

BERGISCHE UNIVERSITÄT
GESAMTHOCHSCHULE WUPPERTAL



Fachbereich 8
NATURWISSENSCHAFTEN I

Quarkmassen in der vollen QCD

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Bergischen Universität-Gesamthochschule Wuppertal

vorgelegt von

Norbert Eicker

aus Schwelm

WUB-DIS 2001-11

Juli 2001

Abstract

The masses of the light quarks play the rôle of fundamental parameters of Quantum Chromodynamics (QCD), the theory of the strong interaction. Due to confinement, the phenomenon that free quarks cannot be observed, it is impossible to determine quarkmasses directly from experiments. Instead, one has to determine the dependence of certain quantities on the quarkmasses. Then the physical quarkmasses are given by comparison with physical results.

The only known access to the absolute values of light quarkmasses is to evaluate QCD on a lattice. All other approaches either cannot determine absolute values (e.g. only ratios as with chiral perturbation theory) or have to use approximations with uncontrollable impact.

We present new results on the mass of the light and strange quarks from SESAM/T χ L. The results were obtained on lattice-volumes of $16^3 \times 32$ and $24^3 \times 40$ points, which allow to investigate finite-size effects. Since the SESAM/T χ L ensembles with $\beta = 5.6$ now are complemented by configurations with $\beta = 5.5$, moreover, we are able to attempt the first continuum extrapolation of the quark masses with standard Wilson fermions.

In the second part a more technical aspect of lattice QCD simulations is treated. The main computational task in full QCD simulations is the solution of large sparse linear equations on parallel computers. To improve this job, besides the choice of the solver, the optimization of the preconditioning scheme plays a major rôle.

Here we present results obtained by the ll -SSOR preconditioner applied to $\mathcal{O}(a)$ improved fermions. We show that the *de facto* standard in todays simulations, even-odd preconditioning, is outperformed by a factor of two. Furthermore we successfully employ the ll -SSOR preconditioning scheme to hypercube fermions, a recent approach inspired by perfect actions.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die Diskretisierung der QCD	9
2.1	Die QCD im Kontinuum	9
2.1.1	Eichsymmetrien	9
2.1.2	Die Pfadintegralformulierung	11
2.2	QCD auf dem Gitter	12
2.2.1	Diskretisierung	13
2.2.2	Gluonen auf dem Gitter	14
2.2.3	Fermionen à la Wilson	15
2.2.4	Verbesserungen à la Symanzik	17
2.2.5	Hyperkubische Fermionen	18
2.3	Gittersimulationen	22
2.3.1	Der Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus	23
2.3.2	Fehler und Extrapolationen	25
2.3.3	Die $N_f = 2$ Simulationen von SESAM / T χ L	26
3	Quarkmassen	29
3.1	Theoretische Grundlagen	29
3.2	Methodik	32
3.2.1	Operatoren	33
3.2.2	Chirale Extrapolation	35
3.3	Statistische Fehleranalyse	37

3.3.1	Das <i>Jackknife</i> -Verfahren	37
3.4	Die Fitprozedur	39
3.4.1	Optimierung der Fit-Intervalle	39
3.4.2	Fitresultate	42
3.5	Chirale Extrapolation in m_{PS}	42
3.6	Chirale Extrapolation in m_V	50
3.6.1	Diskussion – <i>Finite-size</i> Effekte	51
3.6.2	Bestimmung von κ_l	58
3.7	Bestimmung des Gitterabstands a	58
3.8	Berechnung der Renormierungsfaktoren	59
3.8.1	Der Kopplungsparameter $\alpha_{\overline{MS}}$	60
3.8.2	<i>Tadpole</i> -Verbesserung	61
3.9	Bestimmung der leichten Quarkmasse	62
3.9.1	Diskussion	67
3.10	Bestimmung der <i>strange</i> Quarkmasse	68
3.10.1	Diskussion	73
4	Präkonditionierung von QCD-Invertern	75
4.1	Iterative Gleichungslöser	76
4.1.1	CG	76
4.1.2	BiCGStab	78
4.2	Präkonditionierung	80
4.2.1	EO	81
4.2.2	SSOR	82
4.2.3	Ordnungen	83
4.3	SSOR für $\mathcal{O}(a)$ -verbesserte Fermionen	89
4.3.1	Ergebnisse	90

4.4	SSOR für hyperkubische Fermionen	97
5	Zusammenfassung	103
	Tabellenverzeichnis	105
	Abbildungsverzeichnis	107
	Literaturverzeichnis	109

Kapitel 1

Einleitung

Die im letzten Jahrhundert entwickelten Theorien der fundamentalen Wechselwirkungen sind in ihrer Entstehung untrennbar mit der Erkenntnis über die Bedeutung des Eichprinzips verknüpft. Dieses von Weyl bereits 1918 auf die Bühne der physikalischen Theorien gehobene Prinzip besagt, dass Kräfte, die ja eigentlich eine Wirkung zwischen entfernten Objekten darstellen, durch lokale Eichtransformationen beschrieben werden können [1]. Motiviert wurde diese Betrachtungsweise durch die allgemeine Relativitätstheorie Einsteins [2], welche die Gravitationkraft als lokalen Einfluss der Masse auf die Metrik einer gekrümmten 4-dimensionalen Raum-Zeit beschreibt. Dies regte Weyl an, auch die elektromagnetische Kraft durch lokale Einflüsse auf Ladungen zu beschreiben. Obwohl Weyls damaliger Versuch nicht sonderlich erfolgreich war, ebnete er den Weg für die neue Sichtweise auf die Natur der Kräfte. In weiteren Arbeiten hob er das Eichprinzip als ein fundamentales Element der Natur heraus und zeigt, dass aus dem Symmetrieprinzip der Eichinvarianz die Elektrodynamik entwickelt werden kann [3].

Im weiteren Verlauf trugen vor allem Yang und Mills mit der Erweiterung des Eichprinzips auf nichtabelsche Gruppen zur Entwicklung bei [4]. Es sind diese nichtabelschen Eichgruppen, welche die zentralen Aspekte in den Theorien der elektroschwachen und der starken Wechselwirkung darstellen, die zusammen das Standardmodell der Elementarteilchenphysik bilden. So lassen sich die jeweiligen Feldtheorien, die hier jedoch nicht mehr klassische, sondern vielmehr Quantenfeldtheorien sind, völlig natürlich aus den zugehörigen Eichsymmetrien entwickeln. Es kann als Ironie betrachtet werden, dass die Gravitation, die als erste Wechselwirkung in einer Formulierung vorlag, die das Eichprinzip fassbar machte, sich als letzte Kraft gegen eine Quantisierung und damit die Integration in das Standardmodell sträubt.

Das Standardmodell geht davon aus, dass es insgesamt 12 fermionische Grundbausteine der Materie gibt. Diese gliedern sich in zwei Klassen, auf der einen Seite 6 Leptonen, auf der anderen Seite 6 Quarks. Die verschiedenen Quarksorten werden auch als *flavors* bezeichnet. Die Fermionen wechselwirken untereinander durch 4 Elementarkräfte: Neben der elektromagnetischen und der schwachen Kraft, die zur elektroschwachen Kraft vereinheitlicht wurden, sind dies die starke Kraft sowie die Gravitation, die jedoch nicht zum eigentlichen Standardmodell gehört. Die Feldquanten dieser Kräfte sind Bosonen. Im Falle der elektroschwachen Kraft gibt es neben dem Photon die drei massiven Eichbosonen W^\pm und Z_0 . Die starke Kraft wird durch insgesamt 8 Gluonen getragen. Für die Gravitation wird das Graviton postuliert. Abgerundet wird das Standardmodell durch das ebenfalls noch nicht entdeckte Higgs-Boson, dessen Existenz eine natürliche Erklärung für die Masse der Elementarteilchen geben würde. Neuere Arbeiten von LEP geben jedoch Indizien dafür, dass tatsächlich ein Higgs-Teilchen mit einer Masse von etwa 115 GeV existiert [5]. Die elektroschwache Kraft koppelt sowohl an Leptonen als auch an Quarks. Eine umfassende Darstellung dieser Kraft bietet das Glashow-Salam-Weinberg-Modell [6]. Die zugrundeliegende Eichsymmetrie wird durch die Gruppe $SU(2)_W \times U(1)_Y$ beschrieben,

wobei die $SU(2)_W$ -Eichbosonen ausschließlich an „linkshändige“ Teilchen koppeln und somit die Parität explizit verletzt wird. Die vier Eichbosonen dieser Theorie sind zunächst masselos. Bei kleinen Energien führt der Higgs-Mechanismus [7] jedoch dazu, dass durch den Vakuumerwartungswert des Higgs-Bosons die Eichsymmetrie partiell gebrochen wird. Die verbleibende Eichsymmetrie $U(1)_{em}$ führt zur bekannten Elektrodynamik (bzw. ihrer quantisierten Form, der QED) mit dem masselosen Photon. Die drei Eichbosonen, die zum gebrochenen Teil der Eichsymmetrie gehören, werden gleichzeitig massiv.

Die starke Kraft hingegen koppelt allein an die Quarks. Die Theorie, die diese Kraft bisher am besten beschreibt, ist die Quantenchromodynamik (QCD) [8], mit der Eichsymmetrie $SU(3)$. Die Quanten des Eichfeldes sind 8 masselose Gluonen, welche an die „Farbladungen“ der Quarks koppeln. Auf Grund eines Effektes, der als Einschluss (*confinement*) bezeichnet wird, sind in der Natur jedoch keine isolierten Quarks zu beobachten, sondern nur solche Teilchen, in denen die Quarks in einem farbneutralen Ensemble vorliegen [9]. Für die Gravitation liegt noch keine Theorie vor, die für eine konsistente Quantisierung dieser Wechselwirkung sorgt. Ansätze, die in diese Richtung zielen, sind große vereinheitlichte Theorien (*grand unified theories*, GUT) [10] oder String-Theorien [11]. Alle diese Ansätze sind bisher jedoch auf ausgesprochen spekulativem Niveau, nicht zuletzt deshalb, da bisher in keinem Experiment eine Abweichung vom Standardmodell festgestellt werden konnte¹.

Ein wesentliches Charakteristikum von Quantenfeldtheorien ist das Auftreten von divergierenden Ergebnissen, die durch eine Renormierungsprozedur wieder endlich gemacht werden müssen. Ein entscheidender Erfolg des Standardmodells ist, dass die Renormierbarkeit dieser Theorie gezeigt werden konnte [13]. Aus dem Renormierungsverfahren gewinnt man gleichzeitig eine Renormierungsgruppengleichung, die unter anderem beschreibt, wie sich die Kopplungskonstanten unter Änderung des Impulsübertrags bzw. der Energieskala verändern. Dieses „Laufen“ der Kopplungskonstante wird durch die Callan-Symanzik- β -Funktion [14] der jeweiligen Theorie beschrieben. An dieser Stelle tritt ein fundamentaler Unterschied zwischen der $U(1)$ -Kopplung der QED und der $SU(3)$ -Kopplung der QCD zu Tage: Während in der QED die Kopplungsstärke mit wachsender Energieskala immer größer wird, verschwindet die Kopplung in der QCD nach und nach, so dass sie ab einer gewissen Energiedichte vernachlässigt werden kann und man von asymptotischer Freiheit spricht [15].

Dies hat nun verschiedene Implikationen auf die Gültigkeit und die Behandlung der verschiedenen Komponenten des Standardmodells. So ist in der QED und dem GSW-Modell der elektroschwachen Wechselwirkung die Kopplung so klein, dass eine perturbative Behandlung der Theorie in den heute experimentell zugänglichen Energiebereichen möglich ist. Ohne die Störungstheorie wären die großen Erfolge in diesem Teil des Standardmodells jedoch nicht denkbar gewesen. Gleichzeitig zeigt das Anwachsen der Kopplungskonstante mit größer werdender Energie, die schließlich in der Ausbildung eines Landau-Pols gipfelt, dass das Standardmodell nicht für alle Energiebereiche gültig sein kann. Vor allem dieses Ergebnis gab schon früh die Motivation, sich mit GUTs zu beschäftigen.

Die Implikation für die QCD ist jedoch eine komplett andere: Während die perturbative

¹Neue Ergebnisse des Sudbury Neutrino Observatoriums geben starke Hinweise darauf, dass die zu den Leptonen zählenden Neutrino, die im Standardmodell als masselos postuliert werden, eine nichtverschwindende Ruhemasse besitzen [12].

Behandlung bei großen Energien² gesichert ist, entstehen gleichzeitig Probleme bei der Auswertung der Theorie im Bereich kleiner Energien, da dort die Kopplung der QCD, die mit α_s bezeichnet wird, groß wird. Experimente zeigen, dass dies bei einer Skala von $\Lambda_{QCD} \approx 200$ MeV geschieht. Daher kann die Störungstheorie nur bei Energien gültig sein, die größer als etwa 1 GeV sind. Gleichzeitig gibt das Anwachsen der Kopplungskonstante jedoch eine erste Erklärung für den beobachteten Einschluss der Quarks.

Diese Beschränkung der Störungstheorie auf große Energien stellt bei der Behandlung der starken Wechselwirkung zunächst ein wesentliches Problem dar. So ist für den Bereich der gebundenen Zustände der QCD der mächtige, in der QED erarbeitete und dort äußerst erfolgreiche perturbative Apparat nicht anwendbar. Der bis heute erfolgreichste Ansatz, diesem Dilemma zu entkommen, stellt die Auswertung der Theorie auf dem Gitter dar, die ohne unkontrollierbare Näherungen und heuristische Annahmen auskommt³. Die Idee, in Kontinuumstheorien künstlich ein Gitter einzuführen und es nach der Berechnung von Ergebnissen wieder zu entfernen, geht auf den Pfadintegralformalismus Feynmans zurück [17]. Diese – neben der Wellenmechanik Schrödingers und der Matrizenmechanik Heisenbergs – dritte Formulierung der Quantenmechanik erweist sich als wesentlich leichter auf Feldtheorien und insbesondere Eichtheorien verallgemeinerbar, was nicht zuletzt ihren Erfolg begründet.

Die Pfadintegralformulierung einer Theorie geht davon aus, dass das betrachtete System durch ein Funktionalintegral beschrieben wird, in dem jede denkbare Konfiguration angenommen, diese jedoch mit einem Gewichtungsfaktor bewertet werden, welcher der exponentierten Wirkung dieser Konfiguration entspricht. Die Störungstheorie ist in diesem Bild eine Entwicklung des Pfadintegrals in der Kopplungskonstanten. Um es jedoch vollständig auswerten zu können, muss man seiner Definition, die zunächst mathematisch nicht eindeutig ist, eine Bedeutung geben, indem die kontinuierliche Raum-Zeit durch ein endliches vierdimensionales Gitter ersetzt wird und es so in ein hochdimensionales klassisches Integral verwandelt. In Ausnahmefällen kann an diesem Punkt sogar eine analytische Auswertung durchgeführt werden⁴, im allgemeinen bleibt jedoch nur die Möglichkeit, das resultierende Integral durch Monte-Carlo Verfahren numerisch zu behandeln. Dazu muss das zu lösende Integral in der Regel durch eine Wick-Rotation analytisch in die imaginäre Zeit fortgesetzt werden, wodurch die komplexen Gewichtungsfaktoren in reelle Boltzmannfaktoren verwandelt und die Methoden der statistischen Physik anwendbar werden.

Seit der Formulierung der QCD auf dem Gitter durch Wilson [18] ist die Gittereichtheorie zu einem mächtigen Werkzeug gewachsen, das verspricht, mit weiteren Fortschritten im Bereich der Computer und Algorithmen die wesentlichen hadronischen Observablen in einer dem Experiment entsprechenden Genauigkeit *ab initio* berechnen zu können. Um die so erzielten Ergebnisse mit den experimentellen vergleichen zu können, ist es natürlich notwendig, den Einfluss des Gitters zu kontrollieren und durch das Bilden des Kontinuumslimits, bei dem man den Gitterabstand immer kleiner werden lässt, zu beseitigen. Auf diesem Wege ist das Kontinuum natürlich nicht vollständig zu erreichen, allerdings kann

²Im Fall der QCD bedeutet dies einige GeV.

³Daneben existiert noch der Ansatz der QCD-Summenregeln [16], der jedoch zusätzliche heuristische Annahmen erfordert. Damit erzielte Ergebnisse folgen daher nicht allein aus der QCD.

⁴Diese Ausnahmen beschränken sich im wesentlichen aber auf nicht wechselwirkende Theorien, deren physikalische Struktur uninteressant ist.

die Abweichung durch entsprechenden Aufwand beliebig klein gemacht werde.

Bisher ist der Erfolg der Methode jedoch vor allem durch die Computer-Ressourcen beschränkt. So ist es heute selbst mit den leistungsfähigsten Supercomputern nicht denkbar, Gitter zu behandeln, deren lineare Ausdehnung größer als $L = 64$ ist. Dies hat auf Grund der Tatsache, dass die physikalische Ausdehnung des behandelten System nicht beliebig klein gewählt werden darf, zugleich Implikationen auf den Gitterabstand a und somit auf die Impulse, die im Spektrum der Gittertheorie abgeschnitten sind. Im Ultraviolett fehlen dabei alle Impulse mit $p > \pi/a$, im Infraroten hingegen die mit $p < \pi/(aL)$. Gleichzeitig ergeben sich Einschränkungen bei der Wahl der nackten Kopplung oder der nackten Quarkmasse. Eine Abschätzung der Möglichkeiten der nächsten Jahre sowie die benötigten Ressourcen bieten [19] und [20].

Ein bereits sehr alter Versuch, diese Beschränkungen zu überwinden, ist die Vernachlässigung des Einfluss von dynamischen Quarks, d. h. von Quark-Antiquark Paaren, die ständig erzeugt und vernichtet werden. Diese *quenched*-Näherung reduziert zwar auf der einen Seite den Rechenzeitbedarf um etwa drei Größenordnungen, auf der anderen Seite handelt man sich systematische Unsicherheiten von 5-10% ein. [21] zeigt eine „endgültige“ Analyse dieser Näherung, in der alle kontrollierbaren Fehler im Bereich der systematischen Ungenauigkeiten sind. Eine wirklich harte Überprüfung der QCD ist auf Grund der systematischen Unsicherheit so natürlich nicht möglich.

In den letzten Jahren begannen daher verschiedene Gruppen, in explorativen Berechnungen auch die dynamischen Quarks einzubeziehen [22, 23, 24, 25]. Für alle diese Projekte gilt jedoch, dass nur zwei massenentartete Quarks dynamisch sind. Diese Näherung, bei der die dynamischen Quarks den sehr leichten *up* und *down* Quarks entsprechen, hat allein algorithmische Gründe: Der von allen Gruppen verwendete Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus (HMC) [26] kann nur eine gerade Zahl an Quarkflavors (n_f) behandeln. Gleichzeitig muss der Gitterabstand auf Grund der Beschränkungen in der Gittergröße mit 0.1 fm recht groß gewählt werden und die Massen der dynamischen Quarks sind so groß, dass das Verhältnis aus der Massen von π - und ρ -Mesonen, $\frac{m_\pi}{m_\rho}$, mit 0.57 oder mehr sehr viel größer als der experimentelle Wert von 0.1784 ist.

Aus diesen Gründen ist klar, dass neben der größeren Leistung der benutzten Rechner auch Verbesserungen im Bereich der Algorithmen sowie der verwendeten diskretisierten Wirkungen dringend notwendig sind. Es gibt verschiedene Ansätze, diese Fortschritte zu realisieren. Um die Einflüsse der großen Gitterabstände zu überwinden, regte Symanzik bereits 1983 an, systematisch die Diskretisierungsfehler der Gitterwirkung zu beseitigen [45]. Tatsächlich benutzen zwei Gruppen bereits solche $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Wirkungen [24, 25]. Einen Schritt weiter gehen die „perfekten“ Wirkungen [27, 28], bei denen alle irrelevanten Kopplungen vermieden werden sollen.

Da die chirale Symmetrie sowohl bei der einfachsten Gitterformulierung mit Wilson-Fermionen als auch bei den $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Wirkungen nur im Fall des Kontinuumslimites sichergestellt ist, äußern sich die Bemühungen, kleinere Quarkmassen in die Berechnungen einfließen zu lassen, vor allen in der Suche nach Wirkungen, die dies mit vertretbarem Aufwand zulassen. Hier sind zum einen die nahe verwandten Domänenwand- und Überlapp-Fermionen zu nennen [29, 30], die dies durch das Einführen einer weiteren, nichtphysikalischen Dimension versuchen, zum anderen aber auch ein alter Ansatz von Ginsparg und Wilson [31], bei dem die Forderung nach chiraler Symmetrie des Dirac-

Operators so abgeschwächt wird, dass lokale Verletzungen erlaubt werden. Selbst nach dieser Abschwächung kann gezeigt werden, dass die beschriebenen Fermionen einer exakten chiralen Symmetrie genügen [32].

