

$$P(\lambda_{\min}) \;=\; \sqrt{\frac{\pi}{2}}c\;(c\lambda_{\min})^{3/2} I_{3/2}(c\lambda_{\min})\; e^{-\frac{1}{2}(c\lambda_{\min})^2} \tag{3.57}$$

mit $c = V\Sigma$. $I_{3/2}$ ist die modifizierte Bessel-Funktion. Es soll hier nochmal betont werden, daß (3.57) eine Vorhersage für die QCD in statischer Näherung ist, also ohne dynamische Fermionen. Für $N_f \neq 0$ gibt es analytische Ergebnisse für $P(\lambda_{\min})$ nur für ungerade Flavoranzahl [78]. Da in QCD-Simulationen die Kogut-Susskind-Fermionen stets einer geraden Flavoranzahl im Kontinuum entsprechen, können unsere Gitterdaten mit diesen Vorhersagen nicht verglichen werden. Für $N_f = 2$ und 4 gibt es keine geschlossene analytische Ausdrücke für $P(\lambda_{\min})$; es gibt jedoch Ergebnisse [79], mittels derer man $P(\lambda_{\min})$ als schnell konvergierende Taylor-Reihe ausdrücken kann. Der Ausdruck hierfür steht in den Gleichungen (7) und (8) in [80].
Alle bisher vorgestellten Ergebnisse der chRMT gelten im chiralen Limes. Für endliche Quarkmasse gibt es noch keine analytische Vorhersagen für $\rho_S(z)$ und $P(\lambda_{\min})$. Man kann jedoch diese Größen numerisch durch iterative Berechnung schieforthogonaler Polynome erhalten [80, 81].
Für den mikroskopischen Grenzwert

$$\rho_S(x,y) \;=\; \lim_{V\to\infty} \rho_\beta(\frac{x}{V},\frac{y}{V}) \tag{3.58}$$

der Zweipunkt-Clusterfunktion (3.53) gibt es ebenfalls RMT-Vorhersagen für das chirale GSE [74]. Wir verzichten hier darauf, die expliziten Ausdrücke anzugeben.
In [82] wurde gezeigt, daß die Ausdrücke für $\rho_S(z)$, die man für alle drei Ensembles im chiralen Limes erhält, die Leutwyler-Smilga-Summenregeln reproduzieren. Und zwar kann man diese für $\beta = 1, 2, 4$ zusammenfassen zu

$$\frac{1}{V^2} < \sum_{\lambda_n > 0} \frac{1}{\lambda_n^2} >_\nu \;=\; \frac{\beta\Sigma^2}{8(\beta\nu/2 + \beta/2 + N_f - 1)}. \tag{3.59}$$

3.3 Numerische Spektrumsberechnung

3.3.1 Implementierung

In unserer Implementierung berechnen wir die Eigenwerte des masselosen quadrierten Dirac-Operators $-(\not{D}^{KS})^2$. Im Paragraph 3.1.1 wurde gezeigt, daß das Spektrum von $-(\not{D}^{KS})^2$ auf dem geraden Untergitter identisch ist mit dem Spektrum auf dem ungeraden Untergitter. Man braucht also die Diagonalisierung von $-(\not{D}^{KS})^2$ lediglich auf einem von beiden Untergittern durchzuführen. Ohne besonderen rechentechnischen Grund ist es

in unserem Fall das gerade Untergitter.
Die Diagonalisierung von $-(\not{D}^{KS})^2$ wird für jede beim Metropolis-Test akzeptierte Konfiguration U^j vorgenommen. Drei Schritte sind dazu notwendig:

1. Zunächst wird $-(\not{D}^{KS})^2$ mit dem Verfahren von Lanczos [84] tridiagonalisiert. In unserem Code wird bei diesem Schritt die Arbeit so unter den Prozessoren aufgeteilt, daß jeder Knoten eine Teilmatrix tridiagonalisiert.

2. Die so erhaltene tridiagonale Matrix T wird mit einer geeigneten Routine aus einer FORTRAN-Bibliothek der T3E diagonalisiert. Bei diesem Schritt wird die Verteilung der Arbeit unter den Prozessoren von der Routine selbst vorgenommen.

3. Neben den korrekten Eigenwerten entstehen beim Lanczos-Verfahren auf Grund von Rundungsfehlern sogenannte *scheinbare* Eigenwerte. Diese werden mit einem von Cullum und Willoughby [85] entwickelten Verfahren identifiziert und entfernt. Dieser Schritt wird auf einem einzigen Prozessor durchgeführt.

Es wird im Folgenden genauer auf diese drei Schritte eingegangen:

Zu 1: Das Lanczos-Verfahren ist eine iterative Prozedur, die eine symmetrische $n \times n$ Matrix A – hier ist $A = -(\not{D}^{KS})^2$ – durch eine symmetrische $m \times m$ tridiagonale Matrix T^m ersetzt. Hier eine kurze Beschreibung der Tridiagonalisierung:

1. Man wählt einen zufälligen n-komponentigen Startvektor $v_1 = (v^1, \cdots, v^n)^T$ mit $||v_1|| = 1$ und setzt $v_0 = 0$, $\beta_1 = 0$.
2. Für $i = 1, \cdots, m$ berechnet man:

$$u_i = \boxed{A\, v_i} - \beta_i v_{i-1} \tag{3.60}$$

$$\boxed{\alpha_i = (v_i, u_i)} \tag{3.61}$$

$$\beta_{i+1} v_{i+1} = u_i - \alpha_i v_i \tag{3.62}$$

$$r_i = u_i - \alpha_i v_i \tag{3.63}$$

$$\boxed{\beta_{i+1} = \sqrt{(r_i, r_i)}}\,. \tag{3.64}$$

Die eingerahmten Operationen erfordern Kommunikation unter den einzelnen Prozessoren, die übrigen werden lokal ausgeführt. Skalare Variablen werden mit griechischen Buchstaben bezeichnet, Vektoren mit kleinen und Matrizen mit großen lateinischen Buchstaben. In [84] wird bewiesen, daß die obige Rekursion in exakter Arithmetik für alle $i = 1, \cdots, m$ einen Satz von orthonormalen Vektoren $V^i = (v_1, v_2, \cdots, v_i)$ aus den Krylov-Vektoren $(v_1, Av_1, A^2v_1, \cdots, A^{i-1}v_1)$ erzeugt und daß das Verfahren bei $i = m$ abbricht, wenn $\beta_{m+1} = 0$ wird. Mit $m \leq n$ bezeichnet man den größten Index

i, für den die Vektoren $v_1, \cdots, A^{i-1}v_1$ noch linear unabhängig sind.
Gleichung (3.62) mit (3.60) läßt sich in Matrixform schreiben:

$$AV^i = V^i T^i + (0, 0, \cdots, \beta_{i+1}v_{i+1}), \tag{3.65}$$

wo T^i tridiagonale Matrizen sind:

$$T^i = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & 0 \\ \beta_2 & \alpha_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_i \\ 0 & & \beta_i & \alpha_i \end{pmatrix}. \tag{3.66}$$

In der Praxis geht wegen Rundungsfehlern die Orthogonalität der v_i im Laufe der Iteration rasch verloren, so daß man niemals $\beta_{m+1} = 0$ erhält. Das Verfahren wird vielmehr solange fortgesetzt, bis $\beta_{m+1} < \epsilon$ wird. Dann wird aus (3.65)

$$AV^m = V^m T^m. \tag{3.67}$$

Jeder Eigenwert von T^m ist dann auch Eigenwert von A. Wenn λ Eigenwert von T^m ist: $T^m z = \lambda z,\ z \neq 0$, dann folgt für $x = V^m z, x \neq 0$

$$Ax = AV^m z = V^m T^m z = \lambda V^m z = \lambda x. \tag{3.68}$$

Werden nicht alle Eigenwerte von A gebraucht, dann ist es nicht einmal nötig das Verfahren so lange fortzusetzen, bis β_{m+1} genügend klein ist. Man kann nämlich zeigen[9], daß die extremen Eigenwerte von T^m schon für nicht allzu große m rasch gute Schätzwerte der extremen Eigenwerte von A sind. Wie groß man also m wählt, hängt davon ab, wieviele Eigenwerte von A benötigt werden.
Noch eine Bemerkung zum Speicherplatzbedarf dieses Verfahrens ist hier angebracht: Wenn man auf Reorthogonalisierung verzichtet, dann genügen zur Realisierung eines Iterationsschrittes die zwei aktuellsten Vektoren v_i und v_{i-1}. Zum Schluß braucht man nur die Einträge der Haupt- und Nebendiagonale von T^m zu speichern.

Zu 2: Zur Diagonalisierung von T^m benutzen wir die Routine PSSTEBZ aus der FORTRAN-Bibliothek ScaLAPACK[10]. Diese Routine beruht auf dem Bisektionsverfahren [86], das im wesentlichen aus der Bestimmung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms von T^m besteht. Es wird meistens benutzt, wenn man nicht alle Eigenwerte braucht. Will man alle berechnen, so verwendet man in der Regel auf sequentiellen Maschinen die günstigeren QR/QL-Iterationsverfahren. Auf parallelen Rechnern wurde bisher keine effiziente Implementierung dieser Verfahren gefunden.

[9] Siehe die Literaturangaben in [84].

[10] Die ScaLAPACK-Bibliothek beinhaltet einen Teil der LAPACK (Linear Algebra Package) Routinen [87], die für massiv parallele Systeme neu geschrieben wurden. Information über ScaLAPACK findet man unter http://www.netlib.org/scalapack/index.html.

Zu 3: Wegen des Verlusts der Orthogonalität der v_i entstehen beim Lanczos-Verfahren Eigenwerte von T^m, die keine Näherungen zu Eigenwerten von A sind. Man nennt diese Eigenwerte *scheinbar*. Mit numerischen Experimenten haben Cullum und Willoughby gezeigt, daß scheinbare Eigenwerte von T^m gleichzeitig Eigenwerte von $\hat{T}^{(2)}$ sind. $\hat{T}^{(2)}$ entsteht, wenn man aus T^m die erste Zeile und Reihe entfernt. Wenn man das charakteristische Polynom von T^m, also $\det(T^m - \mu I)$, mit $a_m(\mu)$, seine Ableitung mit $a'_m(\mu)$ und das charakteristische Polynom von $\hat{T}^{(2)}$ mit $a_2(\mu)$ bezeichnet, dann haben Cullum und Willoughby nachgewiesen, daß die obere Schranke für den Fehler dafür, daß μ, $T^m z = \mu z$, auch Eigenwert von A sei, durch

$$\epsilon_\mu = \prod_{i=2}^{m+1} |\beta_i| / [a'_m(\mu) a_2(\mu)]^{1/2} \tag{3.69}$$

gegeben ist. Hier sieht man: wenn μ auch Eigenwert von $\hat{T}^{(2)}$ ist, dann wird die Schranke ϵ_μ sehr groß. Damit hat man ein Verfahren, um scheinbare Eigenwerte von T^m zu identifizieren, ohne auf Reorthogonalisierung zurückgreifen zu müssen.
Ein weiteres Problem beim Lanczos-Verfahren ist, daß die Multiplizitäten der Eigenwerte von T^m nicht mit denjenigen von A übereinstimmen. Ein mehrfach auftretender Eigenwert ist jedoch vom numerischen Standpunkt her willkommen, denn er ist bereits zu einem Eigenwert von A konvergiert.

Bei unserem Problem und bei den Gittergrößen, auf denen wir simulierten, werden zwei Eigenwerte von T^m als gleich gewertet, wenn sie um weniger als $7 \cdot 10^{-10}$ differieren. Eigenwerte von T^m und $\hat{T}^2$ werden als gleich identifiziert, wenn sie sich ebenfalls um weniger als diesen Tolenranzwert unterscheiden. Es wird außerdem für die Lanczos-Tridiagonalisierung $m = V$ gesetzt. Damit ist es immer möglich $\frac{V}{2}$ verschiedene Eigenwerte von $-(\not{D}^{KS})^2$ zu finden.
Anstatt die umständliche Fehlerabschätzung (3.69) zu berechnen, testen wir die Güte der Eigenwerte durch Nachprüfen von

$$\mathrm{Sp}[-(\not{D}^{KS})^2] = \sum_{i=1}^{V/2} \lambda_i^2 = \frac{dim}{2} N_c V. \tag{3.70}$$

Diese Relation[11] war für jedes Spektrum mit einer Abweichung von $< 10^{-8}$ erfüllt.
Aus (3.24) berechneten wir mit den numerisch bestimmten Eigenwerten das chirale Kondensat und verglichen die Ergebnisse mit denen, die wir mit (1.36) erhalten haben. Das Ergebnis dieses Vergleichs für β-Werte im Bereich starker Kopplung mit dynamischen Fermionen ist in Tabelle 3.1 wiedergegeben.
Tabelle 3.2 zeigt denselben Vergleich für Simulationen in statischer Näherung bei β-Werten, die sich vom Bereich starker bis schwacher Kopplung erstrecken. Diese Tabelle enthält auch

[11] Diese Relation erhält man sofort aus dem Diagonalanteil von $-(\not{D}^{KS})^2$: $\frac{dim}{2} 1_c \delta_{ij}$.

N_f	β	Masse	#Konf	$\langle\overline{\psi}\psi(m)\rangle_{Sp}$	$\langle\overline{\psi}\psi(m)\rangle_{Def}$
1	1.7	0.01500	1700	0.2443(11)	0.2439(17)
	1.7	0.00750	1000	0.2153(14)	0.2151(27)
	1.8	0.01500	1799	0.1520(14)	0.1513(15)
2	1.3	0.00750	1023	0.2666(12)	0.2695(16)
	1.3	0.00550	1042	0.2472(11)	0.2465(21)
	1.3	0.00375	703	0.2072(21)	0.2075(26)

Tabelle 3.1: Chirales Kondensat für die Daten mit dynamischen Quarks und $V = 8^4$ einmal nach (3.24) mit Spektrum (Sp) und nach (1.36) (Def) berechnet.

