

## 4. Diskussion der Fehlerquellen

Bei der numerischen Simulation der QCD gibt es sowohl statistische wie auch systematische Fehlerquellen. Diese sollen in diesem Kapitel diskutiert und bewertet werden.

### 4.1. Statistische Fehler

Die Berechnung von Erwartungswerten verschiedener Observablen reduziert sich bei einer Monte-Carlo-Simulation auf eine Mittelung der Ergebnisse für  $N$  Konfigurationen. Sind diese Konfigurationen unabhängig, so erwarten wir, dass der statistische Fehler proportional  $1/\sqrt{N}$  kleiner wird.

Allerdings muss berücksichtigt werden, dass es einer minimalen Anzahl  $N_{\min}$  von Konfigurationen bedarf, ehe eine zuverlässige Bestimmung von Observablen möglich ist.  $N_{\min}$  hängt vom Volumen (in Gittereinheiten), der Quarkmasse und der Eichfeldkopplung ab. Je kleiner das Volumen, je kleiner die Quarkmasse und je kleiner der Eichfeldkopplungsparameter  $\beta$  sind, desto größer ist  $N_{\min}$ . In Abbildung 4.1 ist die Masse des Vektormesons  $m_V$  für verschiedene Volumina, Quarkmassen und Werte von  $\beta$  dargestellt. In allen drei Fällen ist die Zahl der Konfigurationen so groß, dass das Ergebnis innerhalb der Fehler konstant ist.

### 4.2. Extrapolation zu unendlichem Volumen

Durch die Begrenzung des räumlichen Volumens auf eine endliche Länge  $L$  und die Wahl periodischer Randbedingungen kommt es zu einer Verschiebung der Energie der einzelnen Zustände in Abhängigkeit von  $L$ . Eine systematische Untersuchung der Volumenabhängigkeit der Massen stabiler Teilchen durch Lüscher [61] ergab, dass für genügend große Volumina die Korrekturterme proportional  $\exp(-\lambda L)$  verschwinden. Für kleine Gitter sind gravierendere Korrekturterme möglich. Tatsächlich zeigen numerische Untersuchungen, dass diese Terme lediglich proportional  $L^{-\nu}$  verschwinden, wobei  $\nu \simeq 2-3$  für QCD mit dynamischen Fermionen [62] ist. Für QCD in der Valenzquark-Approximation wurde  $\nu \simeq 1-2$  gefunden [63]. Dies ist in Übereinstimmung mit der

#### 4. Diskussion der Fehlerquellen

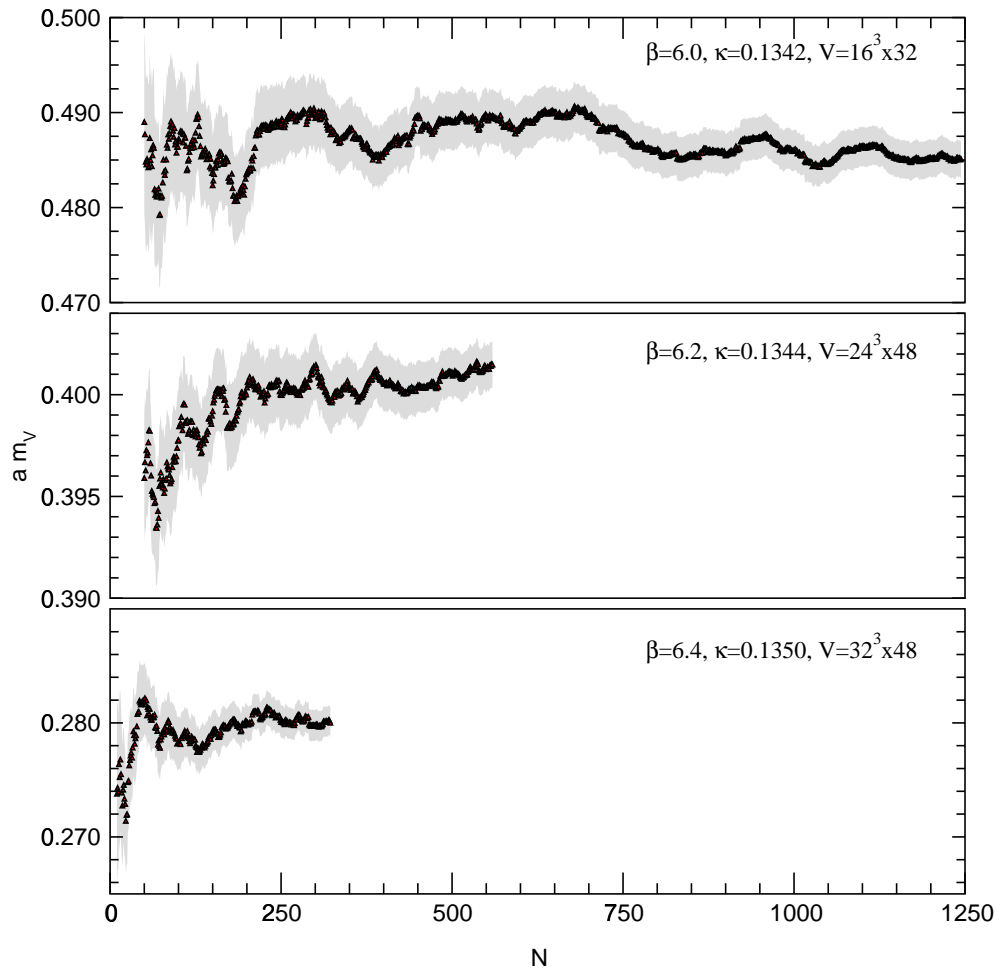


Abbildung 4.1.: Masse des Vektormesons  $m_V$  für verschiedene Quarkmassen und Gitterabstände als Funktion der Anzahl Konfigurationen  $N$ .

theoretischen Erwartung, weil durch die Valenzquark-Approximation Quark-Schleifen unterdrückt worden sind.

