

Masterarbeit

---

**Simulation effektiver Modelle der  
QCD bei nicht-verschwindendem  
chemischen Potential mittels  
Langevin-Dynamik**

---

vorgelegt von

Mathias Neuman

Frankfurt, 31. August 2012

Betreuer: Prof. Dr. Owe Philipsen

# Inhaltsverzeichnis

# 1 Einleitung

Die Quantumchromodynamik (QCD) ist heute die allgemein akzeptierte Theorie der starken Wechselwirkung. Sie beschreibt die Wechselwirkungen zwischen Quarks und Gluonen, welche zusammengenommen die Bauteile des Großteils der sichtbaren Materie unseres Universums bilden. Die Menge der der starken Wechselwirkung unterliegenden Teilchen wird Hadronen genannt, diese unterteilen sich wiederum in Mesonen, welche aus zwei, und Baryonen, welche aus drei Quarks bestehen. Einen Überblick über die theoretischen Grundlagen und die Phänomenologie der QCD wird in Kapitel 2 gegeben. Die bei hohen Energie klein werdende QCD-Kopplungskonstante ermöglicht eine störungstechnische Behandlung der Theorie und extrem genaue Voraussagen für Wirkungsquerschnitte in Hochenergieexperimenten. Dies führte dazu, dass die QCD heute als korrekte Theorie zur Beschreibung der starken Wechselwirkung gilt<sup>1</sup>.

Bei großen Entfernungen, bzw. bei niedrigen Energien, dagegen steigt die Kopplung an. Dieses zum *Confinement* (*engl.* Einschluss) führende Phänomen macht eine störungstheoretische Behandlung der Theorie unmöglich. Dadurch entzieht sich der niederenergetische Bereich der QCD, und damit die Beschreibung der uns umgebenden alltäglichen Materie, einer analytischen Behandlung.

Eine Lösung dieses Problems lag in der Einführung der Gitter-QCD. Durch eine Diskretisierung der Theorie eröffnete sich die Möglichkeit eines numerischen, nicht störungstheoretischen Zugangs. Die Grundlagen dieses Ansatzes werden in Kapitel 3 eingeführt. Trotz des großen Erfolgs numerischer Simulationen der Gitter-QCD in den letzten Jahrzehnten bleiben Teile der Theorie unzugänglich. Dies betrifft die Bereiche von Null verschiedener Baryondichte bzw. von Null verschiedenem Baryon chemischen Potentials<sup>2</sup>. Die erfolgreichste Technik zur Simulation der Gitter-QCD, die Monte-Carlo-Methode, sowie deren Grenzen werden in Kapitel 4 erläutert.

Kapitel 5 ist einer Alternative zur Monte-Carlo-Technik gewidmet, der stochastischen Quantisierung, auch Langevin-Dynamik genannt. Sie ermöglicht die Simulation von Systemen mit endlichem chemischen Potential ohne direkt unter den Problemen zu leiden, welche die Monte-Carlo-Technik in diesem Bereich behindern.

Kapitel 6 und 7 befassen sich schließlich mit konkreten Simulationen, bei denen die in Kapitel 5 eingeführte Methode angewendet wird. Dabei wird in Kapitel 6 ein altes, bereits ausführlich untersuchtes Modell, das XY-Modell, behandelt. Kapitel 7 befasst sich dagegen mit einem effektiven Modell der QCD, welches auf einer Starkkopplungsent-

---

<sup>1</sup>Die experimentellen Bestätigungen der QCD sind nicht Thema dieser Arbeit, einen aktuellen Überblick findet man z.B. in [1].

<sup>2</sup>Dichte und chemisches Potential werden im Folgenden teilweise synonym verwendet. Das chemische Potential ist ein Maß für das Ungleichgewicht zwischen Fermionen und Antifermionen. Mit chemischem Potential ist, wenn nicht anders bezeichnet, stets das Baryon chemische Potential gemeint.

wicklung und einer *Hopping Expansion* beruht.

# 2 Quantenchromodynamik im Kontinuum

## 2.1 Geschichte der QCD

Lange Zeit war wenig über die Ursache der Bindung von Atomkernen bekannt. Ausgehend von der Beobachtung, dass die Bestandteile der Atomkerne trotz ihrer elektromagnetischen Abstoßung stabile Bindungszustände formen, war das Postulat einer zusätzlichen Kraft notwendig. Diese zunächst unverstandene Kraft wurde, aufgrund der für die Überwindung der elektromagnetischen Abstoßung benötigten Stärke, starke Wechselwirkung genannt.

Der erste erfolgreiche Versuch zur Beschreibung der Kräfte zwischen den Nukleonen gelang 1934 Yukawa [2]. Das nach ihm benannte Potential entsteht durch den Austausch der von ihm postulierten Pionen und ist deswegen auf kurze Reichweiten beschränkt. Heute weiß man, dass dies lediglich eine effektive Theorie der QCD darstellt, sie verliert für große Energien ihre Gültigkeit.

Mit Beginn der 50er Jahre stieg, etwa durch die Erfindung der Blasenkammer 1952, die Anzahl der bekannten Teilchen stark an. In dem Bestreben, diese Teilchen nach grundlegenden Eigenschaften zu sortieren, veröffentlichte Gellmann 1961 seine Idee des *Eightfold Way* [3]. Dort ordnete er die Mesonen und Baryonen als Oktetts. Dies ermöglichte ihm die erfolgreiche Vorhersage des  $\Omega^-$ . Der Erfolg dieses Systems beruht auf der damals unbekanntem SU(3) Flavour-Symmetrie<sup>1</sup>, welche auf der geringen Massendifferenz der drei leichtesten Quarks beruht. Gellmanns Theorie gilt damit als Vorläufer des Quark-Modells.

1964 postulierten unabhängig voneinander Gell-Mann und Zweig die Existenz von Quarks, den Bestandteilen der Hadronen [4]. Dies war der Vorläufer der QCD. Zunächst wurden 3 Quarks vermutet; *up*, *down* und *strange*. Von diesen wurde angenommen, dass sie jeweils nur einen Bruchteil der Elementarladung ( $\frac{2}{3}$ ,  $-\frac{1}{3}$  bzw.  $-\frac{2}{3}$ ) tragen und Fermionen mit Spin  $\frac{1}{2}$  sind. Mesonen wurden als Bindungszustände von Quarks und Antiquarks, Baryonen als Zustände aus 3 Quarks betrachtet. Die Annahme von nicht ganzzahligen Ladungen war notwendig um die beobachteten Ladungen der Hadronen zu erklären. Bis heute wurden stets nur Teilchen mit ganzzahligem Vielfachen der Elementarladung beobachtet.

Ein weiteres Problem ergab sich durch die Forderung des Spektrums der Baryonen, dass die Wellenfunktionen der Quarks symmetrisch unter Vertauschung von Spin und Flavour sein muss. So ist das  $\Delta^{++}$  ein Spin  $\frac{3}{2}$  Teilchen aus drei *up* Quarks mit identischen

---

<sup>1</sup>Die Elemente der Symmetriegruppe SU(3) sind die unitären  $3 \times 3$  Matrizen mit Determinante 1.

Quantenzahlen, was durch das Pauli-Prinzip ausgeschlossen ist. Dies machte das Postulat eines weiteren, unbeobachtbaren Freiheitsgrades, der Farbe, notwendig [5]. Diese stellt, analog zur elektrischen Ladung der QED, die Ladung der QCD dar.

Die Erlahrung des experimentellen Befundes, dass niemals Zustande mit nicht ausgeglichener Farbladung beobachtet werden, fuhrt zu einer der wichtigsten Eigenschaften der starken Wechselwirkung, dem Confinement [6]. Confinement bedeutet, dass beobachtbare Teilchen immer Zustande neutraler Farbladung, sogenannte Farb-Singulets, sein mussen.

Gittersimulationen zufolge besteht zwischen gebundenen Quarks ein lineares Potential mit einer Starke von  $\sigma \approx 0.9 \frac{\text{GeV}}{\text{fm}}$  [7]. Das lineare Ansteigen des Potentials macht die Trennung von Quarks unmoglich, da eine unendliche Energie notig ware zwei Quarks zu trennen<sup>2</sup>. Dies erklart das Fehlen von Quarks in Ein-Teilchen-Zustanden im Experiment, denn ein einzelnes Quark tragt immer eine nicht verschwindende Farbladung.

Die zweite wichtige Eigenschaft der starken Kernkraft ist die asymptotische Freiheit, welche 1973 von Gross, Wilczek und Politzer entdeckt [8] und spater mit hoher Genauigkeit experimentell bestatigt wurde [9]. Asymptotische Freiheit bedeutet, dass die Kopplungsstarke der starken Wechselwirkung mit abnehmendem Abstand, bzw. mit zunehmendem Impuls, kleiner wird. Dies bedeutet, dass Quarks bei hohen Energien nur einer geringen gegenseitigen Wechselwirkung unterliegen.

Mithilfe dieser experimentellen Befunde gelang die Formulierung der QCD als Quantenfeldtheorie. Heute bildet die QCD mit ihrer nahen Verwandten, der Theorie zur Beschreibung der elektroschwachen Wechselwirkung, das Standardmodell, welches, abgesehen von der Gravitation, alle bekannten Grundkrafte mit hoher Prazision beschreibt.

## 2.2 Lagrangedichte der QCD

Entscheidend fur die mathematische Formulierung der QCD ist die Existenz der asymptotischen Freiheit und die Entdeckung, dass nicht abelsche<sup>3</sup> Eichtheorien diesen Eigenschaften genugen [10]. Deswegen eignen sich diese zur Aufstellung einer Theorie der starken Wechselwirkung. Ahnlich wie in der Quantenelektrodynamik (QED) die Forderung nach lokaler Eichinvarianz gegenuber U(1) Eichtransformationen gestellt wird, lasst sich die Lagrangedichte der QCD uber die Forderung nach lokaler Eichinvarianz gegenuber SU(3) Transformationen im Farbraum herleiten. Dies verdeutlicht die nahe Verwandtschaft beider Theorien.

Die QCD beschreibt das Verhalten von Objekten mit Farbladung, also Quarks und Gluonen. Quarkfelder werden durch Dirac-Spinoren beschrieben [11, 12]

$$\psi^{(f)}(x)_\alpha \tag{2.1}$$

---

<sup>2</sup>Dies trifft genau genommen nur fur die reine Eichtheorie mit unendlich schweren Quarks zu. Die Berucksichtigung dynamischer Quarks fuhrt zur spontanen Paarbildung und damit zur Abschirmung des Potentials.

<sup>3</sup>Als nicht abelsch werden Symmetriegruppen bezeichnet, deren Elemente nicht kommutieren.

Diese sind Viererspinoren mit Raumzeitkoordinaten  $x$ , Dirac-Index  $\alpha = 1, 2, 3, 4$ , Farbindex  $c = 1, 2, 3$  und Flavourindex  $f = 1, 2, \dots, 6$ . Die 6 Quarkflavours werden als *up*, *down*, *charm*, *strange*, *top* und *bottom* bezeichnet. Die QCD besitzt näherungsweise eine Flavour-Symmetrie. Diese Symmetrie wird erst durch die unterschiedlichen Quarkmassen gebrochen.

Gluonen dagegen werden durch  $SU(3)$  Matrizen beschrieben

$$A_\mu(x)_{cd} = \sum_{a=1}^8 \lambda^a A_\mu^a(x)_{cd} \quad (2.2)$$

mit den 8 Gell-Mann-Matrizen  $\lambda^a$ . Die Gluonen sind masselose Bosonen mit Spin 1, welche die Wechselwirkung zwischen den Quarks vermitteln. Im Gegensatz zu den Quarks tragen sie zwei Farbindizes, da sie immer eine Farbe und eine Antifarbe besitzen, sowie einen Lorentzindex  $\mu = 1, 2, 3, 4$ . Aus je drei Farben und Antifarben lassen sich ein Farboktett und ein Farbsinglet bilden,  $3 \otimes \bar{3} = 8 \oplus 1$ . Das Oktett bildet die acht Gluonen der QCD, während das Singlet als unphysikalisch verworfen wird<sup>4</sup>.

Es gibt keine Möglichkeit die Wirkung der QCD aus grundlegenden Prinzipien herzuleiten. Ihre Formulierung erfolgt unter der Bedingung, dass sie invariant unter lokalen  $SU(3)$  Transformationen der Quark- und Gluonenfelder ist. Quarks transformieren sich unter der fundamentalen, Antiquarks unter der antifundamentalen und Gluonen unter der adjungierten Repräsentation der  $SU(3)$ :

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightarrow \psi' = \Omega(x)\psi(x) \\ \bar{\psi}(x) &\rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}(x)\Omega^\dagger(x) \\ A_\mu(x) &\rightarrow A'_\mu(x) = \Omega(x)A_\mu(x)\Omega^\dagger(x) + i(\partial_\mu\Omega(x))\Omega(x)'. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Die Tatsache, dass die Wirkung, welche sich aus der Integration der Lagrangedichte über den vierdimensionalen Raum ergibt, unverändert bleibt, bezeichnet man als Eichinvarianz

$$S[\psi', \bar{\psi}', A'] = S[\psi, \bar{\psi}, A]. \quad (2.4)$$

Das ist gleichbedeutend mit der Aussage, dass die physikalischen Vorgänge unverändert bleiben. Die euklidische Wirkung der QCD die diese Bedingung erfüllt lautet

$$S[\psi, \bar{\psi}, A] = \int d^4x \mathcal{L} = \int d^4x \sum_{i=1}^{N_f} [\bar{\psi}_i(x)(\not{D} + m_i)\psi_i(x)] - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}, \quad (2.5)$$

wobei über doppelt auftretende Indizes summiert wird. Farb- und Diracindizes werden der Übersichtlichkeit halber in dieser Notation unterdrückt. Wie in der Hochenergiephysik üblich, werden hier und im weiteren Verlauf der Arbeit natürliche Einheiten verwendet werden, also  $c = \hbar = 1$ .  $m_i$  bezeichnet die verschiedenen Quarkmassen der einzelnen Flavours.  $\not{D}$  ist der Diracoperator in der Feynman-Slash-Notation

$$\not{D}_\mu = \gamma^\mu D_\mu = \gamma^\mu [\partial_\mu - igA_\mu(x)], \quad (2.6)$$

<sup>4</sup>Das neunte Gluon wäre farbneutral, würde also nicht wechselwirken.

mit der kovarianten Ableitung  $D$ , welche analog zur QED zur Erhaltung der lokalen Eichsymmetrie die Gluonenfelder enthalten muss. Auf diese Weise ist gewährleistet, dass  $D_\mu\psi(x)$  invariant unter Eichtransformationen ist:

$$D_\mu(x)\psi(x) \rightarrow D'_\mu(x)\psi'(x) = \Omega(x)D_\mu(x)\Omega^\dagger(x)\Omega(x)\psi(x) = \Omega(x)D_\mu(x)\psi(x). \quad (2.7)$$

Die kovariante Ableitung enthält die aus der Dirac Gleichung bekannten  $4 \times 4$ - $\gamma$  Matrizen  $\gamma_\mu$  in ihrer euklidischen Form. Sie erfüllen die Vertauschungsrelation

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}\mathbb{1}. \quad (2.8)$$

Die energieabhängige Kopplungskonstante  $g$  charakterisiert die Stärke der Quark-Gluonen-Wechselwirkung. Sie ist für alle Quark-Flavours identisch.

Der Feldstärketensor  $F_{\mu\nu} = \sum_a \lambda^a F_{\mu\nu}^a$  ist definiert als

$$F_{\mu\nu}^a = [D_\mu, D_\nu] = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc}A_\mu^b A_\nu^c \quad (2.9)$$

Die ersten 2 Terme sind identisch mit dem Feldstärketensor der QED und beschreiben die Dynamik des freien Eichfeldes. Der letzte Term ist eine Folge der nicht-abelschen Natur der Wechselwirkung. Der Yang-Mills-Term der QCD entspricht daher einer Verallgemeinerung des entsprechenden Terms der QED.

Da im Yang-Mills-Term der QCD,  $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ , kubische und quartische Beiträge der Gluonenfelder auftreten, kommt es hierbei, anders als in der QED, zur Selbstwechselwirkung der Gluonen. Diese ist daher eine direkte Folge der Verwendung von nicht abelschen Eichfeldern. Dadurch, dass Gluonen selbst eine Ladung tragen, wechselwirken diese nicht nur mit Quarks sondern auch miteinander. Dies verursacht, dass sich Gluonenfelder nicht gleichmäßig im Raum ausbreiten und schwächer werden wie das Photonfeld der QED. Stattdessen können sie Flussschläuche ausbilden, welche in der Lage sind, eine von der Entfernung unabhängige konstante Kraft zu übertragen. Dieses Phänomen führt zum Confinement der Quarks.

Die Kopplung zwischen Quarks und Gluonen ist, analog zur Photon-Elektron-Wechselwirkung der QED, eine direkte Folge der Forderung nach lokaler Eichsymmetrie, welche die Einbeziehung der Eichfelder in den Diracoperator erfordert.

Um mit der Wirkung einer Theorie Erwartungswerte berechnen zu können, bedient man sich dem aus der statistischen Physik bekannten Konzept der Zustandssumme eines Systems mit den Freiheitsgraden  $x$ :

$$Z = \int \mathcal{D}x e^S. \quad (2.10)$$

Die Zustandssumme ergibt sich aus der Integration über alle möglichen Zustände des Systems. Um die Analogie zur statistischen Physik ausnutzen zu können, formuliert man die Theorie in euklidischer Metrik

$$ds^2 = dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (2.11)$$



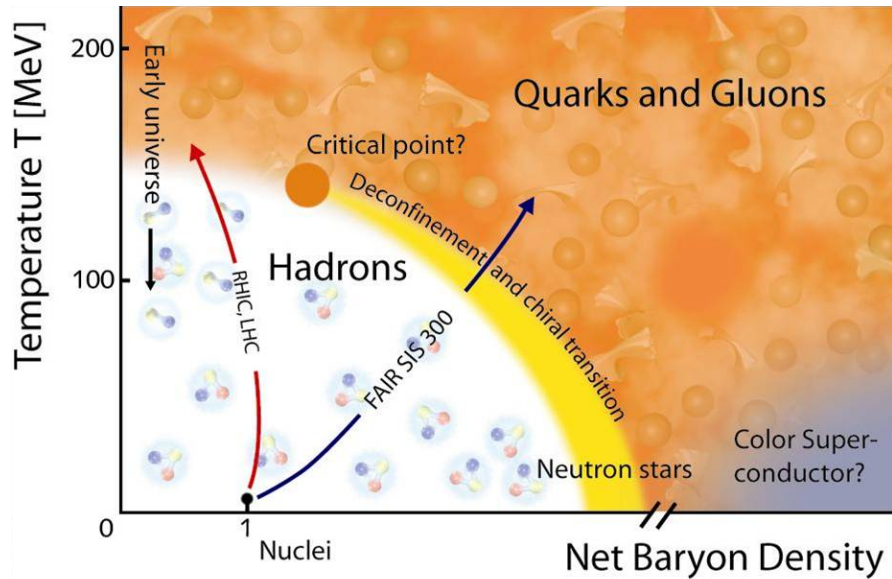


Abb. 2.1: Schematische Darstellung des QCD-Phasendiagramms, entnommen aus [13]

Dies wird durch die sogenannte Wick-Rotation erreicht, bei der der Zeitkomponente ein komplexer Wert zugewiesen wird,  $t = -i\tau$ , so dass für die Metrik  $g_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$  gilt. Dies hat den Vorteil, dass die im Pfadintegral oder in der Zustandssumme erscheinende Wirkung reell wird:

$$e^{iS} = e^{-S_E}. \quad (2.12)$$

Dies führt zu einer wichtigen Analogie mit der statistischen Physik: Der in Pfadintegralen und Zustandssummen auftretende Faktor  $e^{-S_E}$  kann als Boltzmannfaktor interpretiert werden. Konfigurationen mit großer Wirkung werden exponentiell gedämpft, dadurch ist nur ein Bruchteil der möglichen Konfigurationen physikalisch relevant. Diese Verknüpfung erweist sich bei der numerischen Simulation von Modellen, deren Wirkung als Exponent in der Form von (2.12) geschrieben werden können, als überaus nützlich.

## 2.3 Phasendiagramm der QCD

Zweck der QCD ist neben der Beschreibung des niederenergetischen Bereichs der starken WW auch die korrekte Modellierung hadronischer Materie, welche den Grundbaustein der uns bekannten Umwelt bildet. Die Phasen der hadronischen Materie wird in einem Phasendiagramm in Abhängigkeit von Temperatur und Druck bzw. Temperatur und chemischen Potential dargestellt, siehe Abb. 2.1. Jeder Punkt im Phasendiagramm stellt einen stabilen Zustand mit festen thermodynamischen Werten, wie z.B. Druck oder Viskosität, dar.

Obwohl Gegenstand intensiver theoretischer und experimenteller Forschung sind viele Eigenschaften des Phasendiagramm immer noch unbekannt [14, 15]. Dies gilt insbesondere für den Bereich niedriger Temperatur sowie den Bereich endlicher Dichte.

Sicher ist, dass Quarks bei niedrigen Temperaturen und chemischen Potential, also im linken unteren Bereich des Diagramms, dem Confinement unterliegen. Hier ist die Kopplung stark, sodass Quarks sich zu farbneutralen Zuständen, den Mesonen und Baryonen, zusammenschließen.

Wird die Temperatur erhöht, wandert man an der Ordinate nach oben und erreicht schließlich den Bereich des Quark-Gluonen-Plasmas. Dort wird die Dichte der Quarks so groß, dass es keinen Sinn mehr macht einzelne Bindungszustände zu unterscheiden. Dieser Verlauf ist sowohl durch Experimente als auch durch Gittersimulationen untersucht worden und beide weisen auf ein Crossover zwischen den beiden Regionen hin. Im Gegensatz zu einem Phasenübergang erster oder zweiter Ordnung ist ein Crossover durch eine schnelle, aber kontinuierliche Änderung der thermodynamischen Parameter gekennzeichnet.

Oberhalb dieses Übergangs ist die Kopplung zwischen den Quarks so schwach, dass sie durch thermische Fluktuationen aufgebrochen werden können. Dies geschieht bei einer Temperatur von  $T_c \approx 2 \cdot 10^{12}$  K bzw.  $T_c = 175$  MeV und entspricht den Eigenschaften des Universums kurz nach dem Urknall, als das chemische Potential durch das Gleichgewicht von Materie und Antimaterie klein und die Temperatur durch den Druck und die große Energiedichte hoch war.

Der Bereich hoher Temperaturen kann aufgrund der asymptotischen Freiheit der QCD und der damit verbundenen kleinen Kopplungskonstante störungstechnisch behandelt werden. Ebenso ist die  $\mu = 0$  Achse für alle Temperaturen durch Monte-Carlo-Simulationen zugänglich [15].

Der Bereich hohen chemischen Potentials und geringer Temperatur ist weitaus weniger verstanden, da hier sowohl die Störungsrechnung als auch Monte-Carlo-Simulationen versagen. Jedoch wird bei  $T = 0$  ein Phasenübergang erster Ordnung erwartet. Bereits vor diesem Übergang findet der (in Abb. 2.1 nicht eingezeichnete) Übergang vom Vakuumzustand zum Zustand endlicher Fermionendichte statt sobald das chemische Potential ungefähr<sup>5</sup> die Masse der leichten Baryonen erreicht. Hier beginnt der Bereich der uns bekannten nuklearen Materie, welche aus einer Mischung aus Tropfen von kondensierter Kernmaterie mit einer Dichte von etwa 0.153 Nukleonen pro  $fm^3$  und Vakuum besteht. Im Bereich extrem hohen chemischen Potentials findet wieder ein Phasenübergang statt. Dieser Übergang wird mit steigender Temperatur schwächer und endet schließlich in einem kritischen Punkt mit einem Phasenübergang zweiter Ordnung, woran sich die bereits erwähnte Region des Crossovers anschließt. Über die exakte Position dieses kritischen Punktes ist wenig bekannt.