β	V	#Konf	$\langle\overline{\psi}\psi(m)\rangle_{Sp}$	$\langle\overline{\psi}\psi(m)\rangle_{Def}$	$\langle\overline{\psi}\psi(m)\rangle_{Lit}$
1.8	8^4	1999	0.1954(1)	0.1953(1)	
2.2	8^4	4637	0.1155(2)	0.1154(2)	0.1194(28)
2.4	8^4	1000	0.0735(5)	0.0735(6)	0.0730(10)
2.4	16^4	921	0.07433(7)	0.07435(7)	
2.5	16^4	543	0.06391(5)	0.06391(5)	

Tabelle 3.2: Chirales Kondensat für die Daten ohne dynamische Quarks (*quenched*) einmal nach (3.24) mit Spektrum (Sp) und nach (1.36) (Def) berechnet. Die Werte von $\langle\overline{\psi}\psi(m)\rangle_{Lit}$ sind [88] entnommen.

Werte des chiralen Kondensats aus der Literatur.
In Tabelle 3.3 fassen wir schließlich die kleinsten Eigenwerte der Spektren zusammen, die wir numerisch in statischer Näherung berechnet haben. Das Spektrum mit $V = 16^4$ und $\beta = 2.4$ hat beispielsweise $V/2 = 32768$ verschiedene Eigenwerte und erstreckt sich über vier Größenordnungen.

3.3.2 Rechenleistung und Skalierbarkeit

Nach der Beschreibung der Implementierung sollen jetzt Rechenleistung und Skalierbarkeit des Programmcodes auf der T3E-900 abgeschätzt werden. Alle Berechnungen sind in doppelt genauer Gleitkommaarithmetik durchgeführt (64 bit IEEE).
Für das HMC-Programmcode mit Spektrumsberechnung haben wir drei Messungen der Skalierbarkeit durchgeführt und zwar bei einer Eichfeldkopplung $\beta = 2.0$ und einer Fer-

β	V	#Konf	$< \lambda_{min} >$	τ_{int}
1.8	8^4	1999	0.00295(3)	0.69(7)
2.0	4^4	9979	0.0699(5)	1.3(1)
	6^4	4981	0.0127(1)	0.69(5)
	8^4	3896	0.00401(3)	0.71(6)
	10^4	1416	0.00164(2)	0.7(1)
2.2	6^4	5542	0.0293(3)	1.7(2)
	8^4	2979	0.0089(1)	1.2(2)
2.4	16^4	921	0.00390(9)	1.2(3)
2.5	8^4	576	0.194(9)	8(3)
	16^4	543	0.016(2)	12(7)

Tabelle 3.3: Mittelwert des kleinsten Eigenwerts $< \lambda_{min} >$ in Einheiten $1/2a$ für die Gitterdaten in statischer Näherung.

mionenmasse $m = 0.01$ auf zwei verschiedenen Gittergrößen: 16^4 und $32 \cdot 16^3$ und bei $m = 0.02$ auf $32^2 \cdot 16^2$.

In Abb. 3.3 ist die relative Leistungssteigerung des Codes für diese Parameter gegen die Anzahl der Prozessoreinheiten aufgetragen. Die Leistungssteigerung ist auf die Rechenzeit mit 16 Knoten normiert. Für das 16^4 Gitter ist die relative Leistungssteigerung bei 256 CPUs 8.32. Bei idealer Skalierung sollte diese 16 erreichen. Der Kommunikationsverlust beträgt also bei 256 Prozessoren etwa 48% für dieses Gitter, für das mittlere Gitter 35% und für das größte 21%, was einer guten Skalierbarkeit des Codes auf größeren Gittern entspricht. Daß die Leistungssteigerung für kleinere Gitter bei höherer Prozessoranzahl so stark abbricht, ist verständlich, denn bei Verwendung von 256 Prozessoren haben die lokalen Gitter eine Größe von resp. 4^4, $8 \cdot 4^3$ und $8^2 \cdot 4^2$, was zu einem Oberfläche/Volumen Verhältnis von resp. 2.03, 1.61 und 1.26 und somit zu höherem Kommunikationsaufwand führt, je kleiner das Gitter ist.

Hier noch einige Angaben zu Rechenleistung und Rechenzeiten für die Erzeugung einiger der Daten aus Kapitel 4:

- Die Leistung pro Prozessor für die Daten ohne dynamische Fermionen auf dem 16^4 Gitter bei $\beta = 2.4$ ist ≈ 37 MFLOPS. Ein Monte-Carlo-Update mit Spektrumsberechnung braucht mit diesen Simulationsparametern ≈ 550 sec CPU-Zeit auf 128 Knoten.

- Mit dynamischen Fermionen der Masse $m = 0.0055$, $\beta = 1.3$ und $N_f = 2$ auf einem 8^4 Gitter beträgt die Rechenleistung ≈ 83 MFLOPS pro Knoten. Die CPU-Zeit für ein Update mit Spektrum beträgt auf 16 PEs ≈ 885 sec.

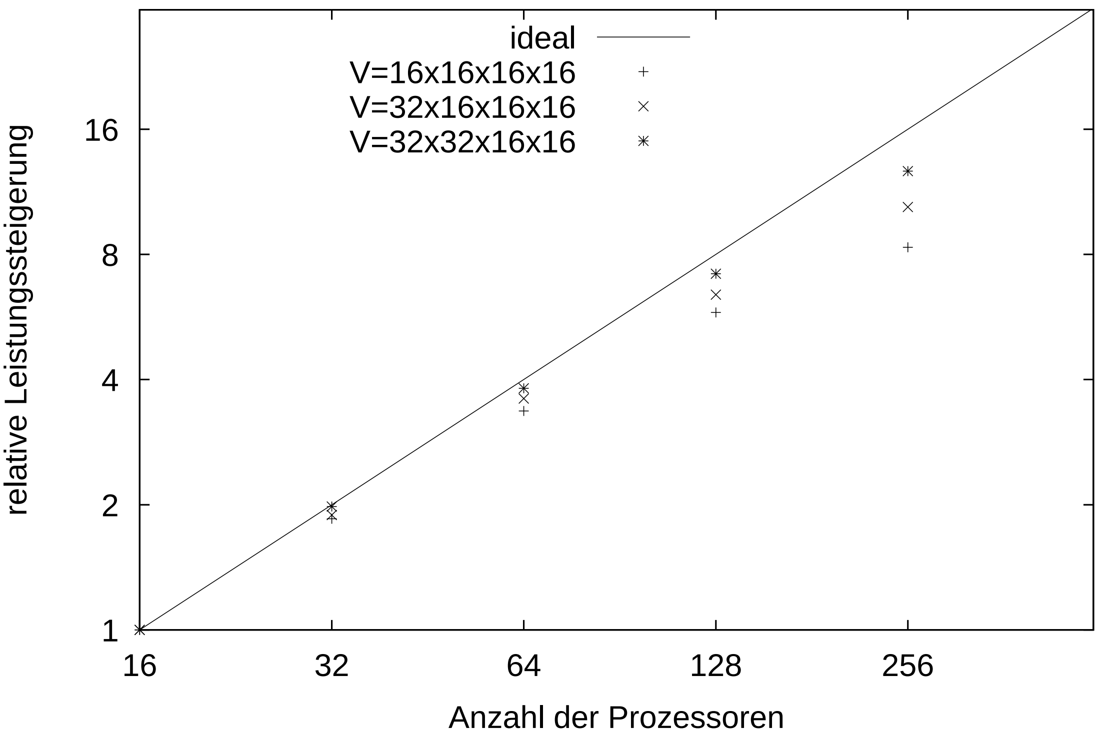

Abbildung 3.3: Relative Leistungssteigerung bei Verdopplung der Anzahl der Prozessoren. Die Leistungssteigerung ist auf die benötigte CPU-Zeit mit 16 Prozessoren normiert. Die Gerade stellt die ideale Leistungssteigerung dar.

Kapitel 4

Ergebnisse

In diesem Kapitel werden weitere Resultate dargestellt und interpretiert. Zunächst werden die Ergebnisse der Tests der einfachsten Leutwyler-Smilga-Summenregel ohne dynamische Quarks wiedergegeben. Dann vergleichen wir die Fluktuationen der kleinsten Eigenwerte des Dirac-Operators aus den HMC-Daten mit den Vorhersagen der chiralen Random-Matrix-Theorie. Dieser Vergleich wird auch auf die Theorie mit dynamischen Fermionen erstreckt.

4.1 Leutwyler-Smilga-Summenregel

Die Daten, die im Rahmen dieser Dissertation entstanden sind, wurden mit $SU_c(2)$-Eichfeldern und Kogut-Susskind-Fermionen erzeugt. Das bedeutet, daß die Matrixelemente des Dirac-Operators sich in reellen Quaternionen anordnen lassen. Das entsprechende chirale Random-Matrix-Ensemble ist das chGSE. Für diesen Fall ist die einfachste Summenregel im chiralen Limes durch (3.59) mit $\beta = 4$ gegeben [82]

$$\frac{1}{V^2} < \sum_{\lambda_n > 0} \frac{1}{\lambda_n^2} >_\nu = \frac{\Sigma^2}{2(N_f + 2|\nu| + 1)}. \tag{4.1}$$

Für die Daten ohne dynamische Fermionen – $N_f = \nu = 0$ – haben wir die Summenregel (4.1) getestet. Das Ergebnis ist in Tabelle 4.1 zu sehen. Die Abweichung in der letzten Spalte ist die Differenz von $\langle \sum_n \lambda_n^{-2} \rangle / V^2$ und $\Sigma^2/2$ dividiert durch den Mittelwert dieser Größen. Man sieht, daß die Übereinstimmung mit zunehmendem Volumen besser wird, was verständlich ist, da die Summenregeln im thermodynamischen Limes gelten. Das chirale Kondensat Σ wurde nach der Banks-Casher-Formel (3.28) aus $\rho(0)$ bestimmt. Dazu wurden Fits an $\rho(\lambda)$ im Bereich kleiner λ's mit Polynomen ersten, zweiten und dritten Grades gemacht. Der Fehler von Σ ist eine Abschätzung aus der Variation von $\rho(0)$ bezüglich

β	V	Σ	$\langle\sum_n \lambda_n^{-2}\rangle/V^2$	$\Sigma^2/2$	Abweichung [%]
2.0	4^4	0.1131(19)	$7.76(10)\cdot 10^{-3}$	$6.40(21)\cdot 10^{-3}$	19.2
2.0	6^4	0.1209(16)	$8.61(61)\cdot 10^{-3}$	$7.31(19)\cdot 10^{-3}$	16.3
2.0	8^4	0.1228(25)	$8.20(20)\cdot 10^{-3}$	$7.54(31)\cdot 10^{-3}$	8.4
2.0	10^4	0.1247(22)	$7.97(30)\cdot 10^{-3}$	$7.78(27)\cdot 10^{-3}$	2.4
2.2	6^4	0.0540(06)	$1.82(06)\cdot 10^{-3}$	$1.46(03)\cdot 10^{-3}$	21.9
2.2	8^4	0.0556(19)	$1.67(03)\cdot 10^{-3}$	$1.55(11)\cdot 10^{-3}$	7.45
2.4	16^4	0.00863(48)	$3.97(14)\cdot 10^{-5}$	$3.72(42)\cdot 10^{-5}$	6.50
2.4	14^4	0.00947(85)			

Tabelle 4.1: Vergleich der Gitterdaten und der analytischen Vorhersage für die Leutwyler-Smilga-Summenregel (4.1). Der Wert von Σ auf dem 14^4 Gitter ist aus [62] zum Vergleich angeführt.

Änderung des Grades des Fitpolynoms, der Bingröße bei der Berechnung von $\rho(\lambda)$ und der Größe des Fitintervals.
Die Summenregel (4.1) ist für den *masselosen* Dirac-Operator hergeleitet. Da auf dem Gitter mit endlicher Quarkmasse simuliert werden muß[1], kann man mit den Gitterdaten, die mit dynamischen Fermionen erzeugt wurden, nur *massive* Summenregeln testen. Für $\beta = 4$ sind solche Summenregeln in [89] für $N_f = 1$ und $N_f = 2$ hergeleitet. Die Daten dieser Dissertation wurden mit $N_f = 0,\ 2$ und 4 erzeugt. Ein Test der massiven Summenregel mit $N_f = 2$ mit unseren Daten ergab eine Abweichung von 30%. Diese große Diskrepanz könnte ein Effekt des endlichen Volumens sein. Zu dieser Frage wurde jedoch keine systematische Untersuchung durchgeführt.

4.2 Fluktuationen der kleinsten Eigenwerte

4.2.1 Statische Näherung

Hier werden zunächst die Ergebnisse in statischer Näherung dargestellt [90]. In dieser Näherung werden die Gittervariablen $U_{i,\mu}$ mit dem Gewicht e^{-S_G} erzeugt, das bedeutet, daß nur die Gluondynamik berücksichtigt wird. Mit der so erzeugten Konfiguration wird der Dirac-Operator (3.2) diagonalisiert. Im Vergleich zu Simulationen mit dynamischen Fermionen war es in der statischen Näherung möglich, eine große Anzahl an Konfigurationen zu erzeugen und auf größeren Gittern zu rechnen, wie man aus den folgenden Abbildungen und aus Tabelle 3.3 entnehmen kann.
Wir sind besonders an den Bereich kleiner Eigenwerte interessiert, denn wir wollen die Gitterdaten mit den analytischen Vorhersagen der chiralen RMT für die Verteilung des

[1] Das Verfahren des konjugierten Gradienten funktioniert nur mit $m \neq 0$.

kleinsten Eigenwerts $P(\lambda_{\min})$ (3.57) und für die mikroskopische Spektraldichte (3.54) mit $N_f = \nu = 0$. Es soll hier nochmal ausdrücklich betont werden, daß die RMT-Vorhersagen (3.54) und (3.57) im Grenzwert $V \to \infty$ hergeleitet sind. An Stelle von (3.54) kann man für die mikroskopische Spektraldichte den vereinfachten Ausdruck für $N_f = 0$ betrachten

$$\rho_S(z) = z[J_0^2(2z) + J_1^2(2z)] - \frac{1}{2}J_0(2z)\int_0^{2z} dt\, J_0(t) \tag{4.2}$$

mit $z = \lambda V\Sigma$. Nach der Definition der mikroskopischen Spektraldichte

$$\rho_S(z) \;=\; \lim_{V\to\infty} \frac{1}{V\Sigma}\rho\left(\frac{z}{V\Sigma}\right)$$

berechnet man diese aus den Gitterdaten, indem man die numerische Zustandsdichte $\rho(\lambda)$ mit $V\Sigma$ reskaliert. Die Skala $V\Sigma$ wird aus den numerischen Daten bestimmt: V ist das Volumen und Σ der Absolutbetrag des chiralen Kondensats bei $m = 0$. Wie man Σ aus den Gitterdaten bestimmt, wurde im vorigen Paragraph beschrieben. Das gleiche gilt für die Verteilung des kleinsten Eigenwertes, hier nochmal:

$$P(\lambda_{\min}) \;=\; \sqrt{\frac{\pi}{2}}c\;(c\lambda_{\min})^{3/2} I_{3/2}(c\lambda_{\min})\; e^{-\frac{1}{2}(c\lambda_{\min})^2} \tag{4.3}$$

mit $c = V\Sigma$, der gleichen Skala wie für $\rho_S(z)$. Das bedeutet, daß die Random-Matrix-Vorhersagen *parameterfrei* sind.