Schließlich gibt es Bemühungen, die Beschränkung der Simulationen auf eine gerade Zahl dynamischer Fermionen aufzuheben. In diesem Zusammenhang gibt es zum einen den Versuch, den HMC Algorithmus so zu modifizieren, dass er auch mit einzelne Quarkflavors umgehen kann [33], zum anderen wird der komplett andere Ansatz des Multi-Boson-Algorithmus verfolgt, bei dem jedes fermionische Feld durch ein Ensemble von Bosonen ersetzt wird [34]. Auch hier gibt es neuere Ansätze, die auch die Behandlung einzelner dynamischer Quarkflavors erlauben [35, 36].

Die in dieser Arbeit vorgestellten Rechnungen sind Teil der Simulationen der SESAM/T χ L Kollaboration [22, 23]. Diese hat sich zum Ziel gesetzt, den Einfluss dynamischer Quarkfreiheitsgrade sowohl auf das Spektrum der QCD als auch auf Matrixelemente in einer explorativen Studie zu untersuchen. Der dabei verfolgte Ansatz geht davon aus, die einfachste verfügbare Wirkung zu benutzen und damit die methodischen Schwierigkeiten der verbesserten Wirkungen zu umgehen.

Der erste Fokus dieser Arbeit liegt auf der Bestimmung der Quarkmassen. Da die Quarks die elementaren Bausteine der gesamten hadronischen Materie sind, gibt es für die Kenntnis ihrer Massen als Parameter des Standardmodells ein besonderes Interesse. Auf Grund des Phänomens des Einschlusses und der damit verbundenen Tatsache, dass Quarks nicht als freie Teilchen zu beobachten sind, ist die Bestimmung ihrer Masse jedoch ein äußerst schwieriges Unterfangen. Es wundert daher nicht, dass die Quarkmassen zu den Parametern des Standardmodells gehören, deren absolute Werte mit den größten Fehler behaftet sind.

Die Gittereichtheorie stellt in diesem Zusammenhang ein Werkzeug dar, mit dem im Prinzip eine Bestimmung der Quarkmassen ohne weitere Modellannahmen möglich ist. Das hebt diese Formulierung der QCD von allen anderen ab.

In dieser Arbeit werden die Massen der leichten Quarks auf Basis der Simulationen von SESAM/T χ L bestimmt. Auf Grund der oben angesprochenen Beschränkungen ist es allerdings weder möglich, zwischen *up* und *down* Quarks zu unterscheiden, noch den Einfluss von drei leichten Seequarks – neben den beiden erwähnten noch das *strange* Quark – in den Simulationen zu berücksichtigen. Vielmehr kann nur der Einfluss von zwei massenentarteten Seequarks auf eine leichte Quarkmasse, die ein Mittelglied zwischen *up* und *down* ist, sowie auf eine *strange* Quarkmasse betrachtet werden. Auf dieser Basis wird hier erstmals eine vollständige Quarkmassenanalyse inklusive der abschließenden Kontinuumsextrapolation auf Basis der Standard-Wilson-Fermionen präsentiert.

Die Aussage, dass Gitterrechnungen ohne weitere theoretische Annahmen auskommen, muss allerdings dadurch abgeschwächt werden, dass bei den heutzutage möglichen Simulationen auf Grund verschiedener Beschränkungen doch noch auf andere theoretische Ergebnisse zurückgegriffen werden muss. Auch um diese Einschränkungen zu umgehen ist es daher notwendig, dass neben der Weiterentwicklung der Gitterformulierungen auch die Verbesserung der für konkreten Rechnungen auf Computern verwendeten Algorithmen nicht aus den Augen verloren wird, wobei sich diese beiden Felder auch gegenseitig beeinflussen. So liegt der zweite Fokus dieser Arbeit auf der Verbesserung von Lösungsmethoden linearer Gleichungssysteme und der Übertragung von erprobten Methoden auf

die neuen Anforderungen verbesserter Wirkungen.

Die Lösung linearer Gleichungssysteme, deren Form durch die gewählte Gitterformulierung bestimmt ist, stellt das zentrale numerische Problem von Simulationen in der Gittertheorie dar. Es wundert daher nicht, dass schon in der Vergangenheit großer Aufwand betrieben wurde, diese Aufgabe möglichst effektiv zu lösen [37]. Da sich beim Übergang auf verbesserte Gitterformulierungen die Struktur des zu lösenden Gleichungssystems verändert, sind die benutzten Algorithmen dementsprechend anzupassen.

Im konkreten Fall dieser Arbeit wird der SSOR Präkonditionierer [38], der in Verbindung mit dem BiCGStab-Algorithmus [39] den *de facto* Standard zur Lösung des linearen Gleichungssystems bei Wilson-Fermionen darstellt, auf die Verwendung bei $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen verallgemeinert. Außerdem wird gezeigt, dass diese Art der Präkonditionierung auch bei komplizierteren Fermionformulierungen erfolgreich anwendbar ist.

Die enge Verknüpfung zwischen der Weiterentwicklung der Fermionformulierungen und der Anpassung und Verbesserung der Simulationsalgorithmen wird auch dadurch deutlich, dass quasi als Abfallprodukt der algorithmischen Forschung ein Beitrag zur eichinvarianten Formulierung der hyperkubischen Fermionen [40] erzielt wurde.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

Diskretisierung der QCD

In Kapitel 2 werden die Grundlagen von Pfadintegralformalismus und Gitterformulierung der QCD dargestellt. Dabei werden neben der Standardformulierung Wilsons auch die $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen Symanziks sowie hyperkubische Fermionen präsentiert. Das Kapitel wird durch einen kurzen Überblick über konkrete Rechnungen mit dynamischen Fermionen abgeschlossen, wobei besonders auf die dieser Arbeit zu Grunde liegenden Simulationen von SESAM/T χ L eingegangen wird.

Quarkmassen

Kapitel 3 ist der Quarkmassenanalyse gewidmet. Nach einem kurzen Überblick der theoretischen Grundlagen wird auf die in dieser Analyse verwendeten Methoden eingegangen. Neben dem grundsätzlichen Vorgehen, das Betrachtungen zur Bestimmung von Operatoren auf dem Gitter oder zur chiralen Extrapolation einschließt, werden vor allem eher technische Aspekte behandelt, wie etwa eine Beschreibung der Fehleranalyse oder der Fitprozedur.

Nachdem die Ergebnisse der verschiedenen chiralen Extrapolationen dargestellt sind, folgt ein Abschnitt, der die Berechnung der benötigten Renormierungskonstanten und Koppelungsparameter beschreibt. Aus diesen Zwischenergebnissen werden dann die Kontinuums- werte der Massen des leichten Quarks sowie des *strange* Quarks ermittelt und diskutiert. Die in diesem Kapitel präsentierten Ergebnisse stammen zum Teil Daten, die bereits in [41] analysiert wurden. Allerdings wird in dieser Arbeit eine andere Philosophie der Fehlerrechnung verfolgt, die dem Einfluss von Korrelationen auf die Datenanalyse eine größere Bedeutung beimessen.

Präkonditionierung von QCD-Invertern

Das 4. Kapitel beginnt mit einer kurzen Einführung zur Theorie der iterativen Lösung linearer Gleichungssysteme. Nachdem auch die Theorie der Präkonditionierung dargestellt wurde, wird auf den Begriff der Ordnung eingegangen, der sich als zentral für die effektive Implementierung von Präkonditionierern auf Parallelrechnern erweisen wird.

In einem ersten Ergebnisteil werden dann die notwendigen Erweiterungen der Idee der SSOR-Präkonditionierung sowie der lokal-lexikographischen Ordnung vorgestellt und die damit erzielten Resultate präsentiert. Ein zweiter Ergebnisteil ist der Anwendung der SSOR-Präkonditionierung auf hyperkubische Fermionen gewidmet.



Kapitel 2

Die Diskretisierung der QCD

In diesem Kapitel soll zunächst die QCD als eine Eichtheorie mit fermionischen Freiheitsgraden vorgestellt werden. Anschließend wird skizziert, wie der Übergang von der Kontinuumstheorie im Minkowskiraum auf die euklidische Gitterformulierung erfolgt. Dabei wird nicht nur auf die weit verbreitete Formulierung Wilsons sowie deren Verbesserungen eingegangen, sondern auch auf eine neuere Entwicklung, die auf einem Hyperkubus diskretisierten Fermionen. Diese sind ursprünglich aus der Idee der „perfekten“ Wirkungen motiviert worden, mittlerweile spielen sie jedoch auch auf dem Gebiet der Ginsparg-Wilson Fermionen eine Rolle. Zum Ende des Kapitel wird kurz darauf eingegangen, wie konkrete Simulationen mit dem Computer vonstatten gehen. Dazu wird mit dem HMC Algorithmus eines der wichtigsten numerischen Verfahren aktueller Computerexperimente der Gittertheorie vorgestellt. Es folgt eine Betrachtung der durchzuführenden Extrapolationen sowie der damit verbundenen Fehler. Das Kapitel endet mit der Vorstellung der dieser Arbeit zu Grunde liegenden Simulationen.

2.1 Die QCD im Kontinuum

Die QCD als Theorie der starken Kraft bildet zusammen mit dem GSW-Modell der elektroschwachen Wechselwirkung das Rückgrat des Standardmodells. Beide Wechselwirkungen werden von Quantenfeldtheorien beschrieben, denen eine lokale Eichsymmetrie zu Grunde liegt. Teilchen werden dabei durch die fermionischen Freiheitsgrade der Theorien repräsentiert.

2.1.1 Eichsymmetrien

Eichtheorien, d. h. Theorien, in welchen Teilchen durch Eichfelder wechselwirken, können aus Theorien freier Teilchen durch die Forderung nach einer lokalen Eichsymmetrie abgeleitet werden.

Im Fall eines freien Diraceteilchens ψ mit Masse m lautet des Wirkungsfunktional:

$$\mathcal{S}_F(m) = \int d^4x \quad \bar{\psi}(x)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x). \quad (2.1)$$

Die Dirac-Matrizen γ^μ sind über ihren Antikommutator definiert, für den $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$ gilt, wobei $g^{\mu\nu}$ der metrische Tensor ist. Das Funktional (2.1) ist invariant unter**globalen** Eichtransformationen

$$\psi(x) \rightarrow G\psi(x) \quad \text{bzw.} \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x)G^\dagger. \quad (2.2)$$

Die G sind Elemente einer Lie-Gruppe, die als Eichgruppe bezeichnet wird, und können daher als $G = \exp(i\Lambda)$ geschrieben werden. Die Λ sind Elemente der erzeugenden Lie-Algebra der Gruppe.

Das Wirkungsfunktional (2.1) ist jedoch nicht invariant unter **lokalen** Eichtransformationen. Bei diesen zeigen die Eichtransformationen zusätzlich eine Abhängigkeit vom Ort:

$$\psi(x) \rightarrow G(x)\psi(x) \quad \text{und} \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x)G^\dagger(x). \quad (2.3)$$

Um lokale Eichinvarianz zu erzielen, muss vielmehr die übliche Ableitung durch ihre kovariante Form ersetzt werden:

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \partial_\mu + ig_0 A_\mu(x). \quad (2.4)$$

Die neu eingeführten Freiheitsgrade $A_\mu(x)$ werden als Eichfelder bezeichnet. Die Eichinvarianz des Wirkungsfunktionals des wechselwirkenden Dirac-Teilchens,

$$\mathcal{S}_F(m) = \int d^4x \quad \bar{\psi}(x)(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi(x), \quad (2.5)$$

ist nun dadurch gesichert, dass die kovariante Ableitung gemäß

$$D_\mu \rightarrow G(x)D_\mu(x)G^\dagger(x) \quad (2.6)$$

transformiert wird. Dies impliziert für die Eichfelder ein Transformationsverhalten gemäß

$$A_\mu(x) \rightarrow G(x)A_\mu(x)G^\dagger(x) + \frac{i}{g_0}\partial_\mu\Lambda(x). \quad (2.7)$$

Der Parameter g_0 wird nach geeigneter Normierung der Eichfelder als nackte Kopplung der Wechselwirkung bezeichnet.

Die Bezeichnung dieser neuen Freiheitsgrade als Eichfelder lässt sich aus einer Betrachtung des Aharonov-Bohm Effektes in der QED [42] motivieren. Dort erhält ein Materiefeld ψ , das in einem elektromagnetischen Eichfeld A_μ vom Ort x_1 nach x_2 transportiert wird, einen Phasenfaktor $G = \exp(ie \int_{x_1}^{x_2} dx^\mu A_\mu(x))$. Die Phasenfaktoren sind Elemente der Lie-Gruppe $U(1)$, der Eichgruppe der QED. In der QED wird die Kopplung üblicherweise mit e bezeichnet und entspricht der elektrischen Ladung des Teilchens.

Im Fall der QCD ist die Eichgruppe die $SU(3)$, deren Elemente sich als $G = \exp(ig_0\theta^a T^a)$ darstellen lassen. Die Generatoren der zugehörigen Lie-Algebra lassen sich durch die Gell-Mann Matrizen $\lambda^a = 2T^a$ darstellen, die der Vertauschungsrelation $[\lambda^a, \lambda^b] = 2if_{abc}\lambda_c$ genügen, wobei die f_{abc} die Strukturkonstanten der erzeugenden Algebra sind¹. Entsprechend lassen sich die Eichfelder gemäß der T^a parametrisieren: $A_\mu(x) = A_\mu^a(x)T^a$.

Neben dem fermionischen Term \mathcal{S}_F können der Wirkung weitere eichinvariante Terme hinzugefügt werden, etwa ein kinetischer Term, der die Propagation der Eichfelder ermöglicht:

$$\mathcal{S}_G = -\frac{1}{4}\text{Sp} \int d^4x \quad F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}. \quad (2.8)$$

Dieser lorentzinvariante Term führt in der Elektrodynamik zu den Maxwell-Gleichungen und wird analog auch in der QCD verwendet, wobei sich der Vorfaktor jedoch auf Grund

¹Die Gell-Mann Matrizen, λ^a , sowie die nichtverschwindenden Elemente von f_{abc} sind z.B. in [43] zu finden.

der Parametrisierung mittels der Gell-Mann Matrizen λ_a auf $\frac{1}{2}$ verdoppelt. Der Feldstärketensor genügt dabei der Definition:

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu} &= \frac{i}{g_0} [D_\mu, D_\nu] \\ &= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig_0 [A_\mu, A_\nu]. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Im Fall der QED verschwindet der Kommutator $[A_\mu, A_\nu]$ natürlich, da die zugehörige Eichgruppe $U(1)$ abelsch ist. Bei nichtabelschen Eichgruppen, wie etwa der $SU(3)$ in der QCD, führt er hingegen zu einer Selbstwechselwirkung der Eichfelder.

Damit erhält man für das Wirkungsfunktional der QCD

$$\mathcal{S}_{QCD} = \sum_{q=1}^{N_f} \mathcal{S}_F(m_q) + \mathcal{S}_G = \int d^4x \sum_{q=1}^{N_f} \bar{\psi}_q(x) (\gamma^\mu D_\mu + m_q) \psi_q(x) + \frac{1}{2} \text{Sp}[F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x)]. \quad (2.10)$$

Als Parameter gehen in die Theorie die nackten Massen der $N_f = 6$ Quarks, m_q , sowie die nackte Kopplung g_0 ein.

2.1.2 Die Pfadintegralformulierung

Unter den verschiedenen Alternativen, Feldtheorien zu quantisieren, ist die Pfadintegralformulierung ein Ansatz, der nur auf fundamentalen Prinzipien der Quantenmechanik beruht und gleichzeitig auch nichtstörungstheoretische Rechnungen zulässt. Erwartungswerte von Operatoren \mathcal{O} , die benötigt werden, um Vorhersagen im Rahmen einer Quantenfeldtheorie machen zu können, werden in diesem Ansatz aus der Überlagerung aller möglicher Ergebnisse berechnet, die jeweils mit der exponentierten Wirkung gewichtet werden:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \quad \mathcal{O}(\phi) e^{i\mathcal{S}[\phi]}. \quad (2.11)$$

Als Normierung dient das Pfadintegral des Einsoperators

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \quad e^{i\mathcal{S}[\phi]}. \quad (2.12)$$

Die Integration erfolgt jeweils über alle möglichen Konfigurationen des Feldes ϕ . Es sollte klar sein, dass (2.11) zunächst nur rein symbolischen Charakter hat, da keine eindeutige mathematische Vorschrift existiert, wie dieser Ausdruck tatsächlich zu berechnen ist. Dies wird erst durch eine Renormierungsvorschrift gegeben. Eine der Möglichkeiten einer solchen Vorschrift ist die, von der kontinuierlichen Raum-Zeit auf ein 4-dimensionales Gitter überzugehen und dabei das Pfadintegral in ein herkömmliches, gleichwohl hochdimensionales Integral zu verwandeln. Geeigneterweise wird anschließend durch eine Wickrotation,

$$x_0 \rightarrow -ix_4 \quad , \quad x_i \rightarrow x_i \quad , \quad i\mathcal{S} \rightarrow -\mathcal{S}^E, \quad (2.13)$$

für eine analytische Fortsetzung der Zeit gesorgt. Neben der Transformation des Minkowskiraums in einen euklidischen Raum hat dies vor allem zur Folge, dass das Pfadintegral

in ein System überführt wird, das einem der gewöhnlichen statistischen Mechanik sehr ähnlich ist:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \quad \mathcal{O}(\phi) e^{iS[\phi]} \quad \rightarrow \quad \langle \mathcal{O} \rangle_E = \frac{1}{Z_E} \int \mathcal{D}\phi \quad \mathcal{O}(\phi) e^{-S^E[\phi]}. \quad (2.14)$$

Genauso geht das Pfadintegral des Einsoperators, das als Normierung dient, in eine vierdimensionale, euklidische Zustandssumme über:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \quad e^{iS[\phi]} \quad \rightarrow \quad Z_E = \int \mathcal{D}\phi \quad e^{-S^E[\phi]}. \quad (2.15)$$

In diesem können nun von der reellen Zeit unabhängige Größen, wie Zerfallskonstanten, Energien von Teilchenzuständen oder Formfaktoren, aus der Entwicklung von Mehrpunkt-funktionen in der euklidischen Zeit ermittelt werden. So bestimmt etwa die 2-Punkt-Funktion,

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}_f(x) \mathcal{O}_i(0) \rangle &= \frac{1}{Z_E} \int \mathcal{D}\phi \quad \mathcal{O}_f(\phi, x) \mathcal{O}_i(\phi, 0) e^{-S^E[\phi]} \\ &= \langle 0 | T[\mathcal{O}_f(x) \mathcal{O}_i(0)] | 0 \rangle, \end{aligned} \quad (2.16)$$

das zeitgeordnete Produkt des Erzeugungsoperators \mathcal{O}_i mit dem Vernichtungsoperator \mathcal{O}_f . Die Operatoren koppeln an Linearkombinationen von Zuständen mit den jeweiligen Quantenzahlen. Wenn die Zustände auf solche mit verschwindendem Impuls projiziert werden, was durch eine Integration über die räumlichen Koordinaten geschieht, lässt sich die Entwicklung der 2-Punkt-Funktion in der euklidischen Zeit nach den Energieeigenzuständen entwickeln:

$$\langle 0 | \int d^3x \mathcal{O}_f(x) \mathcal{O}_i(0) | 0 \rangle = \sum_n \frac{\langle 0 | \mathcal{O}_f | n \rangle \langle n | \mathcal{O}_i | 0 \rangle}{2E_n} e^{-E_n x_4}. \quad (2.17)$$

Für große euklidische Zeiten x_4 wird dieser Ausdruck durch den Beitrag des kleinsten Energieeigenwertes E_1 dominiert und man erhält

$$\lim_{x_4 \rightarrow \infty} \langle 0 | \int d^3x \mathcal{O}_f(x) \mathcal{O}_i(0) | 0 \rangle = \frac{\langle 0 | \mathcal{O}_f | 1 \rangle \langle 1 | \mathcal{O}_i | 0 \rangle}{2E_1} e^{-E_1 x_4} \quad (2.18)$$

für die 2-Punkt-Funktion.

