

# Kapitel 3

## QCD auf dem Gitter

Wir beginnen unsere Darstellung mit einer kurzen Zusammenstellung einiger Begriffe aus der Pfadintegralformulierung der QCD. Diese bietet einen sehr bequemen Zugang zur Zweitquantisierung fermionischer Felder, welche dort durch Grassmann-Felder repräsentiert werden [22]. So leitet man das für die Anwendungen der Theorie wichtige Wick-Theorem im Pfadintegralformalismus auf elegante Weise ab.

### 3.1 Pfadintegralformalismus der QCD

Wir wählen von Beginn an euklidische Koordinaten, da wir die Gitter-QCD ebenfalls in diesen Koordinaten formulieren wollen. Ausgangspunkt der Pfadintegraldarstellung ist die Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S[A_\mu, \bar{\psi}, \psi]}, \quad (3.1)$$

mit der QCD-Wirkung

$$S[A_\mu, \bar{\psi}, \psi] = S_{\text{gauge}} + S_{\text{fermion}}, \quad (3.2)$$

wobei

$$S_{\text{gauge}} = \int d^4x \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (3.3)$$

und

$$S_{\text{fermion}} = \int d^4x \bar{\psi} K \psi. \quad (3.4)$$

$K$  ist der Dirac-Operator

$$K = \gamma_\mu D_\mu + m \quad (3.5)$$

mit

$$D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu(x). \quad (3.6)$$

Den Erwartungswert einer beliebigen Observablen  $\mathcal{O} = \mathcal{O}[A_\mu, \bar{\psi}, \psi]$  erhalten wir durch Auswertung von

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{O} e^{-S}. \quad (3.7)$$

## 3.2 Euklidische Feldtheorie

Bevor wir die Wirkung auf dem Gitter formulieren, treffen wir noch ein paar allgemeine Festlegungen. Die euklidische QCD läßt sich durch Wick-Rotation aus der Feldtheorie mit Minkowski-Metrik ableiten, wenn wir folgende Ersetzungen vornehmen

$$\begin{aligned} x_0 &= -ix_4, \\ p_0 &= ip_4. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Ferner werden aus den Vertauschungsrelationen der  $\gamma$ -Matrizen unter Verwendung der Minkowski-Metrik  $g_{\mu\nu}$

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2g_{\mu\nu}, \quad (3.9)$$

die Vertauschungsrelationen

$$\{\gamma_\mu^E, \gamma_\nu^E\} = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (3.10)$$

Wir erhalten diese durch die Ersetzungen

$$\gamma_4^E = \gamma^0 \quad (3.11)$$

und

$$\gamma_j^E = -i\gamma^j \quad (3.12)$$

für  $j = 1, 2, 3$ . Die von uns verwandte Darstellung der  $\gamma$ -Matrizen im Euklidischen ist im Anhang angegeben. Gehen wir zur euklidischen QCD über, so muß  $S$  im Exponenten der Glg. (3.7) eine nach unten beschränkte reellwertige Funktion der Felder sein, und wir können zur Auswertung von Glg. (3.7) Methoden aus statistischen Mechanik heranziehen. Wir werden den Index  $E$  im folgenden stillschweigend fortlassen.

### 3.3 Euklidisches Raum-Zeit-Gitter

Wir führen an dieser Stelle einige Konventionen zu den Schreibweisen der Koordinaten ein. Wir wählen ein hyperkubisches Volumen  $V = L^4$ . Die Koordinaten und Impulse auf dem Gitter erhalten wir für periodische Randbedingungen durch die Ersetzungen

$$\begin{aligned}x_i &= an_i, \\p_i &= \frac{2\pi}{La} l_i.\end{aligned}\tag{3.13}$$

Die Zahlen  $n_i, l_i$  stammen aus dem Wertevorrat der ganzen Zahlen  $\{0, \dots, L-1\}$ . Für antiperiodische Randbedingungen stammen die  $l_i$  aus dem Wertevorrat  $\{1/2, \dots, L-1/2\}$ . Die Gitterkonstante  $a$  ist die einzige dimensionsbehaftete Größe mit der Einheit einer inversen Masse. Unter einem Skalarprodukt verstehen wir

$$ab = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3 + a_4b_4.\tag{3.14}$$

Wir definieren die Fouriertransformierte

$$\tilde{\phi}(p) = \sum_x a^4 e^{ipx} \phi(x),\tag{3.15}$$

sowie deren Inverse

$$\phi(x) = \frac{1}{a^4V} \sum_p e^{-ipx} \tilde{\phi}(p).\tag{3.16}$$

Im Grenzfall eines unendlichen Volumens erhalten wir ein kontinuierliches Impulsspektrum

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{a^4V} \sum_p \dots = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} d^4p \dots.\tag{3.17}$$

Um die Theorie zu diskretisieren, müssen wir zunächst die Wirkung für endliche Gitterabstände formulieren. Wir beginnen mit den fermionischen Freiheitsgraden.

### 3.4 Fermionen auf dem Gitter

Die fermionischen Freiheitsgrade in der Wirkung Glg. (3.2) sind dimensionsbehaftet. Wir führen einen Satz dimensionsloser Feldgrößen ein

$$m \longrightarrow \frac{1}{a} \hat{m}$$

$$\begin{aligned}
\psi_\alpha(x) &\longrightarrow \frac{1}{a^{3/2}} \hat{\psi}_\alpha(n), \\
\bar{\psi}_\alpha(x) &\longrightarrow \frac{1}{a^{3/2}} \hat{\bar{\psi}}_\alpha(n), \\
\partial_\mu \psi_\alpha(x) &\longrightarrow \frac{1}{a^{5/2}} \hat{\partial}_\mu \hat{\psi}_\alpha(n), \\
\delta_{xy} &\longrightarrow \delta_{nm}/a^4.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Dass die Feldgrößen auf der rechten Seite dimensionslos sind, liest man an der Wirkung (3.4) ab. Die Ableitung in (3.18) wird weiter unten gesondert eingeführt. Wir skizzieren kurz die Entwicklung einer diskretisierten Variante der Funktionalmatrix (3.5). Man muß bei diesem Vorhaben sehr sorgfältig vorgehen, da bei einer allzu naiven Diskretisierung der Wirkung nichtphysikalische Effekte erscheinen (*fermion doubling problem* s.u., für eine ausführliche Diskussion vgl. [23, 24, 25]).

Wir zeigen in diesem Kapitel lediglich eine der möglichen Diskretisierungsformen der fermionischen Variablen, die Wilson-Fermionen [1]. Wie wir weiter unten sehen werden, besitzen sie Korrekturen der Ordnung  $O(a)$ , welche die Konvergenz in Richtung der Kontinuumswirkung gegenüber Wirkungen mit Korrekturen der Ordnung  $O(a^2)$  verschlechtern. Deshalb werden wir im Kapitel 5 eine verbesserte Variante der Wilson-Wirkung kennenlernen, die Sheikholeslami-Wohlert-Wirkung [26]. Eine weitere unangenehme Eigenschaft der Wilson-Fermionen ist, dass eine der globalen Symmetrien der Kontinuumswirkung, die chirale Symmetrie, gebrochen ist.