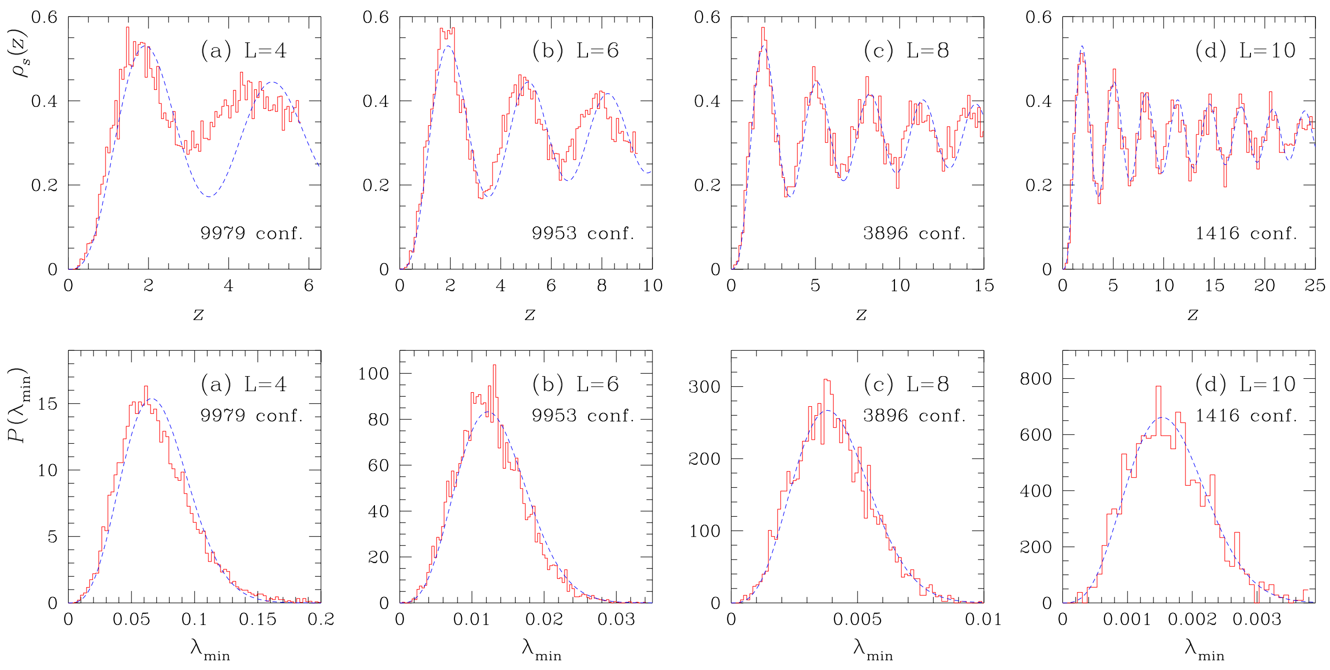

Abbildung 4.1: Mikroskopische Spektraldichte (obere Reihe) und Verteilung des kleinsten Eigenwertes des Dirac-Operators für vier verschiedene Gittergrößen und $\beta = 2.0$. Die Histogramme sind aus Gitterdaten berechnet, die Kurven sind die Vorhersagen der Random-Matrix-Theorie (4.2) und (4.3).

In Abbildung 4.1 sind die Resultate dieses Vergleichs für beide Spektralgrößen dargestellt. Hier ist die Kopplungskonstante fest bei $\beta = 2.0$, also im Bereich starker Kopplung. Das Gittervolumen wird von $V = 4^4$ bis auf $V = 10^4$ vergrößert. Insbesondere für die mikroskopische Spektraldichte ist eine bessere Übereinstimmung zwische Gitterdaten und analytischer Vorhersage für wachsendes Volumen deutlich zu sehen. Die Werte von Σ, die zur Reskalierung von λ verwendet wurden, sind aus Tabelle 4.1 entnommen.
Wiederholt man den Vergleich mit schwächerer Kopplung nämlich $\beta = 2.2$, dann ändert sich das Bild. In Abbildung 4.2 ist das zu sehen: Man braucht bei $\beta = 2.2$ größere Gittervolumina, um die gleiche Qualität der Übereinstimmung wie bei $\beta = 2.0$ zu erreichen.

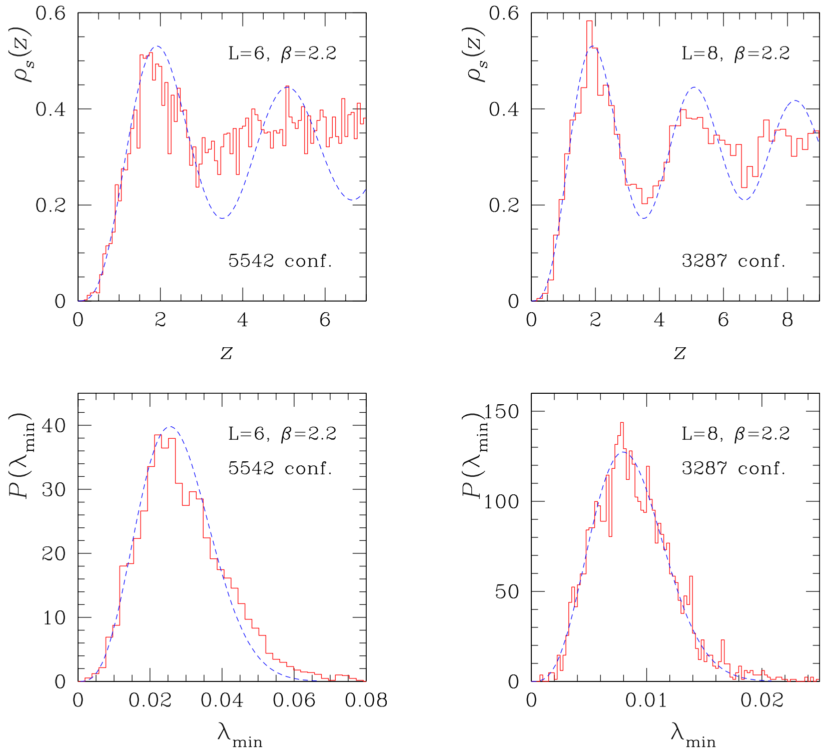

Abbildung 4.2: Mikroskopische Spektraldichte und Verteilung des kleinsten Eigenwertes für zwei verschiedene Gittervolumina und $\beta = 2.2$. Die Histogramme sind aus Gitterdaten berechnet, die Kurven sind die Vorhersagen der Random-Matrix-Theorie (4.2) und (4.3).

Das wird nochmal durch die Resultate in Abbildung 4.3 bestätigt. Hier ist das Gittervolumen fest auf $V = 8^4$ und β wird von links nach rechts von schwacher zu starker Kopplung variiert. Und auch hier sieht man eine Verschlechterung für schwächer werdende Kopplung.
Man kann also aus den bisherigen Resultaten schließen, daß die Übereinstimmung von QCD-Daten und Random-Matrix-Vorhersagen mit $V \to \infty$ und $\beta \to 0$ besser wird, d.h. immer mehr Maxima und Minima der numerisch berechneten mikroskopischen Spektral-

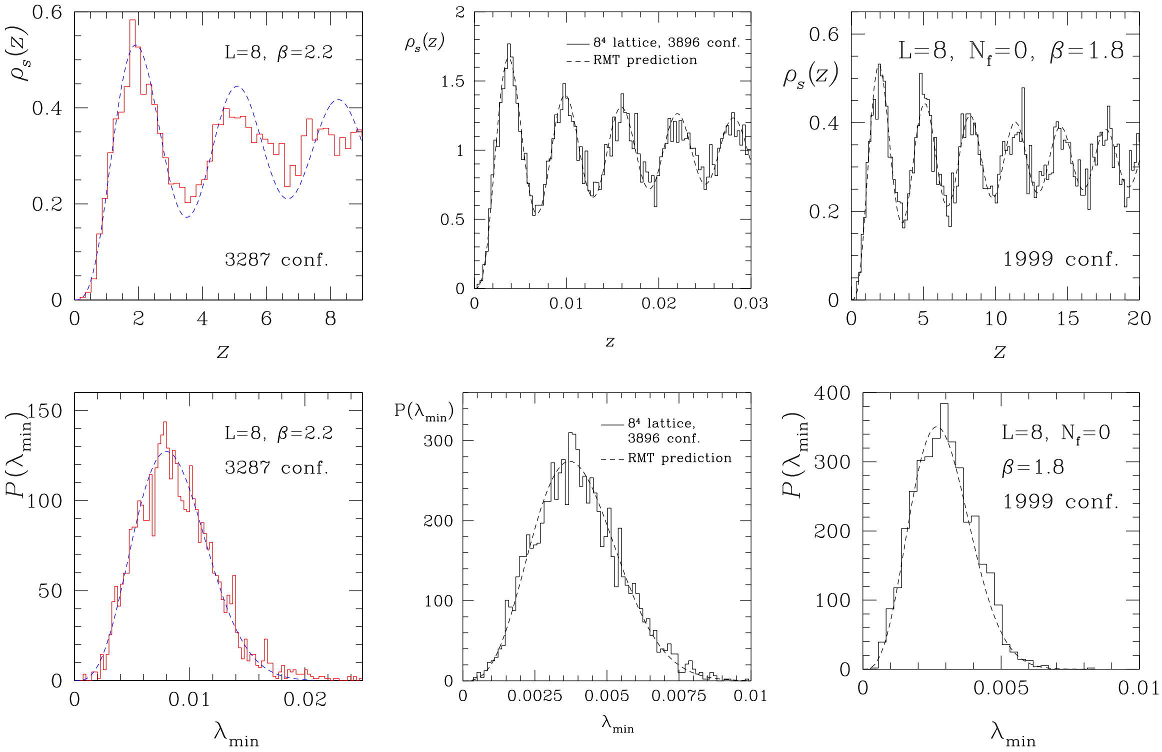

Abbildung 4.3: Mikroskopische Spektraldichte (oben) und Verteilung des kleinsten Eigenwertes für feste Gittergröße $V = 8^4$ und Kopplungskonstanten von links nach rechts $\beta = 2.2,\ 2.0,\ 1.8$. Die Histogramme sind aus Gitterdaten berechnet, die Kurven sind die Vorhersagen der Random-Matrix-Theorie (4.2) und (4.3).

dichte werden durch den analytischen Ausdruck (4.2) parameterfrei modelliert. Die Verbesserung mit $V \to \infty$ ist klar, da die RMT-Vorhersagen in diesem Limes hergeleitet sind. Die Verbesserung mit $\beta \to 0$ liegt an dem Zusammenhang (1.39) zwischen Gitterkonstante a und g bzw. $\beta = 4/g^2$. Für $\beta \to 0$ wird $a\Lambda_L$ größer und somit wächst das *physikalische* Volumen, obwohl das Gitter dann grobmaschiger wird. Vom Standpunkt der Kontinuumsphysik sind aber die Grenzwerte $V \to \infty$ und $\beta \to \infty$ ($a \to 0$) interessant. So vergrößerten wir das Volumen auf 16^4 und β auf 2.4. Das chirale Kondensat ist dann sehr klein (siehe Tabelle 4.1). Diese Parameter sind also gerade noch im Gültigkeitsbereich der Random-Matrix-Vorhersagen und auch hier stellt man noch eine sehr gute Übereinstimmung mit den Gitterdaten fest, wie in Abbildung 4.4 zu sehen ist.
Auf dem größten Gitter diagonalisierten wir den Dirac-Operator auch bei $\beta = 2.5$. Wie wir festellten, liegt die Simulation mit diesen Parametern außerhalb des Bereichs gültiger RMT-Vorhersagen, aber wir fanden trotzdem einige interessante Besonderheiten. Vergleicht man nämlich die Zeitentwicklung des chiralen Kondensats $<\overline{\psi}\psi(m)>$ für die Daten mit $V = 16^4$ und $\beta = 2.5$ mit jener der Daten bei $\beta = 2.4$ wie in Abbildung 4.5, so sind beide qualitativ nicht zu unterscheiden. Nur schwankt $<\overline{\psi}\psi(m)>$ um verschiedene Mittelwer-