Mit steigendem chemischen Potential und niedriger Temperatur wird die Kernmaterie immer dichter und erreicht schließlich Zustände, wie sie im Inneren von Neutronensternen erwartet werden. Dies ist der Bereich des Phasendiagramms, über den nur sehr wenig bekannt ist, doch werden hier verschiedene neue Phasen und Phänomene erwartet [16]. Eine davon ist die sogenannte Farbsupraleitung. Es wird angenommen, dass aufgrund der asymptotischen Freiheit bei hinreichend großer Dichte die sich auf einer Fermifläche befindlichen Quarks fast frei sind. Analog zur BCS Theorie der gewöhnlichen

---

<sup>5</sup>abzüglich der Bindungsenergie

Supraleitung würde nun eine schwache anziehende Kraft zwischen den Quarks zur Formierung von Cooper-Paaren und damit zu einer neuen Phase führen[17]. Im Falle von gewöhnlichen Supraleitern wird diese Wechselwirkung durch Gitterschwingungen, den sogenannten Phononen, erzeugt. Im QCD Fall würde dies durch die Gluonen geschehen. Da Quarks und Gluonen durch Farbe und Flavour in einer größeren Vielfalt als Elektronen und Phononen auftreten, ist die Existenz verschiedener farbsupraleitender Phasen möglich.

Im Bereich höchster Dichten wird eine Phase erwartet, in der sich Quarks nur zu bestimmten Kombinationen aus Farbe und Flavour zu Cooper-Paaren binden können. Diese Phase wird als Colour-Flavour-Locking (CFL) bezeichnet, in ihr ist die SU(3) Eichsymmetrie der Quarkfarben gebrochen und die Gluonen werden massiv.

Experimentell wurde bisher weder eine farbsupraleitende noch eine CFL Phase nachgewiesen, ihr Auftreten wird bei großen Dichten die etwa dem zehnfachen der normalen nuklearen Materie und darüber hinaus entsprechen erwartet. Es wird über die Existenz solcher Phasen im Inneren von Neutronensternen spekuliert, doch gibt es dazu noch keine experimentellen Hinweise. Auch welche Phasenübergänge vom bekannten Quark-Gluonen-Plasma zu diesen neuen Phasen führt ist nicht bekannt.

# 3 QCD auf dem Gitter

Die Notwendigkeit, die QCD numerisch zu behandeln, entstammt der Tatsache, dass sie im niederenergetischen Bereich weder analytisch noch perturbativ lösbar ist. Die Idee zur Formulierung der QCD auf einem Gitter wurde von Wilson 1974 veröffentlicht [18]. Dies schuf einen neuen, nicht perturbativen Zugang zur QCD.

## 3.1 Einführung

Um eine Theorie wie die QCD auf dem Gitter zu formulieren, gibt es keine eindeutige Vorgehensweise. Es sollen allerdings mindestens drei Bedingungen erfüllt sein: Erstens muss die Theorie im Grenzfall eines unendlich feinen Gitters wieder auf die ursprüngliche Kontinuumswirkung führen, zweitens soll die Wirkung lokal sein und drittens sollen möglichst viele Symmetrien der ursprünglichen Theorie erhalten bleiben<sup>1</sup>.

Zunächst wird ein vierdimensionales Gitter mit den Ausmaßen  $N_S^3 \times N_\tau$  eingeführt

$$\Lambda = \{n = (n_1, n_2, n_3, n_4) | n_1, n_2, n_3 = 0, 1, \dots, N_S - 1; n_4 = 0, 1, \dots, N_\tau - 1\}. \quad (3.1)$$

$N_S$  bezeichnet dabei die Anzahl der Gitterpunkte in räumlicher,  $N_\tau$  in zeitlicher Richtung. Beide nehmen nur ganzzahlige Werte an. Der Abstand zwischen den Gitterpunkten wird mit  $a$  bezeichnet und trägt physikalische Einheiten. Der physikalische Abstand zweier Punkte auf einer Achse beträgt also  $an$ , auch wenn die Koordinaten oft nur mit den ganzzahligen Gitterpunkten bezeichnet werden und  $a = 1$  gesetzt wird. Erst bei der Datenauswertung werden dann wieder die physikalischen Einheiten eingeführt. Um Randeffekte zu vermindern, werden für gewöhnlich periodische Randbedingungen verwendet, also  $x_\mu + N_S a = x_\mu$  und  $x_\mu + N_\tau a = x_\mu$ . Bei endlicher Temperatur müssen die Randbedingungen in zeitlicher Richtung periodisch für Bosonen und antiperiodisch für Fermionen gewählt werden. Das Volumen des Gitters beträgt

$$V = a^4 N_S^3 N_\tau. \quad (3.2)$$

Unter dem Kontinuumslimit versteht man den Grenzwert  $a \rightarrow 0$  bei gleichzeitigem Festhalten des Volumens. In diesem Limes muss sich die Gitter-Wirkung wieder an die Wirkung der Kontinuums-QCD annähern.

Die Ausdehnungen in die verschiedenen Richtungen sowie die Gitterabstände müssen nicht zwangsläufig gleich sein. Sind sie es nicht, spricht man von einem anisotropen

---

<sup>1</sup>Die Erhaltung *aller* Symmetrien ist im Allgemeinen allerdings unmöglich, siehe dazu das *No-go theorem* von Ninomiya und Nielsen [19].

Gitter. Die Wahl eines isotropen Gitters ist allerdings die einfachste und geläufigste Methode und wird auch in dieser Arbeit immer Verwendung finden.

## 3.2 Gitterwirkung

### 3.2.1 Fermionenanteil

Als Nächstes müssen auf dem Gitter den Freiheitsgraden der Kontinuumstheorie äquivalente Objekte formuliert werden. Um die Fermionfelder zu repräsentieren, werden Dirac-Spinoren auf jeden Gitterpunkt gesetzt<sup>2</sup>

$$\psi(n), \quad \bar{\psi}(n), \quad n \in \Lambda, \quad (3.3)$$

welche dieselben Freiheitsgrade wie im Kontinuum tragen.

Ableitungen werden durch die symmetrische Differenz benachbarter Felder ersetzt

$$\partial_\mu \psi(x) \rightarrow \frac{1}{2a}(\psi(n + \hat{\mu}) - \psi(n - \hat{\mu})). \quad (3.4)$$

Hierbei stellt  $\hat{\mu}$  die Gitterversion des Einheitsvektors dar, er verbindet zwei benachbarte Gitterpunkte in Richtung  $\mu = 1, 2, 3, 4$ .

Mithilfe von (3.3) und (3.4) lässt sich ein erster Ansatz für eine Fermionenwirkung auf dem Gitter formulieren

$$S_F[\psi\bar{\psi}] = a^4 \sum_{n \in \Lambda} \bar{\psi}(n) \left( \sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \frac{\psi(n + \hat{\mu}) - \psi(n - \hat{\mu})}{2a} + m\psi(n) \right) \quad (3.5)$$

Wobei die Summation über jeden Gitterpunkt und jeden nächsten Nachbarn läuft. Obwohl dieser Ausdruck wie eine diskretisierte Version der fermionischen Kontinuumswirkung aussieht, ist er nicht korrekt. Nimmt man für die Felder das gleiche Transformationsverhalten wie im Kontinuum an, ist er nicht eichinvariant, wie man leicht sehen kann:

$$\bar{\psi}(n)\psi(n + \hat{\mu}) \rightarrow \bar{\psi}'(n)\psi'(n + \hat{\mu}) = \bar{\psi}(n)\Omega^\dagger(n)\Omega(n + \hat{\mu})\psi(n + \hat{\mu}) \quad (3.6)$$

und dadurch  $S \neq S'$ . Wie im Kontinuumsfall ist zur Erhaltung der Eichsymmetrie die Einführung von Eichfeldern nötig. Auf dem Gitter werden diese zwischen die Gitterpunkte gesetzt und daher Links genannt. Sie sind definiert als

$$U_\mu(x) = e^{igaA_\mu(x)} \quad (3.7)$$

und verbinden gerichtet die Gitterpunkte  $x$  und  $x + \hat{\mu}$ . Die Linkvariablen lassen sich mit den Eichfeldern des Kontinuums in Verbindung setzen

$$U_\mu(n) = e^{(iaA_\mu(n))} = \mathbb{1} + iaA_\mu(n) + \mathcal{O}(a^2) \quad (3.8)$$

<sup>2</sup>Die folgende Darstellung folgt in Teilen [11] und [12].

Der letzte Term verschwindet im Kontinuumsimes.

Das Transformationsverhalten der Links ist so gewählt, dass das Produkt zwischen 2 Nachbarnpunkten  $\psi(x)\psi(x + \hat{\mu})$  eichinvariant ist:

$$U_\mu(n) \rightarrow U'_\mu = \Omega(x)U_\mu(x)\Omega^\dagger(n + \hat{\mu}) \quad (3.9)$$

$$\bar{\psi}'(n)U'_\mu(n)\psi'(n + \hat{\mu}) = \bar{\psi}(n)\Omega^\dagger(n)\Omega(n)U_\mu(n)\Omega^\dagger(n + \hat{\mu})\Omega(n + \hat{\mu})\psi(n + \hat{\mu}) \quad (3.10)$$

$$= \bar{\psi}(n)U_\mu(n)\psi(n + \hat{\mu}) \quad (3.11)$$

Damit lässt sich eine eichinvariante Fermionenwirkung bilden

$$\begin{aligned} S_F[\psi, \bar{\psi}, U] &= a^4 \sum_{n \in \Lambda} \bar{\psi}(n) \left( \sum_{\mu=1}^4 \gamma_\mu \frac{U_\mu(n)\psi(n + \hat{\mu}) - U_{-\mu}\psi(n - \hat{\mu})}{2a} + m\psi(n) \right) \\ &= a^4 \sum_{n, m \in \Lambda} \bar{\psi}(n) \mathcal{D}(n|m)\psi(m) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dies ist die einfachste Möglichkeit, eine eichinvariante Fermionenwirkung auf dem Gitter zu formulieren. Sie leidet jedoch unter dem Problem der sogenannten Fermionenverdopplung. Dazu betrachtet man den Propagator der freien Fermionen im Impulsraum, welcher sich aus der Inversion des Dirac Operators ergibt. Im Falle  $m = 0$  ist dieser

$$D(p)^{-1} = \frac{-ia^{-1} \sum_\mu \gamma_\mu \sin(p_\mu a)}{a^{-2} \sum_\mu \sin(p_\mu a)^2}. \quad (3.13)$$

Der Kontinuumslime führt mit  $\lim_{a \rightarrow 0} \sin(p_\mu a) = p_\mu a$  zum korrekten Kontinuumspropagator

$$D(p)^{-1} \Big|_{a \rightarrow 0} = \frac{-i \sum_\mu \gamma_\mu p_\mu}{p^2}. \quad (3.14)$$

Die Masse eines Fermions wird durch den Pol seines Propagators bestimmt. Im Kontinuumsfall liegt dieser bei  $p = (0, 0, 0, 0)$ . Auf dem Gitter treten jedoch weitere Nullstellen des Nenners auf, etwa bei  $p = (\frac{\pi}{a}, 0, 0, 0)$ . Insgesamt treten 15 dieser Doppler genannten zusätzlichen Fermionen auf. Um diese zu entfernen, existieren alternative Formulierung der Fermionenwirkung. Die einfachsten davon beschreibt die sogenannten Wilson Fermionen [11]. Mit der Notation  $\gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu$  lautet diese

$$S_F^W[\psi, \bar{\psi}, U] = a^4 \sum_{n \in \Lambda} \left( \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} \frac{\bar{\psi}(n)(r + \gamma_\mu)U_\mu^\dagger(n - \hat{\mu})\psi(n - \hat{\mu})}{2a} + (m + \frac{4r}{a})\psi(n) \right). \quad (3.15)$$

Die zusätzlichen Terme bewirken, dass die Doppler eine zusätzliche, vom Gitterabstand  $a$  abhängige, Masse erhalten. Diese divergiert im Kontinuumsimes, wodurch die Doppler im Kontinuum aus der Theorie verschwinden.

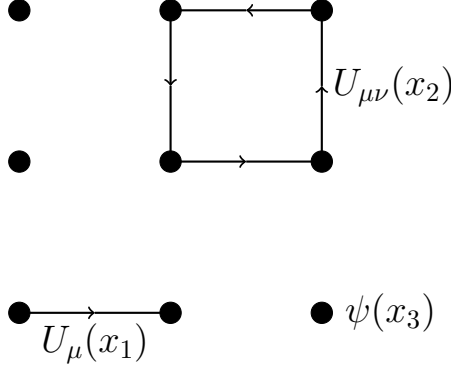


Abb. 3.1: Schematische Darstellung eines zweidimensionalen Gitters mit Plakette  $U_{\mu\nu}$ , Linkvariable  $U_{\mu}$  und Quarkfeld  $\psi$ .

### 3.2.2 Eichanteil

Da die Linkvariablen Eichfelder repräsentieren wird der Eichanteil der Wirkung aus Links konstruiert. Dazu ist zu beachten, dass eine einzelne Linkvariable keine eichinvariante Größe ist und daher nicht zur Konstruktion einer eichinvarianten Wirkung verwendet werden kann. Die Spur über einen geschlossenen Pfad aus Links ist jedoch eichinvariant, der kürzeste geschlossene Pfad aus Links wird Plakette genannt (siehe Abb. 3.1)

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}(n) &= U_{\mu}(n)U_{\nu}(n + \hat{\mu})U_{-\mu}(n + \hat{\mu} + \hat{\nu})U_{-\nu}(n + \hat{\nu}) \\ &= U_{\mu}(n)U_{\nu}(n + \hat{\mu})U_{\mu}^{\dagger}(n + \hat{\nu})U_{\nu}^{\dagger}(n). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Dabei bezeichnen  $U_{-\nu}(n + \hat{\nu})$  und  $U_{\nu}^{\dagger}(n)$  denselben Link mit entgegengesetzter Richtung. In einer solchen Kette heben sich alle Transformationsmatrizen bis auf die zwei an Anfangs- und Endpunkt weg, so dass gilt

$$P[U] = \prod_{(n,\mu) \in \mathcal{L}} U_{\mu}(n) \rightarrow P[U'] = \Omega(n_0)P[U]\Omega^{\dagger}(n_0). \quad (3.17)$$

Wird hiervon die Spur genommen, heben sich die beiden letzten Transformationsmatrizen aufgrund der zyklischen Natur der Spur ebenfalls weg

$$L[U'] = \text{Sp} \left[ \prod_{(n,\mu) \in \mathcal{L}} U'_{\mu}(n) \right] = \text{Sp} \left[ \Omega(n_0) \prod_{(n,\mu) \in \mathcal{L}} U_{\mu}(n) \Omega^{\dagger}(n_0) \right] = \text{Sp} \left[ \prod_{(n,\mu) \in \mathcal{L}} U_{\mu}(n) \right] = L[U]. \quad (3.18)$$

Aus solch einem eichinvarianten Objekt kann eine Wirkung zur Beschreibung des Eichfeldes konstruiert werden. Die einfachste Möglichkeit mit Plaketten eine Eichwirkung zu konstruieren ist die sogenannte Wilson-Wirkung:

$$S_W[U] = \frac{\beta}{2N_c} \sum_p (\text{Sp}U_p + \text{Sp}U_p^{\dagger}), \quad \beta = \frac{N_c}{g^2} \quad (3.19)$$

Das ist eine Summe über alle möglichen Plaketten auf dem Gitter. Genau wie bei dem Fermionenanteil ist dies nur die einfachste Möglichkeit eine eichinvariante Wirkung mit dem korrekten Kontinuumslikes zu formulieren. Mithilfe der Campbell-Hausdorff-Formel lässt sich der Kontinuumslikes für die Plaketten berechnen:

$$\begin{aligned}
U_{\mu\nu} &= \exp(ia^2(\partial_\mu A_\nu(n) - \partial_\nu A_\mu(n) + i[A_\mu(n), A_\nu(n)]) + \mathcal{O}(a^3)) \\
&= \exp(ia^2 F_{\mu\nu}(n) + \mathcal{O}(a^3)) \\
&= \mathbb{1} + ia^2 F_{\mu\nu}(n).
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Somit ergibt sich

$$S_W[U] = \frac{a^4}{2g^2} \sum_{n \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \mathcal{O}(a^2). \tag{3.21}$$

Die Wilson-Wirkung geht im Kontinuumslikes also tatsächlich in die Yang-Mills-Wirkung über. Den  $\mathcal{O}(a^2)$  Fehler bezeichnet man dabei als Gitterartefakt. Wie für die Fermionenwirkung existieren in der Literatur verschiedene Eichwirkung, welche z.B. den Beitrag größerer Plaketten berücksichtigen. Ziel ist dabei unter anderem, den Fehler in  $a$  zu minimieren.



## 4 Numerische Simulationen

Durch die Einführung eines diskreten Gitters reduziert sich die Zustandssumme (2.10) von einem unendlich-dimensionalen Integral zu einem Integral über sehr viele Dimensionen. Dadurch wird eine numerische Behandlung möglich. Die erfolgreichste Methode hierfür ist die Monte-Carlo-Methode. Da das Ziel dieser Arbeit die Untersuchung von Bereichen ist, in welchen die Monte-Carlo-Methode versagt, werden deren Grundlagen vorgestellt<sup>1</sup>. Außerdem werden einige allgemeine Konzepte numerischer Simulationen erläutert.

### 4.1 Monte-Carlo-Methode

Die Monte-Carlo-Methode zählt in der statistischen Physik zu den erfolgreichsten und meist verwendeten Methoden [20]. Sie wurde in den 40er Jahren zur computergestützten Berechnung von numerischen Problemen entwickelt. Ein häufiges Ziel numerischer Simulationen ist es, makroskopische Observablen eines Systems mit einer großen Anzahl mikroskopischer Freiheitsgrade zu berechnen, etwa Temperatur oder Magnetisierung eines Festkörpers. Dies geschieht über die Zustandssumme

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}x \mathcal{O} e^{-S[x]}, \\ Z &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}x e^{-S[x]},\end{aligned}\tag{4.1}$$

mit der euklidischen Wirkung  $S$  und einer Integration über eine Anzahl von Freiheitsgraden  $\mathcal{D}x$ . Das denkbar einfachste nicht triviale System, welches auf diese Weise behandelt wird, ist das Ising-Modell mit der Wirkung

$$S = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad s_i, s_j = \pm 1 .\tag{4.2}$$

Mit (4.1) lassen sich bei Kenntnis der Wirkung Observablen des Systems berechnen, indem über alle möglichen Zustände des Systems integriert wird. Im Falle des Ising Modells, welches an jedem Punkt nur einen Freiheitsgrad mit zwei möglichen Werten besitzt, wären dies bei einem dreidimensionalen Gitter mit Kantenlänge 10 bereits  $2^{10^3} \approx 10^{300}$  mögliche Zustände, über welche summiert werden müsste. So übersteigt die Auswertung der Zustandssumme selbst bei einem einfachen Modell und einem kleinen Gitter die Möglichkeiten der heutigen Computertechnik.

---

<sup>1</sup>Dieses Kapitel folgt teilweise [11].

Monte-Carlo-Simulationen bieten eine Möglichkeit, diesen Aufwand extrem zu reduzieren, ohne dabei wesentlich an Informationen einzubüßen. Dazu wird nur eine begrenzte Anzahl an möglichen Zuständen des Systems ausgewählt und die Observable bei jeder dieser Konfigurationen ausgewertet

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathcal{O}[\psi, \bar{\psi}, U]. \quad (4.3)$$

Dies ergäbe natürlich eine sehr schlechte Abschätzung der Observablen wären diese Konfigurationen zufällig ausgewählt, denn die meisten möglichen Konfigurationen sind physikalisch sehr unwahrscheinlich, da sie weit über der Energie des Grundzustands liegen. Ausschlaggebend für den Wert von  $\langle \mathcal{O} \rangle$  ist offensichtlich, welche Konfigurationen ausgewählt werden.

Entscheidend für die Auswertung der Zustandssumme ist der aus der Wirkung gebildete Faktor  $e^{-S}$ . Dieser versieht jede Konfiguration mit einem Gewichtungsfaktor, wobei solche mit großer Wirkung exponentiell unterdrückt werden.

Aus diesem Grund sollte die Berechnung der Observable nur einen Bruchteil der in der Zustandssumme vorkommenden Zustände benötigen, nämlich gerade jene, welche eine Minimierung der Wirkung bewirken. Dies bewirkt eine gewaltige Reduktion der benötigten Rechenzeit.

Die Ausgangsidee der Monte-Carlo-Methode ist es nun, dass die zur Auswertung herangezogenen Konfigurationen zufällig mit einer Wahrscheinlichkeit  $\propto e^{-S}$  ausgewählt werden. Diesen Vorgang bezeichnet man als *importance sampling*. So sollte, trotz der Vernachlässigung eines Großteils der Zustände, das Ergebnis gegen den korrekten Wert streben.

### 4.1.1 Markow-Kette

Nun wird noch ein Algorithmus benötigt, welcher die gesuchten Zustände entsprechend der vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung auswählt. Es wäre kaum praktikabel, alle möglichen Zustände des Systems zu speichern und ihnen eine Wahrscheinlichkeit zuzuweisen. Stattdessen bedient man sich dem Prinzip der Markow-Kette. Dies ist ein Prozess, welcher ausgehend von einem Ursprungszustand sequenziell weitere Zustände erzeugt

$$U_0 \rightarrow U_1 \rightarrow U_2 \rightarrow \dots \quad (4.4)$$

Dabei geschieht jeder Übergang mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit  $P(U_n \rightarrow U_{n+1}) = P(U \rightarrow U')$ . Offensichtlich sollte gelten

$$\sum_{U'} P(U \rightarrow U') = 1, \quad (4.5)$$

d.h. die kombinierte Wahrscheinlichkeit, dass der Zustand in irgendeinen Zustand (inklusive sich selbst) übergeht, ist 1.

Eine weitere Bedingung ist die Ergodizität. Sie besagt, dass jeder Zustand von jedem Zustand aus erreichbar ist, selbst wenn dazu eine sehr große Anzahl von Schritten notwendig ist. Würde dies nicht gelten, gäbe es Gebiete im Konfigurationsraum, welche voneinander isoliert sind. Dies würde dazu führen, dass das Ensemble an produzierten Zuständen davon abhängen würde, wo im Konfigurationsraum der Ausgangszustand lokalisiert ist, d.h. von der Wahl von  $U_0$ .

Die letzte Bedingung ist die sogenannte *detailed balance* (engl. detailliertes Gleichgewicht) Bedingung. Sie besagt, dass wenn es zwei Zustände  $U$  und  $U'$  gibt, für diese gelten muss:

$$\frac{P(U \rightarrow U')}{P(U' \rightarrow U)} = e^{-\beta(E_{U'} - E_U)} \quad (4.6)$$

Dies garantiert, dass sobald der Vorgang ein Gleichgewicht erreicht hat, die auftretenden Zustände gemäß der Boltzmannverteilung verteilt sind.

### 4.1.2 Metropolis-Algorithmus

Die oben genannten Bedingungen müssen immer erfüllt werden, aber es gibt verschiedene Möglichkeiten, dies zu tun. Diese führen zu unterschiedlichen Monte-Carlo-Algorithmen, welche sich hinsichtlich ihrer Effizienz wesentlich unterscheiden können. Darunter zählt der Metropolis-Algorithmus zu den bekanntesten und meist genutzten.<sup>2</sup>

Dieser wählt, ausgehend von einem Anfangszustand  $U$ , welcher beliebig sein kann, zunächst einen neuen Zustand  $U'$  aus. Wie diese Auswahl vonstatten geht ist dabei nicht festgelegt. Es könnte zum Beispiel durch Verändern eines Freiheitsgrades an einem Punkt des Gitters geschehen. Die Energiedifferenz zwischen  $U$  und  $U'$  beträgt  $\Delta E = E_{U'} - E_U = S[U'] - S[U]$ . Der neue Zustand wird mit folgender Wahrscheinlichkeit akzeptiert

$$P(U \rightarrow U') = \begin{cases} e^{-\beta \Delta E}, & \text{wenn } \Delta E > 0 \\ 1, & \text{ansonsten} \end{cases} \quad (4.7)$$

Wird der neue Zustand akzeptiert, geht das System in diesen über und es wird ein neuer Zustand  $U''$  ausgewählt, z.B. indem am nächsten Gitterpunkt eine Veränderung vorgenommen wird. Wird er dagegen verworfen, wird ein neuer Zustand  $U'$  erzeugt. Dieser Schritt wird für jeden Freiheitsgrad des Systems durchgeführt, ein kompletter Durchlauf durch das Gitter wird als *sweep* (engl. Durchlauf) bezeichnet.