Wir beginnen mit der Konstruktion des Ableitungsterms aus (3.5) bzw. (3.4). Eine von  $O(a)$ -Korrekturen freie Definition der Ableitung in Glg. (3.6) ist die symmetrische Ableitung

$$\hat{\partial}_\mu \hat{\psi}_\alpha(n) = \frac{1}{2} [\hat{\psi}_\alpha(n + \mu) - \hat{\psi}_\alpha(n - \mu)]. \tag{3.19}$$

Man überzeugt sich davon nach Fouriertransformation und für unendliches Volumen

$$\sum_n e^{iqan} \hat{\partial}_\mu \hat{\psi}_\alpha(n) = -i \sin(q_\mu a) \sum_n e^{iqan} \hat{\psi}_\alpha(n), \tag{3.20}$$

denn die Kontinuumsableitung

$$\hat{\partial}_\mu^{\text{kont}} \hat{\psi}_\alpha(n) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\epsilon} [\hat{\psi}_\alpha(n + \epsilon\mu) - \hat{\psi}_\alpha(n - \epsilon\mu)] \tag{3.21}$$

liefert das Resultat

$$\sum_n e^{iqan} \hat{\partial}_\mu^{\text{kont}} \hat{\psi}_\alpha(n) = -iq_\mu a \sum_n e^{iqan} \hat{\psi}_\alpha(n). \tag{3.22}$$

Die führende Abweichung der Gln. (3.20) und (3.22) sind demnach die höheren Terme der Sinusfunktion von der Ordnung  $O(a^2)$ .

Die sogenannte naive Übersetzung des fermionischen Anteils ohne Eichfelder  $A_\mu$  in der Wirkung (3.2) ist gegeben durch

$$S_F^{(naiv)} = \sum_{n,m} \hat{\psi}_\alpha(n) K_{\alpha\beta}^{(naiv)}(n,m) \hat{\psi}_\beta(m), \quad (3.23)$$

mit der Matrix naiv diskretisierter Fermionen

$$K_{\alpha\beta}^{(naiv)}(n,m) = \sum_\mu \frac{1}{2} (\gamma_\mu)_{\alpha\beta} [\delta_{m,n+\mu} - \delta_{m,n-\mu}] + \hat{m} \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.24)$$

Die Indizes  $\alpha, \beta$  geben die Dirac-Struktur wieder. Die Inverse der Matrix (3.24), definiert durch

$$\sum_{k\gamma} K_{\alpha\gamma}^{(naiv)}(n,k) [K_{\gamma\beta}^{(naiv)}]^{-1}(k,m) = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.25)$$

ist die dimensionslose fermionische Zweipunktkorrelationsfunktion

$$\langle \hat{\psi}(n) \hat{\psi}(m) \rangle = [K^{(naiv)}]^{-1}(n,m). \quad (3.26)$$

Sie hängt über die Ersetzungsregeln (3.18) mit der dimensionsbehafteten fermionischen Korrelationsfunktion zusammen. Letztere lautet im Impulsraum

$$\langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{1}{i \sum_\mu \gamma_\mu \sin(ap_\mu) + m} e^{ip(x-y)}. \quad (3.27)$$

Glg. (3.27) ist die Zweipunktkorrelationsfunktion von Grassmannfeldern.<sup>1</sup> Im masselosen Grenzfall verschwindet der Nenner in Glg. (3.27) für alle Impulse aus der Menge  $\{(0,0,0,0), (\pi/a, 0, 0, 0), \dots, (\pi/a, \pi/a, \pi/a, \pi/a)\}$ . Wir assoziieren die Nullstellen mit Fermionen, so dass wir je Raumdimension eine Verdopplung der fermionischen Freiheitsgrade gegenüber der Kontinuumstheorie erhalten. Diese Eigenschaft der naiven Wirkung (3.23) hat den Namen *fermion doubling problem*. Zur Lösung des Problems schlug Wilson vor, einen irrelevanten Operator zur naiven Wirkung

---

<sup>1</sup>Diese ist nichts anderes, als der Vakuumerwartungswert des zeitgeordneten Produkts der im Operatorformalismus quantisierten Felder  $\Psi(x), \bar{\Psi}(y)$ . Es gilt also

$$S_F^E = \langle 0 | T \Psi(x) \bar{\Psi}(y) | 0 \rangle = \langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle. \quad (3.28)$$

Zur Erinnerung wurde am Feynman-Propagator der Index  $E$  für euklidische Koordinaten angebracht.

hinzuzufügen, um die zusätzlichen Fermionen zu unterdrücken [1]. Unter einem irrelevanten Operator versteht man dabei einen Operator der im Kontinuumsrenzfall verschwindet.

Um eine Wirkung zu konstruieren, die den richtigen Kontinuumslikes hat, können wir beliebige Operatoren hinzuaddieren, die im Kontinuumslikes verschwinden. Das Nielsen-Ninomiya-Theorem [27, 28] zeigt jedoch ganz allgemein die Grenzen, die diesem Vorhaben gesetzt sind.

### 3.5 Nielsen-Ninomiya-Theorem

Es sei  $M(p, m = 0)$  der Kern der fermionische Wirkung im Impulsraum (oder der inverse Propagator im Impulsraum - in unserem obigen Beispiel die Matrix  $\frac{i}{a} \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \sin(ap_{\mu})$ ). Verlangt man gleichzeitig die folgenden Eigenschaften der Matrix  $M(p, m = 0)$ :

- Periodizität mit der Periode  $\frac{2\pi}{a}$
- Ein kontinuierliches Impulsspektrum im Intervall  $\{0, 2\pi\}$  (gegeben durch ein unendliches Volumen)
- Lokale Wechselwirkungen im Ortsraum
- Den richtigen Kontinuumslikes:  $\lim_{a \rightarrow 0} M(p) \rightarrow i \sum_{\mu} p_{\mu} \gamma_{\mu}$
- Chirale Symmetrie:  $\gamma_5 M \gamma_5 = M^{\dagger}$  und  $M^{\dagger} = -M$

so erhält man das *fermion doubling problem*. Unter chiraler Symmetrie versteht man die Invarianz der Wirkung mit Masse  $m = 0$  unter der globalen Transformationen

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightarrow e^{i\theta\gamma_5} \psi(x) \\ \bar{\psi}(x) &\rightarrow \bar{\psi}(x) e^{i\theta\gamma_5} . \end{aligned} \tag{3.29}$$

Die Matrix  $\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$  ist die hermitesche Matrix, die mit den Matrizen  $\gamma_{\mu}$ ,  $\mu = 1, 2, 3, 4$  antivertauscht.