Die für Effekte aufgrund endlicher Volumina relevante Skala ist die Compton-Wellenlänge des leichtesten Teilchens, des pseudoskalaren Mesons. Diese Effekte sollten somit klein sein, solange  $aL \gg 1/(m_{PS})$  ist. Bei unseren Simulationen wurde die räumliche Größe des Gitters so gewählt, dass

$$L a m_{PS} > 4.2 \quad (4.1)$$

ist. In Abbildung 4.2 ist das Produkt von  $L$  und  $a m_{PS}$  für leichte Quarkmassen aufgetragen. Das Ziel war dabei, das Volumen so groß zu wählen, dass auf eine Extrapolation nach  $L \rightarrow \infty$  verzichtet werden kann.

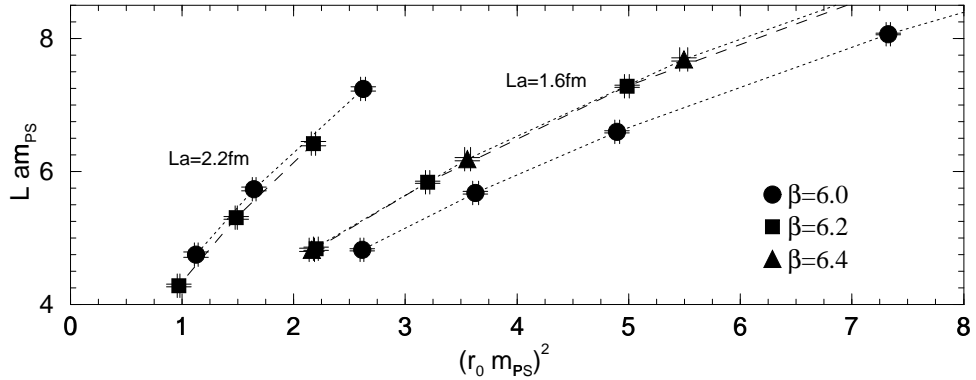


Abbildung 4.2.: Das dimensionslose Produkt der räumlichen Ausdehnung des Gitters  $L a$  und der pseudoskalaren Masse  $m_{\text{PS}}$  als Funktion des Quadrats von  $m_{\text{PS}}$ .

Für  $\beta = 6.0$  und  $6.2$  haben wir bei der gleichen Quarkmasse Simulationen auf zwei Gittern mit unterschiedlichem Volumen durchgeführt. Da wir lediglich bei der Masse des Nukleons für  $\beta = 6.0$  einen statistisch signifikanten Unterschied zwischen den beiden Ergebnissen fanden, können wir davon ausgehen, dass Fehler aufgrund von Effekten endlicher Volumina in der Regel kleiner als die statistischen Fehler sind. Im Falle des Nukleons finden wir eine bis zu 3% größere Masse für das jeweils kleinere Gitter.<sup>1</sup>

### 4.3. Chirale Extrapolation und Artefakte der Valenzquark-Approximation

Bezogen auf die Massen des u- und d-Quarks können Simulationen der QCD auf dem Gitter nur bei relativ schweren Quarkmassen durchgeführt werden. Bei konstantem Volumen wächst die Rechenzeit proportional  $m_{\text{PS}}^{-5}$  [65]. Zur Vermeidung von Volumeneffekten muss das Volumen entsprechend vergrößert werden, so dass der Rechenzeitbedarf im ungünstigsten Fall proportional  $m_{\text{PS}}^{-9}$  wächst.<sup>2</sup> Für QCD in der Valenzquark-Approximation mit Wilson-Fermionen wurden Simulationen mit Quarkmassen bis zu  $m_q \simeq m_{\text{strange}}/3$  durchgeführt, unter anderem auch im Rahmen dieser Arbeit. Um Aussagen über physikali-

<sup>1</sup> Dies ist in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der UKQCD-Kollaboration [64], die bei  $\beta = 6.0$  fand, dass die Masse der Oktettbaryonen auf einem  $16^3 \times 48$ -Gitter 1.4% bis 2.7% größer als auf einem  $32^3 \times 64$ -Gitter ist.

<sup>2</sup> Darüber hinaus sind Probleme mit exzeptionellen Konfigurationen bei kleinen Quarkmassen zu berücksichtigen (siehe Abschnitt 4.8).

sche Größen im chiralen Limes<sup>3</sup> machen zu können, müssen Simulationen für verschiedene (schwere) Quarkmassen durchgeführt und die Ergebnisse extrapoliert werden.

Aussagen über die funktionelle Abhängigkeit hadronischer Observablen von der Quarkmasse können mit Hilfe der chiralen Störungstheorie ( $\chi$ PT) gewonnen werden [66, 67].<sup>4</sup> Der Ausgangspunkt der  $\chi$ PT ist eine effektive Lagrange-Dichte mit masselosen Quarks. Die Brechung der chiralen Symmetrie (und somit die Masse der Quarks) wird als Störung behandelt. Die Parameter der ungestörten Lagrange-Dichte der  $\chi$ PT sind also unabhängig von der Quarkmasse.