2.2 QCD auf dem Gitter

Nach dem im vorigen Abschnitt Gesagten erhält man für die euklidische Wirkung der QCD mit N_f Quarkflavors im Kontinuum:

$$\mathcal{S}_{QCD}^E = \int d^4x \quad \sum_{q=1}^{N_f} \bar{\psi}_q(x) (\gamma_\mu^E D_\mu + m_q) \psi_q(x) + \frac{1}{2} \text{Sp}[F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x)]. \quad (2.19)$$

Hierbei gilt für die euklidische Form der γ -Matrizen:

$$\gamma_4^E = \gamma^0 \quad , \quad \gamma_i^E = -i\gamma^i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2.20)$$

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird auf die explizite Kennzeichnung der euklidischen γ -Matrizen verzichtet.

Im Folgenden soll nun gezeigt werden, wie die Diskretisierung dieser Wirkung vorgenommen wird und welche möglichen Gitterwirkungen daraus entstehen.

2.2.1 Diskretisierung

Wie im letzten Abschnitt gezeigt wurde, ist die Diskretisierung der Raum-Zeit ein Ansatz, um dem Pfadintegral eine Bedeutung zu geben und damit die Berechnung von Operatoren in der Quantenfeldtheorie zu ermöglichen. Dieser Ansatz, der als Gitter-Regularisierung bezeichnet wird, impliziert natürlich, dass die Materiefelder der Theorie nur noch auf den Gitterpunkten existieren können und die Eichfelder dementsprechend nur auf den Verbindungen zwischen diesen Punkten definiert sind. Am Beispiel freier Materiefelder soll hier diskutiert werden, welche beiden grundsätzlichen Möglichkeiten der Definition von diskretisierten Feldern aus denen des Kontinuums möglich sind.

- Zum einen können die Felder auf dem Gitter als räumlicher Mittelwert der Kontinuumsfelder um den Gitterpunkt herum definiert werden:

$$\psi_n = \frac{1}{a^4} \int_V d^4x \quad \psi(x). \quad (2.21)$$

Das Integrationsvolumen erstreckt sich dabei in jeder Dimension der Raumzeit über das Intervall $x_{n,\mu} - a/2 \leq x_\mu \leq x_{n,\mu} + a/2$. Hier, wie auch im weiteren, bezeichnet a den Gitterabstand. Diese Definition wird in der Literatur auch als „Blockung aus dem Kontinuum“ bezeichnet.

- Zum anderen kann das Kontinuumsfeld an der Stelle x_n als der Wert des Gitterfeldes aufgefasst werden:

$$\psi_n = \psi(x_n). \quad (2.22)$$

Die erste Diskretisierung zeichnet sich gegenüber der zweiten durch ein weiches Abschneiden von ultravioletten Impulsen aus. Es erfolgt für die Blockung aus dem Kontinuum mit

$$\Pi(p) = \frac{2 \sin(pa/2)}{pa}, \quad (2.23)$$

im zweiten Ansatz hingegen durch eine θ -Funktion. Folglich werden die diskretisierten Operatoren im ersten Ansatz wesentlich lokaler sein², gleichzeitig ist jedoch nicht *ad hoc* klar, wie der diskretisierte Operator der Ableitung aussieht. Daher kann die explizite Form der Wirkung nur sehr aufwändig ermittelt werden. Die Unklarheit bezüglich des Ableitungsoperators wiegt um so schwerer, als dass alle Operatoren in einer Feldtheorie sich recht einfach als Funktion von Feld- und Ableitungsoperator darstellen lassen. Daher

²Die Koeffizienten fallen beim ersten Ansatz exponentiell mit wachsendem Abstand der Gitterpunkte ab, bei der zweiten Definition jedoch nur mit $1/|x_i - x_j|^2$ [44].

findet dieses Diskretisierungsschema vor allem bei den „perfekten“ Wirkungen Anwendung, wo ohnehin weitergehende Betrachtungen bei der Konstruktion der Operatoren notwendig werden.

Beim zweiten Ansatz verhält es sich hingegen genau umgekehrt, vor allem der Ableitungsoperator ist sehr leicht zu bestimmen. Dies gilt insbesondere dann, wenn die Diskretisierung nur in niedrigster Ordnung betrachtet wird. Versucht man bei diesem Ansatz jedoch auch größere Gitterabstände zuzulassen und die Operatoren durch kleinere Diskretisierungsfehler zu verbessern, wie dies von Symanzik vorgeschlagen wurde [45], so stellt man fest, dass die Operatoren mit wachsender Ordnung immer weniger lokal sind und eine effiziente Implementierung auf einem Parallelrechner schwieriger wird.

In niedrigster Ordnung jedoch kann als Diskretisierung des Ableitungsoperators entweder die Vorwärtsableitung,

$$\partial_\mu^+ \phi_n = \frac{1}{a}(\phi_{n+\hat{\mu}} - \phi_n), \quad (2.24)$$

oder die Rückwärtsableitung,

$$\partial_\mu^- \phi_n = \frac{1}{a}(\phi_n - \phi_{n-\hat{\mu}}), \quad (2.25)$$

gewählt werden. $\hat{\mu}$ bezeichnet dabei einen Einheitsvektor in μ -Richtung, der auf den nächsten Gitterpunkt zeigt. Zweite Ableitungen werden durch sukzessives Anwenden von Vorwärts- und Rückwärtsableitung erzeugt:

$$\partial_\mu^2 \phi_n = \partial_\mu^- \partial_\mu^+ \phi_n = \partial_\mu^+ \partial_\mu^- \phi_n = \frac{1}{a^2}(\phi_{n-\hat{\mu}} - 2\phi_n + \phi_{n+\hat{\mu}}). \quad (2.26)$$

Eine weitere wichtige Operation, die aus dem Kontinuum auf das diskrete System übertragen werden muss, ist die Integration. Sie wird auf dem Gitter durch die Summation des Integranden auf allen Gitterpunkten ersetzt.

Mit diesem Rüstzeug kann nun die Diskretisierung der QCD-Wirkung angegangen werden.

2.2.2 Gluonen auf dem Gitter

Die gluonische Wirkung der QCD im Kontinuum, die nur die Eichfelder $A_\mu(x)$ enthält, wurde bereits als

$$\mathcal{S}_G = \frac{1}{2} \int d^4x \quad \text{Sp}[F_{\mu\nu}(x)F_{\mu\nu}(x)] \quad (2.27)$$

vorgestellt. Zur Konstruktion des entsprechenden Ausdrucks auf dem Gitter genügen die im letzten Abschnitt vorgestellten Operatoren noch nicht. Vielmehr muss zunächst noch die Link-Variable $U_\mu(x)$ eingeführt werden, welche Felder repräsentiert, die nicht auf den Gitterpunkten selbst, sondern auf den verbindenden Kanten des Gitters existieren. Sie ist der Gitterausdruck für das zeitgeordnete „Produkt“ der Kontinuums-Eichfelder zwischen den Gitterpunkten:

$$U_\mu(x) \equiv T \left[\exp \left(-ig_0 \int_x^{x+a\hat{\mu}} dy A_\mu(y) \right) \right]. \quad (2.28)$$

Für kleine Gitterabstände a gilt dann näherungsweise:

$$U_\mu(x) \approx 1 + ia g_0 A_\mu(x + \frac{1}{2}a\hat{\mu}) + \mathcal{O}(a^2). \quad (2.29)$$

Der kleinste geschlossene Pfad auf dem Gitter, der durch vier Link-Variablen gebildet werden kann, wird als Plaquette bezeichnet:

$$\square_{\mu\nu}(x) \equiv U_\mu(x)U_\nu(x + a\hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + a\hat{\nu})U_\nu^\dagger(x). \quad (2.30)$$

Dabei geht ein, dass

$$U_\mu^\dagger(x) = U_{-\mu}(x + a\hat{\mu}) \quad (2.31)$$

gilt. Mit Hilfe der Plaquette kann nun eine gluonische Gitterwirkung geschrieben werden, welche die Kontinuumswirkung im naiven Limes $a \rightarrow 0$ in $\mathcal{O}(a)$ reproduziert:

$$\mathcal{S}_G^E = \beta \sum_{x,\mu>\nu} \left(1 - \frac{1}{3} \text{Re}(\text{Sp}[\square_{\mu\nu}(x)]) \right). \quad (2.32)$$

Im Fall der QCD ist $\beta \equiv 6/g_0^2$. Ein Festlegen der nackten Kopplung g_0 legt die renormierte Kopplung und damit implizit auch den Gitterabstand fest.

Dies stellt jedoch nur eine mögliche Diskretisierung der Kontinuumswirkung dar. Die Bedingung, im naiven Limes $a \rightarrow 0$ in letztere überzugehen, stellt sich als schwach heraus. Vielmehr lassen sich durch die Addition irrelevanter Terme Wirkungen erstellen, deren Diskretisierungsfehler nur von $\mathcal{O}(a^4)$ oder höher sind.

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird nur die in (2.32) gegebene einfachste Form der gluonischen Wirkung betrachtet. Die Behandlung verbesserter oder „perfekter“ Wirkungen wird sich nur auf den fermionischen Teil beschränken.

2.2.3 Fermionen à la Wilson

Eine naive Diskretisierung des fermionischen Teils der euklidischen Kontinuumswirkung der QCD,

$$\mathcal{S}_F^E = \int d^4x \quad \bar{\psi}(x)(\gamma_\mu D_\mu + m_q)\psi, \quad (2.33)$$

erweist sich als wesentlich problematischer als im Fall des gluonischen Anteils. Wendet man die in Abschnitt 2.2.1 besprochenen Regeln an, benutzt außerdem die Näherung (2.29) und symmetrisiert schließlich den Ausdruck, so erhält man

$$\mathcal{S}_F^{\text{naive}} = \frac{1}{2a} \sum_{x,\mu} \bar{\psi}(x)\gamma_\mu (U_\mu(x)\psi(x + a\hat{\mu}) - U_\mu^\dagger(x - a\hat{\mu})\psi(x - a\hat{\mu})) + m_q \bar{\psi}(x)\psi(x) \quad (2.34)$$

für die fermionische Wirkung auf dem Gitter. Diese Wirkung repräsentiert jedoch nicht nur einen fermionischen Freiheitsgrad, sondern in d Dimensionen vielmehr 2^d entartete Fermionen gleicher Masse, wie an den Polen des Quark-Propagators

$$G(p) = \frac{-i\gamma_\mu \sin(ap_\mu) + am}{\sum_\mu \sin^2(ap_\mu) + (am)^2} \quad (2.35)$$

bei verschwindender Masse m leicht abgezählt werden kann. Zur Lösung dieses Verdopp-
lungsproblems wurden die unterschiedlichsten Ansätze vorgeschlagen. Die am weitesten
verbreiteten stammen von Kogut und Susskind [46] sowie von Wilson [47], wobei hier nur
auf letzteren näher eingegangen werden soll. Er basiert auf der Idee, irrelevante Terme³ in
die Wirkung einzufügen, welche $2^d - 1$ unphysikalische Freiheitsgrade unterdrücken. Dazu
wird eine 2. Ableitung addiert, die diesen Freiheitsgraden eine Masse der Größe $\mathcal{O}(a^{-1})$
gibt und eichinvariant ist:

$$\mathcal{S}_F^W = - \sum_{x,\mu} \frac{r}{2a} \bar{\psi}(x) (U_\mu(x)\psi(x + a\hat{\mu}) - 2\psi(x) + U_\mu^\dagger(x - a\hat{\mu})\psi(x - a\hat{\mu})) . \quad (2.36)$$

Der Wilsonparameter r wird gewöhnlich auf 1 gesetzt. An dieser Stelle ist zu bemerken,
dass der Wilson-Term die chirale Symmetrie der masselosen Kontinuumswirkung explizit
bricht. Alle Versuche, eine lokale, translationsinvariante und hermitesche Gitterwirkung zu
definieren, die eine chirale Symmetrie aufweist und gleichzeitig frei von unphysikalischen
Freiheitsgraden ist, sind jedoch zum Scheitern verurteilt, wie im „No-go“-Theorem von
Nielsen und Ninomiya gezeigt wurde [48].

Durch die Einführung des *hopping*-Parameters,

$$\kappa \equiv \frac{1}{2am + 8r}, \quad (2.37)$$

erhält man nach einer Reskalierung der Fermionfelder,

$$\sqrt{2\kappa}\psi \rightarrow \psi, \quad (2.38)$$

für die fermionische Wirkung nach Wilson

$$\mathcal{S}_F = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) M(x,y)\psi(y), \quad (2.39)$$

mit der Wilson-Fermionmatrix

$$M_W(x,y) = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu=1}^4 [(r - \gamma_\mu)U_\mu(x)\delta_{x+a\hat{\mu},y} + (r + \gamma_\mu)U_\mu^\dagger(x - a\hat{\mu})\delta_{x-a\hat{\mu},y}]. \quad (2.40)$$

Damit gilt in der freien Theorie für die Quarkmasse:

$$am_q = \frac{1}{2\kappa} - 4r. \quad (2.41)$$

In der Theorie mit Eichfeldern erfährt die Quarkmasse eine additive Renormierung und
 κ_c , der Wert des *hopping*-Parameters, bei dem die Quarkmasse verschwindet und der im
freien Fall $\frac{1}{8r}$ ist, verschiebt sich zu größeren Werten. Damit gilt für die Quarkmassen in
der wechselwirkenden Theorie:

$$am_q = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c} \right). \quad (2.42)$$

³Irrelevante Terme verschwinden im naiven Kontinuumsimes.

Der Wert κ_c , welcher von der Kopplung β , dem Wilsonparameter r sowie – bei dynamischen Quarks – vom κ dieser Quarks abhängt, ist *ad hoc* nicht bekannt. Dies ist auf die Tatsache zurückzuführen, dass Wilson-Fermionen auf Grund der durch den Wilson-Term verletzten chiralen Symmetrie eine additive Renormierung erfahren. Der genaue Wert von κ_c kann daher erst im Laufe der Berechnungen ermittelt werden.

Eine weitere Implikation des Wilson-Terms ist das Auftreten von Diskretisierungsfehler der Größe $\mathcal{O}(a)$ bei dieser fermionischen Wirkung. Letzteres stellt bei hinreichend kleinen Gitterabständen kein Problem dar, behindert allerdings die Berechnungen bei größerem a . Daraus folgt unmittelbar ein gesteigerter Rechenaufwand, da größere Gitter zur Darstellung eines festen physikalischen Volumens benötigt werden. Im nächsten Abschnitt soll daher gezeigt werden, wie dieses Problem umgangen werden kann.

2.2.4 Verbesserungen à la Symanzik

In der Regel zeigen diskretisierte Wirkungen ab einer gewissen Ordnung in a Abweichungen zur Kontinuumswirkung. Dies hat bei endlichem Gitterabstand Auswirkungen auf die ermittelten Ergebnisse, da diese natürlich auch nur bis auf höchstens diese Ordnung in a genau sein können. Im Kontinuumslimit verschwinden offensichtlich solche Abweichungen wieder, so dass die exakten Resultate erzielt werden können. In der Praxis leiten sich aus der Extrapolation zu $a \rightarrow 0$ jedoch neue Unsicherheiten ab, da die genauen funktionalen Abhängigkeiten der Observablen vom Gitterabstand *ad hoc* nicht bekannt sind. Um diese Unsicherheiten der Ergebnisse auf Grund des endlichen Gitterabstands zu reduzieren, ist es im Prinzip möglich, durch Hinzufügen von geeigneten irrelevanten Termen, die im Kontinuumslimit verschwinden, die Diskretisierungsfehler Ordnung für Ordnung zu beseitigen [45].

Dabei ist jedoch zu beachten, dass die Wirkung zum einen komplizierter wird, zum anderen die hinzugefügten Operatoren immer weniger lokal werden. Beides wirkt sich negativ auf konkrete Simulationen aus, da der Rechenzeitbedarf ansteigt. Im Fall der fermionischen Wirkung Wilsons zeigt sich allerdings, dass die Diskretisierungsfehler der Größe $\mathcal{O}(a)$ bereits durch den lokalen Sheikholeslami-Wohlert-Term, der in die Wirkung eingesetzt wird, beseitigt werden können [49]. Gleichzeitig sind natürlich auch die Operatoren entsprechend anzupassen. Die fermionische Matrix besteht dann – neben der Wilson-Fermionmatrix – zusätzlich aus dem Term

$$M_{SW}(x, y) = \frac{c_{SW}}{2} \kappa \sum_{\mu, \nu} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \delta_{x,y}. \quad (2.43)$$

Hierbei ist $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ und $F_{\mu\nu}$ ist der diskretisierte Feldstärketensor der Eichfelder $A_\mu(x)$, für den

$$F_{\mu\nu} = \frac{i}{8} (f_{\mu\nu} - f_{\nu\mu}^\dagger) \quad (2.44)$$

gilt, wobei der *clover*-Term $f_{\mu\nu}$ durch

$$\begin{aligned} f_{\mu\nu} = & U_\mu(x) U_\nu(x + a\hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + a\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) \\ & + U_\nu(x) U_\mu^\dagger(x - a\hat{\mu} + a\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x - a\hat{\mu}) U_\mu(x - a\hat{\nu}) \end{aligned}$$

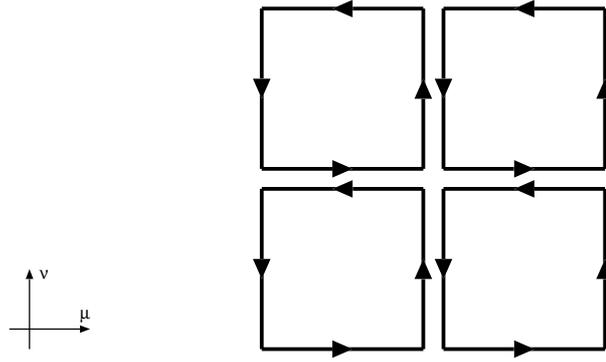


Abbildung 2.1: Graphische Darstellung der Eichfeldprodukte, die zum Feldstärketensor auf dem Gitter beitragen.

$$\begin{aligned}
& + U_\mu^\dagger(x - a\hat{\mu})U_\nu^\dagger(x - a\hat{\mu} - a\hat{\nu})U_\mu(x - a\hat{\mu} - a\hat{\nu})U_\nu(x - a\hat{\nu}) \\
& + U_\nu^\dagger(x - a\hat{\nu})U_\mu(x - a\hat{\nu})U_\nu(x + a\hat{\mu} - a\hat{\nu})U_\mu^\dagger(x)
\end{aligned} \tag{2.45}$$

definiert ist. Abbildung 2.1 zeigt schematisch die Struktur der vier Plaquetten dieses Ausdrucks.

Störungstheoretisch kann in erster Ordnung für den Sheikholeslami-Wohlert-Parameter c_{SW} gezeigt werden, dass er zwar nicht von der Quarkmasse, allerdings mit

$$c_{SW} = 1 + c_{SW}^{(1)}g_0^2 + \mathcal{O}(g_0^4), \quad c_{SW}^{(1)} = 0.2659(1), \tag{2.46}$$

von der Kopplung β abhängt [50]. Allerdings stellt sich bei konkreten Rechnungen schnell heraus, dass bei den in heutigen Simulationen behandelbaren Kopplungen dieses Ergebnis nicht ausreicht, da bei entsprechender Wahl von c_{SW} weiterhin $\mathcal{O}(a)$ -Effekte in den berechneten Observablen zu beobachten sind.

Vielmehr verwendet man eine nichtstörungstheoretische Prozedur, die den Formalismus des Schrödingerfunktional [51] zur Hilfe nimmt, um auch bei größeren Kopplungen ein c_{SW} zu erhalten, das $\mathcal{O}(a)$ -verbesserte Ergebnisse erzielt. Das Resultat für $N_f = 2$ lautet [52]:

$$c_{SW} = \frac{1 - 0.454g_0^2 - 0.175g_0^4 + 0.012g_0^6 + 0.045g_0^8}{1 - 0.720g_0^2}. \tag{2.47}$$

Gleichzeitig gilt es jedoch zu beachten, dass eventuell weitere Parameter zu bestimmen sind, die aus der Verbesserung von Observablen stammen.

2.2.5 Hyperkubische Fermionen

In diesem Abschnitt soll ein weiterer Versuch aufgezeigt werden, Fermionen auf dem Gitter zu behandeln. Hierbei wird, anders als in den beiden bisher vorgestellten Methoden, jedoch die zuvor angesprochene „Blockung aus dem Kontinuum“ benutzt. Ursprünglich sind die hyperkubischen Fermionen im Zusammenhang mit „perfekten“ Wirkungen entwickelt worden. In letzter Zeit werden sie aber auch bei dem Versuch ins Spiel gebracht, Ginsparg-Wilson-Fermionen zu realisieren [53]. Hier soll allerdings nur der Kontext der „perfekten“ Wirkungen nachgezeichnet werden.