### 3.6 Wilson-Fermionen

Die symmetrische Ableitung (3.19) ist durch die Summe aus Vorwärtsableitung ( $\partial^+$ ) und Rückwärtsableitung ( $\partial^-$ ) gebildet worden

$$\hat{\partial}_{\mu} = \frac{1}{2}(\hat{\partial}_{\mu}^+ + \hat{\partial}_{\mu}^-) \tag{3.30}$$

mit

$$\begin{aligned}\hat{\partial}_\mu^+ \hat{\psi}_\alpha(n) &= \hat{\psi}_\alpha(n + \mu) - \hat{\psi}_\alpha(n) \\ \hat{\partial}_\mu^- \hat{\psi}_\alpha(n) &= \hat{\psi}_\alpha(n) - \hat{\psi}_\alpha(n - \mu).\end{aligned}\tag{3.31}$$

Eine symmetrische, zweite Ableitung ist das Produkt aus Vorwärts- und Rückwärtsableitung

$$\begin{aligned}\hat{\partial}^2 \hat{\psi}_\alpha(n) &= \sum_\mu \hat{\partial}_\mu^+ \hat{\partial}_\mu^- \hat{\psi}_\alpha(n) = \sum_\mu \hat{\partial}_\mu^- \hat{\partial}_\mu^+ \hat{\psi}_\alpha(n) \\ &= \sum_\mu \hat{\psi}_\alpha(n + \mu) - 2\hat{\psi}_\alpha(n) + \hat{\psi}_\alpha(n - \mu).\end{aligned}\tag{3.32}$$

Wilson addierte einen Term dieser Form zur naiven Wirkung (3.23) hinzu [1]

$$S^{(Wilson)} = S^{(naiv)} - \frac{r}{2} \sum_n \hat{\psi}_\alpha(n) \delta_{\alpha\beta} \hat{\partial}^2 \hat{\psi}_\beta(n).\tag{3.33}$$

Das liefert uns den Propagator im Impulsraum

$$\langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle = \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{1}{\frac{i}{a} \sum_\mu \gamma_\mu \sin(ap_\mu) + m(p)} e^{ip(x-y)},\tag{3.34}$$

dessen ‘‘Masse’’ formal impulsabhangig wird

$$m(p) = m + \frac{2r}{a} \sum_\mu \sin^2(ap_\mu/2).\tag{3.35}$$

Bis auf die Nullmode  $p = (0, 0, 0, 0)$  werden alle am Rande der Brillouin-Zone gelegenen Fermionen durch Massen  $2r/a$  unterdruckt und dadurch im Kontinuumsimes entkoppelt. Der Wilson-Parameter  $r$  darf Werte aus dem Intervall  $(0, 1]$  annehmen und wird in aller Regel zu  $r = 1$  gewahlt.

Wir fassen zusammen: In der Wilson-Wirkung unterdruckt man die unerwunsten fermionischen Freiheitsgrade durch die Addition eines irrelevanten Operators proportional zum Gitterabstand  $a$ . Der Preis dafur ist, dass die chirale Symmetrie der Wirkung (3.33) gebrochen wird. Einen weiteren Nachteil stellen die  $O(a)$ -Terme in der Wirkung dar, die die Konvergenz der Resultate in Richtung des Kontinuumsresultates gegenuber der naiven Wirkung verschlechtern. Im Hinblick auf das Nielsen-Ninomiya-Theorem lasst sich sagen, dass die chirale Symmetrie geopfert wird, um unphysikalische Zustande zu unterdrucken.

Wir fassen die diskreten Symmetrien der Wilson-Fermionen spater im einem eigenen Abschnitt 3.8 zusammen. Zunachst widmen wir uns den Eichfeldern. Die lokale Eichsymmetrie ist die einzige der Symmetrien der Wirkung, die auch auf dem Gitter eine kontinuierliche Parametrisierung erhalt.

### 3.7 Eichfelder auf dem Gitter

Um ein Analogon zum Vektorpotenzial zu finden, starten wir mit der Forderung der Invarianz der Wirkung unter lokalen Eichtransformationen

$$\begin{aligned}\psi(x) &\rightarrow G(x)\psi(x) \\ \bar{\psi}(x) &\rightarrow \bar{\psi}(x)G^+(x).\end{aligned}\tag{3.36}$$

mit beliebigen  $G(x)$  aus  $SU(3)$ . Die Spinoren  $\psi_\alpha^a(x)$  und  $\bar{\psi}_\alpha^a(x)$  haben sowohl eine Dirac- ( $\alpha = 1, 2, 3, 4$ ) als auch eine  $SU(3)$ -*colour*-Struktur ( $a = 1, 2, 3$ ). Wir führen die Diskussion in diesem Abschnitt für  $SU(3)$ -Eichinvarianz. Das Vektorpotenzial im Ableitungsoperator (3.6) transformiere dabei wie

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = G(x)A_\mu(x)G^+(x) - \frac{i}{g}G(x)\partial_\mu G^+(x).\tag{3.37}$$

Um die bilinearen und bilokalen Operatoren

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(x)\psi(x+a\mu) \\ \bar{\psi}(x+a\mu)\psi(x)\end{aligned}\tag{3.38}$$

aus der Wilson-Wirkung und damit die Wirkung (3.33) selbst eichinvariant zu machen, bedienen wir uns des Vorbildes aus der Kontinuumstheorie. Dort sorgt das pfadgeordnete Produkt

$$\mathcal{P} \exp\left\{\int_x^y igA_\mu(x)dx_\mu\right\}\tag{3.39}$$

für die Eichinvarianz des bilinearen Ausdrucks

$$\bar{\psi}(x) \mathcal{P} \exp\int_x^y igA_\mu(x)dx_\mu \psi(y).\tag{3.40}$$

Wir nennen (3.39) Paralleltransporter. Die diskretisierte Variante von (3.40) lautet zwischen benachbarten Gitterabständen  $x, y = x + a\mu$

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(x)U(x, x+a\mu)\psi(x+a\hat{\mu}), \\ \bar{\psi}(x+a\hat{\mu})U^+(x, x+a\mu)\psi(x),\end{aligned}\tag{3.41}$$

mit den Linkvariablen

$$U_\mu(x) \equiv U(x, x+a\mu) = e^{iagA_\mu(x+a\mu/2)} = 1 + iagA_\mu(x+a\mu/2) + O(a^2) .\tag{3.42}$$



Für den Rückwärtstransporter gilt

$$U_{-\mu}(x) = U(x, x - a\mu) = e^{-iagA_\mu(x - a\mu/2)} = U^+(x - a\mu, x) = U_\mu^+(x - a\mu). \quad (3.43)$$

Die Vektorfelder  $A_\mu$  sind Elemente aus der  $SU(3)$ -Algebra und lassen sich nach den Gell-Mann-Matrizen  $\lambda_a$  mit reellen Phasen  $\theta_a$  entwickeln

$$A_\mu(x + a\mu/2) = \sum_{a=1}^8 \theta_a(x + a\mu/2) \frac{\lambda_a}{2}. \quad (3.44)$$

Die Forderung der Eichinvarianz der Ausdrücke (3.41) zieht folgende Transformationsregeln auf dem Gitter nach sich

$$\begin{aligned} U_\mu(x) &\rightarrow G(x)U_\mu(x)G^+(x + a\mu), \\ U_\mu^+(x) &\rightarrow G(x + a\mu)U_\mu^+(x)G^+(x). \end{aligned} \quad (3.45)$$