Die Anwendung der  $\chi$ PT in der Valenzquark-Approximation (im Folgenden  $q\chi$ PT) geht auf Morel [69] zurück. Dazu wird für jedes Quark ein weiteres bosonisches Quark („ghost“) eingeführt, welches dafür sorgt, dass die Determinante der Fermionmatrix konstant bleibt. Während das  $\eta'$  in der vollen Theorie aufgrund seiner großen Masse entkoppelt wird, bleibt seine Masse in der Valenzquark-Approximation der des Pions gleich [70, 71, 72, 73]. Es existiert somit ein weiteres Pseudo-Goldstone-Boson, was sogenannte *chirale Logarithmen* zur Folge hat. So fanden Bernard und Golterman [74, 75], dass

$$\frac{m_{\text{PS}}^2}{2\mu m_q} = \left[ 1 - \delta \ln \left( \frac{2\mu m_q}{\Lambda_\chi^2} \right) + O(m_q) \right], \quad (4.2)$$

wobei

$$\delta = \frac{m_0^2}{N_f 8\pi^2 f_\pi^2} \quad (4.3)$$

ist. In diesen Gleichungen bezeichnet  $\Lambda_\chi$  einen ultravioletten Abschneideparameter.  $\mu$  und  $f_\pi$  sind Parameter der chiralen Lagrange-Dichte, während  $m_0$  eine für das  $\eta'$  charakteristische Massenskala angibt. In der vollen Theorie ist  $\delta = 0$ , so dass für kleine Quarkmassen  $m_{\text{PS}}^2 = 2\mu m_q$  ist. Der Parameter  $m_0$  kann mit Hilfe der Witten-Veneziano-Formel [76, 77]

$$m_0^2 = \frac{4N_f}{f_\pi^2} \chi_t \quad (4.4)$$

abgeschätzt werden. Verwenden wir für die topologische Suszeptibilität die Abschätzung  $\chi_t = (180 \text{ MeV})^4$  [77] und für die Zerfallskonstante des Pions den experimentellen Wert  $f_\pi = 130.7(4) \text{ MeV}$  [37], so erhalten wir als phänomenologische Abschätzung

$$\delta \simeq 0.18 \quad (4.5)$$

---

<sup>3</sup> Wir können angesichts der kleinen Masse des u- und d-Quarks bzw. des Pions deren Masse in der Regel vernachlässigen.

<sup>4</sup> Für eine Einführung in die chirale Störungstheorie und eine Übersicht über deren Ergebnisse siehe [68].

Für das Vektormeson fanden Booth, Chiladze und Falk [78], die die Abhängigkeit der Masse des Vektormesons von der Quarkmasse mit Hilfe der qχPT untersuchten, dass ein führender in  $m_{\text{PS}}^2$  nicht-analytischer Term existiert:

$$m_V = M_V + C_{1/2} m_{\text{PS}} + C_1 m_{\text{PS}}^2 + C_{3/2} m_{\text{PS}}^3 + \dots \quad (4.6)$$

Hier bezeichnet  $M_V$  die Masse des Vektormesons im chiralen Limes. Für  $N_f = 2$  ist

$$C_{1/2} = -\frac{m_0^2 g_2^2}{N_f 2\pi f_\pi^2} = -4\pi\delta g_2^2 \simeq -2.3, \quad (4.7)$$

wobei  $g_2 \simeq 1$  ein Parameter der Lagrange-Dichte der qχPT ist. In der vollen Theorie ist  $C_{1/2} = 0$  und für kleine Quarkmassen somit  $m_V \propto m_{\text{PS}}^2$ .

Die qχPT für Baryonen wurde von Labrenz und Sharpe untersucht. Sie fanden für das Nukleon [79]

$$m_N = M_N - \frac{3\pi}{2}(D - 3F)^2 \delta m_{\text{PS}} + b_2 m_{\text{PS}}^2 + b_3 m_{\text{PS}}^3 + \dots, \quad (4.8)$$

wobei  $M_N$  die Masse des Nukleons im chiralen Limes angibt. Die Matrixelemente des Axialstroms  $D$  und  $F$  wurden von Jaffe und Manohar [80] durch Anpassung theoretischer Erwartungen an experimentelle Daten bestimmt:

$$\begin{aligned} D &= 0.81(3) \\ F &= 0.47(4) \end{aligned} \quad (4.9)$$

Mit der Abschätzung von  $\delta$  in Gleichung (4.3) erwarten wir somit

$$-\frac{3\pi}{2}(D - 3F)^2 \delta \simeq -0.34 \quad (4.10)$$

In der vollen Theorie ist  $\delta = 0$ . Somit ist dann wie beim Vektormeson der führende Term analytisch. Allerdings ist in beiden Fällen auch in der vollen Theorie der nächste Term proportional  $m_{\text{PS}}^3$  und somit nicht-analytisch in der Quarkmasse.<sup>5</sup>

Die im Rahmen der qχPT gewonnenen Ansätze für verschiedene hadronische Observablen lassen darauf hoffen, dass eine Identifizierung der Artefakte möglich wird, die auf die Valenzquark-Approximation zurückzuführen sind. Wir sind auf der Basis der qχPT allerdings nicht in der Lage, diese Artefakte auf kontrollierte Weise zu entfernen. Eine quantitative Einschätzung des Fehlers, der bei der Bestimmung physikalischer Größen mit Hilfe der QCD in der Valenzquark-Approximation gemacht wird, ist somit nicht möglich.

<sup>5</sup> Eine erste Analyse der Daten von Simulationen mit dynamischen Fermionen scheint dies zu bestätigen [81].

## 4.4. Diskretisierungsfehler

Unsere Ergebnisse wurden für drei verschiedene Werte des Eichfeldkopplungsparameters  $\beta$  bestimmt. Dies entspricht drei verschiedenen Werten des Gitterabstandes  $a$ . Um zu physikalischen Ergebnissen zu gelangen, müssen wir unsere Resultate nach  $a \rightarrow 0$  extrapolieren. Die vorhandenen Daten erlauben uns bestensfalls einen linearen Extrapolationsansatz. Da wir davon ausgehen, dass  $O(a)$ -Diskretisierungsfehler entfernt wurden, werden wir diese Extrapolation linear in  $a^2$  vornehmen. Die Abhängigkeit unserer Ergebnisse vom Gitterabstand  $a$  erweist sich in der Regel als schwach. Wir können daher davon ausgehen, dass der systematische Fehler aufgrund der Vernachlässigung von Termen proportional  $a^k$  ( $k > 2$ ) kleiner ist als der statistische Fehler.