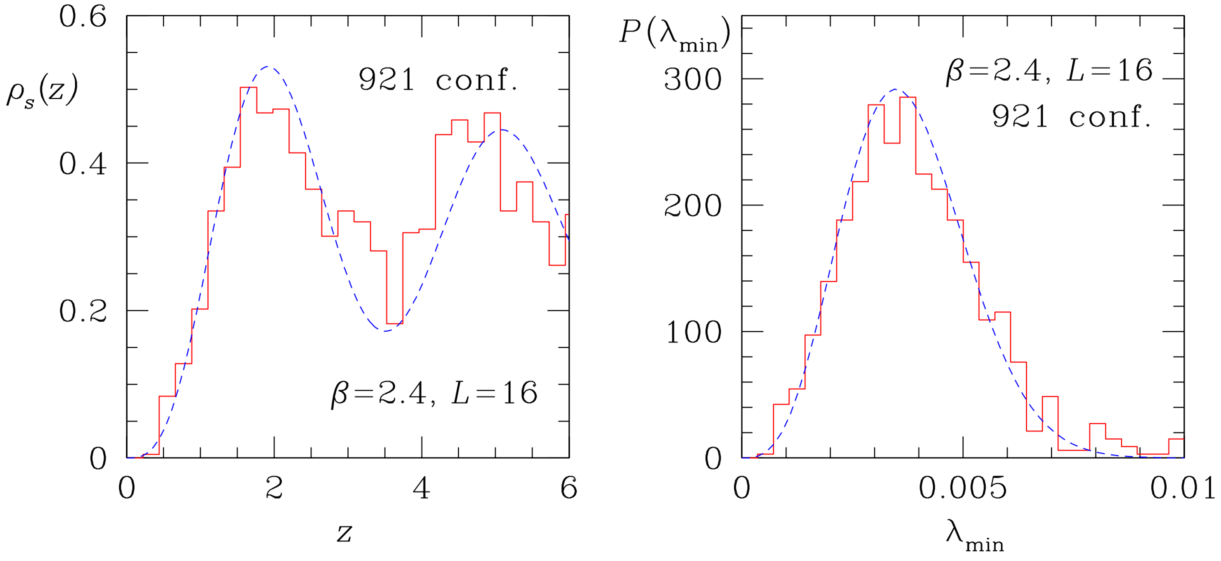

Abbildung 4.4: Mikroskopische Spektraldichte und Verteilung des kleinsten Eigenwertes für $V = 16^4$ und $\beta = 2.4$.

te, die in Tabelle 3.2 wiedergegeben sind. Sieht man sich aber die Zeitentwicklung des kleinsten Eigenwerts $\lambda_{\rm min}$ in Abbildung 4.6 an, dann stellt man fest, daß bei $\beta = 2.5$ die Daten offensichtlich stärker korreliert sind und zwischen zwei verschiedene Phasen schwanken, was möglicherweise ein Anzeichen für nahezu kritisches Verhalten ist. Bei $\beta = 2.4$ sind keine solche Schwankungen zu beobachten. Dieser Unterschied schlägt sich auch in den verschiedenen Werten der integrierten Autokorrelationszeiten von $\lambda_{\rm min}$ für diese Läufe nieder:

$$\begin{array}{lcll} \tau_{\rm int} & = & 1.2(3) & \text{für} \quad \beta = 2.4 \\ \tau_{\rm int} & = & 12(7) & \text{für} \quad \beta = 2.5. \end{array}$$

Noch drastischer wird dieser Unterschied, wenn man $\lambda_{\rm min}$ für beide β-Werte wie in Abbildung 4.7 auf gleicher Skala aufträgt. Erstrecken sich die Fluktuationen des kleinsten Eigenwertes bei $\beta = 2.4$ über eine Größenordnung, so sind die größten auftretenden Eigenwerte bei $\beta = 2.5$ 50 Mal größer als die kleinsten. Zum Vergleich sind beide Verteilungen in einer einzigen Abbildung 4.8 aufgetragen.
Zusammenfassend kann man sagen, daß im Gegensatz zu $<\overline{\psi}\psi(m)>$ $\lambda_{\rm min}$ ein sehr empfindlicher Indikator für kritisches Verhalten des Systems ist.

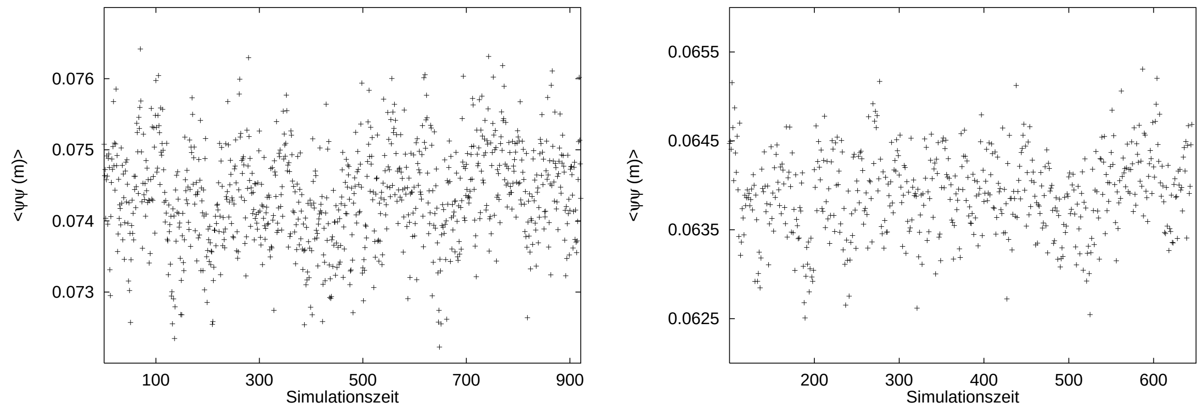

Abbildung 4.5: Zeitentwicklung des chiralen Kondensats für das Gittervolumen 16^4 und $\beta = 2.4$ (links) und $\beta = 2.5$ (rechts).

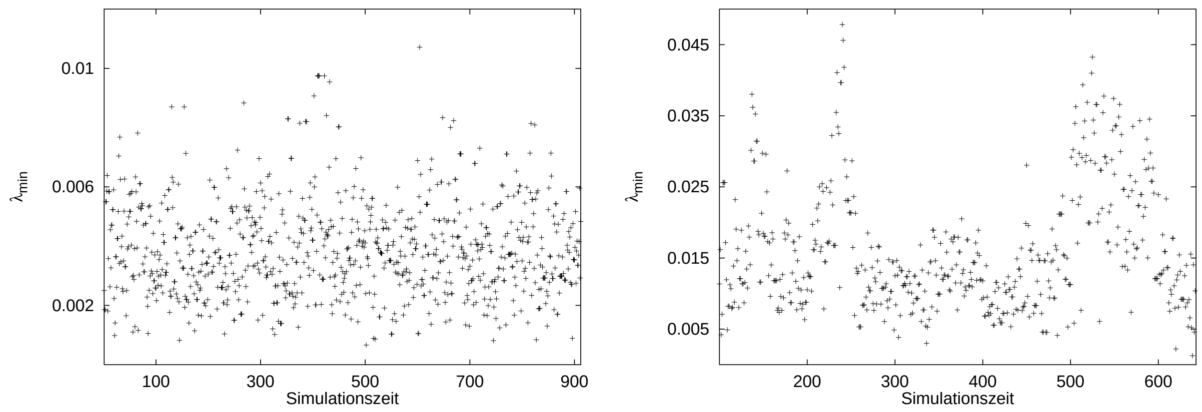

Abbildung 4.6: Zeitentwicklung von λ_{min} für das Gittervolumen 16^4 und $\beta = 2.4$ (links) und $\beta = 2.5$ (rechts), unterschiedliche Skala für λ_{min}.

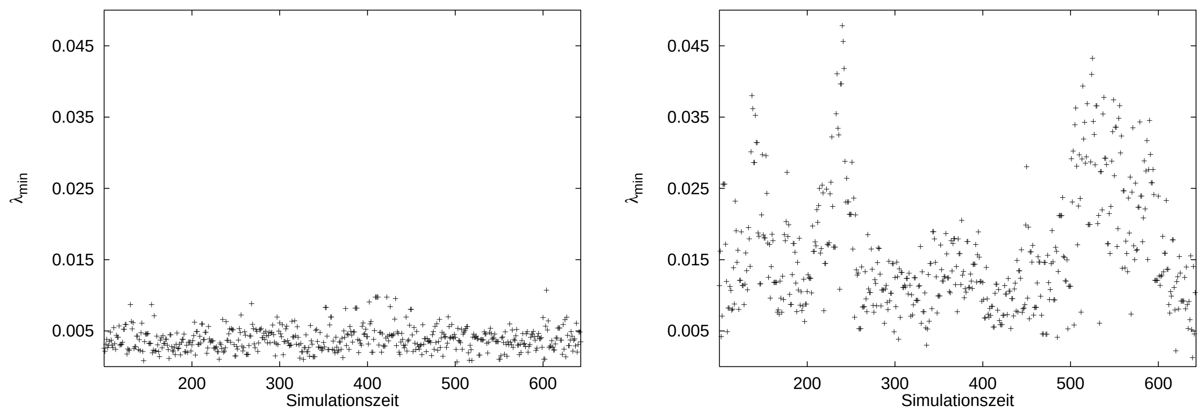

Abbildung 4.7: Zeitentwicklung von λ_{min} für das Gittervolumen 16^4 und $\beta = 2.4$ (links) und $\beta = 2.5$ (rechts), gleiche Skala für λ_{min}.

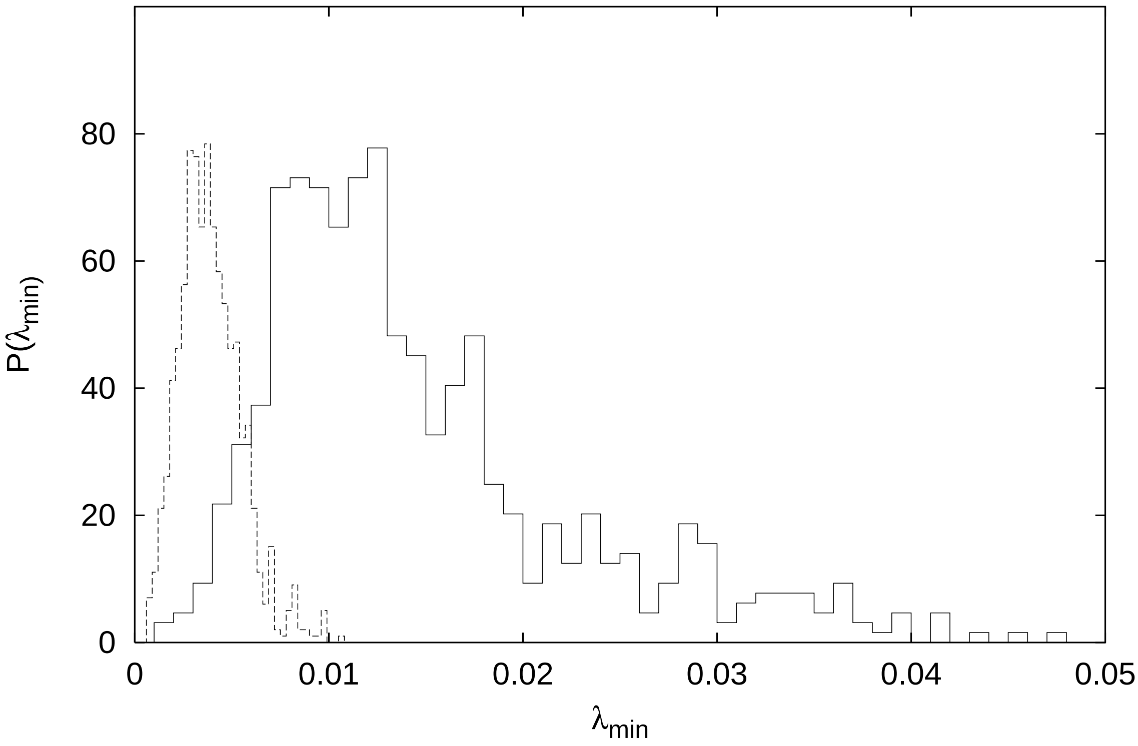

Abbildung 4.8: Verteilung des kleinsten Eigenwertes $P(\lambda_{\text{min}})$ für das Gittervolumen 16^4. Die linke Kurve ist für $\beta = 2.4$, die rechte für $\beta = 2.5$.

Schließlich ist in Abbildung 4.9 der mikroskopische Limes $\rho_S(x, y)$ (3.58) aus den Gitterdaten bei $\beta = 2.0$ und $V = 8^4$ als Funktion von x für festes y zusammen mit der RMT-Vorhersage hierfür aufgetragen. Auch hier ist die Übereinstimmung trotz der für eine Zweipunkt-Clusterfunktion relativ geringen Statistik beeindruckend.
Für die Gitterdaten bei $\beta = 2.0$, $V = 10^4$ und $\beta = 2.4$, $V = 16^4$ berechneten wir die auf Eins normierte mittlere Spektraldichte $\rho(\lambda)/V$. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.10 zu sehen, wobei nur die Spektraldichte positiver Zustände dargestellt ist. Da die Eigenwerte in Paaren $\pm\lambda_k$ vorkommen, muß man sich $\rho(\lambda)$ symmetrisch zur Ordinate zu negativen λ's hin fortgesetzt vorstellen. Nach der Banks-Casher-Relation (3.28) hängt der Wert von $\rho(0)$ direkt mit dem Ordnungsparameter des chiralen Phasenübergangs zusammen. Man sieht eine deutliche Abnahme von $\rho(0)$ beim Übergang von $\beta = 2.0$ nach $\beta = 2.4$. Daß die Dichte für große λ's abbricht, ist ein Effekt des endlichen Gittervolumens.
Was macht die Random-Matrix-Theorie für Vorhersagen über die mittlere Spektraldichte? Integriert man die Verbundswahrscheinlichkeitsdichte (3.50) über λ, so erhält man für

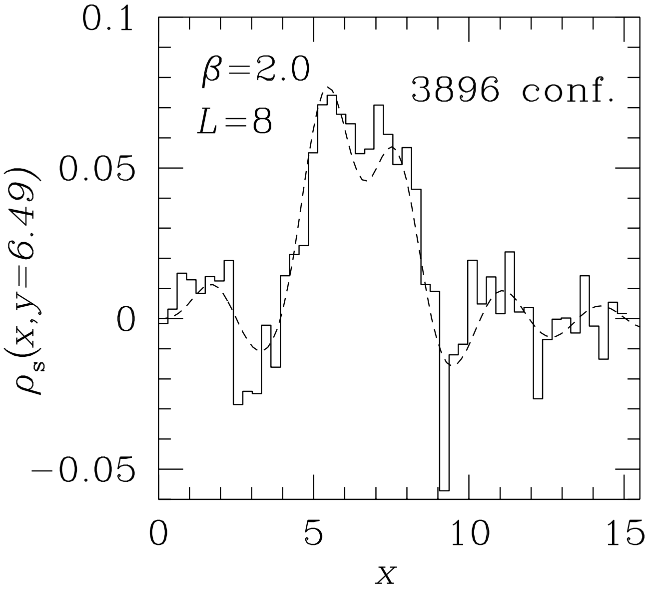

Abbildung 4.9: Mikroskopischer Grenzwert der Zweipunkt-Clusterfunktion für einen festen y-Wert. Das Histogramm ist aus Gitterdaten berechnet, die Kurve ist die RMT-Vorhersage aus [74].