Um die Wirkung eichinvariant zu machen, müssen wir die bilinearen Ausdrücke in den fermionischen Variablen durch ihre eichinvarianten Partner (3.41) ersetzen. Wir gelangen somit zur Form des fermionischen Anteils der Wirkung

$$\begin{aligned} S^{(Wilson)} &= m \sum_x a^4 \bar{\psi}(x)\psi(x) \\ &+ \frac{1}{2a} \sum_{x,\mu} a^4 \bar{\psi}(x)\gamma_\mu [U_\mu(x)\psi(x + \mu) - U_\mu^\dagger(x - \mu)\psi(x - \mu)] \\ &- \frac{r}{2a} \sum_{x,\mu} a^4 \bar{\psi}(x) [U_\mu(x)\psi(x + \mu) - 2\psi(x) + U_\mu^\dagger(x - \mu)\psi(x - \mu)] \\ &= \frac{(ma + 4r)}{a} \sum_x a^4 \bar{\psi}(x)\psi(x) \\ &+ \frac{1}{2a} \sum_{x,\mu} a^4 \bar{\psi}(x) [(\gamma_\mu - r)U_\mu(x)\psi(x + \mu) - (\gamma_\mu + r)U_\mu^\dagger(x - \mu)\psi(x - \mu)]. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Im Hinblick auf die numerische Implementation und um den Anschluss an die Literatur herzustellen, führen wir noch den Hoppingparameter  $\kappa = 1/(2ma + 8r)$  ein und reskalieren die Felder gemäß

$$\psi_x = \sqrt{ma + 4r} \psi(x) = \psi(x)/\sqrt{2\kappa}. \quad (3.47)$$

Den Wert zu verschwindender Quarkmasse nennen wir  $\kappa_c$ , so dass wir die nackte Quarkmasse berechnen können über

$$am = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c} \right). \quad (3.48)$$

Wir schreiben die Wilson-Wirkung als

$$S^{(Wilson)} \equiv \sum_{x,y} a^8 \bar{\psi}_x K_{xy}^{(Wilson)} \psi_y, \quad (3.49)$$

mit der Fermionmatrix

$$aK_{xy}^{(Wilson)}[U] = \delta_{xy} - \kappa \sum_{\mu} [(r - \gamma_{\mu})U_{x,\mu} \delta_{x,y-\mu} + (r + \gamma_{\mu})U_{x-\mu,\mu}^{\dagger} \delta_{x,y+\mu}]. \quad (3.50)$$

Wir entwickeln die Linkvariablen gemäss (3.42) und finden für das Vektorpotenzial wegen den Gln. (3.45)

$$A'_{\mu}(x+a\mu/2) = G(x)A_{\mu}(x+a\mu/2)G^{+}(x+a\mu) - \frac{i}{ga}G(x)(G^{+}(x+a\mu) - G^{+}(x)). \quad (3.51)$$

Sowohl das Transformationsverhalten des Vektorpotenzials (3.51) als auch die Wirkung (3.46) haben damit die richtigen Kontinuums limites Gln. (3.37) und (3.4).

### 3.8 Eigenschaften der Wilson-Fermionen

Wir wollen die diskreten Symmetrien der fermionischen Wirkung (3.46) mit Wilson-Fermionen und das zugehörige Transformationsverhalten des Propagators angeben. Es sei  $S_F(x, y) = \langle \psi(x)\bar{\psi}(y) \rangle$  der Feynman-Propagator mit Wilson-Fermionen auf dem Gitter. Zwar ist die chirale Symmetrie der Wirkung gebrochen, aber die so nützliche Chiralität  $\mathcal{H}$  und alle anderen diskreten Symmetrien der fermionischen Kontinuumswirkung wie Ladungskonjugation, Raumspiegelung und Zeitumkehr ( $\mathcal{C}$ ,  $\mathcal{P}$  bzw.  $\mathcal{T}$ ) bleiben erhalten. Der Propagator ist invariant unter Transformationen

$$\begin{aligned} \mathcal{H} : \quad S_F(x, y, [U]) &\rightarrow \gamma_5 S_F^{+}(y, x, [U]) \gamma_5, \\ \mathcal{P} : \quad S_F(x, y, [U]) &\rightarrow \gamma_4 S_F(x^P, y^P, [U^P]) \gamma_4, \\ \mathcal{T} : \quad S_F(x, y, [U]) &\rightarrow \gamma_4 \gamma_5 S_F(x^T, y^T, [U^T]) \gamma_5 \gamma_4, \\ \mathcal{C} : \quad S_F(x, y, [U]) &\rightarrow \gamma_4 \gamma_2 S_F^T(x, y, [U^C]) \gamma_2 \gamma_4. \end{aligned} \quad (3.52)$$

Die Eichfelder transformieren dabei für  $j = 1, 2, 3$  gemäß

$$\begin{aligned} \mathcal{P} : \quad U_4(x) &\rightarrow U_4(x^P) \\ &U_j(x) \rightarrow U_{-j}(x^P) \\ \mathcal{T} : \quad U_4(x) &\rightarrow U_{-4}(x^T) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& U_j(x) \rightarrow U_j(x^T) \\
\mathcal{C} : \quad & U_4(x) \rightarrow U_4^*(x) \\
& U_j(x) \rightarrow U_j^*(x)
\end{aligned} \tag{3.53}$$

und wir schreiben  $U_{-\mu}(x) = U(x, x - \mu)$ . Die transformierten Koordinaten sind

$$\begin{aligned}
x^T &= (x_1, x_2, x_3, -x_4) \\
x^P &= (-x_1, -x_2, -x_3, x_4).
\end{aligned} \tag{3.54}$$

Zu den kontinuierlich parametrisierbaren Symmetrien im Kontinuum gehört neben der Eichinvarianz die Poincare-Invarianz der QCD, bestehend aus Elementen der Lorentzgruppe (bzw. der  $O(4)$  im Euklidischen) und den Translationen. Die  $O(4)$ -Symmetrie der Wirkung ist auf dem Gitter zur Symmetrie unter  $\pi/2$ -Drehungen der vierdimensionalen  $H(4)$  gebrochen. Die vormals kontinuierlichen Translationen müssen auf dem Gitter Vielfache der Gitterkonstante  $a$  betragen.