Die zentrale Idee der „perfekten“ Wirkungen folgt aus der Erkenntnis, dass die physikalischen Eigenschaften einer gegebenen Gitterwirkung unter einer Renormierungsgruppentransformation (RGT) invariant bleiben. Fasst man etwa die jeweils n^d Punkte der Hyperkuben in d Dimensionen in einem (unendlichen) Gitter zusammen und führt in den Mittelpunkten der Blöcke neue Variablen ein, so erhält man

$$\phi'(x') \sim \sum_{x \in x'} \phi(x) \quad (2.48)$$

als RGT mit Blockfaktor n . Die x sind die ursprünglichen Gitterpunkte, x' die des neuen Gitters. ϕ und ϕ' repräsentieren die alten und die geblockten Felder. Der Ausdruck $x \in x'$ bezeichnet alle Gitterpunkte im Block mit dem Zentrum x' .

Dementsprechend transformiert sich die Gitterwirkung gemäß

$$e^{-S'[\phi']} = \int \mathcal{D}\phi K[\phi', \phi] e^{-S[\phi]}. \quad (2.49)$$

Der Integrationskern K ist so zu wählen, dass die Zustandssumme und alle Observablen invariant unter der RGT bleiben. Es gibt viele Möglichkeiten, K zu wählen [54], eine einfache ist z.B.

$$K[\phi', \phi] = \prod_{x'} \delta \left(\phi'(x') - \frac{\beta_n}{n^d} \sum_{x \in x'} \phi(x) \right), \quad (2.50)$$

wobei β_n ein geeignet zu wählender Renormierungsfaktor ist, der die Reskalierung der Felder auf dem groben Gitter übernimmt. Normalerweise wird im Anschluss der Gitterabstand wieder gleich 1 gesetzt.

Nach unendlich vielen solcher RGT läuft die Wirkung in einen Fixpunkt. Die Fixpunkt-Wirkung $\mathcal{S}^*[\phi]$ ist invariant unter RGT und damit gegenüber Änderungen des Gitterabstands insensitive. Hätte man eine solche perfekte Gitterwirkung ermittelt, könnte man auf sehr groben Gittern also Kontinuumsergebnisse berechnen. Allerdings stellt sich die Bestimmung der Fixpunkt-Wirkung als ein ausgesprochen kompliziertes Problem dar, da im allgemeinen das Funktionalintegral (2.49) in einer Art *bootstrap* unendlich oft gelöst werden müsste.

In einigen Sonderfällen gelingt es jedoch, Fixpunkt-Wirkungen zu bestimmen. So kann man den Integrationskern (2.50) zu einer Faltung mit einer Gaußverteilung verallgemeinern, wobei β_n durch α als Parameter der RGT abgelöst wird. Im Fall freier Fermionen erhält man dann

$$e^{-S'[\bar{\psi}', \psi']} = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S[\bar{\psi}, \psi]} \times \exp \left\{ -\frac{1}{\alpha} \sum_{x'} \left[\bar{\psi}'(x') - \frac{1}{n^{(d+1)/2}} \sum_{x \in x'} \bar{\psi}(x) \right] \left[\psi'(x') - \frac{1}{n^{(d+1)/2}} \sum_{x \in x'} \psi(x) \right] \right\} \quad (2.51)$$

als RGT, für welche die Fixpunkt-Wirkung im Impulsraum analytisch berechnet werden kann [40]. Die Berechnung wird einfach, wenn direkt aus dem Kontinuum geblockt wird, was durch den formalen Grenzwert $n \rightarrow \infty$ in (2.51) erzielt wird. Allerdings kann das

Ergebnis

$$\mathcal{S}^*[\bar{\psi}, \psi] = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} d^d p \bar{\psi}(-p) \Delta^*(p)^{-1} \psi(p)$$

$$\Delta^*(p) = \sum_{l \in \mathbb{Z}^d} \frac{\Pi(p + 2\pi l)^2}{i(p_\mu + 2\pi l_\mu) \gamma_\mu + m} + \alpha, \quad \Pi(p) = \prod_{\mu=1}^d \frac{2 \sin(p_\mu/2)}{p_\mu}, \quad (2.52)$$

in dem Δ^* den perfekten Propagator repräsentiert und m die Masse des Fermions ist, auch aus verschiedenen Gitterwirkungen erzielt werden, unter anderen aus der Wilson-Wirkung. Im Ortsraum kann die Wirkung dann als

$$\mathcal{S}^*[\bar{\psi}, \psi] = \sum_{x,r} \bar{\psi}(x) [\rho_\mu(r) \gamma_\mu + \lambda(r)] \psi(x+r) \quad (2.53)$$

geschrieben werden. Wählt man $\alpha > 0$, so verschwinden die Kopplungen ρ_μ und λ exponentiell mit wachsendem $|r|$. Im eindimensionalen Fall $d = 1$ kann bei der Wahl

$$\alpha = \frac{e^m - m - 1}{m^2} \quad (2.54)$$

gezeigt werden, dass die Kopplungen auf die nächsten Nachbarn beschränkt sind und bei größeren Distanzen verschwinden. Bei höherdimensionalen Theorien verschwinden die Kopplungen bei der angegebenen Wahl immer noch sehr schnell. Dies motiviert die Näherung, für praktische Berechnungen die Kopplungen auf den Hyperkubus zu beschränken. Trotz dieser Näherung sind die spektralen und thermodynamischen Eigenschaften der so beschriebenen Fermionen immer noch deutlich besser, als die durch die Wilson-Wirkung beschriebenen [55, 56].

Unglücklicherweise scheitert der Versuch, die bisher auf freie Fermionen angewendeten Berechnungen, für solche zu wiederholen, die durch Eichfelder gekoppelt sind. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit, motiviert durch andere Arbeiten [57, 58], eine Methode entwickelt und veröffentlicht [110], mit der die Eichfelder „von Hand“ in die fermionische Wirkung eingeführt werden. Dies hat sicherlich zur Folge, dass einige der Eigenschaften, die man sich von „perfekten“ Wirkungen verspricht, verloren gehen oder nur noch abgeschwächt vorhanden sind. Gleichzeitig besteht jedoch die Hoffnung, dass die so erhaltene Wirkung immer noch bessere Eigenschaften hat, als die fermionische Wirkung Wilsons. Neuere Untersuchungen bestätigen diese Hoffnung [53].

Die Eichung „von Hand“ geschieht, indem in die Wirkung für das freie Fermion explizit Eichfelder eingefügt werden. Da die Wirkung (2.53) neben den Kopplungen zwischen nächsten Nachbarn auch solche in Richtung der 2-, 3- und 4-dimensionalen Diagonalen im Hyperkubus enthält, müssen für diese geeignete Eichfelder definiert werden, die im weiteren als *Hyperlinks* bezeichnet werden. Der hier gewählte Weg ist in Abbildung 2.2 skizziert. Dabei werden für die *Hyperlinks* die Eichfelder entlang der kürzesten Pfade auf dem Gitter, welche die beiden Endpunkte der Diagonale verbinden, aufmultipliziert und über die verschiedenen Pfade gemittelt. Für eine d -dimensionale Diagonale ist dabei der Mittelwert über $d!$ verschiedene, kürzeste Pfade zu berechnen.

Eine Vereinfachung für die Implementierung kann dadurch erzielt werden, dass die Definition der *Hyperlinks* rekursiv erfolgt. Dazu wird der eindimensionale Hyperlink $U_\mu^{(1)}(x)$ mit

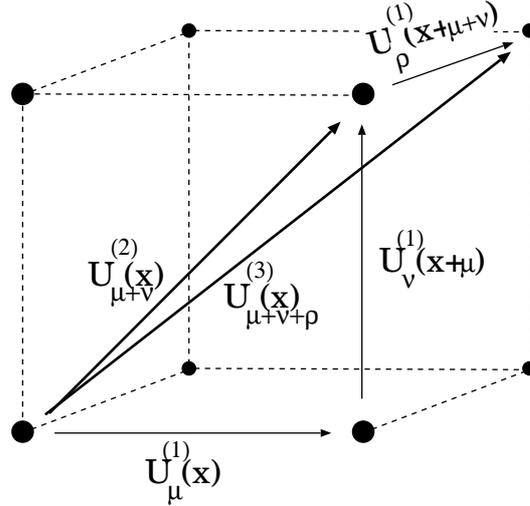


Abbildung 2.2: *Hyperlinks* in einer, zwei und drei Dimensionen.

dem Eichfeld $U_\mu(x)$ zwischen den Punkten x und $x + \hat{\mu}$ identifiziert. Die *Hyperlinks* entlang der 2-, 3- und 4-dimensionalen Diagonalen seien mit $U_{\mu+\nu}^{(2)}(x)$, $U_{\mu+\nu+\rho}^{(3)}(x)$ und $U_{\mu+\nu+\rho+\sigma}^{(4)}(x)$ bezeichnet. Diese sind dann durch die Vorschrift

$$\begin{aligned}
 U_{\mu_1+\mu_2+\dots+\mu_d}^{(d)} &= \frac{1}{d} \left[U_{\mu_1}^{(1)}(x) U_{\mu_2+\mu_3+\dots+\mu_d}^{(d-1)}(x + \hat{\mu}_1) \right. \\
 &\quad + U_{\mu_2}^{(1)}(x) U_{\mu_1+\mu_3+\dots+\mu_d}^{(d-1)}(x + \hat{\mu}_2) \\
 &\quad \vdots \\
 &\quad \left. + U_{\mu_d}^{(1)}(x) U_{\mu_1+\mu_2+\dots+\mu_{d-1}}^{(d-1)}(x + \hat{\mu}_d) \right] \quad (2.55)
 \end{aligned}$$

rekursiv aus den Eichfeldern $U_\mu^{(1)}(x)$ definiert. Es ist nützlich, für eine weitere Umformulierung der Wirkung (2.53) die Vorfaktoren

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{\pm\mu} &= \lambda_1 + \kappa_1(\pm\gamma_\mu) \\
 \Gamma_{\pm\mu\pm\nu} &= \lambda_2 + \kappa_2(\pm\gamma_\mu \pm \gamma_\nu) \\
 \Gamma_{\pm\mu\pm\nu\pm\rho} &= \lambda_3 + \kappa_3(\pm\gamma_\mu \pm \gamma_\nu \pm \gamma_\rho) \\
 \Gamma_{\pm\mu\pm\nu\pm\rho\pm\sigma} &= \lambda_4 + \kappa_4(\pm\gamma_\mu \pm \gamma_\nu \pm \gamma_\rho \pm \gamma_\sigma) \quad (2.56)
 \end{aligned}$$

einzuführen, die von den *hopping*-Parametern κ_i und λ_i , $i = 1, \dots, 4$ sowie Summen von γ -Matrizen abhängen. Hier ist zu beachten, dass die λ_i in (2.56) sich von den $\lambda(r)$ in (2.53) in einem Faktor $\frac{1}{\lambda_0}$ unterscheiden. Dasselbe gilt für die κ_i und $\rho_\mu(r)$. Die Größe dieser *hopping*-Parameter kann unter Verwendung von (2.52) und (2.53) in Abhängigkeit von der Masse m berechnet werden. Sie sind in Abbildung 2.3 für den im weiteren Verlauf der Arbeit betrachteten Massenbereich dargestellt.

Mit diesen Definitionen erhält man schließlich für die fermionische Matrix der hyperkubischen Fermionen:

$$M_{HF}(x, y) = \lambda_0 \left\{ \delta_{x, y} \right.$$

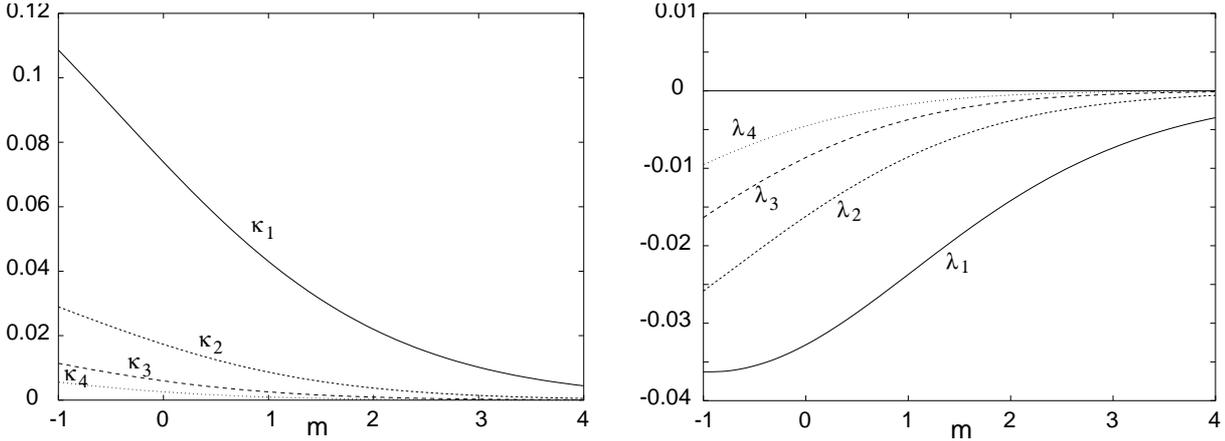


Abbildung 2.3: Die *hopping*-Parameter κ_i und λ_i als Funktion der Masse m .

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} \Gamma_{\mu} U_{\mu}^{(1)}(x) \delta_{x,y-\hat{\mu}} \\
& + \frac{1}{2!} \sum_{\mu,\nu=\pm 1}^{\pm 4} \Gamma_{\mu\nu} U_{\mu+\nu}^{(2)}(x) \delta_{x,y-\hat{\mu}-\hat{\nu}} \\
& + \frac{1}{3!} \sum_{\mu,\nu,\rho=\pm 1}^{\pm 4} \Gamma_{\mu\nu\rho} U_{\mu+\nu+\rho}^{(3)}(x) \delta_{x,y-\hat{\mu}-\hat{\nu}-\hat{\rho}} \\
& + \frac{1}{4!} \sum_{\mu,\nu,\rho,\sigma=\pm 1}^{\pm 4} \Gamma_{\mu\nu\rho\sigma} U_{\mu+\nu+\rho+\sigma}^{(4)}(x) \delta_{x,y-\hat{\mu}-\hat{\nu}-\hat{\rho}-\hat{\sigma}} \} \quad (2.57)
\end{aligned}$$

Die Summen in diesem Ausdruck laufen über die 8 Richtungen der üblichen Eichfelder sowie die 24, 32 bzw. 16 Richtungen der 2-, 3- und 4-dimensionalen *Hyperlinks*. Insgesamt tragen also 80 *Hyperlinks* zur fermionischen Matrix bei und zu jedem existiert eine korrespondierende effektive Γ -Matrix.

Da analog zu (2.31) auch hier für die hermitesch-konjugierten *Hyperlinks* gilt:

$$U_{\mu_1+\mu_2+\dots+\mu_d}^{\dagger(d)}(x) = U_{-\mu_1-\mu_2-\dots-\mu_d}^{(d)}(x + \hat{\mu}_1 + \hat{\mu}_2 + \dots + \hat{\mu}_d), \quad (2.58)$$

genügt es bei einer Implementierung dieser fermionischen Matrix auf dem Computer nur die Hälfte der 80 Felder zu speichern.

2.3 Gittersimulationen

Wie bereits in Abschnitt 2.1.2 beschrieben wurde, erlaubt die Pfadintegralformulierung die Auswertung einer Theorie auf dem euklidischen Gitter. Im Fall der QCD erhält man für den Erwartungswert eines Operators \mathcal{O} den Ausdruck

$$\langle \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, U) \rangle = \frac{1}{Z_E} \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, U) e^{-S^E[\bar{\psi}, \psi, U]}, \quad (2.59)$$

mit der Zustandssumme

$$Z_E = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \quad e^{-\mathcal{S}^E[\bar{\psi}, \psi, U]}, \quad (2.60)$$

wobei \mathcal{S}^E durch eine der im letzten Abschnitt besprochenen Gitterwirkungen ersetzt wird. Das hochdimensionale Integral (2.59) ist in der Praxis meist nur durch eine näherungsweise stochastische Integration zu lösen. Hierbei tritt jedoch das Problem auf, dass die fermionischen Freiheitsgrade $\bar{\psi}$ und ψ als Grassmann-Variablen nicht auf dem Gitter dargestellt werden können. Allerdings ermöglicht die spezielle Form des fermionischen Teils der bisher besprochenen Gitterwirkungen, in denen die Grassmann-Variablen immer nur in einem bilinearen Ausdruck $\mathcal{S}_f = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) M(x,y) \psi(y)$ auftreten, dass die Integration über die fermionischen Freiheitsgrade explizit durchgeführt werden kann:

$$\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \quad e^{-\mathcal{S}^E[\bar{\psi}, \psi, U]} \rightarrow \int \mathcal{D}U \quad \det(M[U]) e^{-\mathcal{S}_G^E[U]}. \quad (2.61)$$

Die Berechnung der fermionischen Determinante $\det(M[U])$ stellt die wesentliche Herausforderung bei der Auswertung einer Theorie mit Fermionen auf dem Gitter dar. Während die Eichwirkung \mathcal{S}_G^E eine lokale Größe ist und somit auf Parallelcomputern effektiv zu implementieren ist, stellt die Berechnung einer Determinante ein hochgradig nichtlokales Problem dar. Daher wurde in der *quenched*-Näherung der Einfluss der fermionischen Determinante auf das Pfadintegral einfach vernachlässigt und durch eine Konstante ersetzt. Dies entspricht einer Theorie, in der die Fermionen unendliche Masse besitzen und somit das Entstehen von virtuellen Fermion-Antifermion Paaren unmöglich ist. Der im nächsten Abschnitt besprochene Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus (HMC) stellt hingegen eine Möglichkeit dar, den Einfluss dieser dynamischen Fermionen auf die physikalischen Ergebnisse zu ermitteln.

Die stochastische Integration geschieht durch die Berechnung einer Observablen \mathcal{O} auf N_{conf} Eichfeldkonfigurationen U_i und der Mittelwertbildung über die Ergebnisse

$$\langle \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, U) \rangle = \frac{1}{N_{conf}} \sum_i^{N_{conf}} \mathcal{O}[U_i]. \quad (2.62)$$

Die U_i müssen dabei entsprechend dem Wahrscheinlichkeitsmaß

$$d\mathcal{P}(U) \sim \mathcal{D}U \quad \det(M[U]) e^{-\mathcal{S}_G^E[U]} \quad (2.63)$$

verteilt sein (*importance sampling*) [59]. Der im nächsten Abschnitt besprochene HMC Algorithmus stellt eine Möglichkeit dar, eine Markovkette gemäß (2.63) verteilter Eichfeldkonfigurationen zu erzeugen.

2.3.1 Der Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus

Der HMC Algorithmus [26] kombiniert die Molekulardynamik (MD) Methode mit der Idee des Wärmebades (*heatbath*) und der Metropolis Monte-Carlo Methode. Er ist exakt im Sinne einer Konvergenz des Markovprozesses gegen die gewünschte Verteilung,

ohne systematische Fehler, solange der molekulardynamische Teil des Algorithmus exakt reversibel und flächenerhaltend ist.

Die fermionische Determinante wird im HMC Algorithmus durch die Einführung bosonischer Freiheitsgrade ϕ generiert, die als Pseudofermionen bezeichnet werden⁴. Gleichzeitig werden zu den Eichfeldern U kanonisch-konjugierte Impulse P eingeführt. Damit kann die Zustandssumme zweier massenentarteter Fermionen,

$$Z_E = \int \mathcal{D}U \quad \det(M[U])^2 e^{-S_G^E[U]}, \quad (2.64)$$

in

$$Z_E = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}U \mathcal{D}P \quad e^{-\mathcal{H}[P,U,\phi]} \quad (2.65)$$

übergeführt werden⁵. Da die fermionische Determinante in der Zustandssumme (2.64) quadratisch auftritt, hat der Hamiltonoperator \mathcal{H} die Form:

$$\mathcal{H}[P,U,\phi] = \frac{1}{2} \text{Sp}(P_\mu^2) + S_G^E[U] + \phi^\dagger (M^\dagger[U]M[U])^{-1} \phi. \quad (2.66)$$

Bei der Behandlung nicht entarteter Fermionen würde der letzte Term dieses Operators seine einfache Struktur verlieren, was die weitere Behandlung ungleich komplizierter und rechenzeitaufwändiger macht [33].