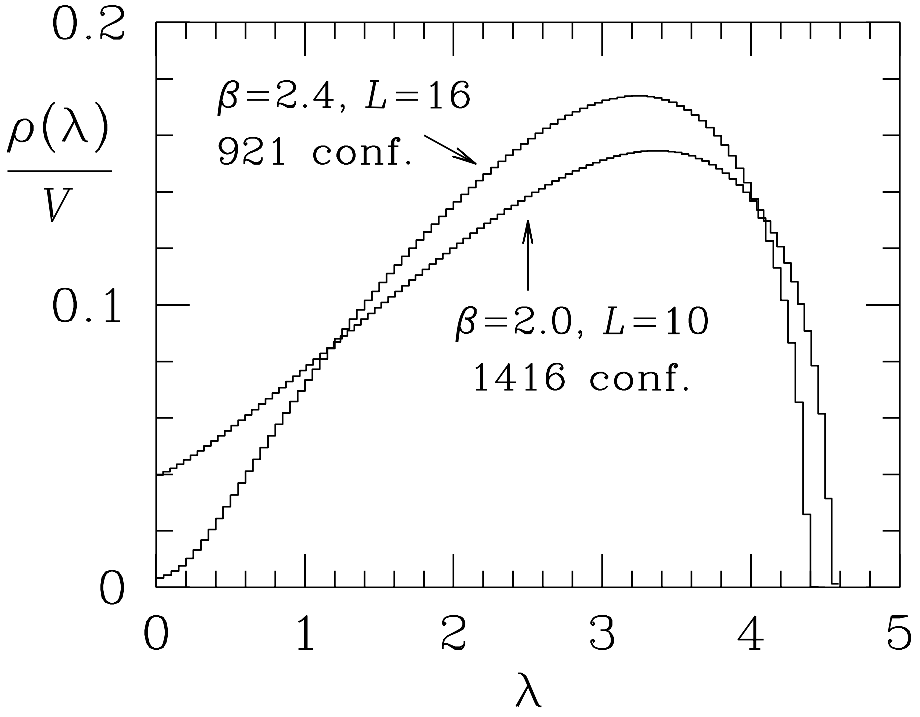

Abbildung 4.10: Auf Eins normierte mittlere Spektraldichte für $\lambda > 0$.

$\beta = 1, 2$ und 4 im Grenzwert großer n für die mittlere Spektraldichte

$$\rho(\lambda) \;=\; \begin{cases} \frac{n\Sigma^2}{\pi}\sqrt{4/\Sigma^2 - \lambda^2} & ,\lambda < 2/\Sigma \\ 0 & ,\lambda \geq 2/\Sigma. \end{cases} \tag{4.4}$$

Das wurde 1957 von Wigner [93] für $\beta = 1$ gezeigt. Wenn man in (4.4) $2/\Sigma$ als Energieeinheit einführt, dann ist $\pi\rho(\lambda)/V\Sigma$ halbkreisförmig (man erinnere sich, daß $2n = N = V$ ist). (4.4) ist in der englischsprachigen Fachliteratur als *Wigner semi-circle law* bekannt. Für die meisten physikalischen Systeme ist eine solche Dichte nicht realistisch und offenbar ist es auch im vorliegenden Fall so. In der Tat hat es sich herausgestellt, daß im Allgemeinen die gaußsche RMT unbrauchbar ist für die Vorhersage von *globalen* Eigenschaften eines Spektrums wie z.B. die mittlere Dichte. Die *lokalen* Vorhersagen der gaußschen RMT sind dagegen in Übereinstimmung mit den Beobachtungen. Diese sind beispielsweise die mikroskopische Spektraldichte $\rho_S(z)$, die Fluktuationen des kleinsten Eigenwerts um seinen Mittelwert oder die mikroskopische Clusterfunktionen. Da im allgemeinen Ereignisse, die sich auf extrem unterschiedlichen Skalen abspielen, fast keinen Einfluß aufeinander haben [94], können diese voneinander unabhängig behandelt werden. Man kann die chiralen Random-Matrix-Ensembles als gute Modelle zur Beschreibung von Fluktuationen betrachten.

4.2.2 Dynamische Fermionen

Nachdem der Vergleich von RMT-Vorhersagen mit QCD-Gitterdaten in der statischen Näherung so gute Übereinstimmung zeigte, war die nächste Frage: Kann die chirale RMT auch Gitterdaten, die mit dynamischen Fermionen erzeugt wurden, richtig modellieren?
Was die QCD-Simulationen in diesem Fall angeht, so nehmen sie viel mehr Rechenzeit in Anspruch als in der statischen Näherung, da im Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus bei jedem leapfrog-Schritt die Fermionenmatrix $M^\dagger M$ invertiert werden muß. Braucht man beispielsweise für ein Update mit Spektrumsberechnung in der statischen Näherung 445 Sekunden CPU-Zeit auf einem 12^4 Gitter, so sind es mit dynamischen Fermionen mit $m = 0.015$ 1248 Sekunden. Es war also unumgänglich, die Simulation in diesem Fall auf ein relativ kleines Gittervolumen zu beschränken und zwar $V = 8^4$.
Mit den dynamischen Fermionen tritt ein neuer Parameter in die Simulation ein, nämlich die Quarkmasse m. In welcher Größenordnung sollte m in den Gittersimulationen gewählt werden, um eine Übereinstimmung zwischen RMT- und QCD-Daten zu sehen? Ein Teil der Antwort ist in der Ungleichung (3.32) enthalten: In diesem Bereich wird die QCD-Zustandssumme durch die Zustandssumme der effektiven chiralen Störungstheorie (3.33) und durch die chirale RMT beschrieben. (3.32) und die Tatsache, daß nach der Gell-Mann-Oakes-Renner-Relation[2] $\frac{1}{2}m_\pi^2 f_\pi^2 \simeq m\Sigma$ ist und also das Quadrat der Pionmasse der nackten

[2] f_π ist die Pionzerfallskonstante.

N_f	β	Masse	#Konf	Σ	$mV\Sigma$
1	1.7	0.01500	1700	0.1124(8)	6.91
	1.7	0.00750	1000	0.1078(8)	3.31
	1.8	0.01500	1799	0.1250(46)	7.68
2	1.3	0.00750	1023	0.2846(38)	8.74
	1.3	0.00550	1042	0.2800(45)	6.31
	1.3	0.00375	703	0.2772(42)	4.26

Tabelle 4.2: Chirales Kondensat Σ für die Daten mit dynamischen Fermionen.

Quarkmasse proportional ist [95], ergeben für die Wahl von m die Forderung

$$m << \frac{1}{\Lambda_{QCD}\sqrt{V}}. \tag{4.5}$$

Wenn man die Zustandssumme (3.47) betrachtet, dann ist klar, daß ein eventueller Effekt dynamischer Quarks auf die Fluktuationen der kleinen Eigenwerte nur sichtbar sein wird, wenn die Quarkmasse in der Größenordnung kleiner Eigenwerte ist. Für die reskalierten Größen fordern wir also:

$$\mu \;=\; mV\Sigma \sim \;z\;=\;\lambda V\Sigma \sim\; \mathcal{O}(1). \tag{4.6}$$

Für die Wahl von m in den Simulationen heißt das:

$$m \sim 1/V\Sigma, \tag{4.7}$$

was mit (4.5) kompatibel ist. Mit $m >> 1/V\Sigma$ bzw. $\mu >> 1$ würde man Ergebnisse erwarten, die mit denen in der statischen Näherung identisch sind.

In Tabelle 4.2 sind die Daten, die wir mit dynamischen Fermionen erzeugt haben, zusammengestellt. Die β-Werte $1.7, 1.8$ bzw. 1.3 sind so gewählt, daß das System für alle Massen m in der chiral gebrochenen Phase ist [96]. Bevor die Ergebnisse vorgestellt werden, ist eine Bemerkung zur Flavoranzahl angebracht: N_f ist die Anzahl der Flavors, die in die Gittersimulation eingeht. Wie in Paragraph 1.3.2 erklärt wurde, ist also N_f die Anzahl der Komponenten der Kogut-Susskind-Fermionfelder auf jedem Gitterpunkt. Im Kontinuum entsprechen diesen Feldern physikalische Quarks mit $\tilde{N}_f = 4 \cdot N_f$. Bei unseren Untersuchungen vergleichen wir die Gitterdaten für $\tilde{N}_f$ mit den RMT-Vorhersagen für $N_f = \tilde{N}_f/2$. Warum das so ist, soll beispielsweise für $N_f = 1$ erläutert werden:

1. Auf dem Gitter ist die chirale Symmetrie $U(4)\otimes U(4)$ der Kontinuumswirkung zu einer $U(1)\otimes U(1)$ Symmetrie heruntergebrochen. Das würde bedeuten, daß man in der Zustandssumme (3.47) und somit in allen daraus abgeleiteten RMT-Ergebnissen die Flavoranzahl wie bei den Gittersimulationen $N_f = 1$ setzt.

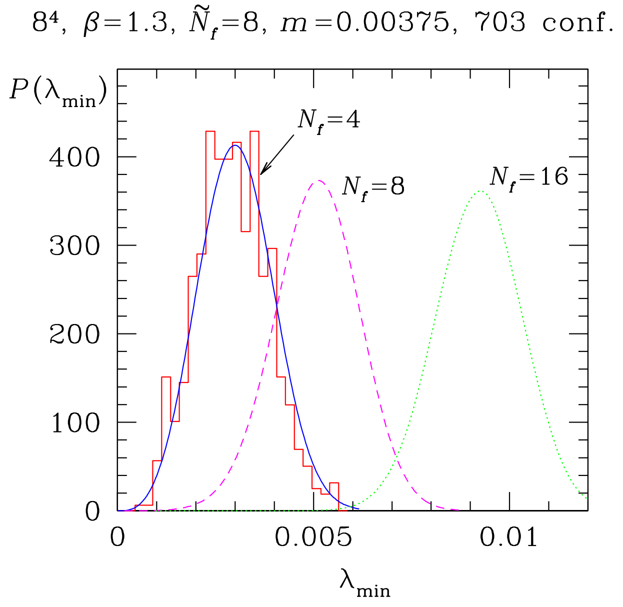

Abbildung 4.11: Das Histogramm ist die Verteilung des kleinsten Eigenwertes für $\tilde{N}_f = 8$ und $m = 0.00375$ aus den numerischen Daten. Die Kurven sind die RMT-Vorhersagen für $N_f = 4, 8, 16$ und die zu m zugehörige reskalierte Masse $\mu = mV\Sigma = 4.26$.

2. Wegen der Ladungskonjugationssymmetrie (3.10) der Kogut-Susskind-Fermionen mit $N_c = 2$ ist das Spektrum des Dirac-Operators zweifach entartet. In der Berechnung von (3.47) wird jedoch diese Entartung nicht berücksichtigt. Also muß in den RMT-Resultaten die Flavoranzahl N_f, mit der simuliert wird, verdoppelt werden, hier also $N_f = 2$.

In Abbildung 4.11 ist ein Vergleich von $P(\lambda_{\rm min})$ aus den Gitterdaten für $\tilde{N}_f = 8$ und $m = 0.00375$ mit den RMT-Vorhersagen für verschiedene Flavoranzahlen und der zu diesem m zugehörigen reskalierten Masse $\mu = mV\Sigma = 4.26$. Daß die Gitterdaten mit der Vorhersage für $N_f = 4$ übereinstimmen, ist ein Hinweis für die Richtigkeit der obigen Argumente. Im Kontinuumslimes würde man Übereinstimmung zwischen numerischen Daten und Vorhersagen der RMT für $N_f = 16$ erwarten.
In Abbildung 4.12 sind unsere Resultate für $\beta = 1.8$, $\tilde{N}_f = 4$ und $m = 0.015$ dargestellt [80]. Die drei Kurven, die außer dem Histogramm zu sehen sind, stellen die RMT-Ergebnisse für die statische Näherung ($N_f = 0$, $\mu = \infty$), für $N_f = 2$ im chiralen Limes und für $N_f = 2$ und $\mu = 7.68$ dar. Diese Vorhersagen wurden in Paragraph 3.2.2 vorgestellt. Die Gitterdaten werden bei diesen Parametern nicht mehr ganz von den Vorhersagen für $N_f = 0$ modelliert. Sie liegen jedoch näher bei dieser Näherung als bei den Vorhersagen im chiralen Limes. Das bedeutet, daß die Quarks mit reskalierter Masse $\mu = 7.68$, was die mikroskopische spektrale Eigenschaften betrifft, immernoch sehr schwer sind. Ganz gut ist die Übereinstimmung mit den aus den schieforthogonalen Polynomen numerisch bestimm-

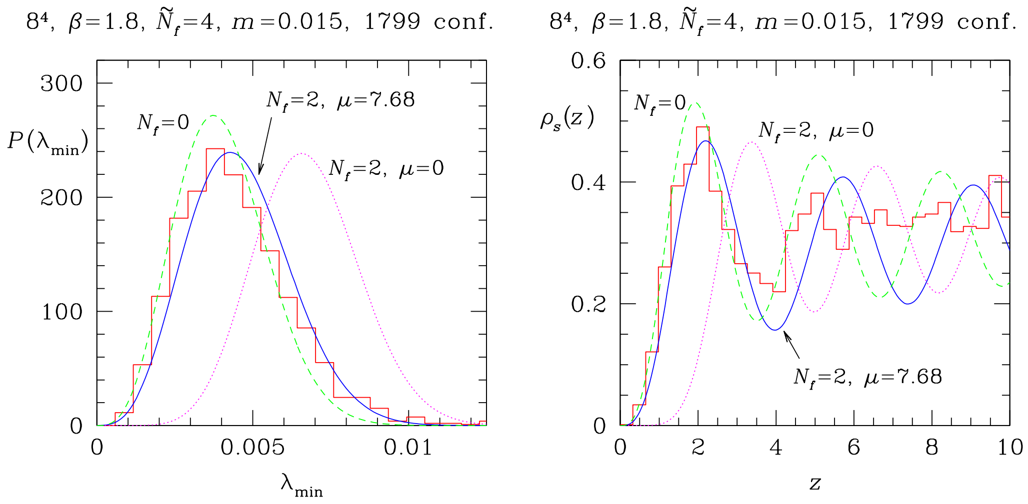

Abbildung 4.12: Verteilung des kleinsten Eigenwertes (links) und mikroskopische Spektraldichte (rechts) mit $\tilde{N}_f = 4$. Die Histogramme sind aus Gitterdaten gewonnen. Die Kurven sind RMT-Resultate für die statische Näherung $N_f = 0$, für $N_f = 2$ im chiralen Limes $\mu = 0$ und für $N_f = 2$ und $\mu = 7.68$.