Der Metropolis-Algorithmus akzeptiert stets energetisch günstigere Zustände, dies garantiert ein schnelles Annähern an den Grundzustand des Systems. Doch auch Zustände mit höherer Energie werden mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit akzeptiert. Dies wird wahrscheinlicher, wenn  $\beta = 1/T$  klein ist, also bei hoher Temperatur. Dies entspricht der Beobachtung, dass ein System bei niedriger Temperatur den Großteil der Zeit im Grundzustand verbringt, während es bei hoher Temperatur auch zunehmend angeregte Zustände besetzt.

---

<sup>2</sup>Mit dem Metropolis-Algorithmus erzielte Ergebnisse werden in Kapitel 7 als Referenzwerte benutzt.

### 4.1.3 Simulationen bei endlicher Dichte

Monte-Carlo-Simulationen sind bei vielen Fragestellungen und vielen verschiedenen Systemen extrem erfolgreich. Dennoch ist der Bereich, in dem sie angewendet werden können, durch den ihnen zugrunde liegenden Mechanismus begrenzt. Dies zeigt sich bei der Betrachtung von System mit endlicher Fermionendichte. Ein solches System enthält neben dem Eichteil der Wirkung  $S_G$  einen die Fermionen beschreibenden Anteil  $S_F$

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} e^{-S_G - S_F}. \quad (4.8)$$

Die Fermionenwirkung kann ausintegriert und als Determinante geschrieben werden

$$Z = \int \mathcal{D}U e^{-S_G} \det[D(U, m_f, \mu)] \quad . \quad (4.9)$$

Wie oben gezeigt, basiert die Monte-Carlo-Methode darauf, die Wirkung als Wahrscheinlichkeitsgewichtung zu interpretieren. Dafür muss der Beitrag jedoch reell und positiv sein. Für  $\mu = 0$ , d.h. für verschwindende Fermionendichte, ist dies der Fall. Es gilt jedoch für die SU(3) Fermionendeterminante

$$\det[D(U, m_f, \mu)] = \begin{cases} \text{reell und positiv,} & \text{wenn } \mu = 0 \\ \text{komplex,} & \text{wenn } \mu \neq 0 \end{cases} \quad . \quad (4.10)$$

Eine komplexe Zahl kann jedoch nicht als Wahrscheinlichkeit interpretiert werden. So ist kein Importance Sampling möglich, und die Monte-Carlo-Methode scheitert bei der Beschreibung von Systemen mit endlichem chemischen Potential. Dieses als *sign problem* (*engl.* Vorzeichenproblem) bekannte Problem ist bis heute ungelöst und behindert die Erforschung des QCD-Phasendiagramms.

Um die Stärke des Vorzeichenproblems zu beurteilen, betrachtet man den sogenannten Phasenfaktor

$$\det[D(U, m_f, \mu)] = e^{i\phi} |\det[D(U, m_f, \mu)]| \quad . \quad (4.11)$$

Ist  $\langle e^{i\phi} \rangle \sim 1$  besteht kein Vorzeichenproblem. Hier können ohne Probleme Monte-Carlo-Techniken angewendet werden. Je kleiner  $\langle e^{i\phi} \rangle \propto e^{-\text{const.} \cdot V}$  jedoch wird, desto größer wird das Problem.

In Abb. 4.1 ist schematisch dargestellt, wie der Realteil des Wahrscheinlichkeitsmaßes bei der Integration über die Feldkonfigurationen fluktuieren würde. Um das korrekte Ergebnis zu erhalten, würde man alle Konfigurationen kennen müssen, da das Ergebnis in hohem Maße davon abhängt, wie sich positive und negative Beiträge wegheben.

### 4.1.4 Umgehen des Vorzeichenproblems

Trotzdem hat es einige Versuche gegeben, dieses der Monte-Carlo-Methode zugrunde liegenden Beschränkungen zu umgehen [12]. Der einfachste Weg zur Lösung der Probleme

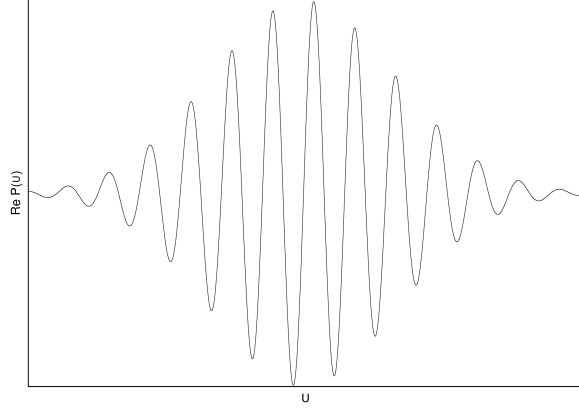


Abb. 4.1: Fluktuation des Realteils der Wahrscheinlichkeit in Abhängigkeit der Konfigurationen  $U$  bei komplexer Wirkung. Die Beiträge sind stark oszillierend und heben sich gegenseitig auf.

bei der Simulation von Fermionen ist die sogenannte *Quenched Approximation* [21]. Diese besteht darin, die Fermionendeterminante als konstant zu betrachten:

$$\det[D(U, m_f, \mu)] = \text{const.} \quad (4.12)$$

Dies entspricht einer Vernachlässigung aller Fermionen Loops bei der Berechnung von Korrelationsfunktionen und stellt damit den Grenzwert unendlich schwerer Quarks dar. Somit ergibt sich eine radikale Vereinfachung der Dynamik des Systems, trotzdem wurde dieser Ansatz in der Vergangenheit oft genutzt. In der Praxis sind damit Geschwindigkeitszuwächse von mehreren Größenordnung möglich, allerdings auf Kosten der vollständigen Vernachlässigung der fermionischen Dynamik.

Eine andere Möglichkeit ist *Rewighting* [22]. Diese basiert darauf, dass ein nicht-positive Wahrscheinlichkeitsgewichtung in eine positive umgewandelt wird. Der komplexe Teil wird in die Observable einbezogen, welche nun mit dem wohldefinierten Maß bei  $\mu_0 = 0$  bestimmt wird:

$$Z(\beta, \mu) = Z(\beta_0, \mu_0) \left\langle \frac{e^{-S_G[\beta, U]} \det[D(U, m_f, \mu)]}{e^{-S_G[\beta_0, U]} \det[D(U, m_f, \mu)]} \right\rangle \quad (4.13)$$

Die auszuwertende Observable wird also mit einem Gewichtungsfaktor versehen und dann bei den bekannten  $\mu_0$ -Konfigurationen ausgewertet.

Das Problem dabei ist, dass die für die Observable wichtigen Konfigurationen nicht notwendigerweise oft in der ursprünglichen Verteilung der  $\mu = 0$  Konfigurationen vorkommen. Dies wird als *Overlap Problem* bezeichnet. Dieses Problem wird mit wachsender Entfernung zu den Ursprungsparametern exponentiell größer und ist deswegen auf den Bereich kleinen chemischen Potentials und hinreichend hoher Temperatur beschränkt. Eine weitere Methode ist die Entwicklung in  $\frac{\mu}{T}$ . So kann etwa der Druck eines Systems

als

$$p = \frac{T}{V} \ln Z = T^4 \sum_{n=0}^{\infty} c_{2n}(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^{2n} \quad (4.14)$$

entwickelt werden. Da die Zustandssumme und damit auch alle thermodynamischen Observablen symmetrische Funktionen von  $\frac{\mu}{T}$  sind, treten nur gradzahlige Exponenten des Entwicklungsfaktors auf. Da die Entwicklung auf einem kleinen Wert von  $\frac{\mu}{T}$  beruht, ist auch sie auf den Bereich kleinen chemischen Potentials beschränkt.

Das Vorzeichenproblem verschwindet, wenn das chemische Potential imaginär wird,  $\mu = i\mu_i$ . So kann das System bei imaginären chemischen Potential simuliert und Observablen als Funktion von  $\mu^2$  untersucht werden. Dann wird versucht, das Verhalten in dem mit imaginären chemischen Potential zugänglichen Bereich  $\mu^2 < 0$  nach  $\mu^2 > 0$  zu extrapolieren [23].

Zusammengefasst lässt sich sagen, dass die Simulation von endlichen Fermionendichten Fortschritte gemacht hat, welche jedoch alle engen Beschränkungen unterliegen. Damit ist die Erforschung alternativer Herangehensweisen notwendig.

## 4.2 Numerische Methoden der Auswertung

Bevor im nächsten Kapitel als Alternative zur Monte-Carlo-Methode die stochastische Quantisierung eingeführt wird, sollen einige für die Durchführung numerischer Simulationen wichtige Themen kurz erläutert werden. Der Schwerpunkt liegt dabei weniger auf den mathematischen Details als vielmehr auf den für diese Arbeit praktisch relevanten Konzepten.

### 4.2.1 Bootstrapping

Von besonderer Wichtigkeit bei Gittersimulationen ist die korrekte Analyse der Daten. Ohne verlässliche Abschätzung des Fehlers sind die gewonnenen Ergebnisse nur von geringem Wert. Um eine verlässliche Abschätzung des statistischen Fehlers eines Messwertes zu erhalten ist es nötig, die Verteilung einer großen Anzahl von Messwerten zu kennen. Oft ist diese Verteilung aber nicht bekannt oder die Produktion einer hinreichend großen Anzahl Messwerte zu aufwendig. Um trotzdem verlässliche Abschätzung des Fehlers zu erhalten gibt es verschiedene Methoden. Eine der meist genutzten Methoden, welche hier ebenfalls verwendet werden soll, ist *Bootstrapping* [12].

Dazu sammelt man zunächst eine möglichst große Menge an Messwerten. Die Größe dieser Menge ist natürlich von der Komplexität der Simulation und der zu Verfügung stehenden Rechenleistung begrenzt. Nun hat man eine Menge von  $N$  Messwerten, aus welchen sich ein Mittelwert  $\alpha$  bestimmen lässt. Um nun den Fehler des Messwertes zu bestimmen generiert man aus den Daten ein neues Ensemble von Messwerten. Dazu wird  $N$  mal zufällig ein Element des ursprünglichen Ensembles zu dem neuen Ensemble hinzugefügt. Dabei wird jedoch das Element nicht aus der Ursprungsmenge entfernt, deshalb ist es möglich, dass ein Messwert mehrfach im neuen Ensemble auftaucht. Aus diesem

neuen Ensemble wird nun wiederum ein Mittelwert  $\alpha_i$  berechnet. Dieser Vorgang wird  $P$  mal wiederholt, wobei dieser Wert natürlich wieder durch die Rechenleistung beschränkt ist, aber möglichst groß sein sollte. Die Varianz beträgt dann

$$\sigma^2 = \frac{1}{P} \sum_{i=1}^P (\alpha_i - \bar{\alpha})^2 \quad (4.15)$$

mit dem Durchschnittswert

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{P} \sum_{i=1}^P \alpha_i. \quad (4.16)$$

## 4.2.2 Finite Size Scaling

Alle Simulationen sind aus praktischen Gründen auf endliche Gitter begrenzt. Obwohl durch die Verwendung periodischer Randbedingungen keine Gitterpunkte am Rand liegen, hat dies spürbare Auswirkung auf das Verhalten des Systems.

Dazu betrachtet man die sogenannte Korrelationslänge  $\xi$ . Sie ist ein Maß für die Reichweite von Wechselwirkungen zwischen Gitterpunkten. So fallen etwa in einem Spinsystem die Korrelationsfunktionen der Magnetisierung, welche definiert sind als

$$\Gamma(r) = \langle m(r_1)m(r_2) \rangle - \langle m(r_1) \rangle \langle m(r_2) \rangle \quad (4.17)$$

bei wachsendem Abstand  $r = r_1 - r_2$  exponentiell mit  $\Gamma(r) \propto e^{-\frac{r}{\xi}} \cdot r^{-n}$  ab.

Am kritischen Punkt  $T_c$  eines Phasenübergangs divergiert die Korrelationslänge als  $\xi \propto (\frac{T-T_c}{T})^{-\nu}$ , wobei  $\nu$  eine charakteristische Größe des betrachteten Systems ist. In einem Gitter endlicher Größe ist dies natürlich nicht möglich, die Korrelationslänge ist auf die Ausdehnung des Gitters begrenzt. Diese Begrenzung wird *cutoff* (*engl.* Abschneiden) genannt. Soll nun der kritische Punkt oder die kritischen Exponenten eines Systems bestimmt werden, ist dies immer nur als Funktion der Gittergröße möglich,  $T_c = T_c(L)$ . Eine Möglichkeit, den kritischen Punkt für ein System im thermodynamischen Limes zu bestimmen ist es, eine Reihe von Messungen bei unterschiedlicher Gittergrößen durchzuführen. Der thermodynamische Limes ergibt sich dann aus der Extrapolation für  $L \rightarrow \infty$ . Der Zusammenhang zwischen Gittergröße und cutoff-Effekten kann entweder unbekannt oder aufgrund von theoretischen Überlegungen bekannt sein. Im ersten Fall muss eine hinreichend große Anzahl von verschiedenen Gittergrößen simuliert werden, um den Zusammenhang zu quantifizieren.

Als Richtlinie für die zu wählenden Dimensionen des Gitters gilt [24]

$$a \ll \xi \ll aN_\tau \quad (4.18)$$

Das garantiert, dass das verwendete Gitter einerseits fein genug ist, um die Dynamik auf der relativen Skala nicht zu sehr zu vereinfachen. Andererseits ist durch die zweite Relation garantiert, dass das verwendete Gitter groß genug ist, um starke Randeffekte zu vermeiden. Natürlich wird es, sobald  $\xi$  divergiert, nicht mehr möglich sein, diese Bedingung zu erfüllen.

### 4.2.3 Autokorrelation

Um festzustellen, wie viele Konfigurationen nötig sind um eine verlässliche Abschätzung einer Observable zu bekommen, betrachtet man die Korrelationszeit des Systems. Sobald sich ein thermisches Gleichgewicht eingestellt hat, wird jeder Zeitschritt den Zustand des Systems nur geringfügig ändern, deswegen sind Konfigurationen, welche nur wenige Sweeps auseinander liegen, korreliert. Wenn nun der Zeitraum, über welchen man eine Observable misst, nicht groß genug ist im Vergleich zur Korrelationszeit läuft man Gefahr, den Fehler der Messung als zu klein einzuschätzen und unzuverlässige Ergebnisse zu erhalten. Dies nennt man Autokorrelation. Angenommen man hat eine Reihe von Messungen einer Observable  $X_i$  die an aufeinander folgenden Zeitschritten mit Index  $i$  gemessen wurden, berechnet man die Autokorrelation als [11]

$$C_X(t) = C_X(X_i, X_{i+t}) = \langle X_i X_{i+t} \rangle - \langle X_i \rangle \langle X_{i+t} \rangle \quad (4.19)$$

Betrachtet wird nun der exponentielle Abfall des Verhältnis

$$\Gamma_X(t) = \frac{C_X(t)}{C_X(0)} \sim \exp\left(\frac{-t}{\tau_X}\right), \quad (4.20)$$

$\tau_X$  bezeichnet man als Autokorrelationszeit der Variabel  $X$ . Ist die Zeit zwischen zwei Messungen  $t$ , so ergibt dies einen systematischen Fehler aufgrund der Korrelation von  $\mathcal{O}(e^{\frac{-t}{\tau_X}})$ . Um systematische Fehler zu vermeiden, sollte darauf geachtet werden, dass Messungen von Observablen mindestens über mehrere Korrelationszeiten laufen, was bei allen im Folgenden untersuchten Systemen berücksichtigt wird.



# 5 Langevin-Dynamik

Die Langevin-Dynamik, oder auch Stochastische Quantisierung, stellt eine Alternative zur im letzten Kapitel vorgestellten Monte-Carlo-Methode dar. Ihre Anwendung ist der Hauptfokus dieser Arbeit.

## 5.1 Ausgangsidee

Die Grundidee der Stochastischen Quantisierung ist es, eine euklidische Feldtheorie als ein mit einem Wärmebad verbundenen statistischen System zu betrachten [25, 26, 27]. Die thermischen Fluktuationen werden dabei durch ein weißes Rauschen<sup>1</sup> simuliert, welches alle Freiheitsgrade des Systems beeinflusst.

Das einfachste Beispiel eines solchen Systems ist die durch thermische Fluktuationen verursachte Brown'sche Bewegung eines Teilchens [28]. Ein hinreichend kleines Teilchen bewegt sich durch Stöße mit Molekülen des es umgebenden Mediums auf unregelmäßigen Bahnen hin und her. Zur Beschreibung dieses Verhaltens stellte Paul Langevin 1908 die Langevin-Gleichung auf:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\alpha \frac{dx}{dt} + \eta. \quad (5.1)$$

Der erste Term auf der rechten Seite beschreibt die Reibung des Teilchens mit Masse  $m$ . Die Stärke der Reibung wird als linear zur Geschwindigkeit angenommen und ist durch einen freien Parameter  $\alpha$  parametrisiert. Der zweite Term beschreibt die zufällige Krafteinwirkung durch Kollisionen mit benachbarten Teilchen. Für diesen Rauschterm wird eine Gaußsche Verteilung angenommen. Zudem soll die Krafteinwirkung isotrop sein, sodass sie sich über große Zeiträume zu Null mittelt, außerdem sollen die Stöße rein zufällig, also nicht korreliert, sein. Diese Forderungen lassen sich für zwei Teilchen  $i$  und  $j$  zu den Zeitpunkten  $t$  und  $t'$  wie folgt formulieren

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2\lambda \delta_{i,j} \delta(t - t'), \quad \langle \eta_i(t) \rangle = 0, \quad (5.2)$$

mit der vorerst unbestimmten, reellen Konstante  $\lambda$ .

Im zeitlichen Mittel hebt sich der Rauschterm weg und verursacht somit keine Bewegung des Teilchens. Die Deltafunktion garantiert, dass es keine Korrelation in der Zeit gibt und der Rauschterm unabhängig vom Zeitpunkt oder der Bewegung des Teilchens ist.

Gleichung (5.1) lässt sich formal lösen durch

$$v(t) = e^{-\frac{\alpha}{m}t} v(0) + \frac{1}{m} \int_0^t e^{-\frac{\alpha}{m}(t-\tau)} \eta(\tau) d\tau. \quad (5.3)$$

---

<sup>1</sup>Bei weißem Rauschen sind zeitlich getrennte Ereignisse nicht korreliert

Der erste Term beschreibt lediglich das durch Reibung exponentielle Abfallen der Anfangsgeschwindigkeit und kann daher mit der Annahme  $v(0) = 0$  vernachlässigt werden. Daraus lässt sich der Erwartungswert der kinetischen Energie eines der Brown'schen Bewegung unterliegenden Teilchens berechnen

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}m\langle v(t)v(t) \rangle &= \frac{1}{2}m\frac{1}{m^2} \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' e^{-\frac{\alpha}{m}(2t-\tau-\tau')} \langle \eta(\tau)\eta(\tau') \rangle \\ &= \frac{3}{2} \frac{\lambda}{\alpha} (1 - e^{-\frac{2\alpha}{m}t}). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Da wir am Zustand des thermischen Gleichgewichts interessiert sind, wird  $t$  als groß angenommen und es ergibt sich

$$\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} \frac{\lambda}{\alpha}. \quad (5.5)$$

Mit dem aus der Thermodynamik bekannten Erwartungswert für die kinetische Energie eines Teilchens im thermischen Gleichgewicht,  $E_k = \frac{3}{2}kT$ , lässt sich  $\lambda = kT\alpha$  ablesen. Dies bedeutet, dass die Reibung die der Bewegung eines Teilchens entgegenwirkt, mit der Stärke der thermischen Fluktuationen zusammenhängt. Dies ist als das Fluktuations-Dissipations-Theorem bekannt [25].

## 5.2 Langevin-Dynamik in Feldtheorien

Die Idee des obigen Ansatz auf Feldtheorien zu erweitern wurde 1981 von Parisi und Wu präsentiert [29]. Normalerweise werden Korrelationsfunktionen eines euklidischen Systems mit Wirkung  $S[\phi]$  durch Integration über die Freiheitsgrade des Systems berechnet

$$\langle \phi(x_1)\dots\phi(x_n) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x_1)\dots\phi(x_n)e^{-S}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S}} \quad (5.6)$$

Stattdessen schlugen Parisi und Wu vor, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung  $e^{-S}$  ebenfalls als stationäres Gleichgewicht eines stochastischen Prozesses hergestellt werden kann.

Dazu wird eine fiktive fünfte Zeitdimension eingeführt:

$$\phi(x) \rightarrow \phi(x, \theta) \quad (5.7)$$

Diese hat keine physikalische Bedeutung, sie ist die Dimension, in der sich das System zum stationären Gleichgewicht entwickelt. Sie wird deswegen auch Langevin-Zeit genannt.

Das System soll sich in dieser neuen Zeit gemäß der Langevin-Gleichung entwickeln

$$\frac{\partial \phi(x, \theta)}{\partial \theta} = -\frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(x, \theta)} + \eta(x, \theta), \quad (5.8)$$

mit den Bedingungen, dass der Rauschterm gaußförmig und ohne räumliche oder zeitliche Korrelation ist

$$\begin{aligned}\langle \eta(x, \theta) \rangle &= 0 \\ \langle \eta(x, \theta) \eta(x', \theta') \rangle &= 2\delta(x - x')\delta(\theta - \theta')\end{aligned}\quad (5.9)$$

Das System befindet sich, abgesehen von dem Rauschterm, in einem stabilen Zustand, wenn der sogenannten Driftterm gegen Null gehen

$$\frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(x, \theta)} = 0. \quad (5.10)$$

Das ist die Lösung der klassischen Feldgleichungen.

Um Observablen zu ermitteln muss über das Rauschen gemittelt werden:

$$\langle \phi(x_1, \theta_1) \dots \phi(x_n, \theta_n) \rangle_\eta = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x_1, \theta_1) \dots \phi(x_n, \theta_n) e^{-\frac{1}{4} \int d^n x d\theta \eta^2(x, \theta)}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{4} \int d^n x d\theta \eta^2(x, \theta)}} \quad (5.11)$$

Die Annahme ist nun, dass die durch diesen Prozess definierten Erwartungswerte im Limes  $\theta \rightarrow \infty$  mit den entsprechenden Greens-Funktionen übereinstimmen

$$\lim_{\theta \rightarrow \infty} \langle \phi(x_1, \theta_1) \dots \phi(x_n, \theta_n) \rangle_\eta = \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_n) \rangle \quad (5.12)$$

Mit (5.11) ist dies gleichbedeutend mit der Annahme, dass sich die durch den Langevin-Prozess erzeugte Wahrscheinlichkeitsverteilung  $P[\phi, \theta]$ , deren Entwicklung durch die Fokker-Planck Gleichung

$$\frac{\partial P}{\partial \theta} = \int d^n x \frac{\delta}{\delta \phi(x, \theta)} \left( \frac{\delta S}{\delta \phi(x, \theta)} + \frac{\delta}{\delta \phi(x, \theta)} \right) P[\phi, \theta] \quad (5.13)$$

beschrieben wird, die Verteilung  $e^{-S}$  als Grenzwert für  $\theta \rightarrow \infty$  hat.