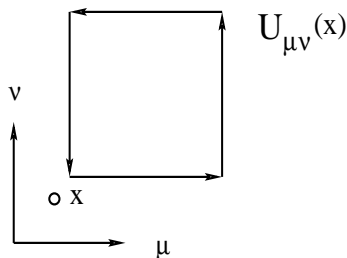
### 3.9 Eichfeldwirkung

Es ist uns im vorangegangenen Abschnitt gelungen, ein Vektorpotenzial auf dem Gitter zu definieren. Es wird nun darum gehen, eine Eichwirkung  $S_{\text{gauge}}$  zu finden, die für die Dynamik dieses Freiheitsgrades sorgt. Wir schildern dies im folgenden der Einfachheit halber am Beispiel der  $U(1)$ . Die Konstruktion für  $SU(3)$  ist jedoch völlig analog. Die Eichfeldwirkung wird lediglich Korrekturen der Ordnung  $O(a^2)$  enthalten. Wir beginnen mit dem eichinvarianten *Wilson-loop*

$$\begin{aligned}
W_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x) &= U_\mu(x) U_\nu(x + a\mu) U_\mu^\dagger(x + a\nu) U_\nu^\dagger(x) \\
&= e^{iag[A_\mu(x + \frac{a\mu}{2}) + A_\nu(x + a\mu + \frac{a\nu}{2}) - A_\mu(x + a\nu + \frac{a\mu}{2}) - A_\nu(x + \frac{a\nu}{2})]}.
\end{aligned} \tag{3.55}$$

Für die grafische Darstellung dieses Ausdrucks vgl. Abb. (3.1). Wir entwickeln zunächst den Exponenten um  $x + \frac{a\mu + a\nu}{2}$  und dann die Exponentialfunktion für eine kleine Gitterkonstante  $a$

$$\begin{aligned}
W_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x) &= \exp \left[ ia^2 g (\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) + \frac{ia^4 g}{12} (\partial_\mu^3 A_\nu - \partial_\nu^3 A_\mu) + \dots \right] \\
&= 1 + ia^2 g F_{\mu\nu} - \frac{a^4 g^2}{2} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \dots
\end{aligned} \tag{3.56}$$



**Abbildung 3.1:** Die grafische Darstellung des Wilson-loops.

wobei nicht über  $\mu$  und  $\nu$  summiert wird. Die nächsten Entwicklungsterme in Glg. (3.56) sind rein imaginäre Beiträge der Ordnung  $O(a^4)$  und reelle Beiträge der Ordnung  $O(a^6)$ . Unser Gitterpendant der Eichfeldwirkung in (3.2) lautet also für  $U(1)$ -Eichsymmetrie

$$S_{\text{gauge}}^{U(1)} = \frac{1}{g^2} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \text{Re}(1 - W_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x)) = \frac{a^4}{4} \sum_x \sum_{\mu, \nu} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + O(a^6). \quad (3.57)$$

Eine Rechnung für die Eichgruppe  $SU(3)$  liefert das Resultat

$$S_{\text{gauge}}^{SU(3)} = \frac{6}{g^2} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \text{ReTr}_{\frac{1}{3}}(1 - W_{\mu\nu}^{1 \times 1}), \quad (3.58)$$

wobei die Spur im Farbraum zu bilden ist.

Nachdem wir bereits den Hopping-Parameter  $\kappa$  eingeführt haben, führen wir noch den Parameter  $\beta$  ein, der die starke Kopplung repräsentiert

$$\beta = \frac{6}{g^2}. \quad (3.59)$$

Wir definieren die Gitterfeldstärke z.B.

$$F_{\mu\nu} = (\partial_\mu^+ A_\nu - \partial_\nu^+ A_\mu) = \frac{1}{ia^2 2g} \{W_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x) - W_{\nu\mu}^{1 \times 1}(x)\} + O(a) \quad (3.60)$$

unter Verwendung des Wilson-loops (3.55). Es können aber auch alle möglichen loops verwandt werden, die in Abb. (5.3) grafisch dargestellt sind. Wir werden diese Freiheit bei der Konstruktion der  $O(a)$ -Verbesserung des erhaltenen Vektorstroms auf dem Gitter ausnutzen.

Wir wollen festhalten, dass wir mit Glg. (3.58) über eine unter lokalen Eichtransformationen (3.45) invariante Eichfeldwirkung verfügen, die überdies frei von Korrekturen der  $O(a)$  ist. Zum Abschluss dieses Kapitels gehen wir noch auf einige anwendungsorientierte Aspekte der Gitter-QCD ein.

### 3.10 Valenzquarkapproximation

Wir haben im Abschnitt 3.1 schon darauf hingewiesen, dass die Eichfeldintegration mangels Rechenleistung nicht durch numerische Integration ausgeführt werden kann. Im Abschnitt 3.11 skizzieren wir eine statistische Methode, durch die man vergleichsweise elegant zur Ausintegration der Eichfreiheitsgrade gelangt, jedoch um den Preis, dass das Ergebnis einen statistischen Fehler trägt. Wir werden noch ein weiteres Zugeständnis zulasten der Genauigkeit aber zugunsten der Effizienz unserer Algorithmen machen. Betrachten wir den Erwartungswert eines allgemeinen Operators

$$\begin{aligned} & \langle \psi(x_1) \dots \psi(x_M) \bar{\psi}(y_1) \dots \bar{\psi}(y_M) U_{\mu_1}(z_1) \dots U_{\mu_N}(z_N) \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \psi(x_1) \dots \psi(x_M) \bar{\psi}(y_1) \dots \bar{\psi}(y_M) U_{\mu_1}(z_1) \dots U_{\mu_N}(z_N) e^{-S} \end{aligned} \quad (3.61)$$

mit der diskretisierten Variante der Zustandssumme  $Z$  aus (3.1). Die fermionischen Felder sind Grassmann-Variablen, die man per Gauß-Integration exakt ausintegrieren kann. Dieses wird durch die in den Feldern  $\psi$  und  $\bar{\psi}$  bilineare Wirkung ermöglicht. Es folgt

$$\begin{aligned} & \langle \psi(x_1) \dots \psi(x_M) \bar{\psi}(y_1) \dots \bar{\psi}(y_M) U_{\mu_1}(z_1) \dots U_{\mu_N}(z_N) \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A_\mu \langle \psi(x_1) \dots \psi(x_M) \bar{\psi}(y_1) \dots \bar{\psi}(y_M) \rangle_{\psi\bar{\psi}} \\ & \times \det K[U] U_{\mu_1}(z_1) \dots U_{\mu_N}(z_N) e^{-S_{\text{gauge}}} \end{aligned} \quad (3.62)$$

mit der Matrix  $K$  aus Glg. (3.50), der Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}A_\mu \det K[U] e^{-S_{\text{gauge}}} \quad (3.63)$$

und dem fermionischen Erwartungswert definiert durch

$$\begin{aligned} & \langle \psi(x_1) \dots \psi(x_M) \bar{\psi}(y_1) \dots \bar{\psi}(y_M) \rangle_{\psi\bar{\psi}} \\ & \equiv \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \psi(x_1) \dots \psi(x_M) \bar{\psi}(y_1) \dots \bar{\psi}(y_M) e^{-S_{\text{fermion}}} . \end{aligned} \quad (3.64)$$

Das Wick-Theorem für Korrelationsfunktionen fermionischer Feldvariablen (3.64) ist auch auf dem Gitter gültig, so dass wir die fermionischen Erwartungswerte  $\langle \dots \rangle_{\psi\bar{\psi}}$  auf Produkte von Propagatoren zurückführen können. Letztere werden durch eine Inversion der Matrix (3.50) gewonnen. Zu bewältigen bleibt das Pfadintegral