ten Vorhersagen für $N_f = 2$ und $\mu = 7.68$.
Da die RMT-Kurven im chiralen Limes für größere Flavoranzahlen weiter weg von denen für die statische Näherung sind, kann man den Effekt massiver dynamischer Quarks in diesem Fall deutlicher sehen. Aus diesem Grund haben wir die gleiche Untersuchung mit $\tilde{N}_f = 8$ und drei verschiedenen Massen $m = 0.0075, 0.0055, 0.00375$ wiederholt. Nach der obigen Argumentation müssen die Gitterdaten für $\tilde{N}_f = 8$ mit RMT-Resulaten für $N_f = 4$ und den entsprechenden reskalierten Massen $\mu = mV\Sigma$ verglichen werden. Wie in Abbildung 4.13 zu sehen ist, bewegen sich die Histogramme der Gitterdaten für kleiner werdende Masse weg von den RMT-Kurven im statischen Limes hin zu denen für das chirale Limes. Für die größte Masse $\mu = 8.74$ sind die Histogramme jedoch immernoch ziemlich nah bei den Kurven für $N_f = 0$. Für $\mu = 4.26$ sind sie schon auf halbem Weg zu dem chiralen Limes. Unsere qualitative Forderung $\mu \sim \mathcal{O}(1)$ kann jetzt also auf Grund dieser Resultate präzisiert werden: $\mu \sim 10$ ergibt Resultate, die näher bei $\mu = \infty$ als bei $\mu = 0$ sind. Erst wenn $\mu < 4$ wird, erhält man Histogramme, die dem chiralen Limes deutlich näher sind.
An dieser Stelle soll noch einmal betont werden, daß die einzigen Parameter, die in den Vergleich eingehen, das chirale Kondensat Σ und das Volumen V sind. Σ wurde wie auch im Fall statischer Fermionen aus $\rho(0)$ bestimmt. Man könnte auch umgekehrt die Histogramme an die RMT-Kurven anpassen und daraus Σ gewinnen. Wie man im nächsten Paragraph sehen wird, ist das eine Methode, die teilweise die Effekte des endlichen Gittervolumens eliminiert. Dann wäre die Übereinstimmung der Ergebnisse besser. Wir wählten jedoch den umgekehrten Weg, denn das Ziel war zunächst, die parameterfreie Übereinstimmung von Gitterdaten und RMT-Vorhersagen nachzuweisen.

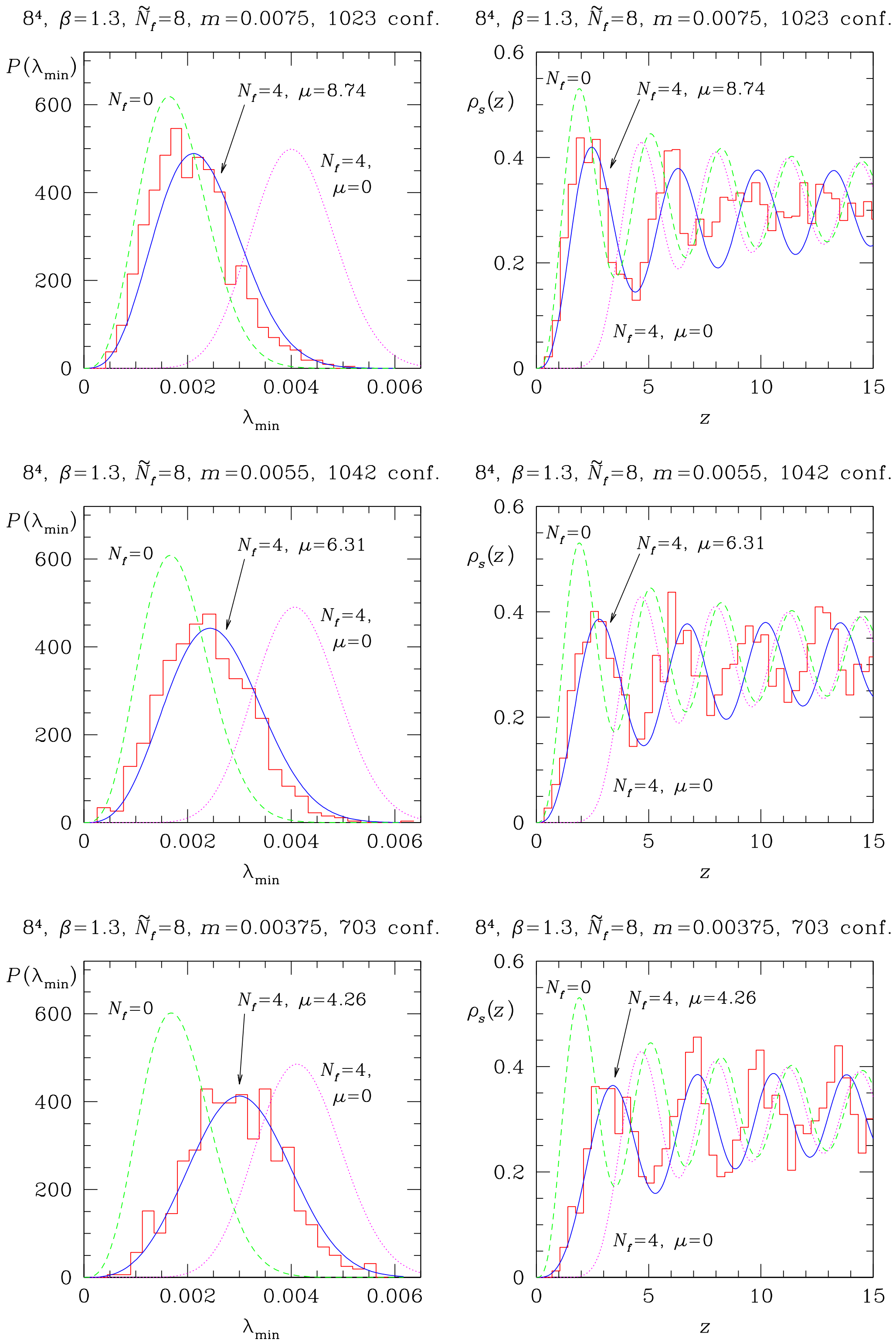

Abbildung 4.13: Verteilung des kleinsten Eigenwertes (links) und mikroskopische Spektraldichte (rechts) mit $\tilde{N}_f = 8$. Die Histogramme sind aus Gitterdaten gewonnen. Die Kurven sind Resultate der RMT für die statische Näherung $N_f = 0$, für $N_f = 4$ im chiralen Limes $\mu = 0$ und für $N_f = 4$ und drei verschiedene Massen $\mu = 8.74, 6.31, 4.26$.

4.3 Random-Matrix-Universalität

Die RMT liefert offensichtlich analytische Ausdrücke, die parameterfrei eine QCD beschreiben, die nicht auf ein endliches Volumen, auf endliche Massen und auf die Diskretisierung von Raum und Zeit beschränkt ist. Kann man daraus etwas gewinnen? Dieser Frage wird in den folgenden drei Paragraphen nachgegangen.

4.3.1 Thermodynamischer Limes

Wie am Schuß von Paragraph 4.2.2 angedeutet, wird das chirale Kondensat Σ aus den Gitterdaten mittels (3.28) bestimmt. Geht man von der Übereinstimmung von numerischen Daten und RMT-Vorhersagen aus, so könnte man das chirale Kondensat Σ bestimmen, indem man die Energieskala der mikroskopischen Spektraldichte oder der Verteilung des kleinsten Eigenwertes, die man aus den Gitterdaten berechnet hat, an die Skala der entsprechenden RMT-Resultate anpaßt. Das wurde für $\rho_S(z)$ mit den Daten bei $\beta = 2.0$ und $L = 4, 6, 8, 10$ gemacht. Die so erhaltenen Werte von Σ werden mit denen aus Tabelle 4.1, die mittels Banks-Casher-Relation aus $\rho(0)$ bestimmt wurden, verglichen. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.14 und Tabelle 4.3 dargestellt. Die über Banks-Casher-Relation bestimmten Werte von Σ erreichen den thermodynamischen Limes erst für das größte Gitter, während die über RMT-Vorhersage bestimmten Werte schon für das kleinste Gitter mit diesem Limes übereinstimmen. Mit Hilfe der RMT-Resultate könnte man also schon auf verhältnismäßig kleinen Gittervolumina Informationen über Observablen im thermodynamischen Limes gewinnen.

L	Σ (BC)	Σ (RMT)	χ^2/dof
4	0.1131(19)	0.1262(17)	6.75
6	0.1209(16)	0.1263(12)	1.87
8	0.1228(25)	0.1255(12)	1.78
10	0.1247(22)	0.1256(10)	1.15

Tabelle 4.3: Das chirale Kondensat als Funktion des Gittervolumens einmal mittels Banks-Casher-Relation (BC) und durch ein Fit an die RMT-Vorhersage für die mikroskopische Spektraldichte (RMT) bestimmt. Siehe auch Abbildung 4.14.

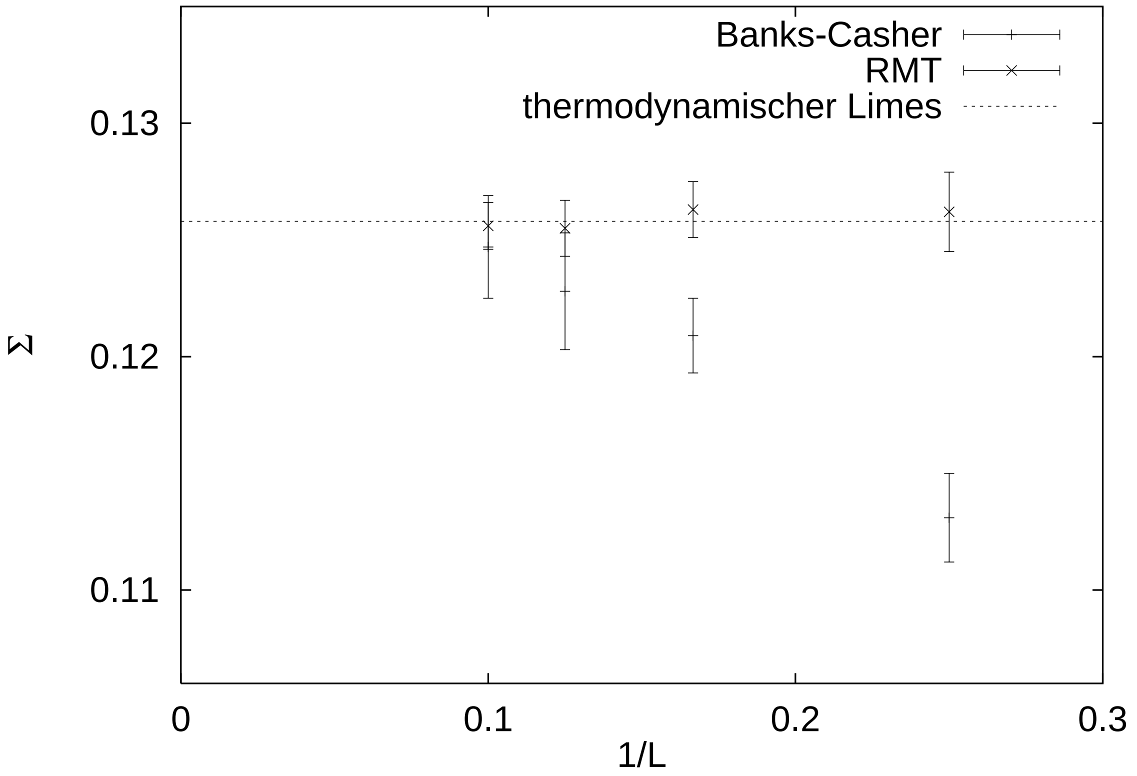

Abbildung 4.14: Extrapolation des chiralen Kondensats Σ zum thermodynamischen Limes mittels Banks-Casher-Relation (3.28) und aus dem Fit der Gitterdaten von $\rho_S(z)$ an (4.2).

4.3.2 Topologie

Die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse sind mit topologischer Ladung $\nu = 0$ konsistent. Das ist vermutlich so, weil auf dem Gitter die Quasi-Nullmoden mit der viel größeren Anzahl an nicht Nullmoden völlig vermischt sind, so daß die effektive topologische Ladung Null ist. Nähert man sich dem Kontinuumslimes, dann erwartet man das Erscheinen topologisch nichttrivialer Konfigurationen. Alle Größen werden dann gewichtete Mittelwerte über die verschiedenen Sektoren topologischer Ladung. Die RMT macht Vorhersagen für die einzelnen Sektoren aber nicht für die Gewichtsfaktoren. In Abbildung 4.15 ist $P(\lambda_{\min})$ für die Gitterdaten mit $\beta = 2.4$, $V = 16^4$ und die RMT-Ergebnisse für $\nu = 0$ und 1 aufgetragen. Mit diesen Parametern sind die Daten dem Kontinuum am nächsten. Möglicherweise sind die kleinen Abweichungen der Gitterdaten von den RMT-Vorhersagen nicht nur auf Effekte des endlichen Volumens zurückzuführen, sondern auf die Beimischung von Konfigurationen mit $\nu \neq 0$.