### 5.3 Implementierung

Um Gleichung (5.8) numerisch zu lösen muss die Langevin-Zeit diskretisiert werden

$$\theta = \epsilon n. \quad (5.14)$$

Dabei ist  $\epsilon$  die Schrittweite. Bestimmend für die Entwicklung des Systems ist der Driftterm. Ist die Wirkung komplex, wie z.B. im Falle nicht verschwindenden chemischen Potentials in einer Theorie mit Fermionen, werden diese Driftterme ebenfalls komplex sein. Dadurch werden alle Freiheitsgrade komplex, auch wenn diese zu Beginn rein reell waren.

$$\phi(x, \theta) \rightarrow \phi^R(x, \theta) + i\phi^I(x, \theta) \quad (5.15)$$

$$\begin{aligned}
K^R(x) &= -\operatorname{Re} \frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(x, \theta)} \Big|_{\phi \rightarrow \phi^R + i\phi^I} \\
K^I(x) &= -\operatorname{Im} \frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(x, \theta)} \Big|_{\phi \rightarrow \phi^R + i\phi^I}.
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Im einfachsten Fall wird Gleichung (5.8) per Euler-Integration gelöst

$$\begin{aligned}
\phi^R(x, n+1) &= \phi^R(x, n) + \epsilon K^R(x, n) + \sqrt{\epsilon} \eta(x, n) \\
\phi^I(x, n+1) &= \phi^I(x, n) + \epsilon K^I(x, n),
\end{aligned} \tag{5.17}$$

was zu einem durch die endliche Schrittweite verursachten Fehler  $\mathcal{O}(\epsilon)$  führt<sup>2</sup>.

Frühere Versuche in den 80er Jahren diese Technik auf Modelle anzuwenden, welche aufgrund einer komplexen Wirkung unter dem Vorzeichen Problem leiden, scheiterten trotz anfänglicher Erfolge [31, 32]. Systeme konvergieren teilweise zu falschen Verteilungen [33], ohne dass bekannt ist, wann und warum dies geschieht.

Das zweite Problem war das Auftreten numerischer Instabilitäten [34]. Dieses Problem entsteht durch die komplexe Erweiterung  $\phi(x) \rightarrow \phi^R(x) + i\phi^I(x)$  der Freiheitsgrade. Auch wenn diese Freiheitsgrade vorher Elemente einer kompakten Mannigfaltigkeit waren, muss dies danach nicht mehr der Fall sein, so dass  $\phi^R(x)$  zwar beschränkt ist jedoch  $-\infty < \phi^I(x) < \infty$  gilt. Im Phasenraum des Systems werden dann Trajektorien existieren, auf denen gegen unendlich strebende Driftterme existieren.

Die Anfälligkeit für dieses Problem scheint jedoch von Modell zu Modell sehr unterschiedlich zu sein. Während es bei manchen ausreichend ist, lediglich die Schrittweite  $\epsilon$  klein genug zu wählen, treten die Instabilitäten bei anderen derart häufig auf, dass es kaum möglich ist, ein thermisches Gleichgewicht zu erreichen, bevor die Simulation abbricht.

## 5.4 Adaptive Schrittweite

Zwar lassen sich die beschriebenen Instabilitäten in einigen Fällen durch Minimierung der Schrittweite (5.14) beheben, allerdings führt dies zu einem Ansteigen der benötigten Anzahl von Simulationsschritten, um etwa ein Gleichgewicht zu erreichen oder statistisch unabhängige Messwerte zu erhalten. Im Allgemeinen gilt, dass die benötigte Rechenzeit um z.B. ein Gleichgewicht zu erreichen proportional zu  $\epsilon^{-1}$  ist. Zur Lösung dieses Problems wurde kürzlich in [34] vorgeschlagen, eine adaptive Schrittweite einzuführen. Dazu wird in jedem Zeitschritt  $n$  der maximale Driftterm bestimmt

$$K_n^{max} = \max_x \sqrt{(K_x^R)^2 + (K_x^I)^2}. \tag{5.18}$$

Zusätzlich wird ein Durchschnittswert für die maximal zulässigen Driftterme für stabile Simulationen benötigt,  $\langle K^{max} \rangle$ . Dieser muss vorher bestimmt werden. Die Schrittweite

---

<sup>2</sup>Durch verbesserte Integrationsverfahren, wie z.B. das Runge-Kutta-Verfahren, lässt sich dieser Fehler auf  $\mathcal{O}(\epsilon^2)$  reduzieren [30].

eines Zeitschritts ergibt sich dann aus

$$\epsilon_n = \bar{\epsilon} \frac{\langle K^{max} \rangle}{K_n^{max}} \quad (5.19)$$

Dabei ist  $\bar{\epsilon}$  der einzige einstellbare Parameter, er stellt die gewünschte Schrittweite dar. Dies ist die Schrittweite, mit der das Programm läuft, solange keine zu großen Driftterme auftreten. Treten große Driftterme auf, wird  $\epsilon_n$  kleiner. Dies bewirkt, dass der Rauschterm in (5.17) relativ zum restlichen Driftterm immer größer wird, da dieser nur mit  $\sqrt{\bar{\epsilon}}$  eingeht. Dadurch ist die Entwicklung des Systems im Grenzfall sehr großer Driftterme praktisch nur noch durch den Rauschterm bestimmt, welcher dadurch das System von der kritischen Trajektorie wegbewegt. Sobald dies geschehen ist, wird die Schrittweite wieder erhöht und die Entwicklung des Systems wieder durch die Driftterme bestimmt. Um eine korrekte statistische Signifikanz zu garantieren, müssen Observablen bei der Verwendung einer adaptiven Schrittweite entsprechend gewichtet werden

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_n \epsilon_n \mathcal{O}_n}{\sum_n \epsilon_n}. \quad (5.20)$$

Die Observablen werden über eine konstante Langevin-Zeit ermittelt, es gilt also  $\sum_n \epsilon_n = \text{const.}$

Generell scheinen Systeme mit großem Volumen anfälliger für Instabilitäten zu sein, da es hier mehr Möglichkeiten gibt, auf kritische Trajektorien zu gelangen. Hier muss tendenziell ein kleinerer Wert für  $\bar{\epsilon}$  gewählt werden, was die benötigte Rechenzeit steigert.

## 5.5 Konvergenz

Neben numerischen Instabilitäten leiden Langevin-Simulationen unter dem Problem der falschen Konvergenz [35, 36, 30]. Dies bedeutet, dass die Simulation bei einer falschen Verteilung  $P \neq e^{-S}$  zum Gleichgewicht kommt und deswegen falsche Erwartungswerte liefert. Dies tritt nur auf, wenn die simulierte Wirkung komplex wird. Im Falle einer reellen Wirkung lässt sich zeigen, dass die Verteilung stets gegen den korrekten Grenzwert  $P = e^{-S}$  konvergiert [25]. Dies ist natürlich äußerst unbefriedigend, da besonders die Behandlung komplexer Wirkungen interessant ist.

Um diesem Problem zu begegnen, wurde in [37] ein Kriterium vorgeschlagen mit dem sich zumindest abschätzen lässt, ob eine Simulation zu einem richtigen oder falschen Wert konvergiert. Dies ist besonders dann wertvoll, wenn keine Vergleichsdaten aus anderen Ansätzen vorhanden sind.

Den Argumenten in [37] und [30] folgend, betrachtet man zunächst zwei verschiedene statistische Gewichte, einerseits das komplexe Maß  $e^{-S} dx$  wie es in Monte-Carlo-Simulationen verwendet wird und andererseits das Maß  $P dx dy$  mit dem reellen und positiven Maß  $P$ , wie es in einer Langevin-Simulationen vorkommt. Dabei sei  $dx$  der einzige Freiheitsgrad des Systems, welcher durch den Langevin-Prozess einen komplexen Anteil  $dy$  erhält.

Wünschenswert wäre es nun, dass Erwartungswerte, die bezüglich dieser zwei Maße ausgewertet werden im Limes  $\theta \rightarrow \infty$  übereinstimmen, dass also die Langevin-Simulation dieselbe Wahrscheinlichkeitsverteilung produziert wie eine Monte-Carlo-Simulation. Das Maß  $P$  entwickelt sich in der Langevin-Zeit  $\theta$  gemäß der Fokker-Planck-Gleichung

$$\frac{\partial}{\partial \theta} P(x, y; \theta) = L^T P(x, y; \theta) \quad (5.21)$$

mit dem Fokker-Planck-Operator

$$L^T = \nabla_x [\nabla_x - K_x] - \nabla_y K_y. \quad (5.22)$$

Ebenso entwickelt sich das komplexe Maß  $\rho(x; \theta) \propto e^{-S}$ ,

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \rho(x; \theta) = L_0^T \rho(x; \theta), \quad (5.23)$$

mit dem komplexen Fokker-Planck-Operator

$$L_0^T = \nabla_x [\nabla_x + (\nabla_x S(x))]. \quad (5.24)$$

Die Erwartungswerte bezüglich der verschiedenen Maße berechnen sich mit

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle_{P(\theta)} &= \frac{\int \mathcal{O}(x + iy) P(x, y; \theta) dx dy}{\int P(x, y; \theta) dx dy} \\ \langle \mathcal{O} \rangle_{\rho(\theta)} &= \frac{\int \mathcal{O}(x + iy) \rho(x; \theta) dx}{\int \rho(x; \theta) dx}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Führen beide Methoden im Grenzfall  $\theta \rightarrow \infty$  zu denselben statistischen Gewicht, muss bei gleichen Anfangsbedingungen gelten:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{P(\theta)} = \langle \mathcal{O} \rangle_{\rho(\theta)}. \quad (5.26)$$

Gilt dies, führt die Verwendung der Langevin-Dynamik zu denselben Ergebnissen wie eine Monte-Carlo-Simulation, denn dann konvergiert das statistische Gewicht  $P(x, y; \theta)$  im Limes  $\theta \rightarrow \infty$  gegen die korrekte Verteilung  $\sim e^{-S}$ .

Um dies zu zeigen, ersetzt man die Zeitentwicklung des statistischen Gewichts durch eine Zeitabhängigkeit der Observablen

$$\partial_t \mathcal{O}(z; t) = \tilde{L} \mathcal{O}(z; t) \quad (t \geq 0), \quad (5.27)$$

mit dem Langevin-Operator

$$\begin{aligned} \tilde{L} &\equiv [\nabla_z - (\nabla_z S(z))] \nabla_z \\ z &= x + iy, \end{aligned} \quad (5.28)$$

wobei der Unterschied zwischen  $\tilde{L}$  und  $L$  verschwindet, da nur holomorphe Funktionen betrachtet werden. Die formale Lösung dieser Gleichung lautet mit den Anfangsbedingungen  $\mathcal{O}(z; 0) = \mathcal{O}(z)$

$$\mathcal{O}(z; t) = e^{t\tilde{L}} \mathcal{O}(z). \quad (5.29)$$

Entscheidend für die Aufstellung eines Kriteriums ist die Funktion

$$F(t, \tau) \equiv \int P(x, y; t - \tau) \mathcal{O}(x + iy; \tau) dx dy. \quad (5.30)$$

Diese Funktion stellt eine Verbindung zwischen den beiden statistischen Gewichten her

$$\begin{aligned} F(t, 0) &= \int dx dy P(x, y; t) \mathcal{O}(x + iy; 0) = \langle \mathcal{O} \rangle_{P(t)} \\ F(t, t) &= \int dx dy P(x, y; 0) \mathcal{O}(x + iy; t) = \langle \mathcal{O} \rangle_{\rho(t)} \end{aligned} \quad (5.31)$$

Um zu zeigen, dass 5.26 erfüllt ist muss  $F(t, \tau)$  unabhängig von  $\tau$  sein, also

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} F(t, \tau) &= - \int (L^T P(x, y; t - \tau)) \mathcal{O}(x + iy, \tau) dx dy \\ &\quad + \int P(x, y; t - \tau) L \mathcal{O}(x + iy; \tau) dx dy \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (5.32)$$

In [37] wird weiterhin argumentiert, dass es ausreicht, wenn diese Bedingung für  $t \rightarrow \infty$  erfüllt ist. In diesem Fall ist  $L^T P(x, y; \infty) = 0$ , vorausgesetzt das Wahrscheinlichkeitsmaß erreicht ein Gleichgewicht. Dann fällt der erster Term in (5.32) weg und das Kriterium reduziert sich zu

$$\begin{aligned} E_{\mathcal{O}} &\equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{d\tau} F(t, \tau) \Big|_{\tau=0} \\ &= \int P(x, y; \infty) L \mathcal{O}(x + iy; 0) dx dy = \langle L \mathcal{O} \rangle \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Um zu beurteilen, ob eine Langevin-Simulation zum korrekten statistischen Gewicht konvergiert, reicht es also, den Erwartungswert  $\langle L \mathcal{O} \rangle$  zu überprüfen.

$$L \mathcal{O} = \sum_{x,a} \left( \left( \frac{\partial}{\partial \phi_{a,x}} + K_{a,x} \right) \frac{\partial}{\partial \phi_{a,x}} \right) \mathcal{O} \quad (5.34)$$

Obwohl dies theoretisch bei allen Observablen durchgeführt werden sollte, wird man sich in der Praxis auf eine hinreichend große Zahl beschränken müssen.

# 6 XY-Modell

Nachdem die Langevin-Dynamik eingeführt ist, soll sie nun an einem einfachen Modell getestet werden. Dafür soll das XY-Modell betrachtet werden, welches bereits zuvor mit der Langevin-Dynamik untersucht wurde [35]. Dessenwegen sollen die dort erzielten Ergebnisse reproduziert werden.

## 6.1 Theoretischer Hintergrund

Das XY-Modell zählt zu den am meisten untersuchten Modellen der statistischen Physik. In seiner einfachsten Version ist es in zwei Dimensionen formuliert und besitzt an jedem Gitterpunkt einen zweikomponentigen Spin  $\vec{s}_i = (\cos \phi_i, \sin \phi_i)$  dessen Stellung durch den Winkel  $\phi \in [0, 2\pi]$  beschrieben wird. Die Wirkung des Modells ist im einfachsten Fall (ohne äußeres Feld):

$$S = -\beta \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \vec{s}_j = -\beta \sum_x \sum_{\nu=0}^2 \cos(\phi_x - \phi_{x+\vec{\nu}}). \quad (6.1)$$

Es werden nur Wechselwirkungen zwischen den nächsten Nachbarn berücksichtigt. Die Stärke dieser Wechselwirkung ist durch die Kopplungskonstante  $\beta$ , bzw. durch die inverse Temperatur  $\beta = \frac{1}{k_b T} = \frac{1}{T}$  gegeben. Ist  $\beta$  positiv, sind parallel ausgerichtete Spins energetisch günstiger. Interpretiert man das System als eine Gruppe von Elementarmagneten, ist das Modell ferromagnetisch. Umgekehrt wird das System bei negativem  $\beta$  antiferromagnetisch. Im Folgenden wird nur der Fall  $\beta > 0$  betrachtet.

Zur Minimierung von Randeffekten werden in alle Richtungen periodische Randbedingungen verwendet. Als Anfangsbedingungen bieten sich zwei Möglichkeiten an. Einerseits die zufällige Verteilung aller Spins, ein sogenannter heißer Start, bei welchem die Energie des Systems zu Beginn hoch ist. Die andere Möglichkeit ist ein kalter Start, bei welchem zu Beginn alle Spins in die gleiche Richtung zeigen. Bei dieser Konfiguration ist die Energie des Systems minimal. In der Praxis zeigt sich, dass beide Möglichkeiten in etwa gleich schnell zu einem Gleichgewicht führen.

Das Modell kann um eine zeitliche Dimensionen auf 2+1 Dimensionen erweitert werden. Zur Einführung des chemischen Potentials werden Verbindungen in zeitlicher Richtungen mit  $e^{-i\mu}$ , bzw.  $e^{i\mu}$  multipliziert, sodass die Wirkung lautet

$$S = -\beta \sum_x \sum_{\nu=0}^2 \cos(\phi_x - \phi_{x+\vec{\nu}} - i\mu \delta_{\vec{\nu}0}) \quad (6.2)$$



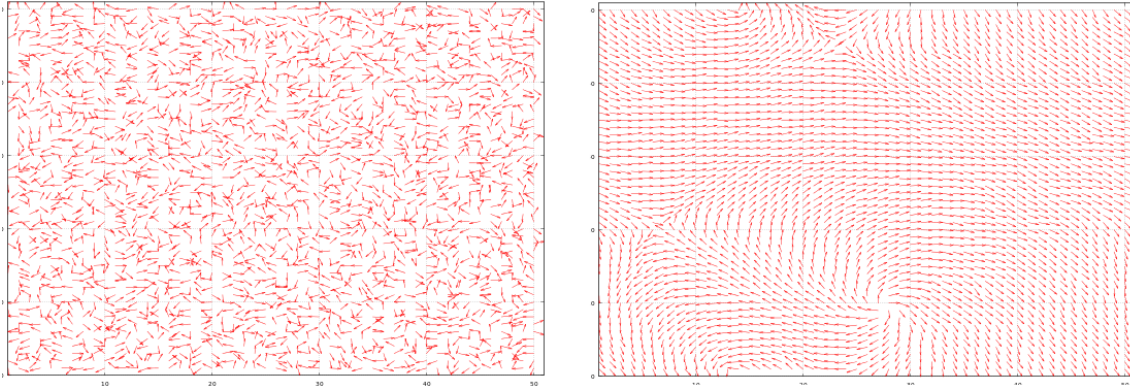


Abb. 6.1: Simulation des 2D-XY-Modell auf einem  $50^2$  Gitter mit Langevin-Dynamik. Zu sehen ist die ungeordnete (links) und die geordnete Phase (rechts).

Das XY-Modell durchläuft sowohl in 2 als auch in 3 Dimensionen einen Phasenübergang bei einem kritischen Wert  $\beta_c$ . Der Bereich  $\beta < \beta_c$  ist ungeordnet, die Korrelation zwischen den Spins fällt exponentiell ab. Im Bereich  $\beta > \beta_c$  wird die Korrelation zwischen den Spins stark und sie ordnen sich aneinander an (siehe Abb. 6.1), allerdings ohne spontane Magnetisierung zu zeigen. In dieser Phase folgt die Korrelation zwischen den Spins einem Potenzgesetz.

Durch thermische Fluktuationen einzelner Spins kommt es im XY Modell zu Bildung von stabilen topologischen Konfigurationen welche Vortizes genannt werden (siehe Abb. 6.2 (rechts)). Ein einzelner Vortex erhöht die Energie eines Systems der Größe  $L$  um  $E \propto \ln L$ . Vortex-Antivortex-Paare mit Abstand  $r$  beeinflussen dagegen nur die Spins ihrer nahen Umgebung, da sich ihre Wirkung für entfernte Spins aufhebt. Deswegen tragen sie nur mit einer Energie proportional zu  $\ln r$  bei. Aufgrund dessen ist in einem hinreichend großen System die Bildung einzelner Vortizes unmöglich.

Oberhalb der kritischen Temperatur kommt es zur Vortexkondensation. Dies zerstört die langreichweitige Ordnung des Systems. Die ist als Berezinskii-Kosterlitz-Thouless-Phasenübergang bekannt [38]. Dieser besitzt keine Diskontinuität und keinen Ordnungsparameter, ist also kein klassischer Phasenübergang erster oder zweiter Ordnung.

Es ist interessant, dieses Modell mithilfe der Langevin-Dynamik zu betrachten, da es, ähnlich wie in der QCD, aufgrund des chemischen Potentials zu einer komplexen Wirkung kommt. Zusätzlich zeigen sich hier trotz der Einfachheit des Modells einige typische Probleme von Langevin-Simulationen.

Eines dieser Probleme ist das Auftreten numerischer Instabilitäten bei der Implementierung. Diese treten durch die Diskretisierung der Langevin-Gleichung auf und können zu unbegrenzt großen Drifttermen führen. Die Verwendung einer adaptiven Schrittweite beseitigt das Auftreten von Instabilitäten, vorausgesetzt  $\bar{\epsilon}$  wird korrekt gewählt. Zur Veranschaulichung sind in Abb. 6.2 (rechts) Schrittweite und maximale Driftterme gegenübergestellt. Wie deutlich zu sehen ist, werden Ausschläge der Driftterme durch das Anpassen der Schrittweite abgefangen. Dagegen ist es ohne diese Korrekturen selbst bei  $\mu = 0$  kaum möglich, ein thermisches Gleichgewicht zu erreichen und Observablen zu

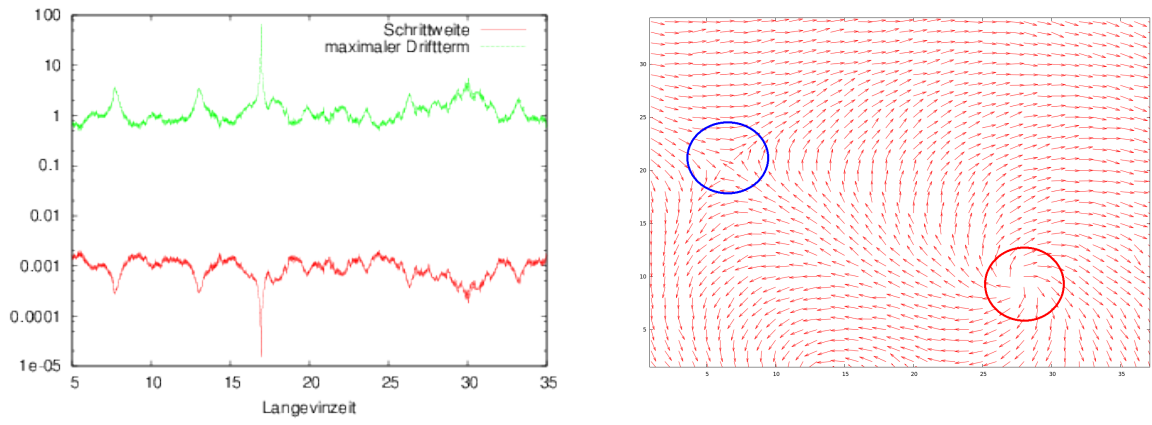


Abb. 6.2: Vergleich von Schrittweite und maximal auftretenden Drifttermen beim XY-Modell (links), ein Paar aus Vortex und Antivortex (rechts), jeweils auf einem  $50^2$  Gitter in der geordneten Phase.

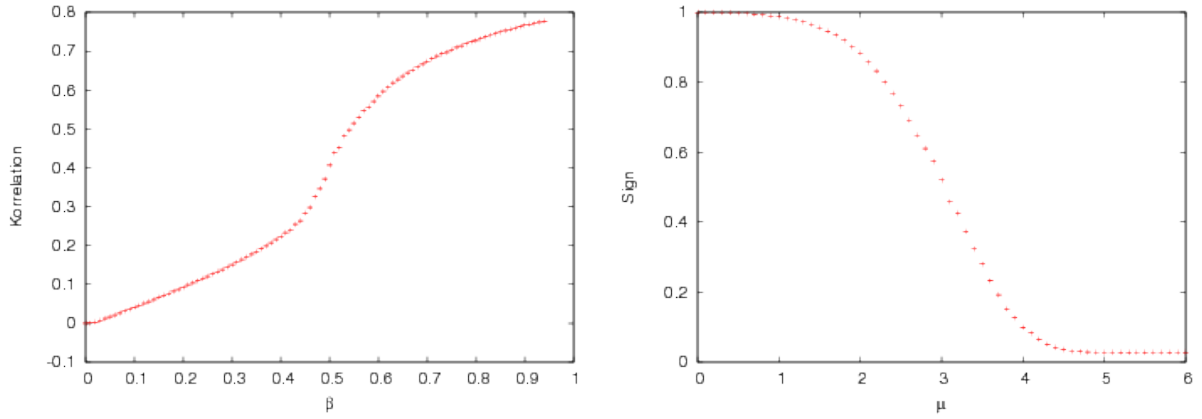


Abb. 6.3: Korrelation nächster Nachbarn in Abhängigkeit von  $\beta$  (links), Stärke des Vorzeichenproblems in Abhängigkeit vom chemischen Potential (rechts), auf einem  $50^2$  Gitter (links) und einem  $16^3$  Gitter (rechts)

messen, ohne das Instabilitäten auftreten.