über die bosonischen Freiheitsgrade. Die Determinante  $\det K[U]$  ist im Gegensatz zu den Eichvariablen in (3.62) eine nichtlokale Größe. Die Berechnung ist entsprechend sehr rechenzeitintensiv, weshalb in Simulationen, wie wir sie mit heutigen Rechnern bewältigen können, in vielen Fällen die Näherung  $\det K[U] = \text{const.}$  verwandt wird. Diese Näherung wird als Valenzquarkapproximation (engl. *quenched approximation*) bezeichnet. Mangels Rechenleistung schlagen auch wir diesen Weg ein. Physikalisch entspricht die konstante Determinante dem Grenzfall unendlich großer Quarkmassen, also statischer Quarks, was zur Unterdrückung von Quark-Antiquark-*loops* korrespondiert. Diese Näherung ist in der Regel eine gute Wahl, denn Kontrollrechnungen mit dynamischen Quarks ergaben in Abhängigkeit vom Operator eine Abweichung der Resultate (z. B. das Hadron-Massenspektrum [29]) von weniger als 10 Prozent.

### 3.11 Erzeugung von Eichfeldkonfigurationen

Um die verbleibende Integration über die Eichfelder in (3.64) auszuführen, bedienen wir uns des Monte-Carlo-Verfahrens. Wir generieren eine Kette von Eichfeldkonfigurationen (eine Eichfeldkonfiguration ist ein Satz von Linkvariablen für das ganze Gitter), deren Verteilung durch den Boltzman-Faktor  $\frac{1}{Z}e^{-S_{\text{gauge}}}$  bestimmt ist [23, 24] und summieren dann über alle derart erzeugten Konfigurationen. Man nennt diese Methode *importance sampling*. Eine hinreichende Bedingung für das Entstehen einer solche Verteilung ist die *detailed balance condition*: Seien  $C, C'$  zwei Konfigurationen von Eichfeldern und  $P(C \rightarrow C')$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Konfiguration  $C'$  auf  $C$  folgt. Gilt dann

$$e^{-S_{\text{gauge}}(C)}P(C \rightarrow C') = e^{-S_{\text{gauge}}(C')}P(C' \rightarrow C) \quad (3.65)$$

so spricht man von *detailed balance*. Der in unseren Simulationen verwandte Algorithmus ist der Metropolis-Algorithmus, der das Kriterium (3.65) erfüllt. Es wird dabei zunächst per Zufallsgenerator eine Eichfeldkonfiguration  $C'$  vorgeschlagen. Ist  $S_{\text{gauge}}(C')$  kleiner als  $S_{\text{gauge}}(C)$ , so akzeptieren wir die neue Konfiguration mit der Wahrscheinlichkeit  $P(C \rightarrow C') = 1$ . Andernfalls ist die Wahrscheinlichkeit  $P(C \rightarrow C')$  gegeben durch

$$P(C \rightarrow C') = e^{-S_{\text{gauge}}(C') + S_{\text{gauge}}(C)} < 1. \quad (3.66)$$

Wir werten also das verbleibende Pfadintegral in (3.62) aus durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle = 1/Z \int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{O} e^{-S_{\text{gauge}}} \approx \frac{1}{N} \sum_i^N \mathcal{O}(C_i), \quad (3.67)$$

wobei die Summe über eine genügend große Anzahl  $N$  von Konfigurationen führt. Der statistische Fehler ist für unkorrelierte Eichfeldkonfigurationen dabei proportional zu  $1/\sqrt{N}$  (vgl. Anhang). Wir haben nun die beiden Bausteine der Theorie beisammen: In unserer Rechnung werden wir den zu untersuchenden Polarisationsoperator mit dem Wick-Theorem durch die Eichfelder und Propagatoren ausdrücken und die Resultate über eine genügend große Anzahl von Konfigurationen gemäß (3.67) mitteln.

### 3.12 Die Skala $a$

Es wurde weiter oben schon erwähnt, dass die einzige dimensionsbehaftete Größe unserer Theorie die Gitterkonstante  $a$  ist. Um sie festzulegen, müssen wir ein Gitterresultat mit einem experimentellen Ergebnis vergleichen. Dies kann auf verschiedene Weise geschehen. Beispiele sind der Vergleich mit der Masse des Pions  $M_\pi$ , welche fermionische Freiheitsgrade involviert, oder auch der Vergleich mit Größen die dem rein gluonischen Sektor entstammen, wie der Seitenspannung  $\sqrt{\sigma}$  zwischen einem Quark und Antiquark oder aber der Kraftskala  $r_0$  definiert durch [30]

$$r_0^2 F(r_0) = 1.65. \quad (3.68)$$

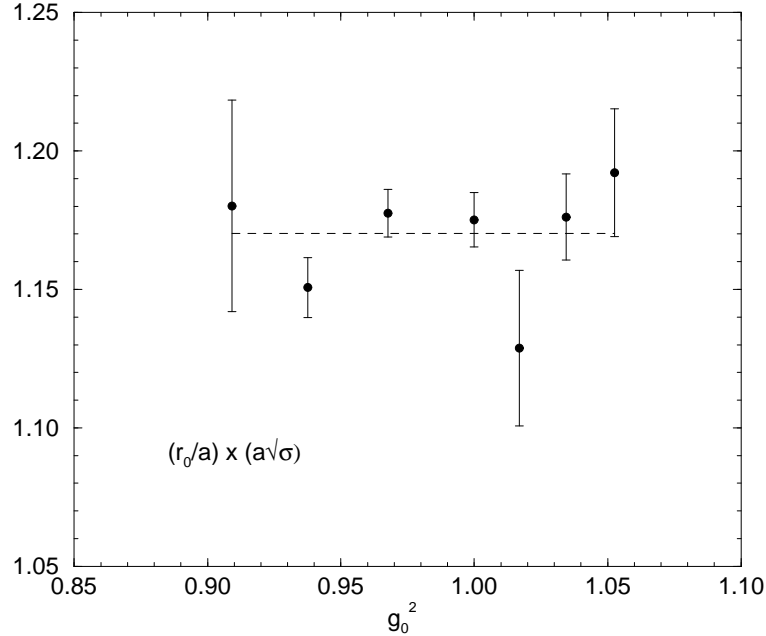
Dabei stellt  $F(r)$  die Kraft zwischen Quark und Antiquark dar. Phänomenologische Modelle geben die Ergebnisse [30, 31]

$$\begin{aligned} r_0 &= 0.5\text{fm} = (394.6\text{MeV})^{-1}, \\ \sqrt{\sigma} &= 427\text{MeV}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Grundsätzlich sollte es keinen Unterschied machen, welchen der möglichen Vergleiche wir ziehen. Insbesondere sollte gelten

$$\frac{r_0}{a} \times (a\sqrt{\sigma}) = \text{const}. \quad (3.70)$$

Eine numerische Bestimmung von  $\frac{r_0}{a}$  [32] und  $\sigma$  [33, 34, 35, 36] ergibt zwar für  $5.7 \leq \beta \leq 6.6$  einen recht konstanten Verlauf mit  $\text{const} = 1.170(5)$  (vgl. Abb. (3.2)). Gegenüber dem phänomenologischen Ergebnis von  $\text{const} = 1.082$  ist das jedoch eine Abweichung von etwa 8 Prozent. Diese wird vermutlich durch eine leicht abweichende Potenzialform in der Valenzquarkapproximation hervorgerufen. Das Verhältnis  $r_0/a$  ist besonders genau aus den Gitterdaten zu gewinnen, weshalb wir anhand