Physikalische Observablen bleiben von der Einführung des spurlosen Operators P unberührt, da die Wahrscheinlichkeitsverteilung faktorisiert:

$$\mathcal{H}[P,U,\phi] = \mathcal{S}(P) + S_G^E[U] + S_F[\phi,U] \quad \Rightarrow \quad \mathcal{P}(P,U,\phi) \propto \mathcal{P}(P)\mathcal{P}(U,\phi). \quad (2.67)$$

Die Aufgabe besteht nun darin, Eichfeldkonfigurationen zu erzeugen, die gemäß (2.65) verteilt sind. Die Erzeugung solcher Konfigurationen geschieht in 3 Schritten:

- Zunächst müssen die Pseudofermionen ϕ und die konjugierten Impulse P in einem Wärmebad initialisiert werden.
- Anschließend lässt man die Eichfelder und Impulse mittels einer MD in einer fiktiven Monte-Carlo Zeit evolvieren. Dies geschieht gemäß den Hamiltonschen Gleichungen:

$$\frac{\partial U_\mu}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial P_\mu}, \quad \frac{\partial P_\mu}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial U_\mu}. \quad (2.68)$$

In die Berechnung der Trajektorie des Systems gehen die Schrittweite in der fiktiven Zeit Δt sowie die Anzahl der MD-Schritte, n_{MD} , ein. Die Effizienz des Algorithmus wird durch diese beiden Parameter gesteuert.

- Als letzter Schritt sorgt eine Metropolis-Abfrage, bei der die Energien des Systems vor und nach der MD verglichen werden, für die Exaktheit des Verfahrens. Die Trajektorie wird dabei mit der Wahrscheinlichkeit

$$\mathcal{P} = \min(1, e^{-\Delta E}), \quad \text{mit} \quad \Delta E = E_{neu} - E_{alt}, \quad (2.69)$$

akzeptiert.

⁴Dazu müssen bei allen Operationen, welche auf die pseudofermionischen Freiheitsgrade rekurren, antiperiodische Randbedingungen in Zeitrichtung angewandt werden.

⁵Da die pseudofermionischen Freiheitsgrade ein festes Hintergrundfeld darstellen, werden keine entsprechenden kanonisch-konjugierten Impulse benötigt.

Als rechenzeitintensivster Teil dieses Algorithmus stellt sich die Berechnung der neuen Impulse P heraus, da zur Bestimmung der fermionischen Kraft das lineare Gleichungssystem

$$M^\dagger[U]M[U]\psi = \phi \quad (2.70)$$

in jedem MD-Schritt gelöst werden muss. In Kapitel 4 wird daher genauer auf die Methoden der Matrixinversion sowie den im Rahmen dieser Arbeit erzielten Verbesserungen eingegangen.

2.3.2 Fehler und Extrapolationen

Naturgemäß sind die Operatorerwartungswerte, die durch Gitterrechnungen erzielt werden, einer Reihe von Näherungen unterworfen. Um sie mit experimentellen Ergebnissen vergleichen zu können, müssen daher noch Extrapolationen zur korrekten Kontinuums-theorie durchgeführt werden. Gleichzeitig sind mögliche Fehler unter Kontrolle zu halten.

Statistische Fehler Aus der in (2.62) angegebenen Vorschrift zur Berechnung einer Observablen ist sofort klar, dass letztere mit einem statistischen Fehler behaftet ist. Die naive Angabe dieses Fehlers ist jedoch nur solange richtig, wie die in den Erwartungswert eingehenden Konfigurationen statistisch unabhängig sind. Die Unabhängigkeit der Konfigurationen kann durch eine Autokorrelationsanalyse festgestellt werden, die aber im Prinzip für jede Observable durchzuführen ist.

In dieser Arbeit wird eine Restkorrelation zwischen den verschiedenen Konfigurationen in Kauf genommen. Gleichzeitig werden jedoch die Auswirkungen dieser Korrelationen auf die statistischen Fehler von Observablen durch das Jackknife-Verfahren kontrolliert, so dass korrekte Fehler angegeben werden. Auf dieses Verfahren wird in Abschnitt 3.3 genauer eingegangen.

Endliches Volumen Sollen Resultate, die mit der Gitterregularisierung erzielt wurden, mit solchen aus dem Kontinuum verglichen werden, so ist zu zeigen, dass keine systematischen Effekte des Gittervolumens die Gitterergebnisse beeinflussen. Dazu ist der Vergleich von Ergebnissen notwendig, die auf verschiedenen Gittervolumina $L^3 \times T$ bei festen Parametern β und κ erzielt wurden.

Ein Kriterium, um Effekte der endlichen Gittergröße vernachlässigen zu können, lässt sich mit Hilfe der Korrelationslänge ξ formulieren, die dem Inversen der Masse des leichtesten Zustands auf dem Gitter, des Pions, entspricht. In Gittereinheiten sollte

$$1 \ll \xi \approx 1/am_\pi \ll L \quad (2.71)$$

für die Gitterausdehnung L gelten. In der Praxis zeigt sich, dass bereits $am_\pi L \geq 5$ ausreicht.

Leichte Quarkmassen Die Erzeugung von Konfigurationen mit Massen der dynamischen Quarks im Bereich der *up*- bzw. *down*-Quarkmassen liegt jenseits des zur Zeit technisch Machbaren [19, 20]. Dies folgt vor allem aus den durch (2.71) geforderten Gittergrößen und dem damit wachsenden Aufwand, die fermionische Matrix zu invertieren. Dieser

Aufwand erfährt eine weitere Steigerung dadurch, dass mit kleiner werdender Quarkmasse und der damit verbundenen Annäherung des *hopping*-Parameters κ an den kritischen Wert κ_c die Konditionszahl der fermionischen Matrix wächst. Schließlich ist der kritische *hopping*-Parameter κ_c durch die Simulationsparameter nicht eindeutig für die gesamte Markovkette bestimmt, sondern fluktuiert in Abhängigkeit der einzelnen Eichkonfigurationen. Gerät der eingestellte *hopping*-Parameter in den Bereich des fluktuierenden kritischen Wertes, so kann die fermionische Matrix singularär werden. Die Lösung des linearen Gleichungssystems ist dann natürlich nicht möglich.

Berechnungen mit dynamischen Quarks werden daher bei Quarkmassen im Bereich der Masse des *strange*-Quarks durchgeführt und die Resultate anschließend unter Zuhilfenahme von Ergebnissen aus der chiralen Störungstheorie in den Bereich der physikalischen leichten Quarks extrapoliert. Auf Grund der Tatsache, dass Gitterresultate fehlerbehaftet sind, kann die Abschätzung des Gültigkeitsbereichs der chiralen Störungstheorie schwierig und der Extrapolationsansatz uneindeutig sein.

Kontinuumslices Der Gitterabstand a wird implizit durch die Wahl der Parameter β und κ festgelegt und durch den Vergleich von hadronischen Observablen auf dem Gitter – wie ρ -Masse, Nukleonmasse, π -Zerfallskonstante oder der Sommerskala r_0 – mit den zugehörigen experimentellen Messwerten ermittelt.

Die Bestimmung von Kontinuumsergebnissen auf dem Gitter geschieht nun, indem Gitterresultate für verschiedene Gitterabstände a ermittelt und mittels der Extrapolation $a \rightarrow 0$ ins Kontinuum fortgesetzt werden. Zu diesem Zweck wurden die vorhandenen Konfigurationen von SESAM und T χ L, die mit einer Kopplungskonstanten $\beta = 5.6$ erzeugt wurden, durch einen Satz ergänzt, bei dem $\beta = 5.5$ gewählt wurde.

Ohne Bildung des Kontinuumslices erwartet man, dass bei hinreichend kleinen Gitterabständen von $a \approx 0.05 - 0.1$ fm der Einfluss des Gitterabstands wenigstens bei Verhältnissen hadronischer Observablen vernachlässigt werden kann, da sich die jeweiligen $\mathcal{O}(a)$ -Effekte auf die Massen gegenseitig kompensieren. Dieser Bereich des Gitterabstands wird als Skalierungsfenster bezeichnet. Die Parameter zur Erzeugung der hier verwendeten Konfigurationen wurden so gewählt, dass der Gitterabstand in diesem Bereich liegt.

2.3.3 Die $N_f = 2$ Simulationen von SESAM / T χ L

Die den Analysen in Kapitel 3 zu Grunde liegenden Eichfeldkonfigurationen wurden im Rahmen der SESAM⁶ [22] und T χ L⁷ [23] Kollaborationen generiert. Dabei wurde der HMC Algorithmus benutzt, um insgesamt 10 Sätze von jeweils etwa $\mathcal{O}(100)$ statistisch unabhängigen Konfigurationen bei verschiedenen Werten der Kopplungskonstante β und des *hopping*-Parameters κ zu erzeugen. Die Gitterabstände ergaben sich dabei zu $a \sim 0.1$ fm. Die verschiedenen Parameter, die bei der Erzeugung der Konfigurationen verwendet wurden, sind in Tabelle 2.1 wiedergegeben.

Auf Grund der Einschränkung des HMC Algorithmus, nur zwei massenentartete Fermionen behandeln zu können, sowie den bereits angesprochenen Beschränkungen bei der Wahl

⁶Sea Quark Effects on Spectrum And Matrix Elements

⁷Towards the Chiral Limit

β	$L^3 \times T$	κ	N_{traj}	N_{conf}	m_{PS}/m_V	$\langle \frac{1}{3}\text{Sp}\square \rangle$
5.5	$16^3 \times 32$	0.1580	4000	119	0.854(2)	0.55547(4)
		0.1590	4500	140	0.803(9)	0.55816(4)
		0.1596	5500	199	0.753(6)	0.55974(6)
		0.1600	5500	200	0.675(10)	0.56078(5)
5.6	$16^3 \times 32$	0.1560	5700	198	0.834(3)	0.56988(2)
		0.1565	5900	208	0.812(9)	0.57072(2)
		0.1570	6000	201	0.762(7)	0.57159(3)
		0.1575	6500	206	0.684(8)	0.57254(3)
	$24^3 \times 40$	0.1575	5100	185	0.701(6)	0.57248(1)
		0.1580	4500	158	0.566(14)	0.57337(2)

Tabelle 2.1: Die Parameter zur Erzeugung der Konfigurationen.

des *hopping*-Parameters κ , ist die Behandlung der physikalischen Situation mit drei leichten Quarks unterschiedlicher Masse natürlich nicht möglich. Ein Maß für die Annäherung an die physikalische Realität stellt das Massenverhältnis m_{PS}/m_V dar, das ebenfalls in Tabelle 2.1 angegeben ist. Die physikalischen Pendanten dieser beiden Massen auf dem Gitter stellen die Masse des π -Mesons, M_π , und die des ρ -Mesons, M_ρ , dar. Es ist zu bemerken, dass die Schwelle $m_{PS}/m_V = 0.5$, die den Zerfall $\rho \rightarrow 2\pi$ zulässt, nicht unterschritten wurde und der experimentelle Wert $M_\pi/M_\rho = 0.1784$ nicht annähernd erreicht werden konnte.

Die Konfigurationen zu $\beta = 5.6$ und $\kappa = 0.1575$, die sowohl auf einem Gitter mit $16^3 \times 32$ als auch mit $24^3 \times 40$ Punkten erzeugt wurden, erlauben es, eine erste Analyse zur Volumenabhängigkeit der Ergebnisse anstellen zu können. Die auf den Konfigurationen ermittelten π -Massen erfüllen im wesentlichen das Kriterium $am_\pi L \geq 5$.

Die Anzahl der berechneten HMC-Trajektorien betrug jeweils $\mathcal{O}(5000 - 6000)$, wobei die ersten $\mathcal{O}(1000)$ der Thermalisierungsphase zugeordnet und verworfen wurden. In einer Autokorrelationsanalyse [60] wurde für die Konfigurationen mit $\beta = 5.6$ gezeigt, dass die integrierte Autokorrelationszeit im Bereich $\tau_{int} < 50$ Trajektorien beträgt. Daher wurden jeweils $\mathcal{O}(200)$ Konfigurationen im Abstand von etwa 25 Trajektorien ausgewählt und für die weiteren Auswertungen benutzt.

Die Berechnung der Eichfeldkonfigurationen erfolgte auf APE100 [61] Parallelrechnern der Universität Bielefeld (QH2), des INFN Rom (QH4), der ENEA Casaccia (QH4) sowie am IfH des DESY in Zeuthen (QH4). Die Berechnungen der Observablen erfolgte auf der Cray T90 bzw. T3E des ZAM Jülich sowie auf dem Parallelrechner ALiCE der Universität Wuppertal. Die Gesamtrechnzeit, die in die Erzeugung dieser Simulationen eingeflossen ist, beträgt etwa 600 TFlop-Stunden.



Kapitel 3

Quarkmassen

Da Quarks im Standardmodell die elementaren Bausteine der hadronischen Materie¹ sind, ist es von besonderem Interesse, ihre Massen zu kennen. Allerdings entziehen sie sich auf Grund des Phänomens des Einschusses der direkten Beobachtung und sind nur in gebundenen Zuständen von zwei oder mehr Quarks anzutreffen. Dies macht die Bestimmung ihrer Massen umso komplizierter. Es verwundert daher nicht, dass die Quarkmassen zu den Parametern des Standardmodells zählen, bei denen die Kenntnis der absoluten Größe mit den größten Unsicherheiten behaftet ist. In ihrer neuesten Ausgabe zitiert die *Particle Data Group* für die Massen der leichten Quarks im $\overline{\text{MS}}$ -Schema bei einer Skala von 2 GeV die folgenden Werte [63]:

$$\begin{aligned}m_u &= 1 - 5 \text{ MeV}, \\m_d &= 3 - 9 \text{ MeV}, \\m_s &= 75 - 170 \text{ MeV}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Die dort angegebenen Werte sind Mittelwerte verschiedener Untersuchungen. Die Ergebnisse für die *up*- und *down*-Quarks ergeben sich aus Berechnungen in der chiralen Störungstheorie, mit denen Massenverhältnisse ermittelt werden können, und anschließender Bestimmung eines absoluten Wertes mit Hilfe von QCD-Summenregeln. Da in heutigen Gitterrechnungen nur zwei massenentartete leichte Quarks behandelt werden können, ist hier die Berechnung von m_u bzw. m_d natürlich nicht möglich. Vielmehr kann nur die Masse dieses doppelt auftretenden, unphysikalischen leichten Quarks bestimmt werden, die üblicherweise mit $\bar{m} = (m_u + m_d)/2$ bezeichnet wird. Die *Particle Data Group* gibt diese Masse mit $\bar{m} = 2.5 - 6 \text{ MeV}$ an, wobei in dieses Ergebnis, ebenso wie in m_s , auch Gitterresultate einfließen [41].

In diesem Kapitel wird zunächst genauer auf den theoretischen Hintergrund der Quarkmassenbestimmung eingegangen. Anschließend wird dargestellt, wie die für die Quarkmassenberechnung benötigten Operatoren auf dem Gitter berechnet werden. Den Hauptteil macht die Präsentation der eigentlichen Quarkmassenbestimmung aus.

3.1 Theoretische Grundlagen

Da Quarks, anders als Leptonen, in der Natur nicht als freie Teilchen beobachtbar sind, kann ihre Masse nicht direkt gemessen werden. Vielmehr kann diese nur indirekt durch ihren Einfluss auf Eigenschaften der Hadronen bestimmt werden. Dies hat zur Folge, dass die Größe der Quarkmassen von der Definition der Messprozedur abhängt, wobei es keine kanonische Wahl des Verfahrens gibt. Die Abhängigkeit der Quarkmassen vom

¹Eine Ausnahme stellen die *glueballs* dar, welche neben Seequarks nur gluonischen Inhalt aufweisen [62]. Sie sind bisher jedoch noch nicht experimentell nachgewiesen.

Berechnungsschema sollte also immer im Auge behalten werden, obwohl über sie oft wie über direkt messbare Massen gesprochen wird, wie etwa die Elektronmasse.

Die einfachste Möglichkeit der Definition von Quarkmassen ist im Kontext nichtrelativistischer Quarkmodelle zu finden, wo sie als Parameter eingehen. Indem das Spektrum des Modells an die physikalischen Hadronmassen angepasst wird, sind indirekt die Parameter und damit auch die Quarkmassen zu ermitteln. Allerdings haben diese Massen nur im Rahmen des jeweiligen Modells eine Bedeutung und zeigen dabei eine Abhängigkeit vom gewählten Potential und der Art und Weise, wie relativistische Effekte modelliert werden. Insbesondere gibt es keinen direkten Zusammenhang zwischen den so definierten Quarkmassen und den Massenparametern m_q im Wirkungsfunktional der QCD,

$$\mathcal{S}_{QCD} = \int d^4x \sum_{q=1}^{N_f} \bar{\psi}_q(x) (\gamma^\mu D_\mu + m_q) \psi_q(x) + \frac{1}{2} \text{Sp}[F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x)]. \quad (3.2)$$

Aus diesem können mit Hilfe einer Renormierungsvorschrift endliche Observablen wie Streuamplituden oder Hadronmassen errechnet werden. Dazu ist es jedoch notwendig, eine Renormierungsskala μ einzuführen. Die daraus indirekt bestimmbaren renormierten Quarkmassen hängen dabei sowohl von der Renormierungsvorschrift als auch von der Skala ab. Üblicherweise werden Observablen im $\overline{\text{MS}}$ -Schema angegeben.

Für verschwindende Massenparameter m_q weist die Wirkung der QCD eine chirale Symmetrie auf. Diese ist zum einen explizit durch die nichtverschwindenden Quarkmassen verletzt, zum anderen durch eine spontane Brechung, die sich z. B. im Spektrum der Hadronen zu erkennen gibt. Die unterschiedlichen Aspekte der beiden Symmetrieverletzungen erlauben es, die Skala der chiralen Symmetriebrechung, Λ_χ , zu definieren. Bei Energien kleiner als Λ_χ dominiert die spontane Symmetriebrechung, bei größeren Energien hingegen die explizite. Gleichzeitig ist Λ_χ ein natürliches Kriterium dafür, ob Quarks als leicht oder schwer klassifiziert werden. Solche mit $m_q < \Lambda_\chi$, also *up*, *down* und *strange*, bezeichnet man als leicht, die mit $m_q > \Lambda_\chi$, also *charm*, *top* und *bottom*, hingegen als schwer. Die weitere Diskussion wird sich auf die leichten Quarks beschränken.

An dieser Stelle sollen nun kurz einige Methoden zur Bestimmung der leichten Quarkmasse vorgestellt werden, bevor die Berechnung auf dem Gitter diskutiert wird.

Als wichtigste Methode stellt sich dabei die chirale Störungstheorie heraus, mit deren Hilfe Quarkmassenverhältnisse leicht ausgerechnet werden können. Auf sie wird auch im Rahmen der Gittermethode zurückgegriffen werden. Bei dieser Berechnungsmethode macht man sich zunutze, dass der Massenterm der QCD-Wirkung der einzige ist, der links- und rechtshändige Quarks aneinander koppelt, also die chirale Symmetrie bricht. Aus einer systematischen Analyse dieser expliziten Brechung der Symmetrie können dann Informationen bezüglich der Quarkmassen gezogen werden.

Üblicherweise betrachtet man die Spinoren der drei leichten Quarks u , d und s in einem Spaltenvektor Ψ angeordnet und schreibt den Massenterm der QCD-Wirkung als

$$\bar{\Psi} M \Psi = \bar{\Psi}_L M \Psi_R + \bar{\Psi}_R M \Psi_L, \quad (3.3)$$

mit den links- bzw. rechtshändigen Spinoren Ψ_L und Ψ_R sowie der Quarkmassenmatrix

$$M = \begin{pmatrix} m_u & 0 & 0 \\ 0 & m_d & 0 \\ 0 & 0 & m_s \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Im Grenzwert $M \rightarrow 0$ existieren unabhängige $SU(3)$ Symmetrien für links- und rechtshändige Quarks im Raum der Quarkflavors. Diese chirale Symmetrie $G_\chi = SU(3)_L \times SU(3)_R$ der QCD-Wirkung erfährt eine spontane Brechung, was zum Ausbilden von acht masselosen Goldstone-Bosonen führen würde, wenn $M = 0$ gälte. Die Goldstone-Bosonen, welche mit den π -Mesonen, den K-Mesonen sowie dem η -Teilchen identifiziert werden, sind tatsächlich jedoch nicht masselos, da die Quarkmassenmatrix M von Null verschieden ist und die chirale Symmetrie somit nur näherungsweise erfüllt ist. Die Abhängigkeit der Masse der Goldstone-Bosonen von der Quarkmassenmatrix M und weiteren, störungstheoretisch nicht zu berechnenden Größen, kann systematisch untersucht werden. In erster Ordnung erhält man für die pseudoskalaren Mesonen etwa

$$\begin{aligned} m_{\pi^0}^2 &= B(m_u + m_d), \\ m_{\pi^\pm}^2 &= B(m_u + m_d) + \Delta_{em}, \\ m_{K^0}^2 = m_{\bar{K}^0}^2 &= B(m_d + m_s), \\ m_{K^\pm}^2 &= B(m_u + m_s) + \Delta_{em}, \\ m_\eta^2 &= \frac{1}{3}B(m_u + m_d + 4m_s), \end{aligned} \quad (3.5)$$

mit den unbekanntem Parametern B und Δ_{em} , der elektromagnetischen Massendifferenz [64]. Daraus können sofort die Quarkmassenverhältnisse,

$$\begin{aligned} \frac{m_u}{m_d} &= \frac{2m_{\pi^0}^2 - m_{\pi^+}^2 + m_{K^+}^2 - m_{K^0}^2}{m_{K^0}^2 - m_{K^+}^2 + m_{\pi^+}^2} = 0.56, \\ \frac{m_s}{m_d} &= \frac{m_{K^0}^2 + m_{K^+}^2 - m_{\pi^+}^2}{m_{K^0}^2 + m_{\pi^+}^2 - m_{K^+}^2} = 20.1, \end{aligned} \quad (3.6)$$

in niedrigster Ordnung Störungstheorie bestimmt werden, wobei die Unsicherheit bei diesen Ergebnissen durch die höheren Ordnungen der Störungsentwicklung gegeben ist. Gleichzeitig ist klar, dass die absoluten Quarkmassen bei diesem Ansatz nicht zugänglich sind, da nur Symmetriebetrachtungen der Quarkmassenmatrix gemacht werden, die für jedes Vielfache von M gleich ausfallen würden.