## 4.5. Wahl der Skala

Um eine Kontinuumsextrapolation durchführen zu können, ist es notwendig zu wissen, wie sich die Skala in Abhängigkeit vom Eichfeldkopplungsparameter  $\beta = 6/g_0^2$  ändert. Da alle dimensionsbehafteten Größen auf dem Gitter nur in Einheiten des Gitterabstandes  $a$  bestimmt werden können, benötigen wir schließlich noch einen Umrechnungsfaktor, um diese Größen in physikalische Einheiten auszudrücken.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, eine Skala zu definieren. Wenn wir das Vektormeson im chiralen Limes mit dem  $\rho(770)$  identifizieren, so erhalten wir den inversen Gitterabstand aus der berechneten Masse  $aM_V$  und der experimentell bestimmten Masse des  $\rho$ -Mesons:

$$a^{-1} = \frac{0.770 \text{ GeV}}{aM_V} \quad (4.11)$$

Statt der Masse des Vektormesons könnten hier auch Massen anderer Hadronen, Zerfallskonstanten, wie etwa  $f_\pi$ , oder die „string tension“  $\sqrt{\sigma}$  verwendet werden.<sup>6</sup>

Da es eines der Ziele dieser Arbeit ist, die  $O(a)$ -Verbesserung der fermionischen Wirkung zu testen, ziehen wir es vor, eine Skala zu verwenden, die ausschließlich von den Eichfeldern abhängt. Von der in Gleichung (2.8) definierten Eichfeldwirkung  $S_g$  wissen wir, dass die Diskretisierungsfehler  $O(a^2)$  sind. Die Skala kann in diesem Fall mit Hilfe der „string tension“  $\sqrt{\sigma}$  definiert werden, die auf dem Gitter durch Berechnung des statischen Quarkpotentials  $V(r)$  [82, 83, 84, 85, 86] und experimentell mit Hilfe des Massenspektrums des Charmoniums [87] bestimmt werden kann.

<sup>6</sup> Für große Abstände  $r$  wächst das statische Quarkpotential linear mit  $r$ . Der Proportionalitätsfaktor  $\sigma$  wird „string tension“ genannt.

Ein Nachteil dieser Skala ist, dass Annahmen über das Verhalten des Potentials bei großen Abständen  $r$  gemacht werden müssen. Dies wird deutlich, wenn man die „string tension“ mit Hilfe der Kraft  $F(r) = -\partial V(r)/\partial r$  als  $\sigma = -\lim_{r \rightarrow \infty} F(r)$  definiert. Um dieses Problem zu umgehen, hatte Sommer [88] vorgeschlagen, stattdessen einen Abstand zu verwenden, der groß genug ist, um phänomenologische Modelle für experimentelle Ergebnisse anwenden zu können, und klein genug ist, um auf dem Gitter zuverlässig bestimmt zu werden. Die von Sommer vorgeschlagene Skala ist definiert durch

$$r_0^2 F(r_0) = 1.65, \quad (4.12)$$

wobei die rechte Seite gerade so gewählt ist, dass  $r_0 \simeq 0.5$  fm. Für SU(3) wurde  $r_0/a$  im Bereich  $5.7 \leq \beta \leq 6.57$  mit einer hohen Genauigkeit bestimmt [89]. Die numerischen Ergebnisse werden durch das Polynom

$$\ln(a/r_0) = -1.6805 - 1.7139(\beta - 6) + 0.8155(\beta - 6)^2 - 0.6667(\beta - 6)^3 \quad (4.13)$$

gut beschrieben, wobei der relative Fehler von 0.3% bei  $\beta = 5.7$  linear auf 0.6% bei  $\beta = 6.57$  wächst.

Passt man den linearen Ansatz

$$a\sqrt{\sigma} = b_0 + b_1 \frac{a}{r_0} \quad (4.14)$$

an die numerischen Ergebnisse für die „string tension“  $a\sqrt{\sigma}$  an, wobei  $r_0$  durch Gleichung (4.13) gegeben ist, so erhält man  $b_0 = 0.0003(23)$  und  $b_1 = 1.17(2)$ . Die Daten und der Fit sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Die Konstante  $b_0$  ist innerhalb der Fehler mit Null verträglich. Beide Skalen liefern somit konsistente Ergebnisse. Daraus folgt ferner, dass das dimensionslose Produkt  $(a\sqrt{\sigma})(r_0/a)$  auf dem Gitter durch  $b_1$  gegeben ist:

$$(a\sqrt{\sigma})(r_0/a) = 1.17(2). \quad (4.15)$$

Die experimentellen Werte  $r_0 = 0.5$  fm =  $(394.6 \text{ MeV})^{-1}$  und  $\sqrt{\sigma} = 427$  MeV [87] liefern dagegen

$$\sqrt{\sigma} r_0 = 1.08 \quad (4.16)$$

Dies ist ein Unterschied von etwa 8%. Es handelt sich hier um ein grundsätzliches Problem, welches auf die Valenzquark-Approximation zurückzuführen sein dürfte und auch bei der Wahl anderer Skalen auftritt.

Da Annahmen über das Potential bei großen Abständen vermieden werden und  $r_0$  auf dem Gitter mit hoher Präzision bestimmt worden ist, werden wir im Rahmen dieser Arbeit diese Skala verwenden. Als Umrechnungsfaktor zu physikalischen Einheiten werden wir  $r_0^{-1} = 394.6$  MeV verwenden.