## 6.2 Implementierung

Zur Simulation der Wirkung (6.1) müssen die Driftterme (5.16) berechnet werden. Diese sind [35]

$$K_x^R = -\beta \sum_{\nu} \left[ \sin(\phi_x^R - \phi_{x+\hat{\nu}}^R) \cosh(\phi_x^I - \phi_{x+\hat{\nu}}^I - \mu\delta_{\nu,0}) + \sin(\phi_x^R - \phi_{x-\hat{\nu}}^R) \cosh(\phi_x^I - \phi_{x-\hat{\nu}}^I + \mu\delta_{\nu,0}) \right] \quad (6.3)$$

$$K_x^I = -\beta \sum_{\nu} \left[ \cos(\phi_x^R - \phi_{x+\hat{\nu}}^R) \sinh(\phi_x^I - \phi_{x+\hat{\nu}}^I - \mu\delta_{\nu,0}) + \cos(\phi_x^R - \phi_{x-\hat{\nu}}^R) \sinh(\phi_x^I - \phi_{x-\hat{\nu}}^I + \mu\delta_{\nu,0}) \right] \quad (6.4)$$

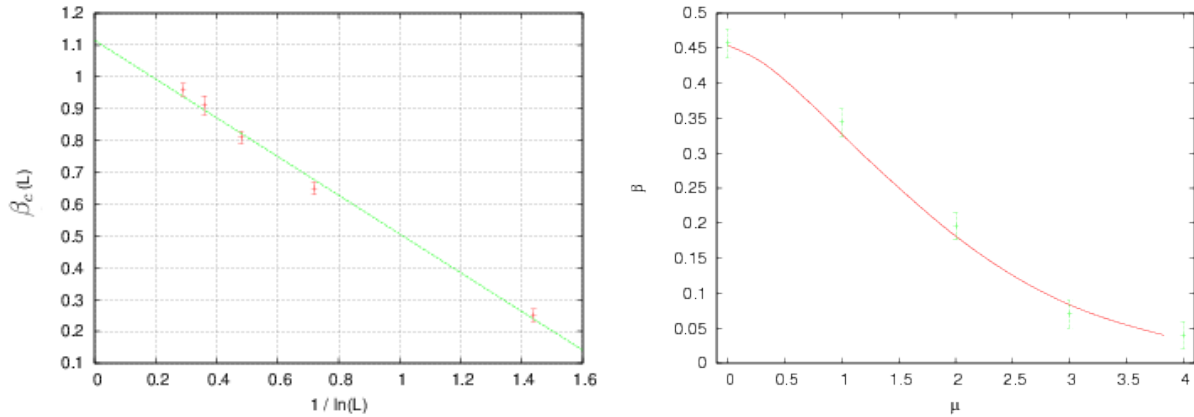


Abb. 6.4: Links: Extrapolation der kritischen Kopplung zum thermodynamischen Limes. Rechts: Phasendiagramm des 3D XY Modells, die geordnete Phase befindet sich über, die ungeordnete Phase unterhalb der Linie.

Aus dem einzelnen Freiheitsgrad des XY-Modells  $\phi_x$  werden durch die komplexe Erweiterung  $\phi_x \rightarrow \phi_x^R + i\phi_x^I$  zwei Freiheitsgrade. Mit (5.17) können nun für jeden Zeitschritt  $i$  die Felder aus den Feldern des vorherigen Zeitschritts  $i - 1$  bestimmt werden.

### 6.3 Ergebnisse für das 2D Modell

Um eine Abschätzung für die zur Messung einer Observable nötigen Zeitschritte zu erhalten, wurde zunächst die Autokorrelationszeit des Systems bestimmt. Die Autokorrelationszeit der Felder schwankt in Abhängigkeit von  $\beta$ , jedoch wurden keine Zeiten von über  $n = 100$  Zeitschritten bei einer Schrittweite von  $\bar{\epsilon} = 0.05$ , bzw. einer Langevin-Zeit von  $\theta = n\bar{\epsilon} = 5$  gefunden.

Wie lange das System braucht, um ein thermisches Gleichgewicht zu erreichen, lässt sich am zeitlichen Verlauf der mittleren Energie pro Spin beobachten. Erreicht diese ein stabiles Minimum, ist das System im Gleichgewicht. Dies dauert im Schnitt deutlich weniger als 1000 Zeitschritte. Zur Vermeidung systematischer Fehler wurden die Observablen über mindestens 5.000 Konfigurationen, also einer Langevinzeit von  $\theta > 50$ , gemessen.

Der Phasenübergang des 2D XY-Modells vollzieht sich bei  $T_c = 0.892$ , bzw.  $\beta_c = 1.121$  [39]. Um die Anwendbarkeit der Langevin-Dynamik zu testen, soll dies nachvollzogen werden.

Zur Bestimmung von  $\beta_c$  ist es nötig, den thermodynamischen Limes zu bilden. Dazu werden Simulationen bei verschiedenen Gittergrößen durchgeführt und angenommen, dass die Volumeneffekte proportional zu  $\frac{1}{\ln L}$  mit der Seitenlänge des Gitters  $L$  sind. Es wurden Simulationen bei  $L = 2, 4, 8, 16$  und  $32$  durchgeführt (siehe Abb. 6.4 (links)). Als Observable wurde die Korrelation zwischen Benachbarten Spins (siehe Abb. 6.3 (links)). Das Ergebnis ist  $\beta = 1.12 \pm 0.02$ , bzw.  $T_c = 0.89 \pm 0.02$  für ein unendlich großes Gitter, was mit den Ergebnissen aus [39] übereinstimmt.

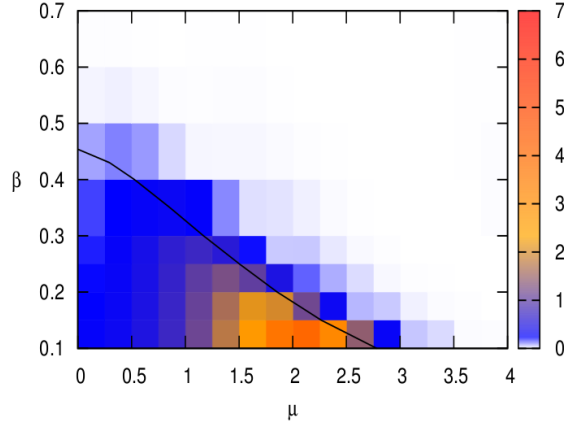


Abb. 6.5: Abweichung der Wirkungsichte  $S/V$  der Langevin-Simulation zum korrekten Ergebniss, entnommen aus [35].

## 6.4 Ergebnisse für das 3D Modell

Im 3D Modell wird eine zeitliche Dimension hinzugefügt, wodurch es möglich ist ein endliches chemische Potential zu berücksichtigen. Betrachtet man den Erwartungswert von  $e^{i\phi}$  wird deutlich, dass die Stärke des Vorzeichenproblems mit wachsendem chemischen Potential zunimmt und spätestens bei  $\mu = 3$  sehr stark ausgeprägt ist (siehe Abb. 6.3 (rechts)).

Es ist bekannt, dass das XY Modell in 3 Dimensionen bei  $\mu = 0$  und  $\beta_c = 0.45421$  einen Phasenübergang durchläuft (siehe Abb. 6.5). Mit wachsendem chemischen Potential wird  $\beta_c$  kleiner und verschwindet im Bereich  $\mu > 4$ . Die mit der Langevin-Simulation erzielten Ergebnisse sind in Abb. 6.4 (rechts) als Balken eingetragen. Die der Grenze zwischen geordneter und ungeordneter Phase repräsentierende Linie wurde mit den aus [40] stammenden Werten interpoliert. Die mithilfe der Langevin-Dynamik ermittelten Werte sind in grün dargestellt. Wie zu sehen ist, stimmen sie innerhalb der Fehlergrenzen mit den aus [40] entnommenen Werten überein.

## 6.5 Konvergenzkriterium

Um die Verlässlichkeit des Kriteriums (5.33) zu testen, soll es am XY-Modell angewendet werden. Dazu machen wir uns die Tatsache zunutze, dass die Langevin-Dynamik bei der Simulation des XY-Modells im Bereich kleiner Kopplungsstärke und kleinem chemischen Potentials falsche Ergebnisse liefert. Dies wurde bereits in [35] festgestellt, jedoch ohne das Kriterium auf das Modell anzuwenden. Die Stärke dieser Abweichung ist in Abb. 6.5 dargestellt.

Zunächst wurde das Kriterium auf die geordnete Phase angewendet, in denen die Ergebnisse korrekt sind. Hier ist die Kopplung mit  $\beta = 0.7$  stark. Zunächst wurde als Observable die Wirkung des Systems gewählt. Wie in Abb. 6.6 (oben links) zu sehen ist,

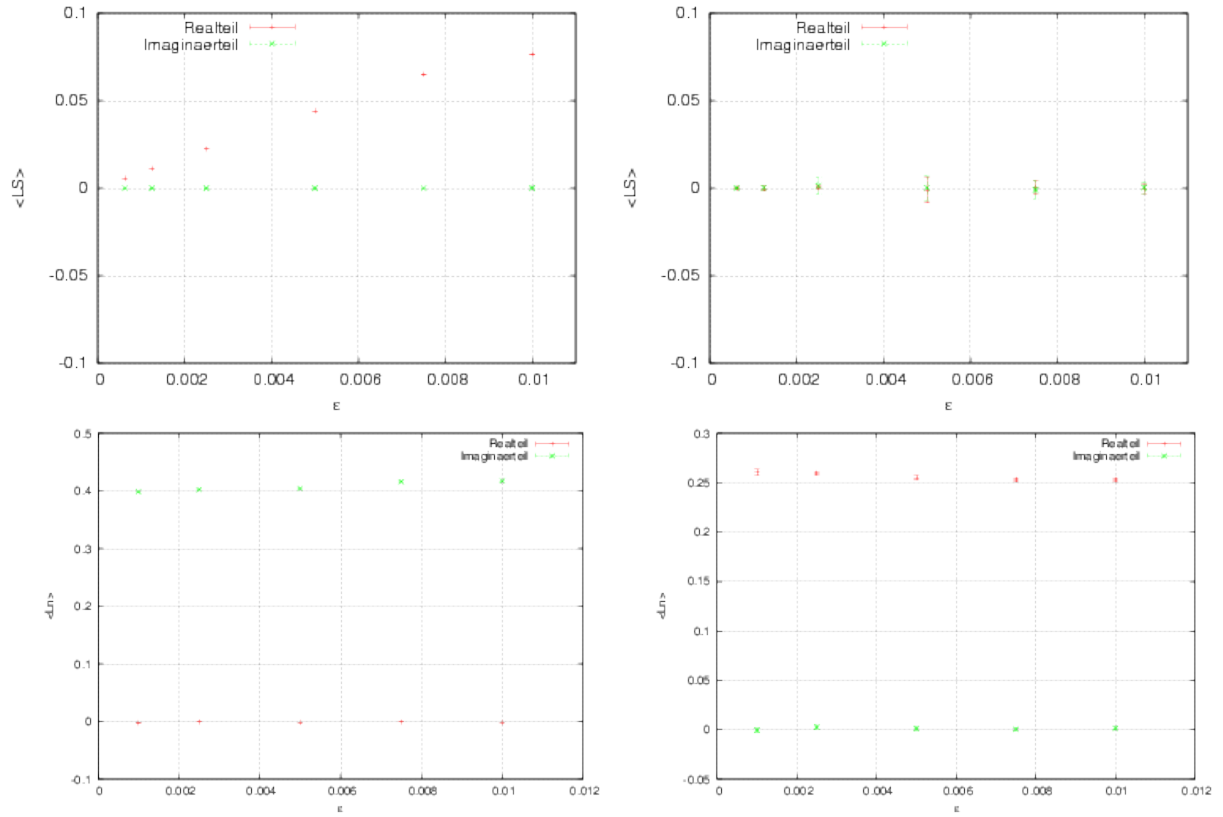


Abb. 6.6: Konvergenzkriterium in Abhängig der Schrittweite, Gittergröße  $8^3$ . Untersucht wurden die Observablen  $S$  (obere Reihe) und  $n$  (untere Reihe), in der geordneten Phase,  $\mu = 2$ ,  $\beta = 0.7$  (links) und in der ungeordneten Phase,  $\mu = 2$ ,  $\beta = 0.1$  (rechts).

geht der Realteil von  $\langle LS \rangle$  im Grenzfall  $\epsilon \rightarrow 0$  gegen null. Der Imaginärteil ist für alle Schrittweiten mit Null verträglich.

Im Fall schwacher Kopplung ergibt sich ein völlig anderes Bild (Abb. 6.6 (oben rechts)). Hier ist das Kriterium scheinbar unabhängig von der Schrittweite und stets nahe Null, schwankt jedoch erheblich stärker als in der geordneten Phase.

Betrachtet man dagegen als Observable die Dichte  $n = \frac{\partial \text{Log} Z}{\partial \mu}$  des Systems, ist das Ergebnis deutlich von Null verschieden. In der geordneten Phase (Abb. 6.6 (unten links)) ist der Realteil von  $\langle Ln \rangle$  für alle Schrittweiten mit Null verträglich, während der Imaginärteil deutlich von Null verschieden ist. In der ungeordneten Phase (Abb. 6.6 (unten rechts)) ist das Verhalten umgekehrt, hier ist der Realteil von Null verschieden und der Imaginärteil mit Null verträglich.

Das Kriterium zeigt die fehlende Konvergenz in der ungeordneten Phase damit zwar korrekt an, der Grund für den nichtverschwindenden Imaginärteil in der geordneten Phase ist jedoch unklar.

# 7 QCD bei endlicher Temperatur und endlicher Dichte

Nachdem die Funktionsweise der Langevin-Dynamik an einem einfachen Modell vorgestellt wurde, soll nun ein wesentlich interessanteres Modell untersucht werden. Bei diesem handelt es sich um eine aus der QCD hergeleitete effektive Theorie, mit der das Verhalten dichter Materie bei tiefen Temperaturen untersucht werden soll.

## 7.1 Theoretischer Hintergrund

Die numerische Untersuchung der QCD ist extrem rechenintensiv. Deswegen verwenden wir eine effektive Theorie, welche einerseits wesentlich kostengünstiger zu simulieren ist, andererseits aber möglichst viele Eigenschaften der vollen Theorie bewahrt.

Hier soll ein dreidimensionales  $SU(3)$ -Spinsystem, welches eine Näherung der QCD im Grenzfall großer Fermionenmassen darstellt, simuliert werden. Das Modell beruht sowohl auf einer Starkkopplungsentwicklung als auch auf einer *hopping expansion* [41, 42]. Dies führt zu einer dreidimensionalen effektiven Theorie. Einfachere Spinmodelle dieser Art wurden schon früh erfolgreich mithilfe der Langevin-Dynamik untersucht [31].

### 7.1.1 Starkkopplungsentwicklung

Mithilfe der Starkkopplungsentwicklung lässt sich eine effektive Theorie der Eichwirkung herleiten [24, 41]. Begonnen wird mit dem Eichanteil der euklidischen Wilson-Wirkung

$$Z = \int [dU_0][dU_i] \exp \left( \frac{\beta}{2N_c} \sum_p (\text{Sp}U_p(x) + \text{Sp}U_p^\dagger(x)) \right), \quad \beta = \frac{2N_c}{g^2}, \quad (7.1)$$

wobei  $U_i$  räumliche und  $U_0$  zeitliche Links sind. Die Kopplungskonstante der Gitterwirkung  $\beta$  wird klein, wenn die Kopplung der Kontinuums-Theorie groß wird. Daher stammt der Begriff Starkkopplungsentwicklung. Während Entwicklungen in der Kopplungskonstante im Kontinuum nur für den Grenzfall verschwindender Kopplungen gültig sind, beruht die Entwicklung auf dem Gitter auf einer unendlich starken Kopplung.

Um eine endliche Temperatur zu simulieren, werden periodische Randbedingung in zeitlicher Richtung gefordert. Die Randbedingungen in räumlicher Richtung werden ebenfalls periodisch gewählt.

Ziel der Entwicklung ist es, ein dreidimensionales Modell zu erhalten. Dies geschieht, indem als Freiheitsgrade Polyakov-Loops verwendet werden:

$$L_j \equiv \text{Sp}W_j \equiv \text{Sp} \prod_{\tau=1}^{N_\tau} U_0(\vec{x}_j, \tau) \quad (7.2)$$

Diese bestehen aus der Spur über einer Kette von Links in Zeitrichtung, welche sich einmal durch die komplette zeitliche Ausdehnung des Gitters erstrecken. Durch die Verwendung der Spur handelt es sich hierbei um eichinvariante Objekte.

Das Modell entsteht durch Integration über die räumlichen Links

$$Z = \int [dU_0] e^{-S_{\text{eff}}} \quad (7.3)$$

$$-S_{\text{eff}} = \ln \int [dU_i] \exp \left[ \frac{\beta}{2N_c} \sum_p (\text{Sp}U_p + \text{Sp}U_p^\dagger) \right] \equiv \lambda_1 S_1 + \lambda_2 S_2 + \dots$$

Die neuen Kopplungskonstanten sind Funktionen der ursprünglichen Parameter  $\lambda_i = \lambda_i(\beta, N_\tau)$ . Dadurch wird eine Reduktion vom vierdimensionalen zu einem dreidimensionalen Modell erreicht, denn die Polyakov-Loops enthalten nun alle Informationen über die Zeitabhängigkeit des Systems. Die Entwicklung der effektiven Wirkung erfolgt über eine sogenannte Charakter-Entwicklung

$$-S_{\text{eff}} = \ln \int [dU_i] \prod_p \left[ 1 + \sum_{r \neq 0} d_r a_r(\beta) \xi_r(U_p) \right] \quad (7.4)$$

Über eine Entwicklung nach Charakterfunktionen lässt sich die führende Ordnung der Zustandssumme berechnen

In führender Ordnung beschreibt die Wirkung Wechselwirkungen benachbarter Polyakov-Loops. Wechselwirkungen zwischen weiter entfernten Loops werden vernachlässigt. Jedoch besteht die Möglichkeit Wechselwirkungen zwischen Loops zu summieren, welche sich mehrmals über die zeitliche Ausdehnung des Gitters erstrecken. Deren Beitrag wird mit ansteigender Windungszahl<sup>1</sup> immer kleiner, die Reihe über alle Beiträge lässt sich zu einem Logarithmus aufsummieren

$$\sum_{\langle ij \rangle} (\lambda_1 (L_i L_j^\dagger + L_i^\dagger L_j) - \frac{\lambda_1^2}{2} (L_i^2 L_j^{\dagger 2} + L_i^{\dagger 2} L_j^2) + \dots) = \sum_{\langle ij \rangle} \ln(1 + \lambda_1 (L_i L_j^\dagger + L_i^\dagger L_j)). \quad (7.5)$$

Die Zustandssumme der mithilfe der Starkkopplungsentwicklung hergeleiteten Theorie lautet

$$Z(\theta, \phi) = \int \prod_i dL_i \prod_{\langle ij \rangle} (1 + 2\lambda_1 \text{Re} L_i L_j^\dagger) \quad (7.6)$$

<sup>1</sup>Diese gibt an, wie oft ein Polyakov-Loop sich durch die periodische zeitliche Dimension erstreckt.

In Abb. (7.2 (links)) ist zu sehen, welche Werte in der komplexen Ebene ein Polyakov-Loop in diesem Modell annehmen kann.

Eine Vereinfachung ergibt sich daraus, dass es möglich ist, alle Loops gleichzeitig zu diagonalisieren und durch 2 Winkel zu parametrisieren[31]. Der Polyakov Loop ist dann

$$L(\theta, \phi) = e^{i\theta} + e^{i\phi} + e^{-i(\phi_1+\phi_2)} \quad (7.7)$$

Somit existieren pro Gitterpunkt nur noch zwei Freiheitsgrade mit dem Wertebereich  $\theta, \phi \in [-\pi, \pi]$ . Der Wechsel zu Polyakov-Loops und deren Diagonalisieren erfordern allerdings die Einführung einer Ergänzung zur Wirkung durch das Haar-Maß.

$$V = \ln \left[ \sin^2 \frac{\theta_x - \phi_x}{2} \sin^2 \frac{2\theta_x + \phi_x}{2} \sin^2 \frac{\theta_x + 2\phi_x}{2} \right] \quad (7.8)$$

### 7.1.2 Hopping-Parameter-Entwicklung

Als nächstes wird die Theorie um einen Anteil zur Beschreibung von Fermionen erweitert. Dazu führt man eine Hopping-Parameter-Expansion durch [41]

$$S = N_f \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\kappa^l}{l} \text{Sp} H[U]^l, \quad (7.9)$$

mit der hopping Matrix

$$H[U]_{y,x} = \sum_{\nu=\pm 1}^{\nu=\pm 4} \delta_{y,x+\hat{\nu}} (1 + \gamma_\nu) U_\nu(x). \quad (7.10)$$

Die Variablen dieses Systems sind die SU(3) Matrizen  $U$ . Die Entwicklung basiert auf dem Parameter  $\kappa$ , welcher definiert ist als

$$\kappa = \frac{1}{2aM + 8}. \quad (7.11)$$

Die Näherung ist also gültig für große Quarkmassen  $M$ . Aufgrund der in der Hopping-Matrix vorkommenden Deltafunktionen geben nur geschlossene Wege einen Beitrag. Gleichzeitig liefert ein solcher Weg der Länge  $l$  einen Beitrag  $\kappa^l$ , sodass in führender Ordnung längere Wege vernachlässigt werden können. Wie bei der Eichwirkung werden wieder Polyakov-Loops als Freiheitsgrade verwendet.

Das chemische Potential wird wie üblich eingeführt, indem negative und positive Links mit  $e^{a\mu}$ , bzw.  $e^{-a\mu}$  multipliziert werden, wodurch eine Asymmetrie in der Zeitrichtung eingeführt wird. Dies begünstigt die Existenz von Fermionen, bzw. Antifermionen. In führender Ordnung ergibt sich die Wirkung aus sich einmal durch die zeitliche Dimension windende Polyakov-Loops.

$$S_{\text{eff}} = -[2N_f \sum_{\vec{x}} (hL(\vec{x}) + \bar{h}(\vec{x}))] \quad (7.12)$$



mit den Kopplungskonstanten

$$h = (2\kappa e^{a\mu})^{N_\tau}, \quad \bar{h} = (2\kappa e^{-a\mu})^{N_\tau}. \quad (7.13)$$

Zusätzlich ist es auch möglich alle sich mehrfach über die  $N_\tau$  Gitterpunkte der zeitlichen Dimension erstreckenden Loops zu berücksichtigen. Diese werden mit größerer Windungszahl unterdrückt und ergeben aufsummiert

$$S_{eff} = -\ln \left[ \prod_{\vec{x}} \det[(1 + hW_{\vec{x}})(1 + hW_{\vec{x}}^\dagger)]^{2N_f} \right] \quad (7.14)$$

### 7.1.3 Fermionenanteil zur Ordnung $\kappa^2$

Indem in der Entwicklung (7.9) Beiträgen in räumliche Richtung berücksichtigt werden, lassen sich  $\mathcal{O}(k^2)$ -Korrekturen zur Wirkung finden

$$\begin{aligned} S_{\text{eff}}(\mathcal{O}(k^2)) &= \sum_{\langle ij \rangle} (h_2 L_i L_j + \bar{h}_2 L_i^\dagger L_j^\dagger) \\ h_2 &= h_1^2 \frac{N_\tau \kappa^2}{N_c} \approx (2\kappa e^{a\mu})^{2N_\tau \kappa^2} \frac{N_\tau \kappa^2}{N_c} \\ \bar{h}_2 &= \bar{h}_1^2 \frac{N_\tau \kappa^2}{N_c} \approx (2\kappa e^{a\mu})^{-2N_\tau \kappa^2} \frac{N_\tau \kappa^2}{N_c} \end{aligned} \quad (7.15)$$

Bei kleinen  $\kappa$  (und nur für diese ist diese Entwicklung gültig) ist dieser Term klein gegenüber der führenden Ordnung. Wie bei der führenden Ordnung lässt sich dies wieder auf sich beliebig oft durch die zeitliche Dimension windende Loops verallgemeinern. So lässt sich die  $\mathcal{O}(k^2)$  Wirkung als Logarithmus schreiben:

$$S_{\text{eff}}(\mathcal{O}(k^2)) = 2N_f N_\tau \ln \left[ \prod_{\langle ij \rangle} 1 - \frac{k^2}{N_c} \text{Sp} \frac{hW_i}{1 + hW_i} \text{Sp} \frac{hW_j}{1 + hW_j} \right] \quad (7.16)$$

Weitere Beiträge zur Ordnung  $\mathcal{O}(k^2)$  lassen sich in die Kopplungskonstanten absorbieren

$$\begin{aligned} \beta &\rightarrow \beta + 48N_f \kappa^4 \\ h_1 &\rightarrow h_1 \left( 1 + 6N_\tau \kappa^2 \frac{u - u^{N_\tau}}{1 - u} + \dots \right). \end{aligned} \quad (7.17)$$

Insgesamt lautet die Zustandssumme für die effektive Theorie mit Eich- und Fermionenanteil

$$\begin{aligned} Z(\lambda, h_1, \mu) &= \int [dL] e^V \prod_{\langle ij \rangle} [(1 + 2\lambda \text{Re} L_i L_j^*) \\ &\cdot \prod_x \det \left[ (1 + h_1 W_{\vec{x}})(1 + \bar{h}_1 W_{\vec{x}}^\dagger) \right] \prod_{\langle ij \rangle} \left[ 1 - 2N_f N_\tau \frac{k^2}{N_c} \text{Sp} \frac{h_1 W_i}{1 + h_1 W_i} \text{Sp} \frac{h_1 W_j}{1 + h_1 W_j} \right]. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Dies ist das Modell, das im Folgenden untersucht werden soll. Es ist eine effektive Theorie der QCD bei endlicher Temperatur und Dichte mit Polyakov-Loops als Freiheitsgrade.