Die renormierten Quarkmassen zeigen auf Grund von Quantenkorrekturen eine Skalenabhängigkeit. Gleichzeitig sind sie auch abhängig von der verwendeten Renormierungsprozedur. Da bei der Bestimmung der Quarkmassenverhältnisse das Transformationsverhalten von M unter der chiralen Symmetrie G_χ untersucht wird, ist es essentiell, dass das verwendete Renormierungsschema dieses Transformationsverhalten nicht verändert. Bei Verwendung eines quarkmassenunabhängigen Renormierungsschemas, wie etwa $\overline{\text{MS}}$, sind die Quarkmassenverhältnisse dann skaleninvariant.

Zur Berechnung der absoluten Quarkmassen stehen nun verschiedene Methoden zur Verfügung. Sie reichen von QCD-Summenregeln über weitere Annahmen zur Größe einzelner Quarkmassen bis schließlich zu Gittermethoden.

Bei der Betrachtung von QCD-Summenregeln [16] werden Größen wie B in spektrale Integrale über alle Zustände mit bestimmten Quantenzahlen überführt. Diese Integrale werden dann unter der Prämisse ausgewertet, dass sie von den ein oder zwei niedrigsten Resonanzen dominiert werden. Unter Verwendung der experimentell bestimmten Parameter dieser Resonanzen können sie dann berechnet werden [65].

Ein weiterer Ansatz ist, die Masse des *strange* Quarks aus der Massenaufspaltung des Barionenoktetts abzuleiten [64, 65]. Hier resultiert aus der Freiheit, ob die Aufspaltung zwischen Σ und Nukleon oder zwischen Δ und Nukleon gewählt wird, eine Ungenauigkeit in der Masse des *strange* Quarks von etwa 75 MeV. Wichtiger ist bei dieser Definition jedoch das Problem, dass sie mit keiner anderen fundamentalen in Verhältnis gebracht werden kann.

Die Gittermethode stellt schließlich eine Möglichkeit dar, Quarkmassen im Prinzip ohne zusätzliche Annahmen bestimmen zu können. Allerdings ist es bisher aus den bereits in Kapitel 2 genannten Gründen nicht möglich, Gitterrechnungen mit drei leichten, dynamischen Quarks durchzuführen, die nicht massenentartet sind. Es verbleibt also nur die Bestimmung einer leichten Quarkmasse $\bar{m} = (m_u + m_d)/2$ und der Masse des *strange* Quarks, m_s . Auch sind die so behandelten dynamischen Quarks nicht wirklich leicht, vielmehr können nur solche Quarks simuliert werden, deren Masse in der Größenordnung des *strange* Quarks liegt. Daher sind Extrapolationen der Ergebnisse mit Hilfe der chiralen Störungstheorie notwendig.

Im weiteren Verlauf des Kapitels wird die Bestimmung der Quarkmassen im Rahmen der Simulationen des SESAM/T χ L Projektes beschrieben.

3.2 Methodik

Wie bereits angesprochen wurde, sind Quarks nicht als freie Teilchen beobachtbar und die Bestimmung ihrer Masse kann daher nur auf indirektem Weg erfolgen. Dies gilt natürlich auch für die Gittermethode, bei welcher aus der QCD-Wirkung unter Zuhilfenahme der Gitterrenormierung Verhältnisse von Teilchenmassen in Abhängigkeit der Quarkmassen bestimmt werden. Letztere werden so lange variiert, bis die so ermittelten Massenverhältnisse mit den physikalischen übereinstimmen.

Bei dieser Vorgehensweise ergeben sich auf dem Gitter jedoch mehrere Schwierigkeiten. So gehen im Fall der Wilson-Fermionen, die im weiteren alleine betrachtet werden, die Quarkmassen nicht unmittelbar in die QCD-Wirkung ein, sondern nur in Form des *hopping*-Parameters κ . Da sie zudem eine große additive Renormierung erfahren, können Quarkmassen nicht direkt abgelesen werden, sondern es muss zunächst der kritische *hopping*-Parameter κ_c ermittelt werden, um dann unter Zuhilfenahme von (2.42) die Quarkmasse bestimmen zu können.

Ein weiteres Problem erwächst daraus, dass die so ermittelten Quarkmassen nur in Gittereinheiten vorliegen. Um diese auch in physikalischen Einheiten angeben zu können, ist eine Bestimmung der Gitterskala notwendig. Dies geschieht in der hier präsentierten Analyse durch den Vergleich der auf dem Gitter bestimmten Sommer-Skalar r_0/a [66] mit dem aus Potentialmodellen abgeleiteten Wert von $r_0 \approx 0.5$ fm. Anschließend können alle anderen auf dem Gitter berechneten Größen durch Multiplikation mit a^{-1} in physikalischen Einheiten angegeben werden.

Ein letztes Problem entsteht aus der Tatsache, dass die Gittermethode ein eigenes Renormierungsschema darstellt, wobei der Gitterabstand a als Renormierungsskala dient, und daher die Ergebnisse im weiteren in das übliche $\overline{\text{MS}}$ -Schema überführt werden müssen. Es ist Konvention, innerhalb dieses Schemas die Massen mit Hilfe der Renormierungsgrup-

pengleichung zur Skala von 2 GeV zu schieben, um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten.

Die Bestimmung der leichten Quarkmasse \bar{m} lässt sich nun folgendermaßen skizzieren:

- Zunächst wird durch Extrapolation der quadrierten Masse des pseudoskalaren Teilchens $(am_{PS})^2$ nach Null der kritische *hopping*-Parameter κ_c ermittelt².
- Genauso wird für die Masse des Vektor-Teilchens eine lineare chirale Extrapolation³ ermittelt. Mit Hilfe beider chiralen Extrapolationen kann der leichte *hopping*-Parameter κ_l bestimmt werden, bei dem das Verhältnis zwischen pseudoskalarer und Vektor-Masse, m_{PS}/m_V , mit dem physikalischen Wert, m_π/m_ρ , übereinstimmt.
- Der inverse Gitterabstand a^{-1} wird mit Hilfe der auf dem Gitter ermittelten Sommer-Skala r_0/a [66] und Vergleich mit dem physikalischen Wert von $r_0 \approx 0.5$ fm bestimmt.
- Aus den beiden so ermittelten *hopping*-Parametern und dem inversen Gitterabstand kann nun die Masse des leichten Quarks bestimmt werden:

$$\bar{m}^{lat} = a^{-1} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa_l} - \frac{1}{\kappa_c} \right). \quad (3.8)$$

Es ist zu erwarten, dass $\bar{m}^{lat}(a)$ neben der expliziten Skalenabhängigkeit noch durch Gitterartefakte implizit von a abhängt.

- Durch Multiplikation mit dem Renormierungsfaktor Z_M wird die Quarkmasse in das $\overline{\text{MS}}$ -Schema übertragen:

$$\bar{m}^{\overline{\text{MS}}}(\mu = 1/a) = Z_M \bar{m}^{lat}(a). \quad (3.9)$$

- Innerhalb des $\overline{\text{MS}}$ -Schemas wird die Skala nach $\mu = 2$ GeV geschoben.
- Durch Extrapolation nach $a \rightarrow 0$ werden die Artefakte des endlichen Gitterabstands eliminiert.

Die Bestimmung der Masse des *strange* Quark geschieht im Prinzip genauso, nur dass der leichte *hopping*-Parameter κ_l durch κ_s ersetzt wird, der etwa aus dem Massenverhältnis zwischen ϕ - und ρ -Meson, m_ϕ/m_ρ , bestimmt werden kann. Auf die speziell dabei auftretenden Schwierigkeiten wird jedoch im Abschnitt 3.10 noch genauer eingegangen.

3.2.1 Operatoren

Wie aus dem obigem Schema deutlich wird, ist es für die Bestimmung der Quarkmassen notwendig, die Masse eines pseudoskalaren Teilchens und eines Vektor-Teilchens auf dem Gitter bei einer gegebenen Konfiguration der Eichfelder zu ermitteln. In Abschnitt 2.1.2 wurde bereits angedeutet, dass Massenberechnungen im Pfadintegralformalismus durch

²Die Extrapolation erfolgt in $(am_{PS})^2$, da gemäß (3.5) ein linearer Zusammenhang zwischen m_{PS}^2 und $1/\kappa$ erwartet wird.

³Anders als bei den pseudoskalaren Mesonen, erhält man für Vektor-Mesonen in der chiralen Störungstheorie mit

$$m_V = b_V + c_V m + d_V m^{3/2} + e_V m^2 \quad (3.7)$$

in erster Ordnung eine lineare Abhängigkeit der Teilchenmasse von der Quarkmasse m und damit von $1/\kappa$ [67].

die Bestimmung des exponentiellen Abfalls von 2-Punkt Funktionen in x_4 -Richtung erfolgen. Die 2-Punkt-Funktionen werden dabei aus Operatoren mit passenden Quantenzahlen aufgebaut. Im Fall der hier betrachteten Teilchen müssen demnach die Korrelatoren folgender Operatoren betrachtet werden:

- Die Masse der pseudoskalaren Mesonen können mit Hilfe des pseudoskalaren Operators⁴

$$\chi_{PS}(x) = \bar{q}(x)\gamma_5 q(x) \quad (3.10)$$

- und die Masse der Vektor-Mesonen durch den Vektor-Operator

$$\chi_V^\mu(x) = \bar{q}(x)\gamma^\mu q(x) \quad (3.11)$$

berechnet werden. Diese lokalen Operatoren werden jedoch nicht direkt verwendet, vielmehr werden aus ihnen verschmierte Operatoren zur Verbesserung des Überlapps mit dem Grundzustand abgeleitet. Ziel dieses Vorgehens ist es, den asymptotischen Bereich in x_4 , bei dem die Teilchenmasse abgelesen werden kann, zu möglichst kleinen euklidischen Zeiten zu verschieben. In dieser Arbeit wird dazu das eichinvariante Wuppertal *Smearing* verwendet [68, 69]. Hierbei wird, ausgehend von einem lokalen Operator $\chi_0(x)$ an einem Punkt x , durch das eichinvariante Hinzufügen des Operatormittelwertes auf den 6 räumlich benachbarten Punkten mit einer Gewichtung α Schritt für Schritt der verschmierte Operator $\chi(x)$ erzeugt:

$$\chi_{i+1}(x) = \frac{1}{1+6\alpha} \left[\chi_i(x) + \alpha \sum_{\mu=1}^3 U_\mu(x) \chi_i(x + \hat{\mu}) + U_\mu^\dagger(x - \hat{\mu}) \chi_i(x - \hat{\mu}) \right]. \quad (3.12)$$

In der folgenden Auswertung wurde als Gewichtungsfaktor $\alpha = 4.0$ gewählt und die Vorschrift (3.12) 50 mal angewendet.

Aus den so verschmierten Operatoren werden dann 2-Punkt-Funktionen gebildet, die hier nur für verschwindende Impulse betrachtet werden sollen:

$$\mathcal{Z}_{AB}(x_4) = \sum_{\vec{x}} \langle 0 | \chi_A^\dagger(0) \chi_B(x) | 0 \rangle. \quad (3.13)$$

Gemäß (2.18) folgt

$$\lim_{x_4 \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{AB}(x_4) = \frac{1}{2E_1} \langle 0 | \chi_A^\dagger(0) | 1 \rangle \langle 1 | \chi_B(0) | 0 \rangle e^{-E_1 x_4}. \quad (3.14)$$

Da die 2-Punkt-Funktion für verschwindenden Impuls betrachtet wird, kann der kleinste Energieeigenwert E_1 mit der Teilchenmasse identifiziert werden.

Auf dem Gitter ist die 2-Punkt-Funktion für die pseudoskalare Masse nach Ausführung der Wick-Kontraktion explizit durch

$$\mathcal{Z}_{PS}(x_4) = \sum_{\vec{x}} \text{Sp}[\gamma_5 M^{-1}(0, x) \gamma_5 M^{-1}(x, 0)] \quad (3.15)$$

⁴Es gilt $\gamma_5 = \gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$.

gegeben, wobei die Spur über die drei Eichfreiheitsgrade sowie die vier Diracindizes genommen wird. M ist hier wiederum die fermionische Matrix. Entsprechend erhält man für die Vektor-Masse:

$$\mathcal{Z}_V(x_4) = \sum_{\vec{x}} \text{Sp}[\gamma^\mu M^{-1}(0, x) \gamma_\mu M^{-1}(x, 0)]. \quad (3.16)$$

Die Berechnung der vollständigen inversen fermionischen Matrix ist auf dem Gitter natürlich nicht möglich. Zur Ermittlung der 2-Punkt-Funktionen \mathcal{Z}_{PS} und \mathcal{Z}_V genügt es jedoch, durch das Lösen der Gleichung

$$\sum_x M(y, x) \xi(x) = \phi(y) \quad (3.17)$$

für den Quellvektor ϕ einzelne Spalten der inversen Matrix zu bestimmen. An dieser Stelle kommt wiederum die Inversion der fermionischen Matrix ins Spiel, die bereits bei der Erzeugung der Eichkonfigurationen als zentrales numerisches Problem identifiziert wurde. Dies ist der zweite Grund, warum in Kapitel 4 auf die Verbesserung von Matrixinversionsmethoden eingegangen wird.

Man kann zeigen, dass das Verschmieren des Operators $\chi(x)$ direkt auf das Verschmieren des Quellvektors $\phi(y)$ übertragen werden kann.

3.2.2 Chirale Extrapolation

Bei der oben skizzierten Quarkmassenbestimmung ist es auf Grund der relativ schweren Quarks, die in aktuellen Simulationen tatsächlich behandelt werden können, an zwei Stellen notwendig, auf dem Gitter ermittelte Messgrößen in Bereiche des *hopping*-Parameters zu extrapolieren, die wesentlich kleineren Quarkmassen entsprechen. Dieses Problem besteht vor allem bei Wilson-artigen Fermionen – wobei auch die $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen in diese Klasse fallen – da hier die chirale Symmetrie durch den Wilson-Term explizit gebrochen ist und nur im Kontinuumslimes wiederhergestellt wird. Als Maß für die Masse der verwendeten Quarks dient dabei das Verhältnis aus pseudoskalarer und Vektormasse, m_{PS}/m_V . Selbst bei der bisher aufwändigsten Simulation mit dynamischen Fermionen durch die CP-PACS Kollaboration [25] ist dieser Quotient mit 0.547 für die leichtesten dort benutzten Quarks noch deutlich größer als der physikalisch Wert von $m_\pi/m_\rho = 0.1784$. In Tabelle 2.1 ist abzulesen, dass bei den hier präsentierten Simulationen das Verhältnis m_{PS}/m_V Werte zwischen 0.854 und 0.566 annimmt.

Bei Simulationen mit dynamischen Fermionen stellen ihre Massen eine weitere Skala der Theorie dar, deren Einfluss auf die physikalischen Ergebnisse natürlich wieder beseitigt werden müssen. Der zugehörige *hopping*-Parameter soll im weiteren mit κ^{see} bezeichnet werden, um ihn von den *hopping*-Parametern der Valenzquarks κ^{val} zu unterscheiden, die direkt in die Berechnung der 2-Punkt-Funktionen eingehen. Da in den 2-Punkt-Funktionen die fermionische Matrix zweimal auftritt und deren *hopping*-Parameter nicht identisch gewählt werden müssen, hängen alle Observablen im allgemeinen von drei verschiedenen κ -Werten ab, κ^{see} und zwei κ^{val} .

A priori ist nicht klar, wie die Extrapolation in den verschiedenen Quarkmassen erfolgen muss. In dieser Arbeit sollen zwei Methoden betrachtet werden, deren Resultate für endliche Gitterabstände nicht übereinstimmen werden. Allerdings wird im Kontinuumslimit erwartet, dass sie konsistente Ergebnisse liefern.

Bei der ersten Methode werden nur die Observablen in Betracht gezogen, bei denen alle beteiligten *hopping*-Parameter denselben Wert annehmen. Physikalisch ist dies so zu interpretieren, dass die beiden Valenzquarks des pseudoskalaren Mesons in einem See von Quarks gleicher Masse betrachtet werden. Entsprechend gelangt man bei dieser chiralen Extrapolation direkt zu einem System mit leichten See- und Valenzquarks. Daher soll diese Methode im weiteren als *direkte Extrapolation* bezeichnet werden.

Bei der zweiten Methode macht man sich zu Nutze, dass bei der Benutzung moderner Algorithmen die Lösung des linearen Gleichungssystems (3.17) für verschiedene Quarkmassen sehr effektiv realisiert werden kann [70]. Mit dieser Methode wurden auf den vorhandenen Eichfeldern Observablen mit Valenzquarkmassen bestimmt, die nicht mit der Seequarkmasse der Konfiguration übereinstimmen. So ist es möglich, dass bei fester Seequarkmasse eine chirale Extrapolation zunächst nur in der Valenzquarkmasse durchgeführt werden kann. Physikalisch würde dies leichten Valenzquarks in einem See von relativ schweren Seequarks entsprechen. Erst in einem zweiten Schritt extrapoliert man auch die Seequarkmasse zur leichten Quarkmasse. Diese Art der Extrapolation soll im weiteren als *semi-quenched* bezeichnet werden. Durch Bernard und Goltermann [71] sowie Sharpe [72] wurde gezeigt, dass für die *semi-quenched* Extrapolation die Gleichungen (3.5) und (3.7) ihre Form beibehalten.

Bei dem zweiten Verfahren muss dementsprechend zunächst der kritische *hopping*-Parameter der Valenzquarks ermittelt werden, bei dem die Masse des pseudoskalaren Mesons in Abhängigkeit von κ^{val} verschwindet. Er wird mit κ_c^{val} bezeichnet. Entsprechend wird die leichte Quarkmasse über κ_l^{val} bestimmt. Erst nach der Bestimmung der Quarkmasse in physikalischen Einheiten und dem Übergang in das $\overline{\text{MS}}$ -Schema erfolgt die Extrapolation in der Seequarkmasse⁵. Die funktionale Abhängigkeit dieser physikalischen Quarkmassen vom *hopping*-Parameter der Seequarks ist *a priori* unbekannt, allerdings zeigt die Beobachtung, dass sie durch einen linearen Ansatz gut beschrieben wird. Die Extrapolation geschieht zu dem mit der direkten Methode bestimmten Wert κ_l .

Obwohl beide Methoden⁶ zum gleichen System mit leichten Valenz- und Seequarks extrapolieren, wird eine Übereinstimmung beider Ergebnisse nur im Kontinuumslimit $a \rightarrow 0$ erwartet. Eine detaillierte Diskussion dieser Problematik ist in [41], [73] und [76] zu finden. Die erwartete Übereinstimmung im Kontinuumslimit stellt jedoch einen guten Konsistenz-

⁵Damit folgt diese Analyse dem von Lubicz in [73] angeregten Vorgehen.