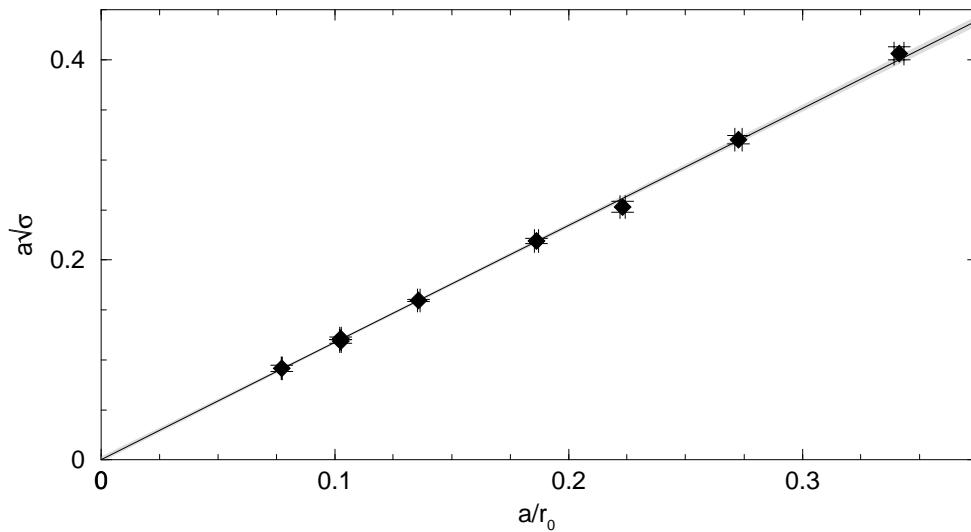


Abbildung 4.3.: Die „string tension“  $a\sqrt{\sigma}$  als Funktion von  $a/r_0$ . Die durchgezogene Linie zeigt das Ergebnis eines linearen Fits.

## 4.6. Diskretisierungseffekte bei schweren Quarks

Zusätzliche Diskretisierungseffekte  $O(am_q)$  sind zu erwarten, wenn die kleinste Masse groß im Vergleich zum Gitterabstand und somit  $am_{PS} \gtrsim 1$  wird. In physikalischen Einheiten entspricht  $am_{PS} = 1$  bei  $\beta = 6.0, 6.2$  bzw.  $6.4$  Massen von  $2.1, 2.9$  bzw.  $3.9$  GeV.

Zwar sollten diese Effekte im Kontinuumslimit verschwinden, jedoch sind diese Diskretisierungseffekte proportional  $a$ . Sind diese groß, so ist der oben genannte Ansatz für eine Kontinuumsextrapolation linear in  $a^2$  nicht korrekt.

## 4.7. Renormierung und Verbesserungskoeffizienten

Zur Bestimmung von Größen wie Zerfallskonstanten müssen Matrixelemente bestimmt werden. Diese müssen in der Regel renormiert werden, um ein endliches Resultat im Kontinuumslimit zu erhalten. Außerdem macht die explizite Verletzung der chiralen Symmetrie durch die Wilson-Wirkung Korrekturen erforderlich, die in diesen Renormierungskonstanten absorbiert werden können. Schließlich kann in einigen Fällen, beispielsweise bei den Quarkmassen oder dem chiralen Kondensat, eine Umrechnung in eines der üblichen Regulierungsschemata im Kontinuum, beispielsweise in das  $\overline{MS}$ -Schema, erforderlich werden.

Nur ein Teil der Renormierungskonstanten ist bislang nicht-störungstheo-



retisch bestimmt worden. Dies gilt auch für einen großen Teil der Verbesserungskoeffizienten. Wir sind hier darauf angewiesen, Ergebnisse der Störungstheorie auf dem Gitter zu verwenden. Allerdings ist bekannt, dass diese Entwicklungen oft nur relativ langsam konvergieren. Wir werden im Rahmen dieser Arbeit in der Regel auf die Ergebnisse der tadpole-verbesserten Störungstheorie nach Lepage und Mackenzie [90] zurückgreifen.

In den Fällen, in denen bislang keine nicht-störungstheoretische Bestimmung von Renormierungskonstanten bzw. Verbesserungskoeffizienten erfolgt ist, ist prinzipiell davon auszugehen, dass die  $O(a)$ -Diskretisierungseffekte nicht vollständig behoben sind. Wir werden allerdings die Annahme machen, dass diese klein genug sind, um bei einer Kontinuumsextrapolation unberücksichtigt zu bleiben.

## 4.8. Exzeptionelle Konfigurationen

Für ausreichend kleine Quarkmassen werden bei Simulationen in der Valenzquark-Approximation auf manchen Konfigurationen Korrelationsfunktionen beobachtet, die nicht das erwartete exponentiell in der Zeit abfallende Verhalten aufweisen. In den Abbildungen 4.4 bis 4.5 sind einige Beispiele graphisch dargestellt. Sie alle zeigen ein Verhalten, welches dem Vorhandensein weiterer Quellen entsprechen würde. Solche Konfigurationen werden „exzeptionell“ genannt.

Das exzeptionelle Verhalten der Korrelationsfunktionen ist auf reelle Eigenwerten der Fermionmatrix  $M$  zurückzuführen. Da die Fermionmatrix die Gleichung

$$M^\dagger = \gamma_5 M \gamma_5 \quad (4.17)$$

erfüllt, treten die Eigenwerte dieser Matrix in komplex konjugierten Paaren  $\mu_i$  und  $\mu_i^*$  auf. Es ist möglich, dass die Eigenwerte von  $M$  auch reell sind. Existieren derartige Eigenwerte, so führt dies in Abhängigkeit von der Quarkmasse zu verschwindenden Eigenwerten  $\lambda_i$  der Matrix  $\gamma_5 M$ . Für kleine reelle Eigenwerte  $\mu_i$  gilt [91]

$$\lambda_i = \mu_i \frac{\phi_i^\dagger \gamma_5 \phi_i}{\phi_i^\dagger \phi_i} + O(\mu_i^2), \quad (4.18)$$

wobei  $\phi_i$  den zum Eigenwert  $\mu_i$  gehörenden Eigenvektor bezeichnet. Da sich hadronische Korrelationsfunktionen mit Hilfe der Matrix  $M^{-1} \gamma_5$  ausdrücken lassen, führen verschwindende Eigenwerte  $\lambda_i$  zu Polen in hadronischen Observablen. Während derartige Situationen in der vollen Theorie aufgrund der dann verschwindenden Fermionmatrix unterdrückt sind, ist dies in der Valenzquark-Approximation nicht der Fall.