### 7.1.4 Zentrumssymmetrie

Das durch (7.18) beschriebene Modell ist wie zu Beginn gefordert invariant unter  $SU(3)$ -Eichtransformationen.

$$L \rightarrow L' = \text{Sp} \prod_{\tau=1}^{N_\tau} \Omega U_0 \Omega^{-1} = \text{Sp} \prod_{\tau=1}^{N_\tau} U_0. \quad (7.19)$$

Die Eichinvarianz ist durch die zyklische Natur der Spur gegeben.

Die ursprüngliche  $SU(3)$  Yang-Mills-Theorie besitzt noch eine weitere Symmetrie, die Zentrumssymmetrie. Unter dem Zentrum einer Symmetriegruppe versteht man jene Elemente, die mit allen anderen Elementen der Gruppe kommutieren. Im Fall der  $SU(3)$  sind dies [15]

$$G(SU(3)) = \{ \mathbb{1} \cdot e^{\frac{2}{3}i\pi n}, \quad n \in \mathbb{N} \} \quad (7.20)$$

Die ursprüngliche Wirkung ist invariant unter Zentrumstransformationen, dies folgt aus der Tatsache, dass die Elemente des Zentrums mit den Linkvariablen kommutieren, wodurch die Plaketten invariant sind. Für Polyakov-Loops ist dies jedoch nicht der Fall

$$L \rightarrow e^{i\frac{2\pi}{3}n} \cdot L. \quad (7.21)$$

Das bedeutet, dass die Zentrumssymmetrie der ursprünglichen Theorie gebrochen wird, sobald  $\langle L \rangle \neq 0$  ist. Daraus ergibt sich die Existenz von zwei Phasen mit  $\langle L \rangle$  als Ordnungsparameter.

Der Anstieg des Erwartungswerts des Polyakov-Loop hängt mit dem Übergang von Confinement zu Deconfinement zusammen. Dies lässt sich daran sehen, dass der Erwartungswert der Polyakov-Loops mit der freien Energie eines einzelnen Quarks in Verbindung gebracht werden kann

$$\langle L \rangle \propto e^{-\beta F_q}. \quad (7.22)$$

Solange  $\langle L \rangle = 0$  ist, muss  $F_q$  unendlich groß sein, was bedeutet, dass die Existenz eines einzelnen Quarks unmöglich ist. Erst bei einem endlichen Erwartungswert für  $L$  wird  $F_q$  ebenfalls endlich, wodurch Deconfinement möglich ist. Somit ist der Erwartungswert der Polyakov-Loop der Ordnungsparameter des Phasenübergangs zwischen Confinement und Deconfinement in der reinen Eichtheorie. In der vollen Theorie dagegen gilt dies nicht mehr, hier wird die Symmetrie durch die Anwesenheit dynamischer Quarks gebrochen [43].

### 7.1.5 Analytische Lösung

Die erste Ordnung des Fermionenanteils beschreibt ein Modell ohne Wechselwirkung zwischen den nächsten Nachbarn. Solch ein System lässt sich analytisch lösen, da die Freiheitsgrade der Gitterpunkte einzeln integriert werden können [44]. Dies bietet die

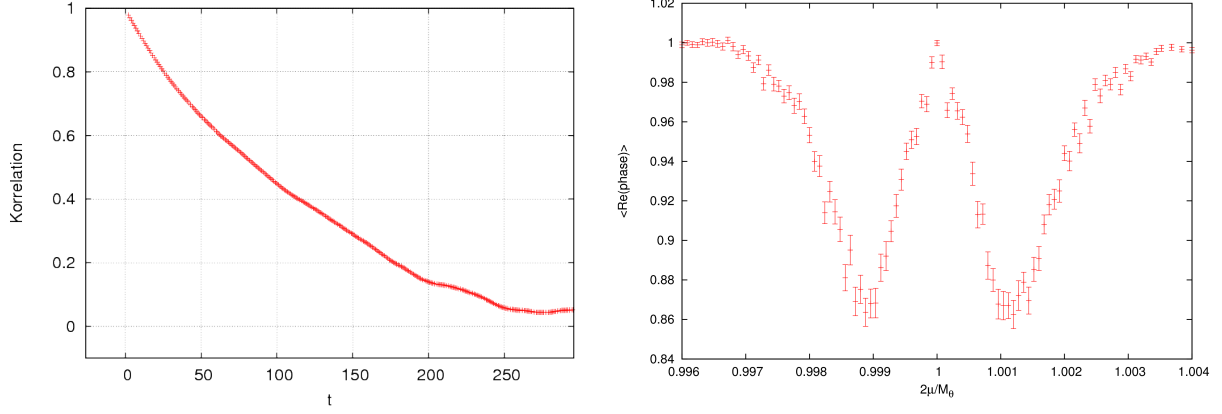


Abb. 7.1: Links : Beispiel für den Verlauf der Autokorrelation der Observable  $L$ . Rechts:  $\cos(\phi)$  als Maß für die Stärke des Vorzeichenproblems in Abhängigkeit von  $\mu$

Möglichkeit, die Ergebnisse der Langevin-Simulation mit exakten Werten zu vergleichen. Nehmen wir der Einfachheit halber  $N_f = N_\tau = 1$  an, ist die Zustandssumme

$$Z = \int [dW] \prod_{\vec{x}} \det(1 + hW_{\vec{x}})^2 \det(1 + \bar{h}W_{\vec{x}}^\dagger)^2. \quad (7.23)$$

Mithilfe von  $\det(1 + hW) = 1 + hL + h^2L^\dagger + h^3$ , bzw.  $\det(1 + \bar{h}W^\dagger) = 1 + \bar{h}L^\dagger + \bar{h}^2L + \bar{h}^3$  lässt sich dies schreiben als

$$Z = \left[ \int [dW] (1 + hL + h^2L^\dagger + h^3)^2 (1 + \bar{h}L^\dagger + \bar{h}^2L + \bar{h}^3)^2 \right]^V = Z_1^V \quad (7.24)$$

Durch Integration ergibt sich

$$Z_1 = [1 + 4h^3 + h^6] + 2h[2 + 3h^3]\bar{h} + 2h^2[5 + 3h^3]\bar{h}^2 + 2[2 + 10h^3 + 2h^6]\bar{h}^3 + 2h[3 + 5h^3]\bar{h}^4 + 2h^2[3 + 2h^3]\bar{h}^5 + [1 + 4h^3 + h^6]^3\bar{h}^6. \quad (7.25)$$

Wir sind an dem Bereich hohen chemischen Potentials und tiefer Temperatur interessiert. Dort gilt  $e^{-a\mu N_\tau} \rightarrow 0$ , deshalb können Terme  $\sim \bar{h}$  vernachlässigt werden. Übrig bleibt nur

$$Z = [1 + 4h^3 + h^6]^V. \quad (7.26)$$

Diese Zustandssumme beschreibt ein ideales Gas statischer Baryonen. Daraus lässt sich leicht die Fermionendichte berechnen

$$n = \frac{T}{V} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z = \frac{1}{a^3} \frac{12h^3 + 6h^6}{1 + 4h^3 + h^6}. \quad (7.27)$$

Für  $\mu \rightarrow \infty$  geht  $n \rightarrow 6 = 2N_c$ . Das Modell zeigt also Saturierung bei hohem chemischen Potential, eine Folge der Diskretisierung und der Wahl der Wirkung [45].

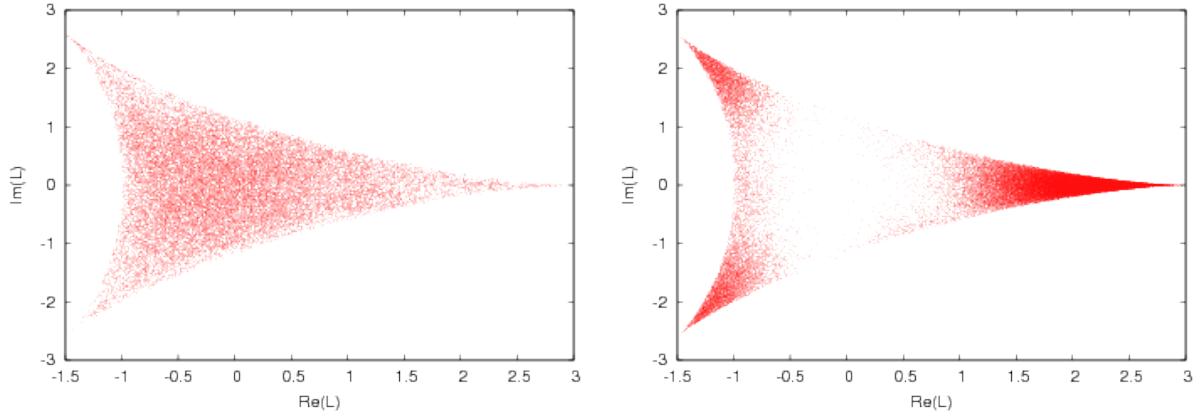


Abb. 7.2: Domäne der Polyakov-Loops in der komplexen Ebene bei  $\lambda < \lambda_c$  (links) und  $\lambda > \lambda_c$  (rechts) auf einem  $10^3$  Gitter mit reiner Eichwirkung

Der Erwartungswert der Polyakov-Loops ist

$$\begin{aligned}
 \langle L \rangle &= \frac{1}{Z} \left[ \int [dW] (1 + hL + h^2 L^* + h^3)^2 \right]^{V-1} \\
 &\quad \cdot \left[ \int [dW] (1 + hL + h^2 L^* + h^3)^2 L \right] \\
 &= \frac{3h^2 + 2h^5}{(1 + 4h^3 + h^6)^V}
 \end{aligned} \tag{7.28}$$

Diese analytischen Lösungen für die Erwartungswerte der Dichte und der Polyakov-Loops können mit den Simulationsergebnissen überprüft werden.

### 7.1.6 Implementierung

Das Modell wurde auf 3D Gittern mit einer Größe von bis zu  $10^3$  simuliert, wobei periodische Randbedingungen verwendet wurden. Die Felder jedes neuen Zeitschrittes wurden wieder mit (5.17) bestimmt, zur Vermeidung von numerischen Instabilitäten wurde die Schrittweite mit (5.19) bestimmt. Die einzelnen Driffterme sind in Anhang A aufgeführt. Eine typische Simulation auf einem mittelgroßen  $5^3$  Gitter ließ sich mit einem durchschnittlichen<sup>2</sup> PC in wenigen Stunden durchführen.

### 7.1.7 Physikalische Skala

Um den aus numerischen Simulationen erzielten Ergebnissen eine physikalische Bedeutung zuzuordnen, ist es nötig, diese auf die Variablen der ursprünglichen Theorie zu übertragen und festzulegen, bei welchen physikalischen Parametern die Theorie simuliert wird. So hängt die Temperatur des Systems mit dem Gitterabstand  $a$  und der Ausdehnung der zeitlichen Dimension  $N_t$  zusammen,  $T = \frac{1}{aN_t}$ . Der Gitterabstand  $a$

<sup>2</sup>Intel Core 2 Duo CPU E8400 @ 3.00GHz

hängt wiederum mit der Kopplungskonstante der ursprünglichen Wirkung  $\beta$  zusammen. Die Kopplung der effektiven Theorie wird jedoch durch den Parameter  $\lambda$  bestimmt, um daraus Rückschlüsse auf die ursprüngliche vierdimensionale Theorie zu ziehen, ist die Kenntnis der Funktion  $\lambda_1(\beta, N_\tau)$  nötig. Diese ist für  $N_\tau > 4$  [47]

$$\lambda_1(u, N_\tau) = u^{N_\tau} \exp[N_\tau(4u^4 + 12u^5 - 14u^6 - 36u^7 + \frac{295}{2}u^8 + \frac{1851}{10}u^9 + \frac{1055797}{5120}u^{10})] \quad u = \frac{\beta}{18} + \dots \quad (7.29)$$

Durch Kenntnis der Funktion  $a(\beta)$  lässt sich daraus der Gitterabstand berechnen. Für  $5.7 < \beta < 6.92$  lautet diese [46]

$$\ln \frac{a}{r_0} = -1.6804 - 17331(\beta - 6) + 0.7849(\beta - 6)^2 - 0.4428(\beta - 6)^3 \quad (7.30)$$

mit  $r_0 = \frac{1}{2}\text{fm}$ . Durch Festlegen von  $\lambda$  und  $N_\tau$  lässt sich also eine Temperatur fixieren. Der Parameter  $\kappa$  hängt mit der Quarkmasse zusammen (siehe 7.11). Zur Festlegung einer physikalischen Skala lässt sich die Masse des leichtesten Mesons und des leichtesten Baryons, also des Pions und des Protons, in Abhängigkeit von  $\beta$  und  $\kappa$  ausdrücken [41]:

$$\begin{aligned} aM_M &= -2 \ln(2\kappa) - 6\kappa^2 - 24\kappa^2 \frac{u}{1-u} + \dots \\ aM_B &= -3 \ln(2\kappa) - 18\kappa^2 \frac{u}{1-u} + \dots \end{aligned} \quad (7.31)$$

Das Quark chemische Potential  $\mu$  lässt sich in Einheiten einer solchen Masse ausdrücken. Da das Pion das leichteste Meson ist, ist ein Übergang zu einer endlichen Dichte erst ab  $\frac{\mu}{m_B} \approx 1$  zu erwarten.

Zusätzlich lassen sich so berechnete Dichten, welche man aus der Simulation in Gittereinheiten erhält, mit der Kenntnis des Gitterabstandes in physikalische Einheiten umrechnen.

Im Folgenden wird zur Festlegung einer physikalischen Skala ein konstantes Verhältnis zwischen Pionenmasse und Temperatur festgelegt,  $\frac{M_\pi}{T} = aM_\pi N_\tau = c$ . Auf diese Weise lassen sich Simulationen bei konstanter Temperatur durchführen. Durch Variation von  $\kappa$ ,  $\beta$  und  $N_\tau$  lassen sich zusätzlich unterschiedliche Quarkmassen simulieren.

## 7.2 Vergleich mit bestehenden Lösungen

### 7.2.1 Vergleich mit der analytischen Lösung

Um die Tauglichkeit der Langevinsimulation zu überprüfen, wurde die entsprechende Wirkung auf einem  $4^3$  Gitter und einer Schrittweite von  $\epsilon = 10^{-3}$  simuliert.

Die Autokorrelationszeit dieses Systems wurde zu  $162.6 \pm 0.7$  bei einer Schrittweite von  $\bar{\epsilon} = 0.001$  bestimmt, was bei den Messungen entsprechend berücksichtigt wurde.

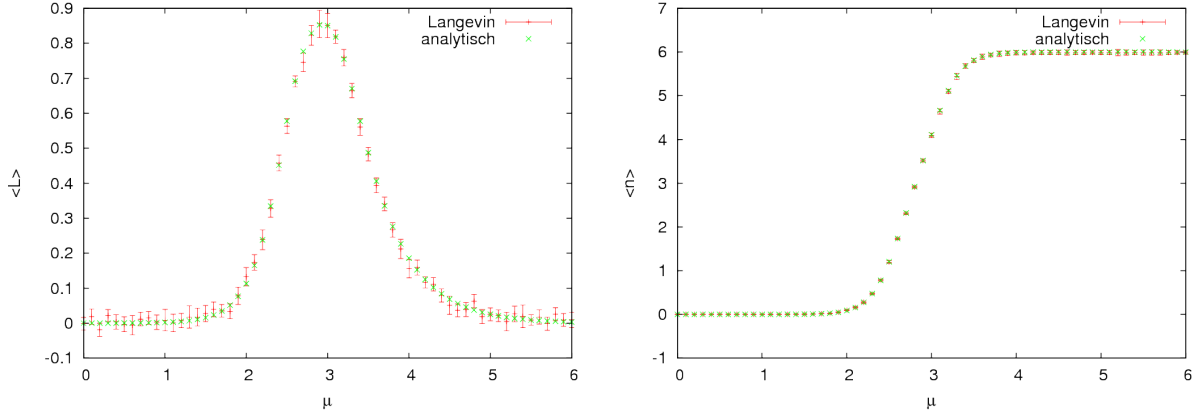


Abb. 7.3: Vergleich des Erwartungswertes der Polyakov-Loops (links) und der Dichte (rechts) in Abhängigkeit vom chemischen Potential mit den analytischen Ergebnissen,  $N_\tau = N_f = 1$ ,  $k = 0.03$

Um die Stärke des Vorzeichenproblems zu beurteilen, untersuchen wir den Erwartungswert des Phasenfaktors  $\cos(\phi)$ . Dieser besitzt im Bereich des kritischen chemischen Potentials zwei ausgeprägte Minima. Der Grund dafür ist, dass bei  $\frac{\mu_q}{M_B} = 1$  die Kopplung  $h \approx 1$  wird. Dadurch wird die Wirkung reell. Bei noch höherem chemischen Potential wird der Phasenfaktor wieder 1 und das Vorzeichenproblem verschwindet.

Wie in Abb. 7.3 zu sehen reproduziert die Simulation innerhalb des Fehlers die analytisch gewonnenen Daten. Die Polyakov-Loops  $L = \text{Sp } W = e^{i\phi_1} + e^{i\phi_2} + e^{-i(\phi_1+\phi_2)}$  verschwinden im Grenzfall niedrigen und hohen chemischen Potentials. Gleichzeitig mit dem Ansteigen der Polyakov-Loops steigt die Dichte des Systems bis zu einer Sättigung von 6 Fermionen pro Gitterpunkt. Dies ist bei Berücksichtigung von 3 Farben und 2 Spins die maximal mögliche Zahl ohne Verletzung des Pauli-Prinzips auf einem Gitter mit  $a > 0$  und in Anwesenheit von baryonischer Materie. Dabei ist keine Volumenabhängigkeit des Übergangs festzustellen, was bei einem Modell ohne Wechselwirkung zu erwarten ist. Das Ansteigen von  $\langle \text{Sp } W \rangle$  signalisiert das sogenannte *screening* (*engl.* Abschirmung) der Quarks.

Um ein Verständnis dafür zu erhalten, wie die Dynamik eines solchen Modells aussieht kann man die sich ergebenden Driftterme in Abhängigkeit von den Freiheitsgraden des Systems  $\theta$  und  $\phi$  grafisch darstellen. Die so entstehende Ebene bildet den Phasenraum eines Gitterpunktes ab. Aufgrund der fehlenden Wechselwirkung ist die Dynamik der Freiheitsgrade einzig durch die Position in der Ebene bestimmt.

In Abb. 7.4 sind die Driftterme als Pfeile abgebildet. Sie bestimmen die Bewegung des Systems durch den Phasenraum<sup>3</sup>. Statistisch gesehen wird sich das System häufig an stabilen Fixpunkten des Phasenraumes, von denen keine Driftterme wegführen, aufhalten. Durch den Beitrag des Rauschterms besteht aber immer auch eine Wahrscheinlichkeit, dass es sich entgegengesetzt der Pfeile bewegt. Dieser verhindert auch, dass sich das System längere Zeit an instabilen Fixpunkten aufhält.

<sup>3</sup>Wie die Wirkung ist dieser invariant unter  $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$  und  $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$ .

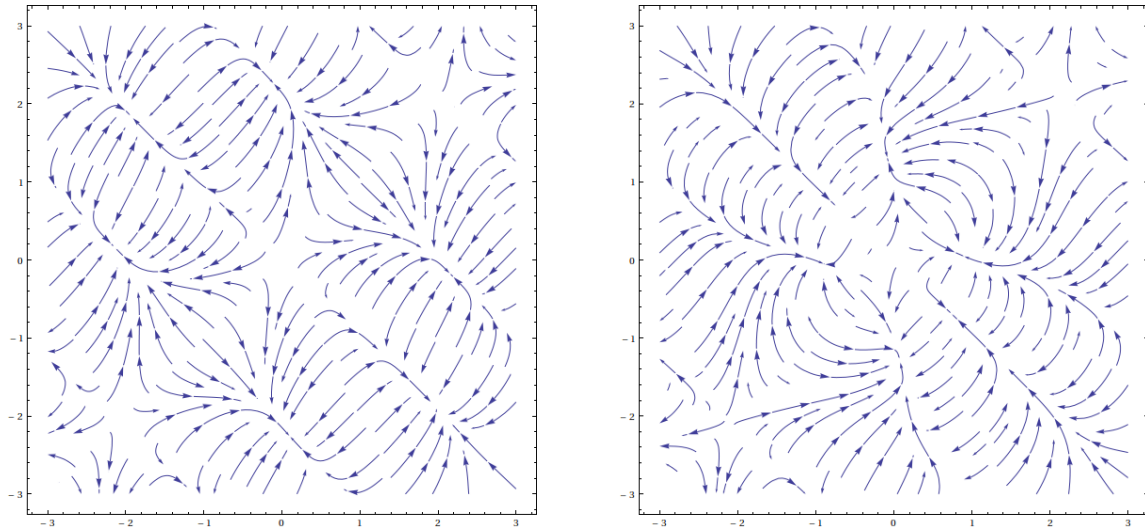


Abb. 7.4: Driftermdiagramm für  $h = 0.02$  (links) und  $h = 0.2$  (rechts). Die Fixpunkte und damit der Erwartungswert der Polyakov-Loops verschieben sich durch die Änderung von  $h$

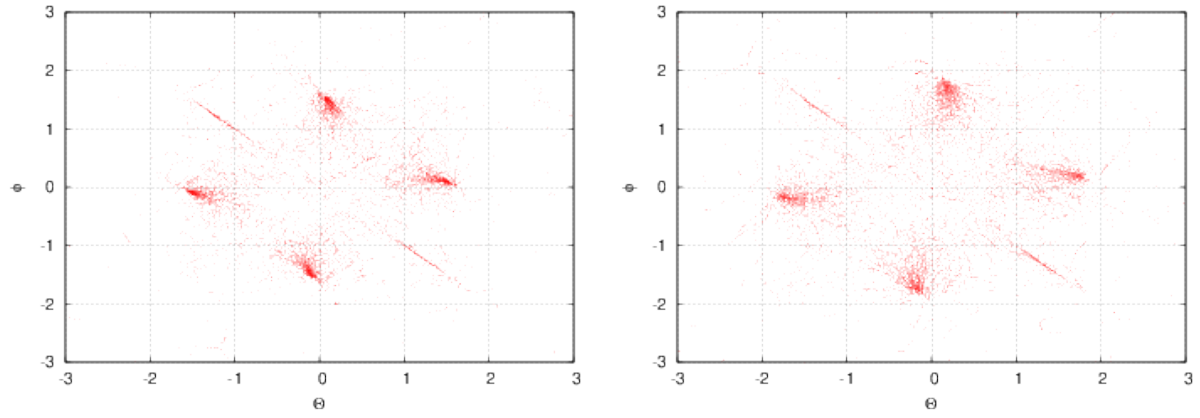


Abb. 7.5: Phasenraumverteilung für  $h = 0.02$  (links) und  $h = 0.2$  (rechts) auf einem  $10^3$  Gitter

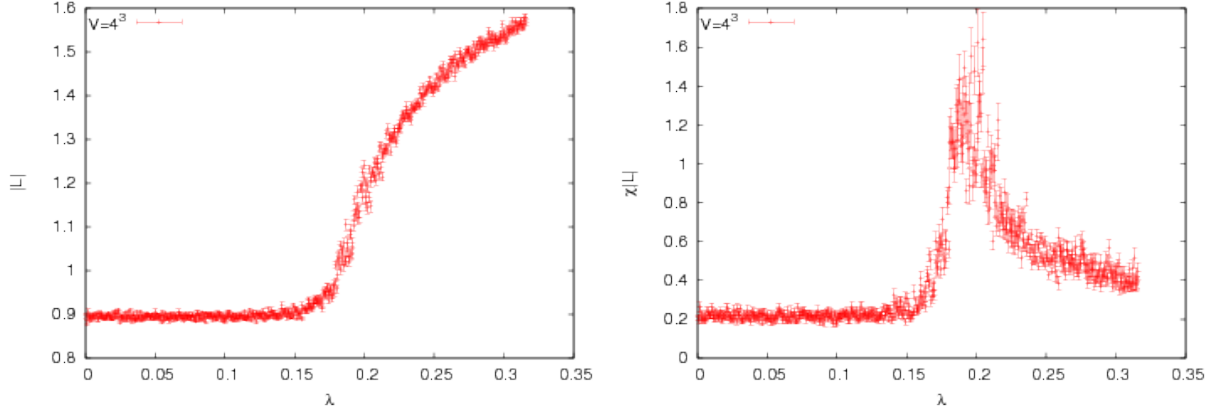


Abb. 7.6: Erwartungswert von  $|\text{Tr } W|$  in Abhängigkeit von  $\lambda$  (links), Erwartungswert der Suszeptibilität von  $|\text{Tr } W|$  in Abhängigkeit von  $\lambda$  (rechts). In beiden Fällen ist  $V = 4^3$

In Abb. 7.5 sind zum Vergleich die Verteilungen der Freiheitsgrade aus den Simulationen auf einem  $10^3$  Gitter dargestellt. Wie man sieht, ergibt sich eine mit den Drifftermen in Abb. 7.4 übereinstimmende Verteilung. Die Simulation zeigt also das erwartete Verhalten.