⁶Eine dritte Methode der Quarkmassenbestimmung beruht, anders als die beiden bisher besprochenen, auf der axialen Ward-Identität [74]:

$$m_1 + m_2 = \frac{Z_A \langle \partial_\mu A_\mu(x) J(0) \rangle}{Z_P \langle P(x) J(0) \rangle}. \quad (3.18)$$

Hier ist $A_\mu(x) = \bar{\Psi} \gamma_\mu \gamma_5 \Psi$ der axiale Strom, $P = \bar{\Psi} \gamma_5 \Psi$ die pseudoskalare Dichte, Z_A und Z_P sind die zugehörigen Renormierungskonstanten und J ist ein Operator, der an das pseudoskalare Meson koppelt. In [75] wurde gezeigt, dass auch diese Definition mit den beiden oben besprochenen übereinstimmt. Dieser Ansatz soll hier jedoch nicht weiter diskutiert werden.

test dar.

3.3 Statistische Fehleranalyse

Bei der Bestimmung einer Observablen auf dem Gitter treten infolge der endlichen Anzahl verfügbarer Konfigurationen natürlicherweise statistische Fehler auf. Allerdings würden bei einer naiven Bestimmung diese Fehler unter Umständen dramatisch unterschätzt, da die einzelnen „Messungen“ auf Grund unterschiedlichster Effekte stark miteinander korreliert sein können:

- Dies beginnt mit der Korrelation der unterschiedlichen Zeitschichten innerhalb einer Konfiguration, die bei der Bestimmung der 2-Punkt-Funktionen als Korrelationen zwischen den einzelnen „Messwerten“ $\mathcal{Z}_{AB}(x_4)$ zu Tage treten. Diese müssen natürlich bei der im nächsten Abschnitt beschriebenen Bestimmung des exponentiellen Abfalls berücksichtigt werden, gleichzeitig werden sie allerdings auch die Fehler dieser abgeleiteten Größen beeinflussen.
- Weitere Korrelationen treten zwischen den verschiedenen, aus einer Markovkette entnommenen Konfigurationen auf. Auch die daraus resultierenden Autokorrelationen der auf diesen Konfigurationen bestimmten Observablen müssen in einer vollständigen Fehleranalyse berücksichtigt werden.
- Bei der Bestimmung von m_{PS}/m_V und anderen abgeleiteten Größen sowie deren Extrapolation muss die Tatsache Beachtung finden, dass die beiden Massen auf demselben Satz von Konfigurationen ermittelt werden.
- Schließlich treten bei der oben beschriebenen *semi-quenched* Extrapolation zur Bestimmung von κ_c und κ_l noch Korrelationen zwischen den für verschiedene κ^{val} ermittelten Observablen auf, da für deren Bestimmung wiederum auf dieselben Konfigurationen zurückgegriffen wird.

Innerhalb der hier beschriebenen Analyse werden verschiedene Ansätze zur Erfassung der unterschiedlichen Korrelationen verfolgt. Die Korrelationen zwischen den Zeitschichten – wie auch die in der *semi-quenched* Extrapolation – werden etwa durch die Kovarianzmatrix in der Fitprozedur berücksichtigt.

Die Autokorrelationen innerhalb der Markovkette wurden bereits in [60] genauer untersucht. Diese Analyse ergab, dass die hier betrachteten Observablen integrierte Autokorrelationszeiten von $\tau_{int} < 50$ aufweisen. Daher wurde, auch um den Aufwand zur Bestimmung der Observablen zu begrenzen, deren Berechnung nur auf jeder 25sten Konfiguration vorgenommen. Die dabei noch nicht berücksichtigten Korrelationen werden schließlich durch das *Jackknife*-Verfahren aufgefangen, das im weiteren Verlauf dieses Abschnitts besprochen werden soll. Mit Hilfe dieses Blockungsverfahrens gelingt es letzten Endes auch, eine konsistente Bestimmung der statistischen Fehler abgeleiteter Größen vorzunehmen sowie Kovarianzmatrizen zwischen diesen zu bestimmen.

3.3.1 Das *Jackknife*-Verfahren

Die Analyse korrelierter Daten x, y erfordert die Berücksichtigung der Kovarianzmatrix zur korrekten Berechnung der Fehler abgeleiteter Größen. Die Bestimmung der Kovari-

anzmatrix, die durch

$$\Omega_{xy} = \langle (x - \bar{x})(y - \bar{y}) \rangle \quad (3.19)$$

definiert ist, aber auch deren Inversion, sind jedoch oft sehr unzuverlässig. Dies liegt an der nicht ausreichenden Mächtigkeit der zur Verfügung stehenden Ensembles, so dass eine hinreichende Genauigkeit der einzelnen Elemente oft nicht garantiert werden kann. Das angesprochene Problem verschärft sich, wenn die Kovarianzmatrix von abgeleiteten Größen bestimmt werden soll.

Einen Ausweg aus diesem Dilemma stellt die *Jackknife*-Methode dar [77]. Dazu wird das Ausgangsensemble, für das im weiteren die Mächtigkeit N angenommen wird, in Blöcke der Größe B aufgeteilt⁷. Aus dem Ensemble der $N_b = N/B$ Blöcke werden nun genauso viele neue Ensembles E_i erzeugt, indem jeweils der i -te Block weggelassen wird. Auf jedem dieser so gebildeten Ensembles kann nun die gesuchte Größe $\hat{\mathcal{O}}_i$ ermittelt werden, und man erhält die *Jackknife*-Verteilung dieser Größe. Es ist leicht zu zeigen, dass der Mittelwert dieser Verteilung,

$$\bar{\mathcal{O}} = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} \hat{\mathcal{O}}_i, \quad (3.20)$$

mit dem Mittelwert der Größe auf dem vollen Ensemble übereinstimmt und somit eine Schätzung von \mathcal{O} darstellt. Gleichzeitig stellt die Breite der Verteilung gemäß

$$(\delta\mathcal{O})_B^2 = (N_b - 1)(\langle \hat{\mathcal{O}}^2 \rangle - \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle^2) = \frac{N_b - 1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} (\hat{\mathcal{O}}_i - \bar{\mathcal{O}})^2 \quad (3.21)$$

ein Maß für den Fehler von \mathcal{O} dar, wenn die Blockgröße hinreichend groß gewählt wurde. Ein konsistente Wahl der Blockgröße liegt dann vor, wenn $(\delta\mathcal{O})_B^2$ in Abhängigkeit von B ein Plateau ausbildet.

Eine zusätzliche Schwierigkeit entsteht, wenn Daten mit Ensembles unterschiedlicher Mächtigkeit in einer Rechnung kombiniert werden sollen. Dies tritt in dieser Arbeit immer dann auf, wenn Größen beteiligt sind, die bei unterschiedlichem κ^{see} ermittelt wurden, wie etwa bei der direkten chiralen Extrapolation⁸. Um in einem solchen Fall trotzdem das *Jackknife*-Verfahren anwenden zu können, werden die kleineren Ensembles geeignet erweitert, bis ihre Mächtigkeit mit dem des größten beteiligten übereinstimmt. Die fehlenden Elemente eines zu erweiternden Ensembles werden dabei zufällig aus den vorhandenen gezogen. Dies hat zur Folge, dass im Ensemble einige Elemente doppelt vorkommen.

Geht man davon aus, dass die Varianz eines erweiterten Ensembles mit der ursprünglichen übereinstimmt, so werden die Fehler durch dieses Vorgehen im folgenden überschätzt werden. Diese Erwartung folgt aus der Tatsache, dass die Varianz der beschriebenen Größe aus der Varianz des Ensembles durch Multiplikation mit ihrer Mächtigkeit hervorgeht. Aus den Mächtigkeitsunterschieden der in dieser Arbeit verwendeten *Jackknife*-Ensembles

⁷An dieser Stelle wird angenommen, dass B ein Teiler von N ist. Ist dies nicht der Fall, so benötigt der letzte Block eine gesonderte Behandlung.

⁸Die unterschiedlichen Mächtigkeiten der Ensembles folgen zum einen daraus, dass die Zahl der Konfigurationen in Abhängigkeit der Simulationsparameter variiert, zum anderen ist sie durch die verschiedenen optimalen Blockgrößen bedingt.

kann die Überschätzung der Fehler auf etwa 15% bestimmt werden. Dies ist der Preis für die Möglichkeit, Korrelationen zwischen Größen und deren Auswirkungen auf die Fehlerrechnung kontrollieren zu können.

3.4 Die Fitprozedur

Wie in (3.14) gezeigt wurde, dominiert in der 2-Punkt-Funktion für große euklidische Zeiten der Grundzustandsbeitrag. Daher kann sie in diesem Bereich durch

$$\lim_{x_4 \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{AB}(x_4) = \mathcal{Z}_{AB} e^{-E_1 x_4} \quad (3.22)$$

beschrieben werden. Da auf dem Gitter in den Raumrichtungen periodische, in der Zeitrichtung jedoch antiperiodische Randbedingungen verwendet werden, ist der Term in (3.22) durch einen entsprechenden des rückwärts propagierenden Teilchens zu ergänzen. Weil die Massen der vorwärts- und der rückwärtslaufenden Mesonen identisch sind, können die Resultate der 2-Punkt-Funktion für die euklidischen Zeitpunkte x_4 und $T - x_4$ gemittelt werden. Gleichzeitig kann die Existenz beider Beiträge im Fitansatz berücksichtigt werden, ohne die Anzahl der Fitparameter erhöhen zu müssen. Dieser stellt sich daher als

$$F(x_4) = A (e^{-m x_4} + e^{-m(T-x_4)}) \quad (3.23)$$

dar. Die Bestimmung der Parameter geschieht durch die Minimierung der χ^2 -Funktion

$$\chi^2 = \sum_{x_4, x'_4 = x_4^{\min}}^{x_4^{\max}} (\bar{\mathcal{Z}}_{AB}(x_4) - F(x_4)) \Omega^{-1}(x_4, x'_4) (\bar{\mathcal{Z}}_{AB}(x'_4) - F(x'_4)). \quad (3.24)$$

Die Kovarianzmatrix $\Omega(x_4, x'_4)$ dient dabei zur Berücksichtigung der Korrelationen zwischen den verschiedenen Zeitschichten, die innerhalb einer Konfiguration natürlich vorliegen. Sie ist durch

$$\Omega(x_4, x'_4) = \langle (\mathcal{Z}_{AB}(x_4) - \bar{\mathcal{Z}}_{AB}(x_4)) (\mathcal{Z}_{AB}(x'_4) - \bar{\mathcal{Z}}_{AB}(x'_4)) \rangle \quad (3.25)$$

definiert, wobei die Erwartungswertbildung über die auf den verschiedenen Konfigurationen ermittelten Ergebnissen geschieht. Entsprechend stellt $\bar{\mathcal{Z}}_{AB}(x_4)$ den über die verschiedenen Konfigurationen gemittelten Korrelator dar.

Die eigentliche Minimierung geschieht durch die Funktion MINUIT [78] der CERN-Bibliothek [79]. Die Fitparameter, über deren Variation eine Minimierung der χ^2 -Funktion erfolgt, sind die Masse m des Grundzustands mit den passenden Quantenzahlen sowie die Amplitude der 2-Punkt-Funktion, A , bei $x_4 = 0$.

3.4.1 Optimierung der Fit-Intervalle

Ein kritischer Punkt in der Fitprozedur ist die Wahl des jeweiligen Fit-Intervalls, das durch x_4^{\min} und x_4^{\max} begrenzt wird. Eine optimale Justierung dieser Parameter erlaubt, die systematischen Fehler zu kontrollieren, die etwa durch Beiträge angeregter Zustände zur

2-Punkt-Funktion entstehen können. Dementsprechend bestimmt x_4^{min} die Zeitschicht, ab der diese Beiträge vernachlässigt werden können und das in (3.22) gezeigte asymptotische Verhalten dominiert. x_4^{max} hingegen setzt die obere Grenze des Fitbereichs und sollte unter optimalen Bedingungen auf $T/2$ gesetzt werden können⁹. Auf Grund des exponentiellen Abfalls des Korrelators kann es jedoch passieren, dass auf dieser Zeitschicht – oder bereits früher – das Resultat schon im Rahmen der Fehler mit Null verträglich ist. Um die daraus erwachsenden systematischen Fehler zu unterdrücken, ist auch eine Anpassung der oberen Fitgrenze notwendig.

Eine gutes Kriterium zur Festlegung dieser beiden Punkte wird durch die Betrachtung der *effektiven Massen* $m_{eff}(x_4)$ gewonnen. Für die hier betrachteten Korrelatoren erhält man sie aus der Lösung der Gleichung

$$\frac{\mathcal{Z}_{AB}(x_4)}{\mathcal{Z}_{AB}(x_4 + 1)} = \frac{e^{-m_{eff}(x_4)x_4} + e^{-m_{eff}(x_4)(T-x_4)}}{e^{-m_{eff}(x_4)x_4+1} + e^{-m_{eff}(x_4)(T-x_4-1)}}. \quad (3.26)$$

Sie kann als ein Maß für den lokalen exponentiellen Abfall der 2-Punkt-Funktion angesehen werden, und man erwartet, dass sie ein Plateau erreicht, sobald der Grundzustand den Korrelator dominiert. Der Beginn dieses Plateaus stellt somit ein gutes Maß für x_4^{min} dar. Da *a priori* nicht zu erwarten ist, dass diese untere Grenze unabhängig von der Art des betrachteten Korrelators ist, wird im weiteren zwischen $x_4^{min}(PS)$ und $x_4^{min}(V)$ als Untergrenze für die Fits an die pseudoskalaren bzw. Vektor-Propagatoren unterschieden. Gleichzeitig kann an m_{eff} natürlich auch abgelesen werden, wann das Signal des Korrelators im Rauschen untergeht, da an dieser Stelle zum einen die Werte das Plateau wieder verlassen, zum anderen die Fehler der effektiven Masse signifikant anwachsen. Es zeigt sich, dass – anders als bei x_4^{min} – für x_4^{max} eine Unterscheidung zwischen den beiden hier betrachteten Korrelatoren nicht notwendig ist.

Ein zweites Kriterium zur Fixierung von x_4^{min} ist die gefittete Masse m selbst, die natürlich unter Variation der unteren Fitgrenze ebenfalls in ein Plateau laufen muss. Gleichzeitig sollte der zugehörige Wert von χ^2 pro Freiheitsgrad im Bereich von 1 liegen, was ebenfalls ein Kriterium für die geeignete Wahl der Fitgrenzen ist.

Neben den Fitgrenzen ist für die Fehlerbestimmung natürlich auch die Wahl der Blockgröße B für das *Jackknife*-Verfahren ein festzulegender Parameter. Dieser erscheint dann geeignet gewählt, wenn der Fehler der durch den Fit bestimmten Masse m in ein Plateau läuft.

Abbildung 3.1 zeigt exemplarisch für $\beta = 5.6$ sowie $\kappa^{see} = \kappa^{val} = 0.1570$ die zur Festlegung der Fitparameter benutzten Diagramme sowohl für die pseudoskalare Masse als auch für die Vektormasse. Die Diagramme für die anderen Werte in β und κ^{see} sowie für die anderen Kombinationen von κ^{val} in den Observablen zeigen ein qualitativ ähnliches Verhalten.

Tabelle 3.1 gibt die Parameter wieder, welche für die im nächsten Abschnitt präsentierten Propagatorfits benutzt wurden. Insgesamt zeigt sich, dass die Fitgrenzen für die meisten Konfigurationssätze nur wenig variieren. Trotzdem konnte bei einigen Kombinationen von β und κ bereits durch eine kleine Änderung der oberen oder unteren Fitgrenze ein deutlich konsistenteres Resultat für die jeweilige Teilchenmasse erzielt werden.

⁹Da die mesonischen 2-Punkt-Funktionen explizit symmetrisiert wurden, ergibt sich aus einer oberen Fitgrenze größer $T/2$ keine weitere Verbesserung.

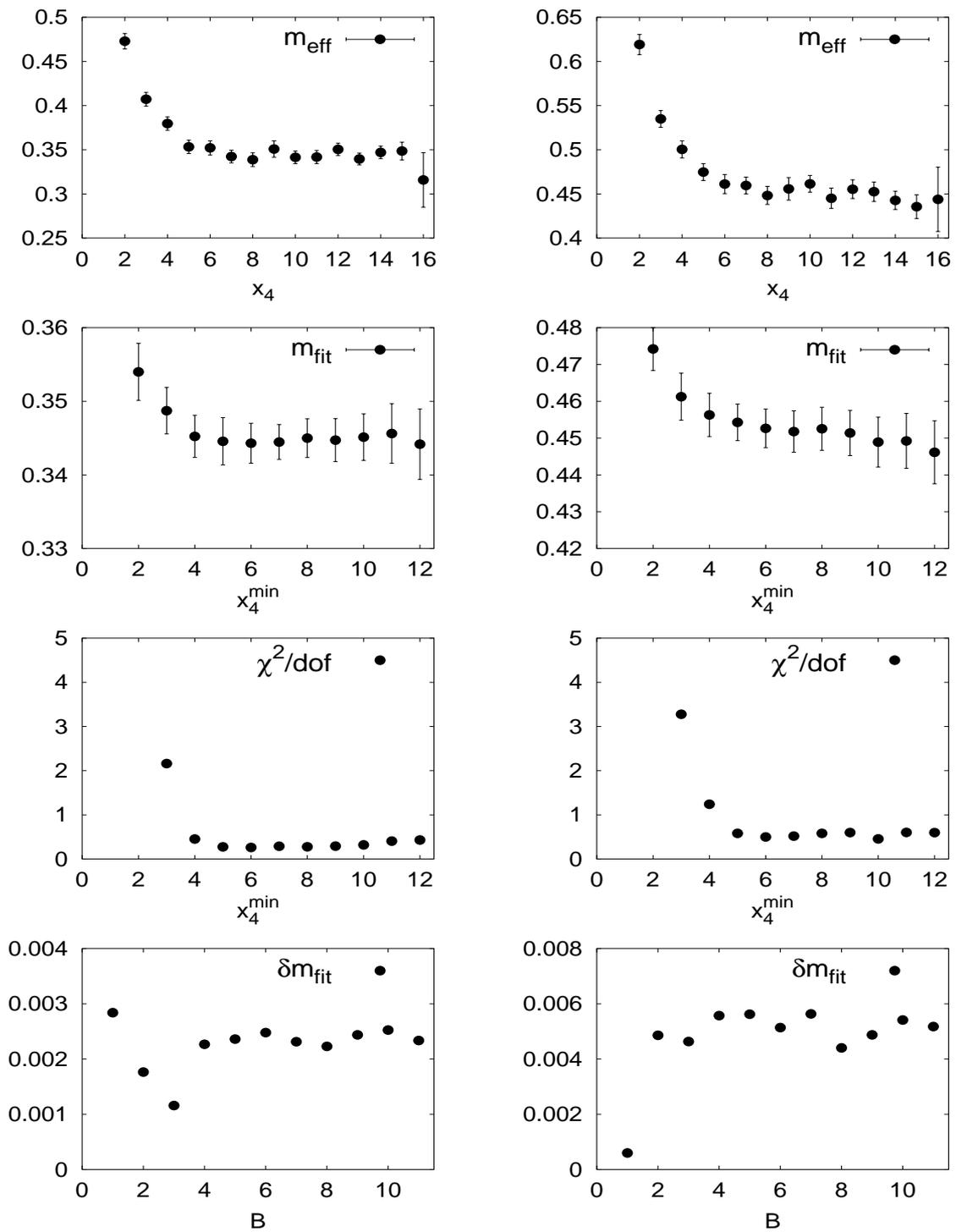


Abbildung 3.1: Die Diagramme zur Festlegung der Fitparameter am Beispiel für $\beta = 5.6$ und $\kappa^{\text{see}} = \kappa^{\text{val}} = 0.1570$. Von oben nach unten die effektive Masse $m_{\text{eff}}(x_4)$, gefittete Masse und χ^2 pro Freiheitsgrad in Abhängigkeit von der linken Fitgrenze x_4^{min} und der Fehler der gefitteten Masse in Abhängigkeit von der *Jackknife*-Blockgröße B . Links für das pseudoskalare, rechts für das Vektor-Meson.

β	$L^3 \times T$	κ^{see}	$x_4^{min}(PS)$	$x_4^{min}(V)$	x_4^{max}	B
5.5	$16^3 \times 32$	0.1580	6	5	15	3
		0.1590	6	6	14	5
		0.1596	5	5	14	5
		0.1600	7	7	15	5
5.6	$16^3 \times 32$	0.1560	5	5	14	5
		0.1565	7	7	14	5
		0.1570	7	7	15	5
		0.1575	6	6	15	6
	$24^3 \times 40$	0.1575	7	7	19	6
		0.1580	6	7	19	6

Tabelle 3.1: Die in der Analyse verwendeten Fitparameter. Wiedergegeben sind die unteren und oberen Fitgrenzen sowie die Blockgröße des *Jackknife*-Verfahrens.