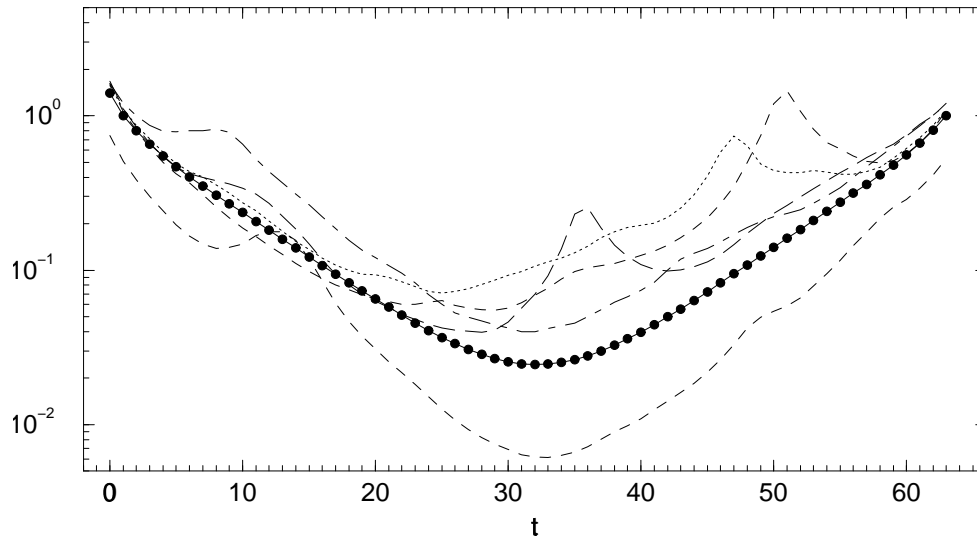


Abbildung 4.4.: Korrelationsfunktion des pseudoskalaren Mesons für  $\beta = 6.2$  und  $\kappa = 0.13555$  als Funktion der Zeit  $t$  auf einem Gitter der Größe  $32^3 \times 64$ . Die verschiedenen Kurven zeigen Korrelationsfunktionen, die ein exceptionelles Verhalten aufweisen. Die geschlossenen Symbole zeigen den Mittelwert der Korrelationsfunktionen, der nach Eliminierung der exceptionellen Konfigurationen gebildet wurde. Die Fehler sind deutlich kleiner als die Symbole. Zwecks leichteren Vergleichs wurden die Korrelationsfunktionen so normiert, dass der Mittelwert in Zeitschicht  $t = 1$  eins ist.

Numerische Untersuchungen der Eigenwerte von  $\gamma_5 M$  [92, 93, 94, 95] zeigen, dass die Eigenwerte der Matrix  $\gamma_5 M$  umso häufiger Null werden, je kleiner die Quarkmasse und die Eichfeldkopplung  $\beta$  und je größer der Verbesserungskoeffizient  $c_{sw}$  ist.

Bei den Simulationen im Rahmen dieser Arbeit haben wir alle Konfigurationen als exceptionell angesehen, bei denen eines der beiden folgenden Kriterien zutrif:

1. Die Fermionmatrix  $M$  konnte weder mit Hilfe des BiCGstab- noch des MR-Algorithmus invertiert werden.
2. Die Korrelationsfunktion des pseudoskalaren Mesons fluktuierte auf einer der Zeitschichten  $t$  um mehr als fünf Standardabweichungen gegenüber dem Mittelwert und zeigte in einem bestimmten Bereich kein in der Zeit exponentiell abfallendes Verhalten.

Die Anzahl exceptioneller Konfigurationen bei  $\beta = 6.2$  sind in Tabelle 4.1 auf Seite 54 aufgelistet.

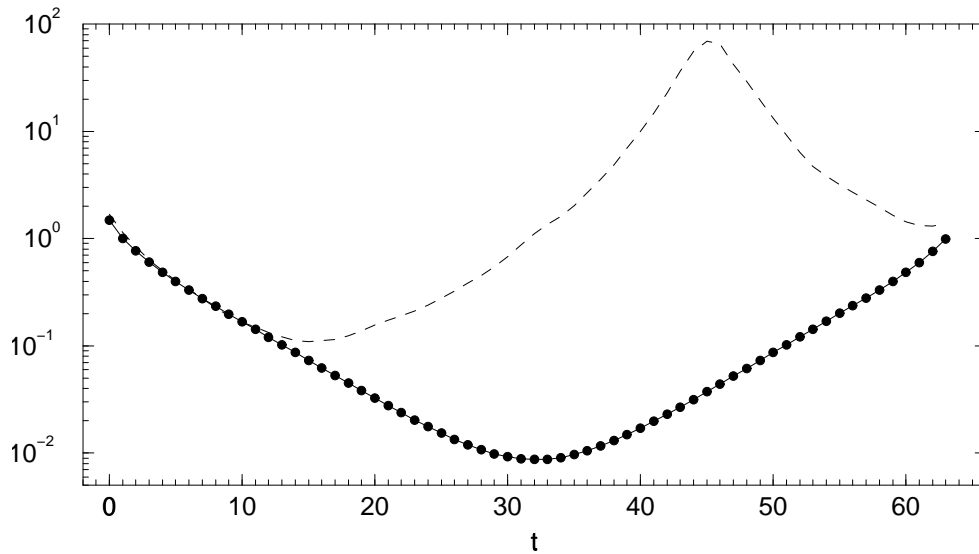


Abbildung 4.5.: Wie Abbildung 4.4, jedoch für  $\kappa = 0.13540$ . Die gestrichelte Kurve zeigt eine Korrelationsfunktion mit besonders exzeptionellen Verhalten.