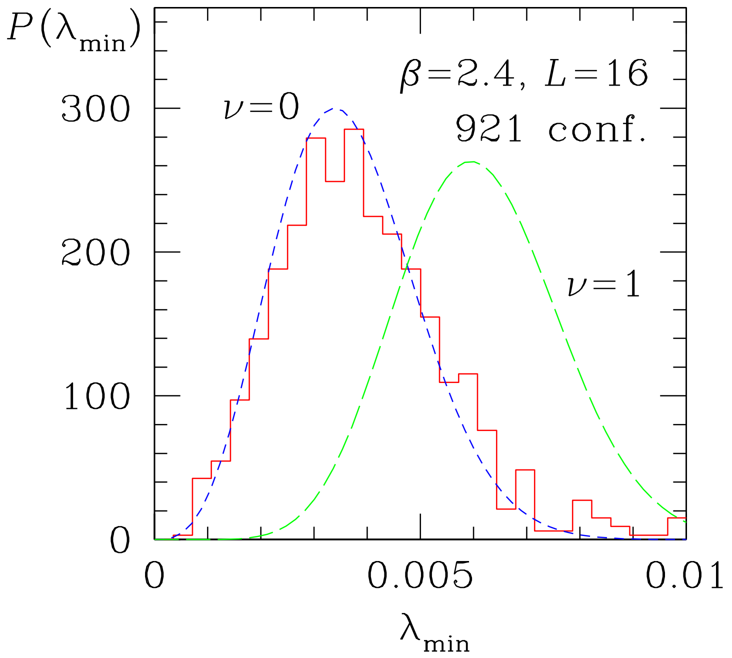

Abbildung 4.15: Verteilung des kleinsten Eigenwertes des Dirac-Operators auf dem Gitter (Histogramm) für $\beta = 2.4$ auf einem 16^4 Gittervolumen in der statischen Näherung und RMT-Vorhersagen für die topologische Sektoren $\nu = 0$ und $\nu = 1$.

4.3.3 Übergang zum Kontinuum

Die Resultate der RMT modellieren spektrale Korrelationen, die aus Gitterdaten bei endlicher Gitterkonstante a berechnet wurden. Allerdings enthalten die Vorhersagen der RMT-Informationen, die beim Übergang zur QCD im Kontinuum nützlich sein könnten.
Da ist erst einmal die Frage der Flavoranzahl, die schon in Paragraph 4.2.2 erwähnt wurde. Beim Übergang zum Kontinuum geht die $U(1)\otimes U(1)$-Symmetrie der Kogut-Susskind-Wirkung in die $U(4)\otimes U(4)$-Symmetrie der Kontinuumswirkung über. Dann würde man eine Übereinstimmung zwischen numerische Daten, die mit $N_f = 4$ erzeugt wurden, und RMT-Resultate bei $N_f = 8$ erwarten.
Eine weitere Frage bezüglich des Kontinuumsübergangs ist die Symmetrieklasse des Dirac-Operators in diesem Grenzwert. Die mikroskopische spektrale Korrelationen des Kogut-Susskind-Operators mit $N_c = 2$ werden durch das chGSE beschrieben. Im Limes $a \to 0$ geht $\not{D}^{KS}$ über in den Dirac-Operator in der fundamentalen Darstellung [97], dessen mikroskopische spektrale Eigenschaften in die Klasse des chGOE fallen. Um zu sehen, ob eines unserer statischen Datensätze einen Hinweis auf einen solchen Übergang liefert, wurde die Größe $\langle\lambda_{\min}\rangle/\Delta(\langle\lambda_{\min}\rangle)$ aus den Gitterdaten berechnet und mit den von der RMT vorhergesagten Werten 2.78 für das chGSE und 1.91 für das chGOE verglichen. Die beiden

letzten Werte wurden aus

$$\begin{aligned}
\langle\lambda_{\min}\rangle &= \int P(\lambda_{\min})\lambda_{\min}d\lambda_{\min} \\
\Delta(\langle\lambda_{\min}\rangle) &= \sqrt{\langle\lambda_{\min}^2\rangle - \langle\lambda_{\min}\rangle^2} \\
\text{mit} \qquad \langle\lambda_{\min}^2\rangle &= \int P(\lambda_{\min})\lambda_{\min}^2 d\lambda_{\min}
\end{aligned}$$

erhalten, wobei für $P(\lambda_{\min})$ der von Forrester [77] berechneten Ausdruck für das jeweilige Ensemble einzusetzen ist. Die Werte für $\langle\lambda_{\min}\rangle/\Delta(\langle\lambda_{\min}\rangle)$ aus den numerischen Daten sind in Tabelle 4.4 zusammengetragen. Für die betrachteten Parametersätze sieht man keinen Hinweis auf einen Übergang zum Kontinuum. Hierzu muß man vermutlich die Untersuchung auf größere Gitter erweitern.

β	V	#Konf	$\langle\lambda_{\min}\rangle/\Delta(\langle\lambda_{\min}\rangle)$
1.8	8^4	1999	2.70
2.0	8^4	3896	2.88
2.0	10^4	1416	2.66
2.2	8^4	2979	2.63
2.4	16^4	921	2.42
2.5	16^4	643	1.89
2.5	16^4	432	2.86[1]

Tabelle 4.4: $\langle\lambda_{\min}\rangle/\Delta(\langle\lambda_{\min}\rangle)$ für verschiedene Datensätze. Die von der RMT vorhergesagten Werte sind 2.78 für das chGSE und 1.91 für das chGOE. [1] Hier wurden alle $\lambda_{\min}^2 > 0.0005$ weggelassen.

Kapitel 5

Schlußbemerkungen und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde gezeigt, daß es in der Quantenchromodynamik auf dem Gitter universelle Größen gibt, die mit Hilfe der Random-Matrix-Theorie exakt berechnet werden können. Der Vergleich der Gitterdaten mit den Vorhersagen der RMT ist parameterfrei und zwar sowohl in der statischen Näherung als auch bei Einbeziehung dynamischer Fermionen. Allerdings beschränken sich unsere Ergebnisse auf Simulationen mit $SU_c(2)$-Eichfeldern und Temperatur $T = 0$. Es wäre daher sehr nützlich, die im Rahmen dieser Dissertation durchgeführten Untersuchungen in folgender Weise zu erweitern:

→ Es sollten die Untersuchungen mit dynamischen Fermionen mit weiteren Simulationsparametern durchgeführt werden, um auch hier die Universalität der RMT-Vorhersagen fest zu etablieren.

→ Es wäre wünschenswert, die Vermutung der Universalität spektraler Korrelationen auch bei endlicher Temperatur durch Gittersimulationen zu überprüfen. Hierzu gibt es in der RMT eine Reihe schematischer Modelle, die einen chiralen Phasenübergang zweiter Ordnung mit *mean-field* kritischen Exponenten liefern [98].

→ Interessant wäre auch, den in Paragraph 4.3.3 erwähnten Übergang zum Kontinuum der $SU_c(2)$-QCD mit Kogut-Susskind-Fermionen zu untersuchen.

→ Die Untersuchungen sollten auf Gittersimulationen mit $SU_c(3)$-Eichfeldern ausgeweitet werden. Das wäre vom Standpunkt der QCD realistischer. Auch im Rahmen der RMT ist es einfacher, analytische Ausdrücke für die Spektralgrößen zu berechnen. In [99] und [100] zeigt sich auch hierfür eine erste Bestätigung der Universalitätshypothese.

→ Eine sehr wichtige Frage ist die nach dem Gültigleitsbereich von RMT-Vorhersagen für das Spektrum des QCD-Dirac-Operators. Es hat sich gezeigt, daß die RMT-

Ergebnisse lediglich bis zu einer gewissen Energie gelten. Diese wird in Analogie zur Physik der kondensierten Materie mit *Thouless-Energie* bezeichnet. Die Frage ist, wie die Thouless-Energie von verschiedenen Simulationsparametern abhängt. Diese und ähnliche Fragen wurden in [101, 102] untersucht. Die Studie in [102] wird zur Zeit erweitert, um auf quantitative Fragen eine Antwort zu finden.

→ Wie schon in Paragraph 4.3.2 angedeutet, sind unsere Ergebnisse mit topologischer Ladung Null konsistent. Die RMT macht Vorhersagen für die verschiedenen topologischen Sektoren und könnte somit als alternatives Mittel bei der Analyse von Fragen der Topologie nützlich sein.

→ Eine weitere interessante Frage ist: Kann man die analytische Information über die kleinen Eigenwerte benutzen, um einen neuen fermionischen Algorithmus zu erfinden? Die Kenntniss kleiner Eigenwerte von $\not{D}$ ist von größter Wichtigkeit für das Verständnis der Performance von Simulationsalgorithmen mit dynamischen Fermionen. So kann z.B. das Skalierungsverhalten von Algorithmen nahe dem chiralen Limes durch den kleinsten Eigenwert der Dirac-Matrix ausgedrückt werden (siehe z.B. für Wilson-Fermionen [103]). Die Studie [102] kommt in der statischen Näherung zu dem Schluß, daß die niedrigsten $\simeq \sqrt{V}/10$ Eigenwerte durch die RMT korrekt beschrieben werden. Man könnte sich also möglicherweise mit Hilfe der RMT-Ergebnisse den numerischen Aufwand, der durch die niedrigsten Eigenwerte verursacht wird, ersparen. Hier wären neue Ideen willkommen.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen stellen somit einen vielversprechenden Ausgangspunkt für eine Vielzahl weiterer Studien dar, die möglicherweise zu einem besseren Verständnis verschiedener Aspekte der nichtperturbativen QCD führen können.

Literaturverzeichnis

[1] C. DeTar, *Quark-gluon plasma in numerical simulations of QCD*, in: *Quark gluon plasma 2*, R. Hwa Ed., (World Scientific, 1995); A. Ukawa, Nucl. Phys. **B53** (Proc.Suppl.) (1997) 106.

[2] T. Banks, A. Casher, Nucl. Phys. **B169** (1980) 103.

[3] E.V. Shuryak, J.J.M. Verbaarschot, Nucl. Phys. **A560** (1993) 306.

[4] E.P. Wigner, Ann. Math. **53** (1951) 36.

[5] T. Guhr, A. Müller-Groeling, H.A. Weidenmüller, Phys. Rept. **299** (1998) 189.

[6] E. Brézin, S. Hikami, A. Zee, Nucl. Phys. **B464** (1996) 411.

[7] S. Chandrasekharan, N. Christ, Nucl. Phys.(Proc. Suppl.) **47** (1996) 527.

[8] J.J.M. Verbaarschot, Phys. Lett. **B368** (1996) 137.

[9] A.D. Jackson, M.K. Şener, J.J.M. Verbaarschot, Nucl. Phys. **479** (1996) 707.

[10] K. Slevin, T. Nagao, Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 635.

[11] J.J.M. Verbaarschot, Nucl. Phys. **B427** (1994) 534.

[12] F.A. Berezin, *The Method of Second Quantization*, (Academic Press, 1966).

[13] L.H. Ryder, *Quantum Field Theory*, (Cambridge University Press, 1997).

[14] E.V. Shuryak, *The QCD Vacuum, Hadrons and the Superdense Matter*, (World Scientific, 1988).

[15] S. Adler, Phys. Rev. **177** (1969) 2426; J.S. Bell, R. Jackiw, Nuov. Cim. **60A** (1969) 47.

[16] C. Callan, R. Dashen, D.J. Gross, Phys. Lett. **B63** (1976) 334.

[17] C. Caso *et al.* (Particle Data Group), European Physical Journal **C3** (1998) 1.

[18] T. Applequist, J. Carazzone, Phys. Rev. **D11** (1975) 2856.

[19] J. Goldstone, Nuovo Cimento **19** (1961) 154, siehe auch Kapitel 8 in [13].

[20] K.G. Wilson, Phys. Rev. **D14** (1974) 2455; F. Wegner, J. Math. Phys. **12** (1971) 2259; A.M. Polyakov, Phys. Lett. **B59** (1975) 79; Phys. Lett.**B59** (1975) 82.

[21] H. Rothe, *Lattice Gauge Theories*, (World Scientific, 1992).

[22] H.B. Nielsen, M. Ninomiya, Nucl. Phys. **B185** (1981) 20; H.B. Nielsen, M. Ninomiya, Phys. Lett. **B105** (1981) 219.

[23] K.G. Wilson, *Quark and Strings on a Lattice* In: *New Phenomena in Subnuclear Physics*, A. Zichichi Ed., (Plenum Press, New York, 1977) S. 69.

[24] J. Kogut, L. Susskind, Phys. Rev. **D11** (1975) 395; T. Banks, J. Kogut, L. Susskind, Phys. Rev. **D13** (1976) 1043; L. Susskind, Phys. Rev. **D16** (1977) 3031; N. Kawamoto, J. Smit, Nucl. Phys. **B192** (1981) 100.

[25] I. Montvay, G. Münster, *Quantum Fields on the Lattice*, (Cambridge University Press, 1994).

[26] J.B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **55** (1983) 775; M. Creutz, L. Jacobs, C. Rebbi, Phys. Reports **93** (1983) 201.

[27] D.H. Weingarten, D.N. Petcher, Phys. Lett. **B99** (1981) 333.

[28] H. Kluberg-Stern, A. Morel, O. Napoly, B. Petersson, Nucl. Phys. **B220** [FS8] (1983) 447.

[29] A.M. Polyakov, Phys. Lett. **72B** (1978) 477.

[30] L.D. McLerran, B. Svetitsky, Phys. Lett. **98B** (1981) 195; L.D. McLerran, B. Svetitsky, Phys. Rev. **D24** (1981) 450; J. Kuti, J. Polónyi, K. Szlachányi, Phys. Lett. **98B** (1981) 199.

[31] W.E. Caswell, Phys. Rev. Lett. **33** (1974) 244; D.R.T. Jones, Nucl. Phys. **B75** (1974) 531; A.A. Belavin, A.A. Migdal, JETP Lett. **19** (1974) 181.

[32] K.G. Wilson, Phys. Rev. **D10** (1974) 2445.

[33] G. Münster, Nucl. Phys. **B180** [FS2] (1981) 23.

[34] T. Jolicoeur, A. Morel, Nucl. Phys. **B262** (1985) 627.