## 7.2.2 Deconfinement in der reinen Eichtheorie

Der Fall  $\mu = h = 0$  beschreibt ein rein bosonisches System, zudem ist die Wirkung (7.18) und damit auch die komplette Dynamik des Modells reell. Dieses Modell wurde bereits erfolgreich mit Monte-Carlo-Methoden simuliert [47].

Im Bereich  $\beta < \beta_c$  ist das System ungeordnet und der Erwartungswert der Polyakov-Loops ist gleichmäßig verteilt, so dass  $\langle \text{Sp } W \rangle = 0$  gilt (siehe Abb. 7.2 (links)). Im Bereich  $\beta > \beta_c$  geht das System in eine geordnete Phase über in der die Polyakov-Loops einen endlichen Erwartungswert annehmen,  $\langle \text{Sp } W \rangle \neq 0$  (siehe Abb. 7.2 (rechts)). In Abb. 7.6 (links) ist der plötzliche Anstieg des Erwartungswertes von  $|\text{Sp } W|$  bei  $\beta \approx 0.19$  zu sehen. Gleichzeitig erreicht dort die Suszeptibilität  $\chi(|\text{Sp } W|) = \langle (|\text{Sp } W| - \langle |\text{Tr } W| \rangle)^2 \rangle$  ein Maximum (siehe Abb. 7.6 (rechts)). In [47] wurde ein Wert von

$$\lambda_c = 0.187885(30) \quad (7.32)$$

bestimmt. Dazu wurde der Wert  $\lambda_c$  bei verschiedenen Gittergrößen ermittelt und mittels der Funktion

$$\lambda_c(N_s) = \lambda_c + bN_s^{-1/\nu} \quad (7.33)$$

mit  $\nu = 1/3$  zum thermodynamischen Limes ( $N_s \rightarrow \infty$ ) extrapoliert. Zum Vergleich wurden Langevin-Simulationen mit den Gittergrößen  $N_s = 4, 6, 8$  durchgeführt. Das Ergebnis

$$\lambda_c = 0.1891(4) \quad (7.34)$$



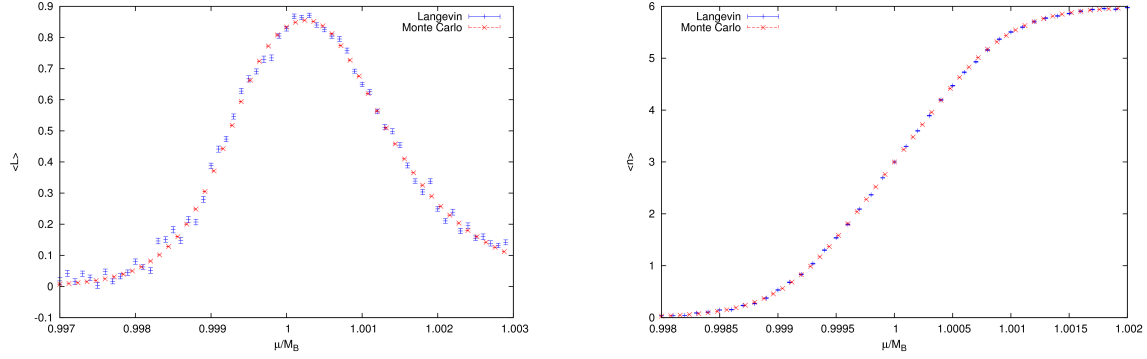


Abb. 7.7: Vergleich zwischen Monte-Carlo- und Langevin-Daten, zu sehen sind  $\langle \text{Tr } W \rangle$  (links) und  $\langle n \rangle$  (rechts),  $V = 3^3$ ,  $k = 0.001724$ ,  $N_\tau = 176$

stimmt mit dem Ergebnis aus [47] überein.

### 7.2.3 Monte-Carlo-Simulationen der vollen Wirkung

Wie in 7.1 (rechts) zu sehen, ist das Vorzeichenproblem bei diesem Modell im Vergleich zur vollen QCD nur mäßig ausgeprägt<sup>4</sup>. Deswegen ist es zumindest auf kleinen Gittern möglich es mit Monte-Carlo-Methoden zu simulieren [44]. Dabei wird ein Metropolis Algorithmus verwendet. Jedoch ist die Langevin-Dynamik insbesondere bei größeren Gittern weit überlegen, da sie wesentlich schneller ist. Dagegen sind Monte-Carlo-Simulationen dieses Systems auf Gittern, die größer als  $4^3$  sind, mit großem rechnerischen Aufwand verbunden. Gerade bei der Simulation leichterer Fermionen ist jedoch die Verwendung großer Gitter nötig. Trotzdem bieten die Monte-Carlo-Daten eine weitere Möglichkeit, die Richtigkeit der mit der Langevin-Dynamik gewonnenen Ergebnisse zu überprüfen.

In Abb. 7.7 sind die Erwartungswerte für die Polyakov-Loops und die Dichte aus Monte Carlo und Langevin-Simulationen aufgetragen. Verwendet wurde für beide Simulationen ein  $3^3$  Gitter. Es konnten keine Abweichungen zwischen den beiden Methoden festgestellt werden.

### 7.2.4 Konvergenzkriterium

Wie beim XY-Model soll auch hier das Konvergenzkriterium (5.33) angewendet werden, um die Richtigkeit der Ergebnisse zu verifizieren. Als Parameter wurden für den in dieser Arbeit untersuchten Bereich typische Werte gewählt. Diese sind  $k = 0.00008866$ ,  $N_\tau = 58$ ,  $\beta = 5.7$  und  $\mu = 8.55 = 0.99m_q$ . Für die untersuchten Schrittweiten  $\epsilon = 0.001$ ,  $0.00075$  und  $0.0005$  konnte kein von Null abweichendes Ergebnis festgestellt werden, sodass das Konvergenzkriterium  $\langle L\mathcal{O} \rangle = 0$  für die beiden relevanten Observablen  $\text{Tr } W$  und  $\text{Tr } W^{-1}$  erfüllt ist.

<sup>4</sup>Zur Stärke des Vorzeichenproblems in den verschiedenen Bereichen des QCD Phasendiagramms siehe z.B. [48]

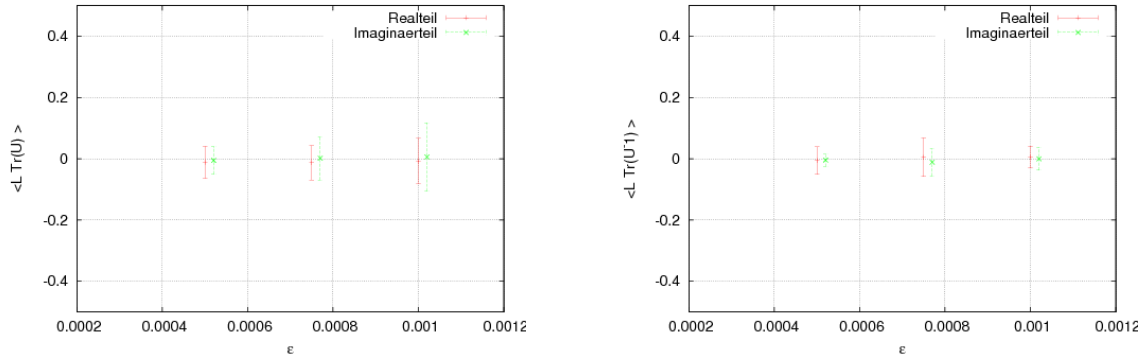


Abb. 7.8: Konvergenzkriterium für die Observable  $\text{Tr}(W)$  (links) und für  $\text{Tr}(W^{-1})$  (rechts), Gittergröße  $V = 10^3$

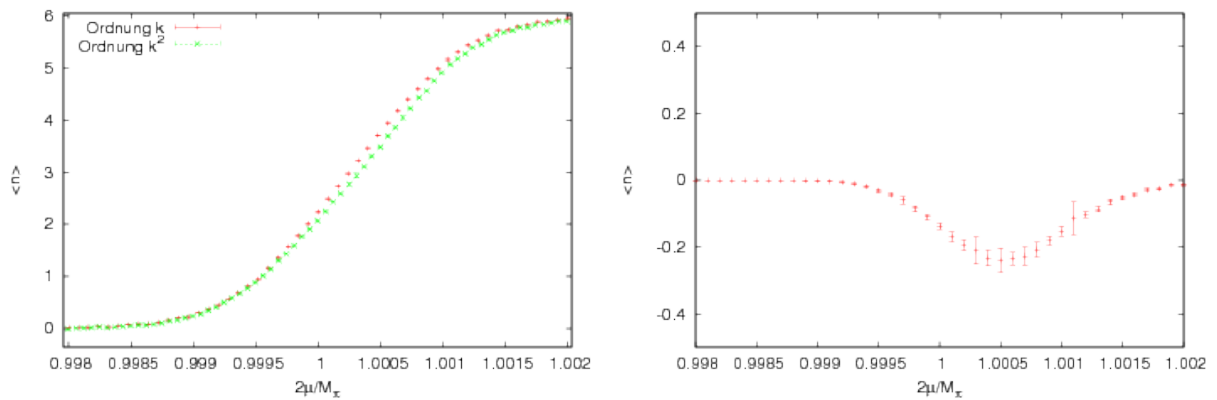


Abb. 7.9: Vergleich der  $\mathcal{O}(k)$  und der  $\mathcal{O}(k^2)$  Wirkung bei  $\kappa = 0.009098$  und  $N_\tau = 250$  (links). Differenz der beiden Erwartungswerte (rechts)

## 7.2.5 Fazit

Es wurden Vergleiche zwischen den aus Langevin-Simulationen gewonnenen Daten mit analytischen Ergebnissen und Daten aus Monte-Carlo-Simulationen verglichen. In keinem Fall konnte eine signifikante Abweichung festgestellt werden. Ebenso ist das in [35] aufgestellte Konvergenzkriterium erfüllt. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass die Langevin-Dynamik das vorliegende Modell fehlerfrei simuliert und daher auch in Bereichen, in denen keine Vergleichsdaten vorliegen, zuverlässig ist.

## 7.3 Ergebnisse

### 7.3.1 Simulation bei tiefen Temperaturen

Als Nächstes soll eine Simulation bei realistischen physikalischen Parametern und mit der vollen Wirkung mit den Korrekturen bis zur Ordnung  $\mathcal{O}(k^2)$  durchgeführt werden.

Dabei ist besonders der Bereich der tiefen Temperaturen und hohen chemischen Potentials interessant, da dieser einerseits wenig verstanden ist und andererseits gut mit der Langevin-Dynamik simuliert werden kann.

Um eine Temperatur von  $T = 10\text{MeV}$  festzulegen wird mit einem zunächst beliebigen Wert für  $\beta$  begonnen, z.B.  $\beta = 6.1$ . Aus diesem ergibt sich dann  $u = \frac{\beta}{18} + \dots = 0.4290$  sowie durch (7.30) ein Gitterabstand von  $a = 0.07891$ . Dadurch ist über  $T = \frac{1}{aN_\tau}$  der Wert  $N_\tau = 250$  festgelegt. Für das Verhältnis  $\frac{m_\pi}{T}$  wird ein festes Verhältnis gefordert, z.B.  $\frac{m_\pi}{T} = c = 2000$ . Dann lässt sich über den Zusammenhang zwischen  $\kappa$  und der Pionenmasse (7.31) ein Wert für  $\kappa$  festlegen. Die Eichkopplung  $\lambda$  ergibt sich aus (7.29).

Da die Kopplungskonstante aufgrund  $\lambda \approx u^{N_\tau} e^{4N_\tau u^4} \approx 10^{-78}$  extrem klein ist kann  $\lambda = 0$  gesetzt werden. Diese Parameter entsprechen einer Pionenmasse von  $M_\pi = 4.00556 \text{ MeV}$ . Um nur physikalische Einheiten zu verwenden, wird ab jetzt das chemische Potential immer in Einheiten der Pionenmasse angegeben.

Das System zeigt bei diesem hohen  $N_\tau$ -Wert. bzw. bei diesen niedrigen Temperaturen, einen sehr steilen Übergang vom Vakuum zur Saturierung. Der in Abb. 7.9 gezeigte Ausschnitt entspricht einem Bereich von  $a\mu = 3.997$  bis  $a\mu = 4.014$ , was verglichen mit dem  $N_\tau = 1$ -Fall (siehe Abb. 7.3) einen sehr schnellen Übergang bedeutet.

Ebenfalls in Abb. 7.9 ist zu sehen, dass es durch den Beitrag der  $\mathcal{O}(k^2)$ -Wirkung zu einem verzögerten Anstieg des Erwartungswertes  $\langle n \rangle$  kommt, da diese einen negativen Beitrag zur Dichte liefert. Für  $\frac{2\mu}{M_\pi} \gg 1$  verschwindet dieser Beitrag und das System saturiert wieder bei 6 Quarks pro Gitterpunkt.

### 7.3.2 Kontinuumsliches

Um die Abhängigkeit der Ergebnisse vom Gitterabstand zu überprüfen und zum Kontinuum zu extrapolieren, ist es nötig, Simulationen bei unterschiedlichen Gitterabständen durchzuführen. Dies geschieht, indem  $\beta$  variiert wird, während das Verhältnis  $\frac{m_\pi}{T}$  konstant gehalten wird. Da Formel (7.30) im Bereich  $5.7 < \beta < 6.1$  gültig, ist lässt sich somit der Bereich  $0.07891 \text{ fm} < a < 0.17016 \text{ fm}$  abdecken. Die so gewonnenen Ergebnisse können dann nach  $a \rightarrow 0$  extrapoliert werden. Dies geschieht unter der Annahme, dass die durch endlichen Gitterabstand hervorgerufenen Fehler in führender Ordnung linear in  $a$  sind und Korrekturen zu höherer Ordnung in  $a$  beinhalten.

Die aus Simulationen gewonnen Dichte enthält jedoch den Gitterabstand  $a$ , da die Seitenlänge des Gitters und damit auch das Volumen in Einheiten von  $a$  gegeben sind. Deswegen ist  $\langle n \rangle_{\text{Gitter}} = \frac{\langle n \rangle}{a^3}$ , wodurch die Dichte für  $a \rightarrow 0$  gegen Unendlich gehen würde. Deswegen muss die zu untersuchende Observable dimensionslos sein, also nicht von  $a$  abhängen. Dies kann bei der Dichte z.B. durch  $\mathcal{O} = \frac{n}{\mu^3}$  oder  $\mathcal{O} = \frac{n}{(T)^3} = nN_\tau$  erreicht werden. Für eine solche Observable sollte daher als Abhängigkeit von  $a$  gelten

$$\frac{\langle n \rangle_{\text{Gitter}}}{(a\mu)^3} \stackrel{a \rightarrow 0}{=} \frac{\langle n \rangle_{\text{phys}}}{\mu^3} + Ba + Ca^2 + \dots, \quad (7.35)$$

wobei es sich bei B und C um unbekannte Konstanten handelt. Interessant ist nur der Wert  $\langle \frac{n_{\text{phys}}}{\mu^3} \rangle$ , er stellt die Dichte im Limes  $a \rightarrow 0$  dar.

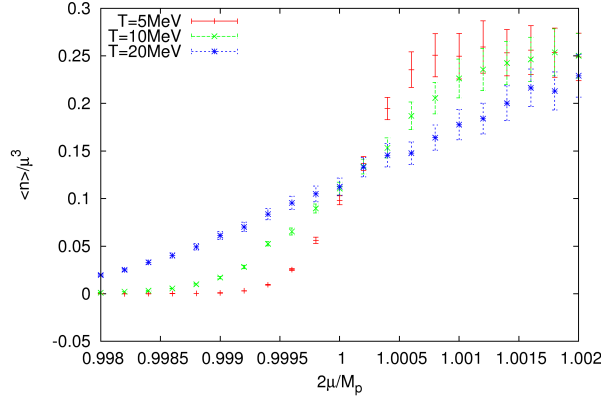


Abb. 7.10: Resultat der  $a \rightarrow 0$  Extrapolation

Um  $\langle n \rangle_{phys}$  zu bestimmen, wurden neun unterschiedliche Gitterabstände von  $a = 0.07891 fm$  bis  $0.17016 fm$  auf einem  $6^3$  Gitter simuliert (siehe Anhang A2). Nun stehen für jede der drei Temperaturen an jedem Wert für  $\mu$  Ergebnisse für neun verschiedene Gitterabstände zur Verfügung (ebenfalls Anhang A2). Diese wurden dann mit Formel (7.35) nach  $a = 0$  extrapoliert. Als Ergebnis erhält man die Dichte des Systems in Abhängigkeit vom chemischen Potential im thermodynamischen Limes (siehe Abb. 7.10). Wie zu sehen ist, wird der Phasenübergang mit sinkender Temperatur steiler und die Dichte vor dem Übergang wird immer geringer.

### 7.3.3 Silver Blaze

Es wird allgemein angenommen, dass die Observablen eines fermionisches System bei  $T = 0$  und endlichem chemischen Potential unabhängig vom chemischen Potential sind, solange dieses unterhalb eines kritischen Wertes,  $\mu_c = m_N/3 - E_B$ , liegt. Dabei ist  $m_N$  die Nukleonenmasse und  $E_B$  die Bindungsenergie der Quarks des Nukleons. Unterhalb dieses Werts sind alle Observablen unabhängig von  $\mu$ . Erst ab dem kritischen Wert  $\mu_c$  kommt es zu einem Übergang vom Vakuum zu einem Zustand endlicher Fermionendichte. Überraschend ist dies, da das chemische Potential über den Dirac-Operator explizit in die Zustandssumme eingeht:

$$\det(\not{D} + m) \rightarrow \det(\not{D} + m + \mu\gamma^0) \quad . \quad (7.36)$$

Dieses Phänomen wird *Silver-Blaze* genannt. Durch die Einführung eines endlichen chemischen Potentials wird die Fermionendeterminante komplex und wechselt bei der Integration über verschiedene Eichkonfigurationen in rascher Folge das Vorzeichen. Die Tatsache, dass die Zustandssumme trotz  $\mu > 0$  unabhängig von  $\mu$  ist solange  $\mu < \mu_c$  gilt, muss daher durch die exakte Aufhebung zwischen Konfigurationen mit positivem und solchen mit negativem Beitrag zustande kommen. Hier wird klar, dass das Silver-Blaze-Phänomen eng mit dem Vorzeichen Problem verknüpft ist.

In 7.10 ist zu sehen, dass das simulierte Modell ein Silver-Blaze-Verhalten zeigt. Unterhalb des kritischen chemischen Potentials geht die Dichte im Grenzfall  $T \rightarrow 0$  gegen

Null. Erst wenn das chemische Potential etwa 99.9% des kritischen Wertes erreicht hat, kommt es zu einem Anstieg der Dichte. Somit ist das System trotz endlichen chemischen Potentials über einen weiten Bereich unabhängig von  $\mu$ .

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

Das Hauptthema dieser Arbeit ist die numerische Analyse physikalischer Modelle mithilfe der stochastischen Quantisierung. Nach einer Einführung in die QCD in Kapitel 2 wurde deren Formulierung auf dem Gitter in Kapitel 3 diskutiert. In Kapitel 4 wurden die gängigsten Methoden zur Behandlung numerischer Simulationen sowie deren Nachteile vorgestellt. Das Augenmerk lag hier vor allem bei den Schwierigkeiten der Simulation von Systemen mit endlichem chemischen Potential. Zusätzlich werden einige der in dieser Arbeit verwendete Methoden eingeführt.

In Kapitel 5 wird die Langevin-Dynamik eingeführt, welche eine bisher wenig verwendete Alternative zu den konventionellen Monte-Carlo-Simulationen darstellt. Es wurden die Schwierigkeiten, welche in den 80er Jahren zum Verwerfen dieser Technik führten sowie kürzlich entwickelte Lösungsmöglichkeiten beschrieben.

Kapitel 6 befasst sich mit der Analyse des XY-Modells, welche zwar bereits gut verstanden ist, aber gerade deswegen einen guten Prüfstein für die Langevin-Dynamik darstellt. Die Ergebnisse stimmen dabei sowohl mit den mit anderen Methoden gewonnenen Ergebnissen als auch mit früheren Behandlungen dieses Modells mithilfe der Langevin-Dynamik überein.

In Kapitel 7 schließlich wurde die Langevin-Dynamik an einem neuen Modell angewendet, einem effektiven Modell zur Simulation der QCD bei endlichen Temperaturen und endlicher Dichte. Die Methode konnte erfolgreich implementiert werden. Es konnten alle mit Monte-Carlo-Methoden erzielten Ergebnisse nachvollzogen und der Übergang vom Vakuum zum Bereich endlicher Dichte simuliert werden. Die verwendete Methode zeigte sich dabei insbesondere den Monte-Carlo-Implementierungen als überlegen. Diese Herangehensweise ist somit als Erfolg zu werten. Daher erscheint es aussichtsreich diesen Ansatz weiter zu verfolgen. Wünschenswert ist jedoch auch ein besseres theoretisches Verständnis der Grenzen und Anwendbarkeit der Langevin-Dynamik.

# A Implementierung

Durch die komplexe Erweiterung besitzt das Modell 4 Freiheitsgrade pro Gitterpunkt, nämlich  $\theta = \theta^R + i\theta^I$  und  $\phi = \phi^R + i\phi^I$ . Die Driftterme ergeben sich aus den Real-, bzw. Imaginärteilen der Ableitungen der Wirkung nach den Freiheitsgraden

$$K_{\theta^R} = -\text{Re} \frac{\delta S}{\delta \theta} \Big|_{\theta \rightarrow \theta^R + i\theta^I} \quad K_{\theta^I} = -\text{Im} \frac{\delta S}{\delta \theta} \Big|_{\theta \rightarrow \theta^R + i\theta^I} \quad (\text{A.1})$$

$$K_{\phi^R} = -\text{Re} \frac{\delta S}{\delta \phi} \Big|_{\phi \rightarrow \phi^R + i\phi^I} \quad K_{\phi^I} = -\text{Im} \frac{\delta S}{\delta \phi} \Big|_{\phi \rightarrow \phi^R + i\phi^I} .$$

Die Wirkung teilt sich in Beiträge für den Bosonen-, Harnmaß- und den Fermionenanteil auf,  $S = S_B + S_H + S_F$ . Die Driftterme können deswegen für die Implementierung ebenfalls aufgespalten werden, zusätzlich zerfällt der Fermionenanteil der Driftterme in zwei Terme,  $K = K_B + K_H + K_{F_1} + K_{F_2}$ . Dabei erfordert  $F_1$  nur eine Summierung über alle Gitterpunkte während  $F_2$  zusätzlich eine Summation über die nächsten Nachbarn enthält.