Es wurden in den letzten Jahren verschiedene Vorschläge gemacht, wie das Problem exzeptioneller Konfigurationen gelöst werden kann:

1. Mit dem Argument, dass die Existenz von reellen Eigenwerten bei endlichen Quarkmassen ein Artefakt auf dem Gitter sei, schlug eine Arbeitsgruppe am FNAL [96, 97, 98] ein Verfahren vor, bei dem diese Pole nach  $m_q = 0$  verschoben werden. Dieses Verfahren ist als „modified quenched approximation“ (MQA) bekannt.
2. Die MILC-Kollaboration [95, 99] führte dieses Problem auf kurzreichweitige Fluktuationen der Eichfelder zurück. Um dies zu verhindern, hat sie vorgeschlagen, für die fermionische Wirkung Eichfelder zu verwenden, die mit Hilfe des APE-Verfahrens [100] lokal verschmiert wurden. Da jeder Link anschließend die Informationen benachbarter Links umfasst, wird diese Wirkung „fat clover action“ genannt.
3. Die QCDSF-Kollaboration [101] hat zur Lösung des Problems exzeptioneller Konfigurationen vorgeschlagen, durch eine geeignete chirale Rotation der fermionischen Wirkung eine Verschiebung der Eigenwerte zu erreichen.

Das letztere Verfahren soll hier eingehender dargestellt werden.<sup>7</sup>

<sup>7</sup> Siehe dazu auch [102].

#### 4. Diskussion der Fehlerquellen

---

$\beta$	$\kappa$	$V$	Konfigurationen	davon exzeptionell
6.2	0.13520	$32^3 \times 64$	115	0 + 2
6.2	0.13540	$32^3 \times 64$	303	2 + 13
6.2	0.13555	$32^3 \times 64$	298	6 + 18

Tabelle 4.1.: Zahl der exzeptionellen Konfigurationen bei Simulationen mit der Sheikholeslami-Wohlert-Wirkung, wobei für  $c_{\text{sw}}$  der nicht-störungstheoretisch bestimmte Wert verwendet wurde. Die letzte Spalte gibt die Zahl der Konfigurationen an, für die Fermionmatrix nicht invertierbar war, plus die Anzahl derer, die aufgrund des Verhaltens der pseudoskalaren Korrelationsfunktion als exzeptionell angesehen wurden.

Die in Gleichung (2.63) definierte Sheikholeslami-Wohlert-Wirkung lässt sich wie folgt schreiben:

$$S_f^{\text{SW}} = a^4 \sum_{x,y} \bar{\psi}_x [\mathcal{D} + (X + m_{0,c}) + (m_0 - m_{0,c})] \psi_y, \quad (4.19)$$

wobei

$$\mathcal{D} = \frac{\gamma_\mu}{2} (\Delta_\mu^f + \Delta_\mu^b) \quad (4.20)$$

$$X = -\frac{a}{2} \Delta_\mu^b \Delta_\mu^f - \frac{ia g_0 c_{\text{sw}}}{4} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu,x} \delta_{x,y} \quad (4.21)$$

und  $m_{0,c}$  die nackte Fermionmasse für  $\kappa = \kappa_c$  ist.

Wir können Gleichung (4.19) so umformulieren, dass

$$S_f^{\text{SW}} = a^3 \bar{\psi}_x [M_c^{\text{SW}} + am_q \delta_{x,y}] \psi_y \quad (4.22)$$

ist, wobei  $M_c^{\text{SW}}$  die Fermionmatrix mit  $\kappa = \kappa_c$  und  $m_q = m_0 - m_{0,c}$  die in Gleichung (2.24) definierte Quarkmasse bezeichnet. Wir haben nun die Freiheit [103, 104, 105, 106] eine chirale Rotation auf die Matrix  $M_c^{\text{SW}}$  anzuwenden:

$$\begin{aligned} M_c^{\text{SW}} \rightarrow M_{c,\phi}^{\text{SW}} &= e^{i\gamma_5 \phi} M_c^{\text{SW}} e^{i\gamma_5 \phi} \\ &= \mathcal{D} + (X + m_{0,c})(\cos 2\phi + i\gamma_5 \sin 2\phi). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Durch die Rotation werden die reellen Eigenwerte der Fermionmatrix  $M_{c,\phi}^{\text{SW}}$  komplex. Die Eigenwerte von  $M_{c,\phi}^{\text{SW}} + am_q \delta_{x,y}$  sind somit für  $\kappa \neq \kappa_c$  weder reell noch Null.

Dieses Verfahren haben wir für eine Konfiguration bei  $\beta = 5.7$  auf einem Gitter der Größe  $16^3 \times 32$  getestet. Wie in Abbildung 4.6 dargestellt wurde,