**Abbildung 3.2:** Das Produkt  $\frac{r_0}{a} \times (a\sqrt{\sigma})$ .  $(r_0/a)(g_0)$  ist mit der Formel [32] bestimmt, die Seitenspannung entstammt [33] ( $\beta = 5.7, 5.8, 5.9, 6.4$ ), [34] ( $\beta = 6.0, 6.2$ ), [35] ( $\beta = 6.4$ ), [36] ( $\beta = 6.6$ ).

dieser Größe unsere Längenskala  $a$  eichen. Eine Präzisionsmessung in der Valenzquarkapproximation und die Anpassung an ein Polynom dritter Ordnung in  $(\beta - 6)$  ergibt für das dimensionslose Verhältnis  $a/r_0$  die Formel [32]

$$\ln(a/r_0) = -1.6805 - 1.7139(\beta - 6) + 0.8155(\beta - 6)^2 - 0.6667(\beta - 6)^3 \quad (3.71)$$

im Fitintervall  $5.7 \leq \beta \leq 6.57$ . Der Fehler des Verhältnisses  $a/r_0$  für kleine  $\beta$  beträgt 0.3 Prozent und steigt linear auf 0.6 Prozent am rechten Rand des Fitintervalls. Wie wir später sehen werden, ist die Eichung der Längenskala der einzige Fehler, den wir durch die Valenzquarkapproximation begehen.

### 3.13 Gitter und $\overline{\text{MS}}$ -Schema

Wir wollen unsere Gitterresultate mit phänomenologischen Resultaten im  $\overline{\text{MS}}$ -Schema vergleichen. Wir müssen dazu die Kopplung  $g$  und die Quarkmasse  $m$ , die über die  $\beta$ - und  $\kappa$ -Werte bestimmt sind, in diesem Renormierungsschema ausdrücken. Die



Renormierungsgruppen-Gleichungen lauten

$$\beta^{\mathcal{S}}(g^{\mathcal{S}}(M)) \equiv \left. \frac{\partial g^{\mathcal{S}}(M)}{\partial \log M} \right|_{bare}, \quad (3.72)$$

$$\gamma_m^{\mathcal{S}}(g^{\mathcal{S}}(M)) \equiv \left. \frac{\partial \log Z_m^{\mathcal{S}}(M)}{\partial \log M} \right|_{bare}. \quad (3.73)$$

Im  $\overline{\text{MS}}$ -Schema sind die ersten vier Koeffizienten der Entwicklung

$$\begin{aligned} \beta^{\overline{\text{MS}}}(g) &= -b_0 g^3 - b_1 g^5 - b_2^{\overline{\text{MS}}} g^7 - b_3^{\overline{\text{MS}}} g^9 - \dots, \\ \gamma_m^{\overline{\text{MS}}}(g) &= d_{m0} g^2 + d_{m1}^{\overline{\text{MS}}} g^4 + d_{m2}^{\overline{\text{MS}}} g^6 + d_{m3}^{\overline{\text{MS}}} g^8 + \dots \end{aligned} \quad (3.74)$$

bekannt [38, 39]. Die ersten beiden Koeffizienten sind universell, d. h. vom Renormierungsschema unabhängig. Man integriert die Glg. (3.72)

$$\begin{aligned} M &= \Lambda^{\mathcal{S}} \left[ b_0 g^{\mathcal{S}}(M)^2 \right]^{\frac{b_1}{2b_0^2}} \\ &\exp \left[ \frac{1}{2b_0 g^{\mathcal{S}}(M)^2} \right] \exp \left\{ \int_0^{g^{\mathcal{S}}(M)} d\xi \left[ \frac{1}{\beta^{\mathcal{S}}(\xi)} + \frac{1}{b_0 \xi^3} - \frac{b_1}{b_0^2 \xi} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.75)$$

mit der Integrationskonstante  $\Lambda^{\mathcal{S}}$ . Man definiert die renormierungsgruppen-invariante Quarkmasse

$$m^{RGI} \equiv \Delta Z_m^{\mathcal{S}}(M) m^{\mathcal{S}}(M) = \Delta Z_m^{\mathcal{S}}(M) Z_m^{\mathcal{S}}(M) m_{bare}, \quad (3.76)$$

beim Integrieren der Glg. (3.73)

$$[\Delta Z_m^{\mathcal{S}}(M)]^{-1} = \left[ 2b_0 g^{\mathcal{S}}(M)^2 \right]^{\frac{d_{m0}}{2b_0}} \exp \left\{ \int_0^{g^{\mathcal{S}}(M)} d\xi \left[ \frac{\gamma_m^{\mathcal{S}}(\xi)}{\beta^{\mathcal{S}}(\xi)} + \frac{d_{m0}}{b_0 \xi} \right] \right\}. \quad (3.77)$$

Die ALPHA-Kollaboration bestimmte den Parameter  $\Lambda^{\overline{\text{MS}}}$  [37]

$$\Lambda^{\overline{\text{MS}}} = 0.602(48)/r_0. \quad (3.78)$$

Die Unsicherheit in der Kraftskala  $r_0$  (3.69) überträgt sich auf das Resultat

$$\begin{aligned} \Lambda_{r_0}^{\overline{\text{MS}}} &= 238(19) \text{ MeV}, \\ \Lambda_{\sqrt{\sigma}}^{\overline{\text{MS}}} &= 220(18) \text{ MeV}. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Das Resultat der QCDSF-Kollaboration lautet [40]

$$\Lambda_{r_0}^{\overline{\text{MS}}} = 243(1)(10) \text{ MeV}. \quad (3.80)$$

Wir können damit die Gln. (3.75) und (3.77) numerisch lösen und erhalten  $\alpha_s^{\overline{\text{MS}}}(M)$  und  $\Delta Z_m^{\overline{\text{MS}}}(M)$  [41]. Wir wählen die Skala  $\mu$  in der Größenordnung des halben Impuls-*cutoff*  $M = \mu = \frac{1}{a}$ . In Tabelle D.1 sind die von uns benutzten Werte für die Kopplung  $\alpha_s^{\overline{\text{MS}}}(M)$  sowie den Faktor  $[\Delta Z_m^{\overline{\text{MS}}}(\mu)]^{-1}$  aufgeführt. Zur Bestimmung des Kopplungsparameters können wir die Glg. (3.72) auch direkt lösen und erhalten als *2-loop*-Resultat

$$\frac{\alpha_s(\mu^2)}{\pi} = \frac{1}{\beta_0 \ln(\mu^2/\Lambda_{\overline{\text{MS}}}^2)} \left[ 1 - \frac{\beta_1}{\beta_0^2} \frac{\ln \ln(\mu^2/\Lambda_{\overline{\text{MS}}}^2)}{\ln(\mu^2/\Lambda_{\overline{\text{MS}}}^2)} \right], \quad (3.81)$$

$$\beta_0 = \frac{11}{12} C_A - \frac{1}{3} T N_f, \quad (3.82)$$

$$\beta_1 = \frac{34}{48} C_A^2 - \frac{1}{4} C_F T N_f - \frac{5}{12} C_A T N_f, \quad (3.83)$$

$$C_F = \frac{4}{3}, \quad C_A = 3, \quad T = \frac{1}{2}. \quad (3.84)$$

Der Koeffizient  $\beta_1$  für eine Anzahl von *flavours*  $N_f$  stammt aus [42]. Die Valenzquarkapproximation entspricht  $N_f = 0$ .