## A.1 Driftterme

### A.1.1 Bosonenanteil

Zur Berechnung des Anteils  $K_B$  ist an jedem Gitterpunkt eine Summation über die nächsten Nachbarn erforderlich

$$K_{\theta_x}^B = \frac{A}{C} \quad (\text{A.2})$$

$$A = \prod_{\nu=1,2,3} [4\lambda \sin(\theta_x + \frac{1}{2}\phi_x) (\cos(\frac{1}{2}\phi_x + \theta_{x+\hat{\nu}}) + \cos(\frac{1}{2}\phi_x + \phi_{x+\hat{\nu}}) + \cos(\frac{1}{2}(\phi_x - 2(\theta_{x+\hat{\nu}} + \phi_{x+\hat{\nu}}))))] \quad (\text{A.3})$$

$$C = \prod_{\nu} [1 + 2\lambda (\cos(\theta_x - \theta_{x+\hat{\nu}}) + \cos(\phi_x - \theta_{x+\hat{\nu}}) + \cos(\theta_x + \phi_x + \theta_{x+\hat{\nu}}) + 2(\cos(\theta_x + \phi_x - \frac{1}{2}\theta_{x+\hat{\nu}}) + \cos(\theta_x + \frac{1}{2}\theta_{x+\hat{\nu}}) + \cos(\phi_x + \frac{1}{2}\theta_{x+\hat{\nu}}) \cos(\frac{1}{2}\theta_{x+\hat{\nu}}\phi_{x+\hat{\nu}})))] \quad (\text{A.4})$$

$$K_{\phi_x}^B = \frac{B}{C} \quad (\text{A.5})$$

$$B = \prod_{\nu} [4\lambda \sin(\frac{1}{2}\theta_x + \phi_x) (\cos(\frac{1}{2}\theta_x + \theta_{x+\hat{\nu}}) + \cos(\frac{1}{2}\theta_x + \theta_{x+\hat{\nu}}) + \cos(\frac{1}{2}(\theta_x - 2(\theta_{x+\hat{\nu}} + \phi_{x+\hat{\nu}}))))] \quad (\text{A.6})$$

### A.1.2 Harmaaßanteil

Der Harmaaßanteil muss wegen der Einführung der Polyakov-Loops als Freiheitsgrade sowie deren Diagonalisierung eingeführt werden, er lautet:

$$K_{\theta_x}^H = \tan^{-1} \left[ \frac{\theta_x - \phi_x}{2} \right] + 2 \tan^{-1} \left[ \theta_x + \frac{1}{2}\phi_x \right] + \tan^{-1} \left[ \frac{1}{2}\theta_x + \phi_x \right] \quad (\text{A.7})$$

$$K_{\phi_x}^H = -\tan^{-1} \left[ \frac{\theta_x - \phi_x}{2} \right] + \tan^{-1} \left[ \theta_x + \frac{1}{2}\phi_x \right] + 2 \tan^{-1} \left[ \frac{1}{2}\theta_x + \phi_x \right] \quad (\text{A.8})$$

### A.1.3 Fermionenanteil $\mathcal{O}(\mathbf{k})$

Es werden Fermionendriftterme erster und zweiter Ordnung benötigt. In erster Ordnung sind dies:

$$K_{\theta_x}^{F_1} = \prod_{\nu} \frac{-8N_f e^{i(2\theta_x + \phi_x)} h (2h \cos(\theta_x + \frac{1}{2}\phi_x) + (1 + h^2) \cos(\frac{1}{2}(\phi_x + 2ia\mu N_{\tau}))) \sin(\theta_x + \frac{1}{2}\phi_x)}{(e^{i\theta_x} + h)(1 + e^{i(\theta_x + \phi_x)} h)(e^{i(\theta_x + \phi_x)} + h)(1 + e^{i\theta_x})} \quad (\text{A.9})$$

$$K_{\phi_x}^{F_1} = \prod_{\nu} \frac{-8N_f e^{i(2\theta_x + \phi_x)} h (2h \cos(\frac{1}{2}\theta_x + \phi_x) + (1 + h^2) \cos(\frac{1}{2}(\theta_x + 2ia\mu N_{\tau}))) \sin(\frac{1}{2}\theta_x + \phi_x)}{(e^{i\theta_x} + h)(1 + e^{i(\theta_x + \phi_x)} h)(e^{i(\theta_x + \phi_x)} + h)(1 + e^{i\theta_x})} \quad (\text{A.10})$$

### A.1.4 Fermionenanteil $\mathcal{O}(k^2)$

Die zweite Ordnung erfordert eine Summation über die nächsten Nachbarn:

$$K_{\theta_x}^{F_2} = \frac{2ih\kappa^2 N_f N_{\tau} (1 - u) e^{i\theta_x} (-1 + e^{i(2\theta_x + \phi_x)}) (e^{i\phi} - h^2) \text{Tr} \left[ \frac{L_{x+\hat{\nu}}}{1+hL_{x+\hat{\nu}}} \right]}{3(e^{i(\theta+\phi)} + h)^2 (1 + e^{i\theta} h)^2 (1 - \frac{1}{3} h\kappa^2 \text{Tr} \left[ \frac{L_x}{1+hL_x} \right] \text{Tr} \left[ \frac{L_{x+\hat{\nu}}}{1+hL_{x+\hat{\nu}}} \right])} \quad (\text{A.11})$$

$$K_{\phi_x}^{F_2} = \frac{2ih\kappa^2 N_f N_{\tau} (1 - u) e^{i\phi_x} (-1 + e^{i(\theta_x + 2\phi_x)}) (e^{i\theta} - h^2) \text{Tr} \left[ \frac{L_{x+\hat{\nu}}}{1+hL_{x+\hat{\nu}}} \right]}{3(e^{i(\theta+\phi)} + h)^2 (1 + e^{i\theta} h)^2 (1 - \frac{1}{3} h\kappa^2 \text{Tr} \left[ \frac{L_x}{1+hL_x} \right] \text{Tr} \left[ \frac{L_{x+\hat{\nu}}}{1+hL_{x+\hat{\nu}}} \right])} \quad (\text{A.12})$$



## A.2 Kontinuumsextrapolation

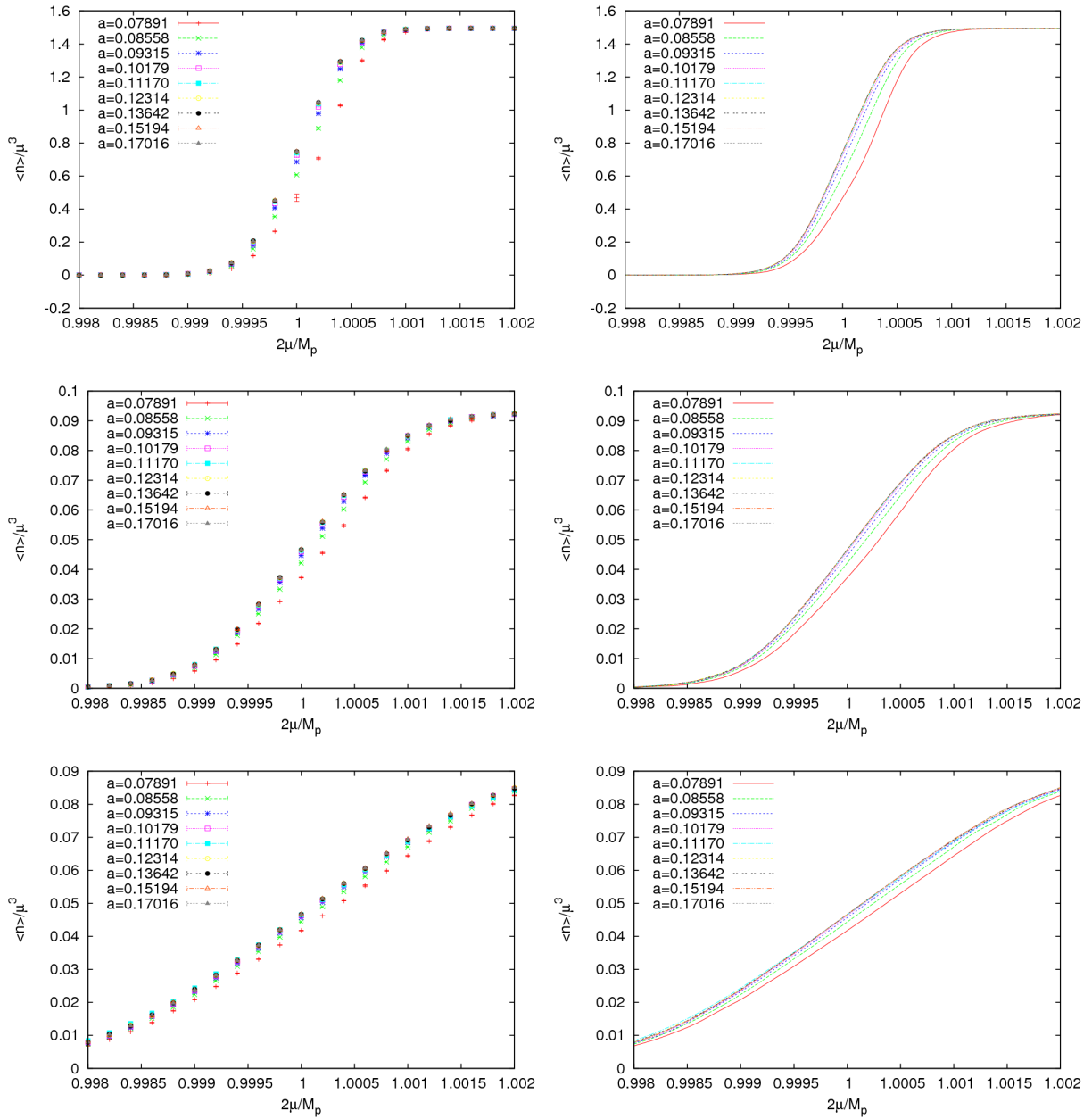


Abb. A.1: Übergang zwischen Vakuum und Saturierung bei  $T = 5$  MeV (oben),  $T = 10$  MeV (mitte) und  $T = 20$  MeV (unten), jeweils als einzelne Datenpunkte (links) und mit kubischen Splines interpoliert (rechts). Jedes Bild enthält den Verlauf für verschiedene Gitterabstände von  $a = 0.07891$  fm bis 0.17016 fm.

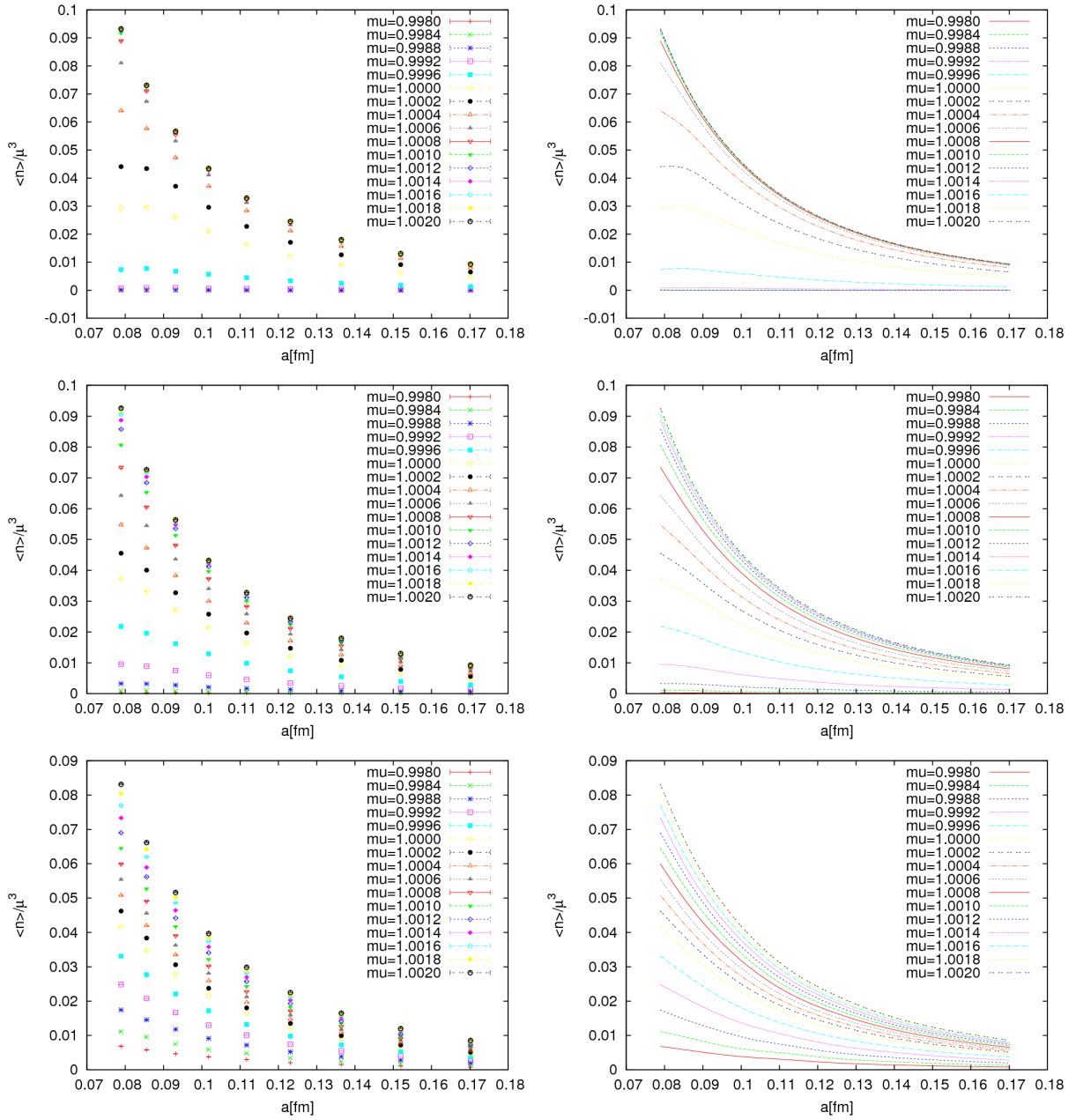


Abb. A.2: Jede Kurve repräsentiert den Erwartungswert  $\frac{\langle n \rangle}{\mu^3}$  für einen bestimmten Wert von  $\mu$  in Abhängigkeit von der Gitterkonstante  $a$ . So kann  $\frac{\langle n \rangle}{\mu^3}$  nach  $a = 0$  extrapoliert werden. Die Temperaturen sind wieder  $T = 5$  MeV (oben),  $T = 10$  MeV (mitte) und  $T = 20$  MeV (unten).

# Literaturverzeichnis

- [1] J. Huston. “QCD: Experimental Review”. In: *arXiv:1110.3284v1 [hep-ph]* (2011).
- [2] H. Yukawa. “On the Interaction of Elementary Particles”. In: *Proc.Phys.Math.Soc.Jap.* 17 (1935).
- [3] M. Gell-Mann. “The Eightfold Way: A Theory of Strong Interaction Symmetry”. In: DOI 10.2172/4008239 (1961).
- [4] M. Gell-Mann. “A schematic model of baryons and mesons”. In: *Phys. Lett.* 8 214 (1964).
- [5] O. W. Greenberg. “Discovery of the Color Degree of Freedom in Particle Physics: a Personal Perspective”. In: *arXiv:0803.0992v1 [physics.hist-ph]* (2008).
- [6] J. Greensite. “The Confinement Problem in Lattice Gauge Theory”. In: *arXiv:hep-lat/0301023v2* (2008).
- [7] J. Greensite. “The Confinement Problem in Lattice Gauge Theory”. In: *arXiv:hep-lat/0301023v2* (2003).
- [8] D. J. Gross. “Twenty Five Years of Asymptotic Freedom”. In: *arXiv:hep-th/9809060v1* (1998).
- [9] S. Bethke. “Experimental Tests of Asymptotic Freedom”. In: *arXiv:hep-ex/0606035v2* (2006).
- [10] M. E. Peskin und D. V. Schroeder. *An Introduction to Quantum Field Theory*. Westview Press, 1995.
- [11] C. Gattringer und C. Lang. *Quantum Chromodynamics on the Lattice*. Springer, 2010.
- [12] T. DeGrand und C. DeTar. *Lattice Methods for Quantum Chromodynamics*. World Scientific, 2006.
- [13] CBM collaboration. *The CBM Experiment Introduction*. abgerufen am 26.6.2012.
- [14] M. Stephanov. “QCD phase diagram: an overview”. In: *PoS LAT2006:024,2006* (2006).
- [15] O. Philipsen. “Lattice QCD at non-zero temperature and baryon density”. In: *arXiv:1009.4089v1 [hep-lat]* (2009).
- [16] M. Alford. “Color superconductivity in ultra-dense quark matter”. In: *PoS(LAT2006)001* (2006).
- [17] J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schrieffer. “Theory of Superconductivity”. In: *Phys. Rev.* 108, 1175–1204 (1957).

- [18] K. G. Wilson. “Confinement of Quarks”. In: *Phys. Rev. D* 10, 2445-2459 (1974).
- [19] H.B. Nielsen und M. Ninomiya. “A no-go theorem for regularizing chiral fermions”. In: *Phys. Lett. B* 105: 219. (1981).
- [20] K. Binder und D. W. Heermann. *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Springer, 2010.
- [21] M.F.L. Golterman. “How good is the quenched approximation of QCD?” In: *arXiv:hep-lat/9405002v2* (1994).
- [22] Z. Fordor und S.D. Katz. “A new method to study lattice QCD at finite temperature and chemical potential”. In: *arXiv:hep-lat/0104001v2* (2008).
- [23] M. P. Lombardo. “Lattice QCD at finite density: imaginary chemical potential”. In: *arXiv:hep-lat/0612017v1* (2006).
- [24] I. Montvay und G. Münster. *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, 1994.
- [25] P.H. Damgaard und H. Hueffel. “Stochastic Quantization”. In: *Physical Reports* 152, Nos. 5 and 6 (1987) 227-398 (1987).
- [26] P. H. Damgaard und H. Huffel. “Stochastic Quantization”. In: *Phys. Rept.* 152 227 (1987).
- [27] R. Mahnke, J. Kaupuzs und I. Lubashevsky. *Physics of Stochastic Processes*. Wiley-VCH, 2009.
- [28] Paul Langevin. “On the Theory of Brownian Motion”. In: *C. R. Acad. Sci. (Paris)* 146: 530-533 (1908).
- [29] G. Parisi und W. Yongshi. In: *Scientia Sinica Vol. XXIV No. 4 (1981) 35* (1981).
- [30] G. Aarts und F. A. James. “Complex Langevin dynamics in the SU(3) spin model at nonzero chemical potential revisited”. In: *arXiv:1112.4655v2 [hep-lat]* (2011).
- [31] F. Karsch und H.W. Wyld. “Complex Langevin Simulation of the SU(3) Spin Model with Nonzero Chemical Potential”. In: *Phys. Rev. Lett.* 55 (1985).
- [32] Jan Ambjorn und S-K. Yang. “Numerical problems in applying the langevin equation to complex effective actions”. In: *Phys. Lett.* 165, Issues 1-3 (1985).
- [33] H. Q. Lin und J. E. Hirsch. “Monte Carlo versus Langevin Methods for Nonpositive Definite Weights”. In: *Phys. Rev. B* 34, 1964 (1986).
- [34] G. Aarts, F. A. James, E. Seiler und I. O. Stamatescu. “Adaptive stepsize and instabilities in complex Langevin dynamics”. In: *arXiv:0912.0617v2 [hep-lat]* (2009).
- [35] G. Aarts und F. A. James. “On the convergence of complex Langevin dynamics: the three-dimensional XY model at finite chemical potential”. In: *arXiv:1005.3468v2 [hep-lat]* (2010).
- [36] G. Aarts, F. A. James und I.O. Stamatescu. “The Complex Langevin method: When can it be trusted?” In: *arXiv:0912.3360v2 [hep-lat]* (2009).

- [37] G. Aarts, F. A. James und I. O. Stamatescu. “Complex Langevin: Etiology and Diagnostics of its Main Problem”. In: *arXiv:1101.3270v2 [hep-lat]* (2011).
- [38] J. B. Kogut und M. A. Stephanov. *The Phases of Quantum Chromodynamics*. Cambridge University Press, 2004.
- [39] G. Palma, T. Meyer und R. Labbe. “Finite size scaling in the 2D XY-model and generalized universality”. In: *arXiv:cond-mat/0007289v3 [cond-mat.stat-mech]* (2000).
- [40] D. Banerjee1 und S. Chandrasekharan. “Finite size effects in the presence of a chemical potential: A study in the classical non-linear O(2) sigma-model”. In: *arXiv:1001.3648v3 [hep-lat]* (2010).
- [41] M. Fromm, J. Langelage, S. Lottini und O. Philipsen. “The QCD deconfinement transition for heavy quarks and all baryon chemical potentials”. In: *JHEP 01 (2012) 042* (2012).
- [42] J. Langelage, G. Muenster und O. Philipsen. “Strong coupling expansion for finite temperature Yang-Mills theory in the confined phase”. In: *JHEP0807:036,2008* (2008).
- [43] K. Fukushima. “Center Symmetry in the Presence of Dynamical Quarks”. Diss. Institute of Physics, University of Tokyo, 2001.
- [44] M. Fromm, J. Langelage, S. Lottini, N. Neuman und O. Philipsen. “The silver blaze property for QCD with heavy quarks from the lattice”. In: *arXiv:1207.3005v1 [hep-lat]* (2012).
- [45] W. Bietenhol und U.-J. Wiese. “Perfect Actions with Chemical Potential”. In: *arXiv:hep-lat/9801022v1* (1998).
- [46] S. Necco und R. Sommer. “The  $N_f = 0$  heavy quark potential from short to intermediate distances”. In: *arXiv:hep-lat/0108008v1* (2001).
- [47] J. Langelage, S. Lottini und O. Philipsen. “Centre symmetric 3d effective action for thermal SU(N) Yang-Mills from strong coupling series”. In: *arXiv:1010.0951v3 [hep-lat]* (2011).
- [48] S. Hsu und D. Reeb. “On the sign problem in dense QCD”. In: *arXiv:0808.2987v4 [hep-th]* (2008).

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich abschließend allen Personen danken die mich bei der Erstellung dieser Arbeit begleitet haben und damit ihr Gelingen ermöglicht haben.

- Prof. Dr. Owe Philipsen, der mir dieses interessante Thema angeboten und mich bei der Durchführung unterstützt hat.
- Dr. Michael Fromm, welcher mir mit zahlreichen Erklärungen und Hilfestellungen bei vielen Problemen zur Seite stand.
- Christian Schäfer und Janine Hütig für die angenehme Arbeitsatmosphäre im Büro.
- Janine Hütig und Michael Fromm für das Korrekturlesen meiner Arbeit.
- Meiner ganzen Familie, welche mir durch ihre Unterstützung den Abschluss meines Studiums ermöglicht haben und meiner Freundin Sabrina Böttger, welche mir immer zur Seite gestanden hat.
- Der Arbeitsgruppe Philippsen für die angenehme Atmosphäre und ein interessanten und lehrreiches Jahr.

### **Selbstständigkeitserklärung**

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Masterarbeit selbstständig verfasst habe.  
Dabei habe ich keine außer den angegebenen Quellen verwendet.  
Die Arbeit wurde nicht - auch nicht auszugsweise - für eine andere Prüfung verwendet.

Mathias Neuman  
Frankfurt am Main, 31.August 2012