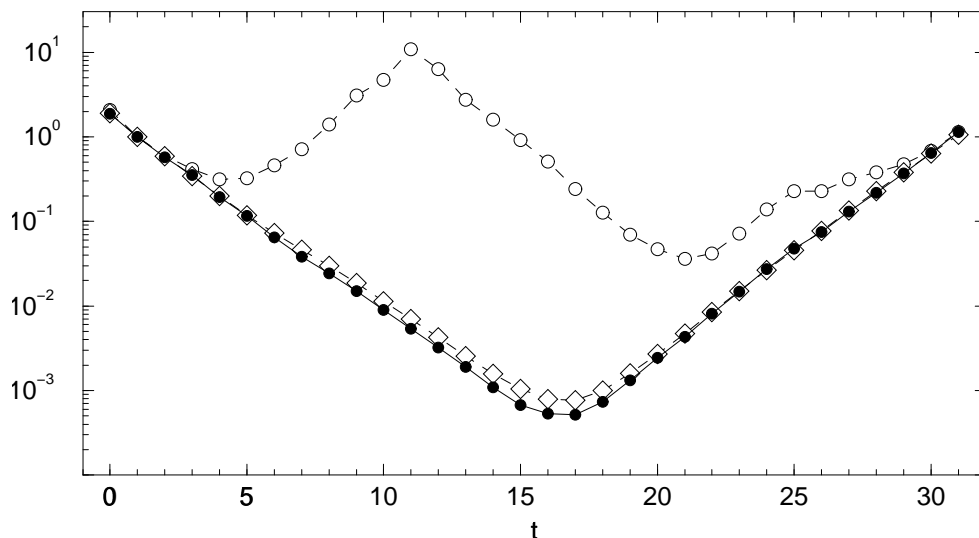


Abbildung 4.6.: Die Korrelationsfunktion des pseudoskalaren Mesons als Funktion der Zeit auf einer einzelnen Konfiguration bei  $\beta = 5.7$ . Mit offenen Kreisen ( $\circ$ ) ist das Ergebnis für die Sheikhholeslami-Wohlert-Wirkung mit  $\kappa = 0.1295$  und  $c_{\text{sw}} = 2.25$  dargestellt. Die geschlossenen Symbole ( $\bullet$ ) zeigen das Resultat unter Verwendung der rotierten Wirkung. Zum Vergleich ist die Korrelationsfunktion eingezeichnet ( $\diamond$ ), die mit Hilfe von Wilson-Fermionen ( $c_{\text{sw}} = 0$ ) bestimmt wurde.

zeigt die Korrelationsfunktion des pseudoskalaren Mesons bei  $\kappa = 0.1295$  und  $c_{\text{sw}} = 2.25$  ein deutlich exzeptionelles Verhalten. Zum Vergleich haben wir auf derselben Konfiguration diese Korrelationsfunktion mit normalen Wilson-Fermionen (oder, anders ausgedrückt, mit  $c_{\text{sw}} = 0$ ) berechnet. Wir haben in letzterem Fall  $\kappa = 0.1640$  mit Hilfe der Ergebnisse in [107] so gewählt, dass die Masse des pseudoskalaren Mesons in beiden Fällen in etwa gleich ist. In diesem Fall zeigt die Korrelationsfunktion kein auffälliges Verhalten. Dies bestätigte auch eine Bestimmung der betragsmäßig kleinsten Eigenwerte der Matrix  $\gamma_5 M$  mit Hilfe des Lanzcos-Algorithmus [108]. Wie man der Abbildung 4.7 entnehmen kann, fanden wir für  $\kappa = 0.1295$  und  $c_{\text{sw}} = 2.25$  deutlich kleinere Eigenwerte als für  $\kappa = 0.1640$  und  $c_{\text{sw}} = 0$ .

Verwenden wir nun die um  $\phi = \pi/4$  rotierte Fermionmatrix, so finden wir für  $\kappa = 0.1295$ ,  $c_{\text{sw}} = 2.25$  und  $\kappa_c = 0.13074$  [107] keinerlei Anzeichen für exzeptionelles Verhalten. Die pseudoskalare Masse ist in guter Übereinstimmung mit dem in [107] bestimmten Wert.

Exzeptionelle Konfigurationen sind somit als ein Artefakt der verwendeten Formulierung auf dem Gitter anzusehen. Wir haben diese Konfigurationen da-

#### 4. Diskussion der Fehlerquellen

---

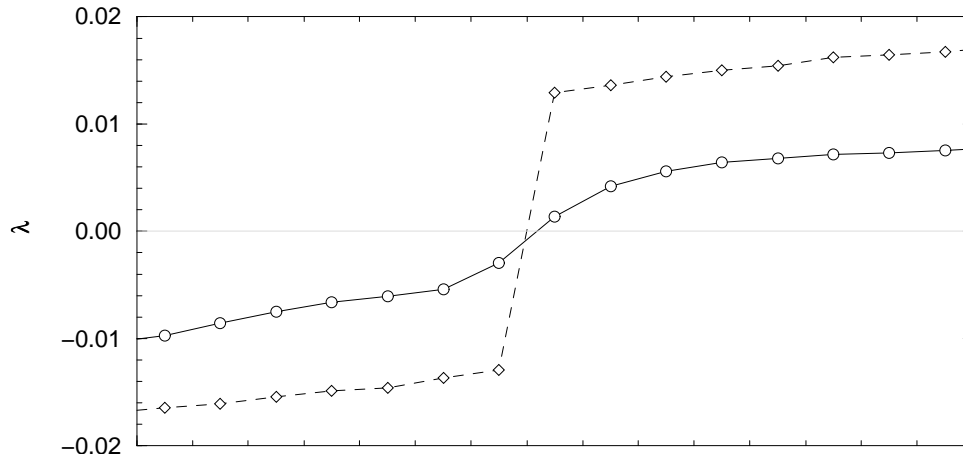


Abbildung 4.7.: Eigenwerte der hermiteschen Fermionmatrix  $\gamma_5 M$  auf einer einzelnen Konfiguration mit  $\beta = 5.7$  und  $V = 16^3 \times 32$ . Dargestellt sind die betragsmäßig kleinsten Eigenwerte für die standardmäßige Sheikholeslami-Wohlert-Wirkung mit  $\kappa = 0.1295$  und  $c_{\text{sw}} = 2.25$  (○) und die übliche Wilson-Wirkung mit  $\kappa = 0.1640$  (◇).

her bei der Bestimmung hadronischer Observablen nicht berücksichtigt. Da es sich um eine kleine Anzahl von Konfigurationen handelt, gehen wir davon aus, dass dieser Eingriff in die statistische Verteilung nicht zu einer fehlerhaften Bestimmung des Mittelwerts führt.