### 3.13.1 Quarkmasse der Sheikholeslami-Wohlert-Fermionen

Der Faktor  $\Delta Z_m^{\mathcal{S}}(M)$  hat die inverse Renormierungsschema- und Skalenabhängigkeit des Renormierungsfaktors  $Z_m^{\mathcal{S}}(M)$ , so dass das Produkt unabhängig von Renormierungsskala  $M$  und -Schema  $\mathcal{S}$  ist. Im Schrödinger-Funktional-Schema wurde der Faktor für  $6.0 \leq \beta \leq 6.5$  bestimmt [37]

$$\Delta Z_m^{SF}(L^{-1}) Z_m^{SF}(L^{-1}) = 1.752 + 0.321(\beta - 6) - 0.220(\beta - 6)^2. \quad (3.85)$$

Die nackte Masse  $m_{bare}$  ist von der Definition abhängig. In [37] wurde die PCAC-Definition benutzt. Für Sheikholeslami-Wohlert-Fermionen hängt sie mit der von uns verwandten Definition Glg. (3.48) über die Beziehung

$$m_{bare} = Y m + O(m^2) \quad (3.86)$$

zusammen [41]. Der Faktor  $Y$  ist von der Kopplung abhängig und in Tab. D.2 gegeben. Um die Quarkmasse im  $\overline{\text{MS}}$ -Schema zu erhalten, errechnen wir zunächst die renormierungsgruppen-invariante Masse gemäß den Gleichungen (3.48) und (3.76) und teilen dann durch den Faktor  $\Delta Z_m^{\overline{\text{MS}}}(M)$ .

### 3.13.2 Quarkmasse der Wilson-Fermionen

Für Wilson-Fermionen ist der Renormierungsfaktor in [41] bestimmt worden. Es gilt

$$m^{\overline{\text{MS}}} = Z_m^{\overline{\text{MS}}}(\mu)m \quad (3.87)$$

der Renormierungsfaktor  $Z_m^{\overline{\text{MS}}}(\mu)$  ist für die Skala  $\mu = \frac{1}{a}$  und  $\beta = 6.0, \beta = 6.2$  im Anhang in Tabelle D.3 gegeben.

## 3.14 Numerische Implementation

Die Simulationen werden auf massiv parallelen Rechnern vom Typ Quadrics durchgeführt (vgl. Tabelle D.4). Es handelt sich um speziell für QCD-Simulationen optimierte Maschinen. Die Knoten haben eine Taktfrequenz von 25MHz, einen lokalen Arbeitsspeicher von 4 MB und erreichen eine maximale Rechenleistung von 50 MFLOPS. Die Architektur und Kontrollanweisungen der Maschinen sind auf das SIMD (Single Instruction Multiple Data) Prinzip hin ausgerichtet. Die Programme sind in der *high-level*-Programmiersprache TAO geschrieben, die neben einer C-artigen Grundstruktur sowohl über Kontrollelemente zur Kommunikation von benachbarten Prozessoren, als auch auf die QCD zugeschnittene Daten-Typen und deren algebraische Verknüpfung verfügt.

Die SIMD-Datendistribution erfordert ein spezielles Vorgehen bei der Erzeugung der Eichfelder [43]. Zunächst werden drei der vier Koordinaten auf kanonische Weise auf das dreidimensionale Gitter aus Prozessoren abgebildet, so dass angrenzende Knoten angrenzende Teilgitter verwalten. Die vierte ( $x_1$ -) Koordinate wird auf jedem Knoten berechnet. Die  $SU(3)$ -Linkvariablen werden unter Verwendung der nächsten Nachbarn im Gitter per Zufallsgenerator erzeugt. Damit beim Durchlauf durch das Gesamtgitter parallel zu den Koordinatenachsen eine Linkvariable nicht von zwei Knoten gleichzeitig aktualisiert wird, arbeiten wir mit verschobenen Koordinaten. Z. B. für ein  $16^4$ -Gitter wählen wir

$$\begin{aligned} s_t &= t, \\ s_x &= (x + t) \bmod 16, \\ s_y &= y, \\ s_z &= z. \end{aligned} \quad (3.88)$$

Diese Koordinatenwahl ermöglicht es darüber hinaus, statt der Fermionmatrix  $K$

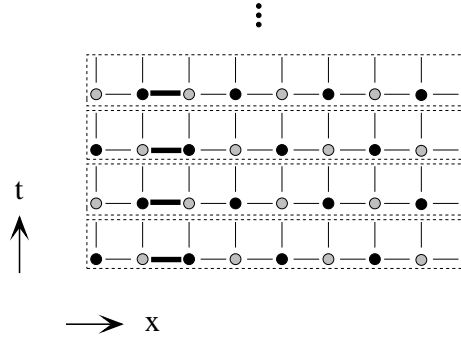


Abbildung 3.3: *Unverschobene Koordinaten*

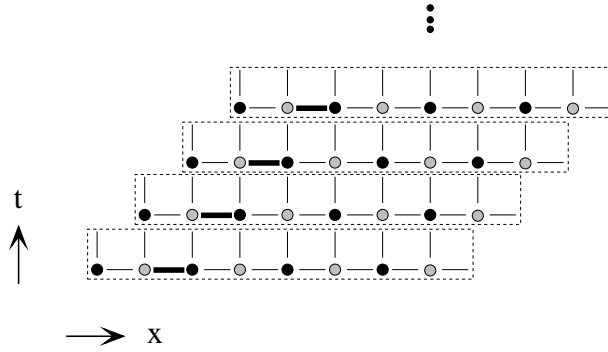


Abbildung 3.4: *Verschobene Koordinaten*

(3.50) die Matrizen  $A$  und  $B$  gemäß der Zerlegung

$$K = \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \quad (3.89)$$

zu invertieren, was zu einer Rechenzeitersparnis von ca. 35 Prozent führt. Da die Fermionmatrixinversion den bei weitem größten Teil der Rechenzeit beansprucht (bei unserer Simulation ca. 70 Prozent), ist diese Eigenschaft um so wichtiger.