[35] A. Hasenfratz, P. Hasenfratz, Phys. Lett. **104B** (1981) 489; A. Hasenfratz, Z. Kunszt, P. Hasenfratz, C.B. Lang, Phys. Lett. **110B** (1982) 289; H. Joos, I. Montvay, Nucl. Phys. **B255** [FS9] (1983) 565; I. Montvay, Phys. Lett. **139B** (1984) 70;

[36] J.M. Hammersley, D.C. Handscomb, *Monte Carlo Methods*, (Methuen's Monographs, London, 1975).

[37] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087.

[38] M. Creutz, *Algorithms for Simulating Fermions*, in: *Quantum Fields on the Computer*, M. Creutz Ed., (World Scientific, 1992) S. 275.

[39] S. Duane, A.D. Kennedy, B.J. Pendelton, D. Roweth, Phys. Lett. **B195** (1987) 216.

[40] M. Creutz, Phys. Rev. **D38** (1988) 1228; A.D. Kennedy, *Probabilistic Methods in Quantum Field Theory and Quantum Gravity*, 1990, S. 209.

[41] G. Parisi, Y.S. Wu, Sci. Sin. **24** (1981) 483.

[42] D.J.E. Callaway, A. Rahman, Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 613; D.J.E. Callaway, A. Rahman, Phys. Rev. **D28** (1983) 1506.

[43] S. Duane, R. Kenway, B.J. Pendleton, D. Roweth, Phys. Lett. **B176** (1986) 143.

[44] S. Gottlieb, W. Liu, D. Toussaint, R.L. Renken, R.L. Sugar, Phys. Rev. **D35** (1987) 2531.

[45] M.R. Hestenes, E. Stiefel, Nat. Bur. Standards, J. of Res. **49** (1952) 409; J. Stoer, R. Bulirsch, *Numerische Mathematik*, Bd.2, (Springer Verlag, 1990) S. 294; C.B. Chalmers, R.D. Kenway, D. Roweth, J. of Comp. Phys. **70** (1987) 500.

[46] K. Jansen, C. Liu, Nucl. Phys. **B453** (1995) 375.

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

[48] A. M. Horowitz, Phys. Lett. **156B** (1985) 89; Nucl. Phys. **B280** (1987) 510; Phys. Lett. **268B** (1991) 247. Siehe auch: M. Beccaria, G. Curci, Phys. Rev. **D49** (1994) 2578; M. Beccaria, G. Curci, L. Galli, Phys. Rev. **D49** (1994) 2590.

[49] A.D. Sokal, *Bosonic Algorithms*, in: *Quantum Fields on the Computer*, M. Creutz Ed., (World Scientific, 1992) S. 211.

[50] W. Oed, *Technische Dokumentation Cray Research Massiv Paralleles Prozessorsystem* (1996), siehe http://www.kfa-juelich.de/zam/docs/craydoc/t3e/t3e.ps.

[51] R. Barriuso, A. Knies, *SHMEM User's Guide for Fortran*, Technical Report, (Cray Research Inc., Eagan (MN), 1994).

[52] R.C. Brower, A.R. Levi, K. Orginos, Nucl. Phys. **B42** (Proc. Suppl.) (1995) 855.

[53] K.C. Bowler, D.L. Chalmers, A. Kenway, R.D. Kenway, G.S. Pawley, D.J. Wallace, Nucl. Phys. **B240** [FS12] (1984) 213.

[54] M.E. Berbenni, A.P. Gottlob, S. Meyer, M. Pütz, Nucl. Phys. **B53** (Proc. Suppl.) (1997) 965.

[55] A.D. Kennedy, R. Edwards, H. Mino, B. Pendleton, Nucl. Phys. **B47** (Proc. Suppl.) (1996) 781.

[56] B. Efron: *The Jackknife, the Bootstrap and other Resampling Plans.* (SIAM, Philadelphia, 1982).

[57] S. Basak, A.K. De, Phys. Lett. **B430** (1998) 320.

[58] M.A. Halasz, J.J.M. Verbaarschot, Phys. Rev. **D52** (1995) 2563.

[59] M.A. Halasz, J.J.M. Verbaarschot, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 3920.

[60] H. Leutwyler, A. Smilga, Phys. Rev. **D46** (1992) 5607.

[61] J.J.M. Verbaarschot, lectures given at the *Nato Advanced Study Institute* on *Confinement, Duality, and Non-Perturbative Aspects of QCD*, Cambridge, 1997, see also hep-th/9710114.

[62] S.J. Hands, M. Teper, Nucl. Phys. **B347** (1990) 819.

[63] O. Martin, S.W. Otto, Phys. Rev. **D31** (1985) 435.

[64] T. Kalkreuter, Phys. Lett. **B276** (1992) 485; Phys. Rev. **D48** (1993) 1; Comp. Phys. Comm. **95** (1996) 1.

[65] A. Smilga, Phys. Rept. **291** (1997) 1.

[66] J. Gasser, H. Leutwyler, Phys. Lett. **188B** (1987) 477.

[67] A. Smilga, invited talk on the conference *Chiral Dynamics in Hadrons and Nuclei*, Seoul, February 1995, see also hep-th/9503049.

[68] M. Peskin, Nucl. Phys. **B175** (1980) 197; S. Dimopoulos, Nucl. Phys. **B168** (1980) 69; M. Vysotskii, Y. Kogan, M. Shifman, Sov. J. Nucl. Phys. **42** (1985) 318; D.I. Diakonov, V.Yu. Petrov, *Lecture notes in physics*, **417**, (Springer Verlag, 1993).

[69] A. Smilga, J.J.M. Verbaarschot, Phys. Rev. **D51** (1995) 829.

[70] S. Nishigaki, Phys. Lett. **B387** (1996) 139; G. Akemann, P.H. Damgaard, U. Magnea, S. Nishigaki, Nucl. Phys. **B487** (1997) 721; M.K. Şener, J.J.M. Verbaarschot, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 248; S. Nishigaki, P.H. Damgaard, T. Wettig, Phys. Rev. **D58** (1998) 087704.

[71] E. Brézin, A. Zee, Nucl. Phys. **B402** (1993) 613; G. Hackenbroich, H.A. Weidenmüller, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 4118.

[72] J.C. Osborn, D. Toublan, J.J.M. Verbaarschot, hep-th/9806110.

[73] M.L. Mehta, *Random Matrices*, (Academic Press,1990).

[74] T. Nagao, P.J. Forrester, Nucl. Phys. **B435** (1995) 401.

[75] J.-Z. Ma, T. Guhr, T. Wettig, Euro. Phys. J. **A2** (1998) 87.

[76] O. Bohigas, M.-J. Giannoni, *Chaotic Motion and Random Matrix Theories*, in: *Lecture notes in physics*, **209**, (Springer Verlag, 1984) S. 1.

[77] P.J. Forrester, Nucl. Phys. **B402** [FS] (1993) 709.

[78] T. Nagao, P.J. Forrester, Nucl. Phys. **B509** (1998) 561.

[79] J. Kaneko, SIAM J. Math. Anal. **24** (1993) 1086.

[80] M.E. Berbenni, S. Meyer, T. Wettig, Phys. Rev. **D58** (1998) 071502.

[81] F.J. Dyson, Comm. Math. Phys. **19** (1970) 235; G. Mahoux, M. Mehta, Comm. Math. Phys. **79** (1981) 327; Indian J. Pure Appl. Math. **22** (1991) 531; J. Phys. **A14** (1981) 579; J.Phys. France **I** (1991) 1093.

[82] J.J.M. Verbaarschot, Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 2531;

[83] J.J.M. Verbaarschot, Phys. Lett. **B329** (1994) 351; Nucl. Phys. **B427** (1994) 434.

[84] C. Lanczos, Nat. Bur. Standards, J. of Res. **45** (1950) 255; J. Stoer, R. Bulirsch, *Numerische Mathematik*, Bd.2, (Springer Verlag, 1990) S. 34.

[85] J. Cullum, R.A. Willoughby, J.of Comp. Phys. **44** (1981) 329.

[86] J. Stoer, R. Bulirsch, *Numerische Mathematik*, Bd.1, (Springer Verlag, 1990) S. 277.

[87] E. Anderson *et al.*,*LAPACK user's Guide*, SIAM (1995).

[88] A. Billoire, R. Lacaze, E. Marinari, A. Morel, Nucl. Phys. **B251** [FS13] (1985) 581.

[89] P.H. Damgaard, Phys. Lett. **B425** (1998) 151.

[90] M.E. Berbenni Bitsch, S. Meyer, A. Schäfer, J.J.M. Verbaarschot, T. Wettig, Phys. Rev. Lett. **80** (1998) 1146.

[91] J.J.M. Verbaarschot and I. Zahed, Phys. Rev. Lett. **70** (1993) 3852.

[92] T. Guhr, T. Wettig, Nucl. Phys. **B506** (1997) 589; A.D. Jackson, M.K. Şener, J.J.M. Verbaarschot, Nucl. Phys. **B506** (1997) 612.

[93] E.P. Wigner, Proc. 4th Can. Math. Congr., Toronto, 1959, S. 174.

[94] K.G. Wilson, Scientific American, **241** (1979) 158.

[95] M. Gell-Mann, R.J. Oakes, B. Renner, Phys. Rev. **175** (1968) 2195.

[96] S. Meyer, B.J. Pendleton, Phys. Lett. **B241** (1990) 397.

[97] M.F.L. Golterman, J. Smit, Nucl. Phys. **B245** (1984) 61; Y. Luo, Phys. Rev. **D55** (1997) 353.

[98] A.D. Jackson, J.J.M. Verbaarschot, Phys. Rev. **D53** (1996) 7223; M.A. Stephanov, Phys. Lett. **B375** (1996) 249; R.A. Janik, M.A. Nowak, I. Zahed, Phys. Lett. **B392** (1997) 155; T. Wettig, T. Guhr, A. Schäfer, H.A. Weidenmüller, Proc. of *Hirschegg '97: QCD phase transitions*, (GSI, Darmstadt, 1997) 69; T. Wettig, A. Schäfer, H.A. Weidenmüller, Phys. Lett. **B367** (1996) 28.

[99] P.H. Damgaard, U.M. Heller, A. Krasnitz, hep-lat/9810060.

[100] M. Göckeler, H. Hehl, P.E.L. Rakow, A. Schäfer, T. Wettig, hep-lat/9811018.

[101] J. Stern, hep-ph/9801282; R.A. Janik, M.A. Nowak, G. Papp, I. Zahed, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 264; J.C. Osborn, J.J.M. Verbaarschot, Nucl. Phys. **B525** (1998) 738; J.C. Osborn, J.J.M. Verbaarschot, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 268.

[102] M.E. Berbenni-Bitsch, M. Göckeler, T. Guhr, A.D. Jackson, J.-Z. Ma, S. Meyer, A. Schäfer, H.A. Weidenmüller, T. Wettig, T. Wilke, Phys. Lett. **B438** (1998) 14.

[103] K. Jansen, Nucl.Phys. **B53** (Proc.Suppl.) (1997) 127.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die für das Gelingen dieser Arbeit eine wesentliche Unterstützung waren. Zuallererst danke ich meinem Betreuer Prof. Dr. Steffen Meyer für die interessante Themenstellung, für die stetige Bereitschaft zu wissenschaftlichen Diskussionen und für seine Ratschläge. Herrn Prof. Dr. Volkhard Müller danke ich für die Erstellung des Zweitgutachtens. Weiterhin danke ich Herrn Prof. Dr. Tilo Wettig für die sehr fruchtbare Zusammenarbeit während der letzten zwei Jahre. Herrn Prof. Dr. Hans Arved Weidenmüller und Herrn Prof. Dr. Andreas Schäfer danke ich für die Einladung zum workshop "Applications of RMT in QCD", 4.5.98 - 8.5.98, am ECT in Trento. Herrn Prof. Dr. Antonin Vancura danke ich ganz herzlich für die vielen physikalischen Erläuterungen. Ein besonderer Dank gilt Aloysius Gottlob[1], Mathias Pütz und Jens Schneider für die große Hilfe beim Programmieren. Mathias Pütz und Jens Schneider gilt mein besonderer Dank für ihre stete Bereitschaft zu physikalischen Diskussionen.
Frau Frey, Herrn Blochmann und Frau Börner möchte ich einen großen Dank für ihr freundliches Entgegenkommen und ihre Hilfe bei allen verwaltungstechnischen Angelegenheiten aussprechen.
Dem Systemverwalter der gluon, Herrn Rolf Kissel, danke ich ganz besonders für seine geduldigen Erklärungen über das Innenleben einer workstation. Ich möchte mich auch beim Regionalen Hochschulrechenzentrum Kaiserslautern und beim Rechenzentrum der Universität Stuttgart bedanken für die wertvolle Hilfe bei der Rechnernutzung. Mein Dank gilt ebenfalls der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die finanzielle Unterstützung.
Schließlich möchte ich mich bei meinem Mann, meinen Kindern und allen Freunden für ihr Verständnis und Ihre Unterstützung bedanken.

[1] † 20.11.1996

Lebenslauf

Persönliche Daten:

Name:	Maria Elisabetta Berbenni Bitsch
Geburtsdatum:	18. Januar 1949
Geburtsort:	Mailand (Italien)
Eltern:	Bruno Alfredo und Carla Berbenni
Familienstand:	verheiratet seit dem 14. Juni 1977, zwei Kinder, 1978 und 1981 geboren

Schulbildung:

1955 - 1968	Volksschule und Gymnasium an der Deutschen Schule 'Istituto Giulia' in Mailand
1968	Übersiedlung in die Bundesrepublik Deutschland
1968 - 1969	'Maria Ward' Schule in Mainz
1969	Hochschulreife

Studium:

1969	Aufnahme des Studiums der Physik an der 'Johannes Gutenberg' Universität in Mainz
1972	Vordiplom im Fach Physik
1972	Immatrikulation an der Universität Kaiserslautern
1975	Diplom im Fach Physik
1993 - 1994	Inhaberin des Wiedereinstiegsstipendiums des Ministeriums für Wissenschaft und Weiterbildung des Landes Rheinland - Pfalz
Juni 1995	Aufnahme des Promotionsstudiums im Fachbereich Physik der Universität Kaiserslautern