Auch die Wahl der Blockgröße B für die Jackknife-Analyse zeigt nur eine geringe Auswirkung auf die ermittelten Fehler, was vor allem darauf zurückzuführen ist, dass die betrachteten Konfigurationen bereits im wesentlichen statistisch unabhängig sind. Die Betrachtung der Fehlergröße in Abhängigkeit von B ergibt, dass die verbleibenden Abhängigkeiten mit den in der Tabelle angegebenen Werten letzten Endes ebenfalls beseitigt werden können. Auch für B sind nur geringe Variationen zwischen den verschiedenen Konfigurationssätzen auszumachen.

3.4.2 Fitresultate

Die Abbildungen 3.2-3.4 zeigen die effektiven Massen sowie die Fits bei $\kappa^{val} = \kappa^{see}$ für die verschiedenen hier untersuchten Gitter. Für jede Kombination von β und κ ist jeweils links die pseudoskalare Masse wiedergegeben, rechts ist die Vektor-Masse zu sehen. Die Fits wurden nur in den jeweils festgelegten Fitbereichen eingezeichnet, so dass diese in Kombination mit den effektiven Massen nochmals hervorgehoben sind.

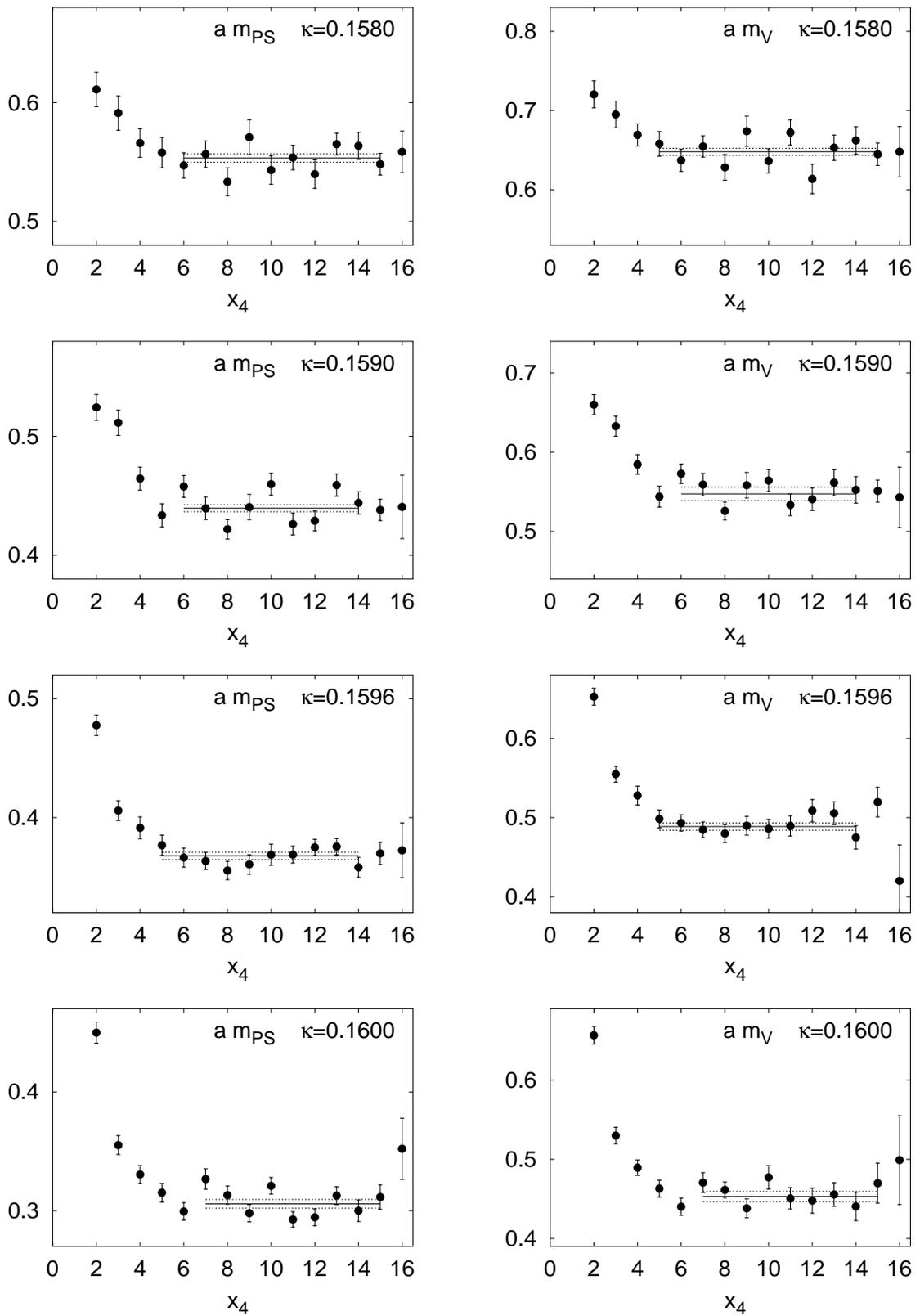
Die entsprechenden Diagramme für die anderen symmetrischen und asymmetrischen Kombinationen der κ^{val} wurden ebenfalls visuell überprüft. Auch sie zeigen ein qualitativ ähnliches Verhalten, wie die hier abgebildeten.

Die Tabellen 3.2 und 3.3 geben die gefitteten Massen in Gittereinheiten für alle Korrelatoren mit zwei identischen κ^{val} wieder. Sie bilden die Grundlage der Bestimmung von κ_c und der leichten Quarkmasse \bar{m} in den folgenden Abschnitten.

Auf die Wiedergabe der ebenfalls bestimmten Massen für die Korrelatoren mit gemischten κ^{val} , die insbesondere für die Bestimmung der Masse des *strange* Quark m_s benötigt werden, muss hier aus Platzgründen verzichtet werden.

3.5 Chirale Extrapolation in m_{PS}

Wie in Gleichung (3.5) gezeigt wurde, besteht ein linearer Zusammenhang zwischen der leichten Quarkmasse und dem Quadrat der pseudoskalaren Masse. Ergänzt man das Wir-

Abbildung 3.2: Fitresultate für die SESAM-Gitter bei $\beta = 5.5$.

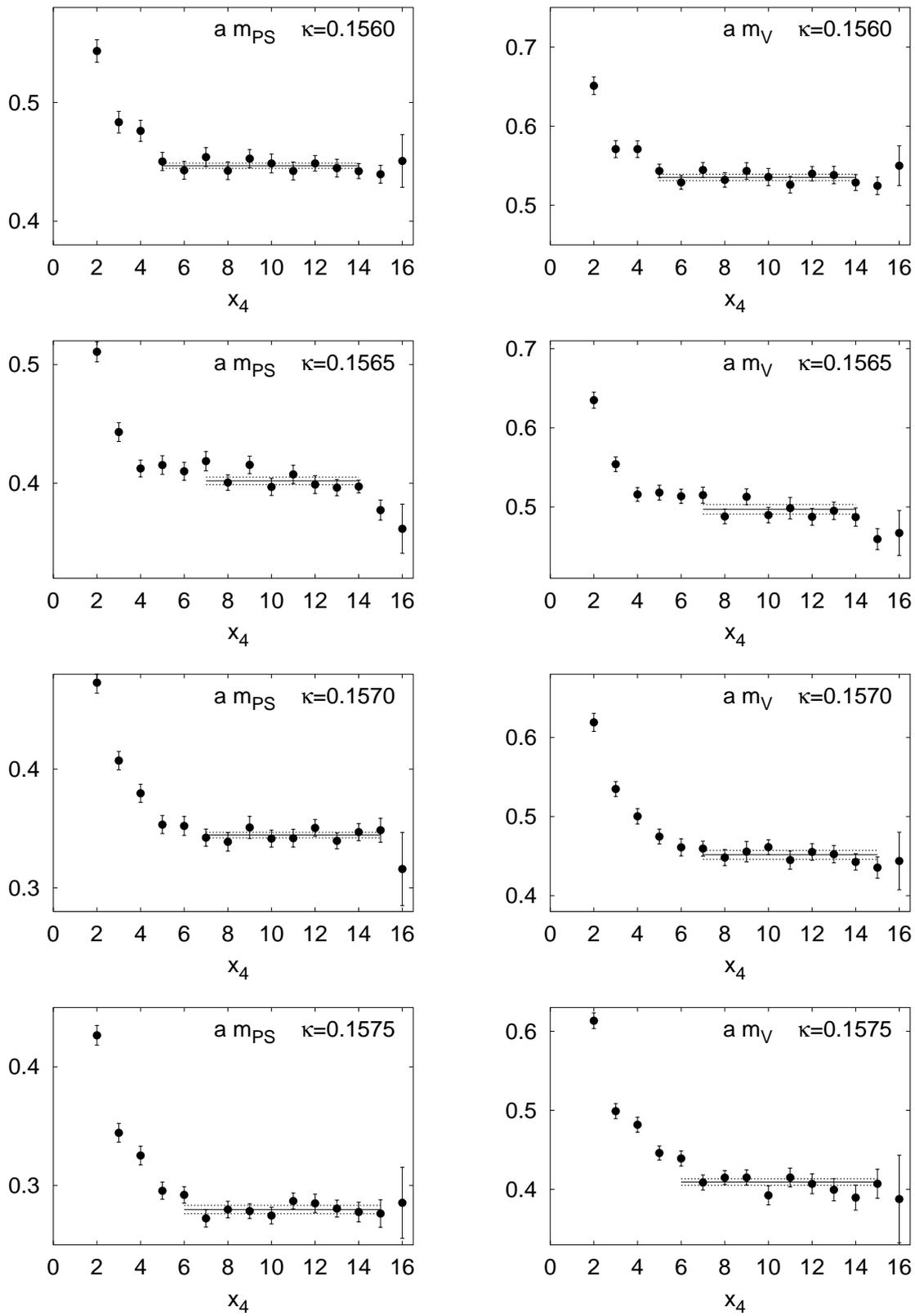
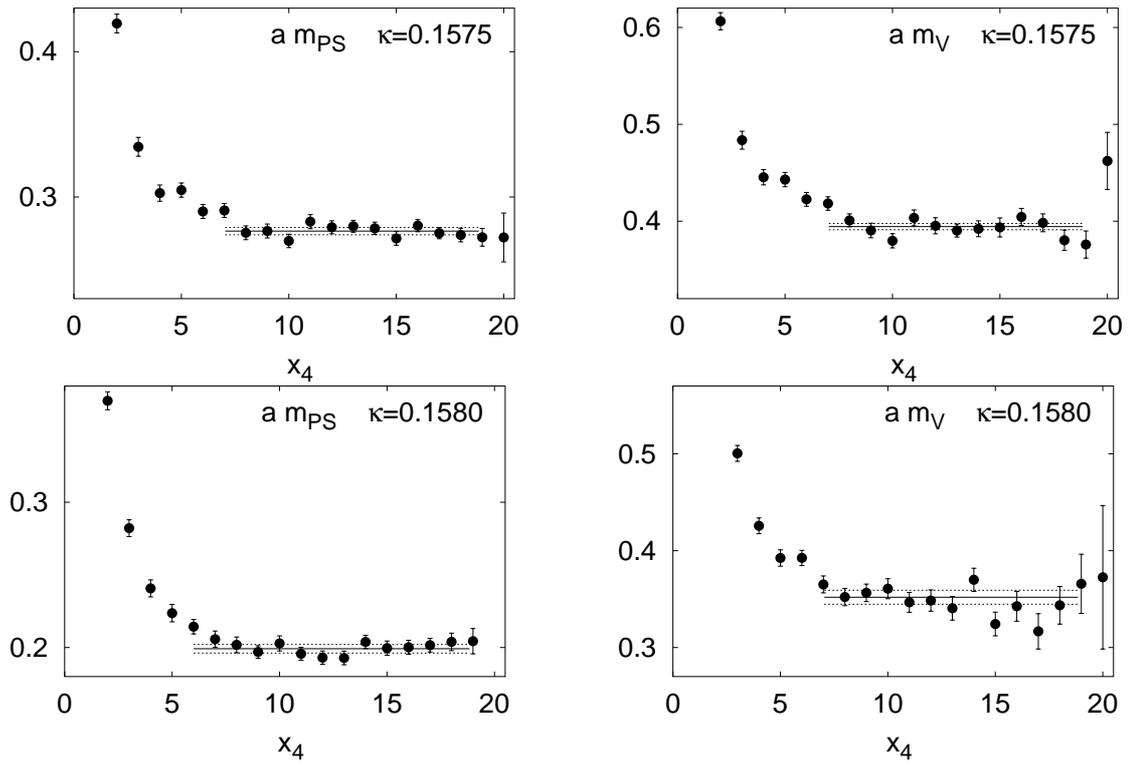


Abbildung 3.3: Fitresultate für die SESAM-Gitter bei $\beta = 5.6$.

Abbildung 3.4: Fitresultate für die $T_{\chi}L$ -Gitter bei $\beta = 5.6$.

$L^3 \times T$	κ^{see}	κ^{val}	m_{PS}	m_V
$16^3 \times 32$	0.1580	0.1580	0.5534(35)	0.6479(44)
		0.1590	0.5051(32)	0.6126(57)
		0.1596	0.4749(32)	0.5916(55)
		0.1600	0.4542(32)	0.5778(57)
		0.1604	0.4328(33)	0.5640(59)
	0.1590	0.1580	0.4915(30)	0.5861(68)
		0.1590	0.4395(30)	0.5473(85)
		0.1596	0.4065(28)	0.5239(95)
		0.1600	0.3834(25)	0.5081(101)
		0.1604	0.3595(27)	0.4924(108)
	0.1596	0.1580	0.4578(24)	0.5505(46)
		0.1590	0.4031(24)	0.5119(50)
		0.1596	0.3679(31)	0.4887(46)
		0.1600	0.3429(32)	0.4734(51)
		0.1604	0.3165(35)	0.4580(53)
	0.1600	0.1580	0.4256(31)	0.5241(47)
		0.1590	0.3694(33)	0.4873(52)
		0.1596	0.3325(33)	0.4663(57)
		0.1600	0.3058(37)	0.4530(66)
		0.1604	0.2767(36)	0.4404(72)

Tabelle 3.2: Gefittete Massen in Gittereinheiten für $\beta = 5.5$. Die Zeilen mit $\kappa^{see} = \kappa^{val}$ sind durch Fettdruck hervorgehoben.

$L^3 \times T$	κ^{see}	κ^{val}	m_{PS}	m_V
$16^3 \times 32$	0.1560	0.1560	0.4467(22)	0.5353(40)
		0.1570	0.3909(25)	0.4970(42)
		0.1575	0.3609(26)	0.4782(36)
		0.1580	0.3290(28)	0.4598(42)
		0.1585	0.2943(27)	0.4419(43)
	0.1565	0.1560	0.4298(37)	0.5170(58)
		0.1565	0.4020(32)	0.4970(60)
		0.1570	0.3730(34)	0.4771(62)
		0.1575	0.3424(39)	0.4574(67)
		0.1580	0.3096(39)	0.4379(71)
	0.1570	0.1555	0.4316(27)	0.5140(35)
		0.1560	0.4038(25)	0.4934(47)
		0.1565	0.3749(28)	0.4726(49)
		0.1570	0.3445(24)	0.4518(56)
		0.1575	0.3120(28)	0.4308(66)
	0.1575	0.1555	0.4064(24)	0.4900(34)
0.1565		0.3474(25)	0.4496(36)	
0.1570		0.3151(31)	0.4295(38)	
0.1575		0.2798(35)	0.4093(41)	
$24^3 \times 40$	0.1575	0.1555	0.40238(168)	0.4795(25)
		0.1560	0.37357(172)	0.4583(26)
		0.1565	0.34333(194)	0.4371(33)
		0.1570	0.3112(23)	0.4158(31)
		0.1575	0.2765(25)	0.3944(33)
		0.1580	0.2380(30)	0.3729(41)
	0.1580	0.1555	0.3743(21)	0.4524(31)
		0.1560	0.34430(173)	0.4308(34)
		0.1565	0.3127(22)	0.4096(39)
		0.1570	0.2788(23)	0.3891(43)
		0.1575	0.2416(25)	0.3696(54)
	0.1580	0.1991(30)	0.3519(72)	

Tabelle 3.3: Gefittete Massen in Gittereinheiten für $\beta = 5.6$. Die Zeilen mit $\kappa^{see} = \kappa^{val}$ sind durch Fettdruck hervorgehoben.

kungsfunktional der chiralen störungstheorie um weitere Terme, so können höhere Korrekturen in der Quarkmasse berechnet werden. Für zwei massenentartete Quarkflavors erhält man entsprechend [80]

$$m_{PS}^2 = b_{PS}m + c_{PS}m^2 + \dots, \quad (3.27)$$

wobei $m = \frac{1}{2}(1/\kappa - 1/\kappa_c)$ proportional zur leichten Quarkmasse ist. Die Bestimmung von κ_c erfolgt nun durch die Ermittlung desjenigen κ , bei dem die pseudoskalare Masse zu Null wird, entsprechend dem Verschwinden der Masse des π -Mesons im chiralen Limes. Da π -Mesonen aus zwei leichten Quarks aufgebaut sind¹⁰, werden für diese Teilanalyse nur pseudoskalare Massen mit zwei identischen Valenzquarks betrachtet.

In Abschnitt 3.2 wurde bereits diskutiert, dass in dieser Analyse zwei verschiedene Ansätze verfolgt werden sollen, die chirale Extrapolation durchzuführen. Zunächst wird nun der *semi-quenched* Ansatz besprochen.

Da für alle Kombinationen von β und κ^{see} die Ergebnisse von m_{PS} und m_V für mindestens 4 verschiedene Werte von κ^{val} vorliegen, kann für die chirale Extrapolation in κ^{val} ein quadratischer Fitansatz benutzt werden. Damit ist auch der Parameter c_{PS} zu ermitteln, der die Größe des quadratischen Korrekturterms angibt. Um die Qualität der Fits besser beurteilen zu können, wurde gleichzeitig auch ein rein linearer Ansatz überprüft. Bei allen Fits der *semi-quenched* Analyse gehen die Korrelationen zwischen den Datenpunkten, die aus der Tatsache resultieren, dass die Massen für verschiedene κ^{val} jeweils auf denselben Konfigurationen bestimmt wurden, in die Bestimmung der Parameter mit ein.

In Tabelle 3.4 sind die Ergebnisse der beiden Fitansätze für die verschiedenen Konfigurationssätze dargestellt. Betrachtet man die Abweichungen pro Freiheitsgrad (χ^2/dof), so ist festzustellen, dass der lineare Fitansatz sicher nicht genügt, um die Daten zu beschreiben. Dies ist auch daran festzumachen, dass bei allen quadratischen Fits der Parameter des quadratischen Terms, c_{PS} , signifikant ($> 10\sigma$) von Null verschieden ist. Gleichzeitig liegen die χ^2/dof für die quadratischen Fits mit $\mathcal{O}(1)$ im erwarteten Bereich für einen qualitativ guten Fit. Auch eine visuelle Kontrolle der Fits in Abbildung 3.5 zeigt, dass der quadratische Fitansatz zu stabilen Ergebnissen führt.

Von diesen Argumenten geleitet wird in der *semi-quenched* Analyse für die chirale Extrapolation der pseudoskalaren Masse immer der quadratische Ansatz benutzt. Die resultierenden Werte für κ_c^{val} können in Tabelle 3.4 abgelesen werden.

Für die direkt chirale Extrapolation der pseudoskalaren Masse werden die Fits auf die Datenpunkte beschränkt, bei denen $\kappa^{see} = \kappa^{val}$ gilt. Da die einzelnen Datenpunkte jeweils auf getrennten Konfigurationssätzen bestimmt wurden, sind keine Korrelationen zwischen diesen zu erwarten. Deshalb werden in dieser Analyse auch nur unkorrelierte Fits betrachtet. Auf Grund der Tatsache, dass für beide β -Werte zu mindestens 4 verschiedenen κ^{see} Konfigurationssätze erzeugt wurden, ist auch hier wieder ein quadratischer Fitansatz möglich.

Bei den $\beta = 5.6$ Konfigurationen liegen Simulationen für zwei verschiedene Gittergrößen vor. Die Ergebnisse sollten – bis auf *finite-size* Effekte – ohne weiteres miteinander kombinierbar sein. Im Fall von $\kappa^{see} = 0.1575$ liegen sogar Konfigurationen für dieselben

¹⁰Eine Unterscheidung zwischen den beiden leichten Quarks, *up* und *down*, ist auf Grund der bereits besprochenen Einschränkungen nicht möglich.

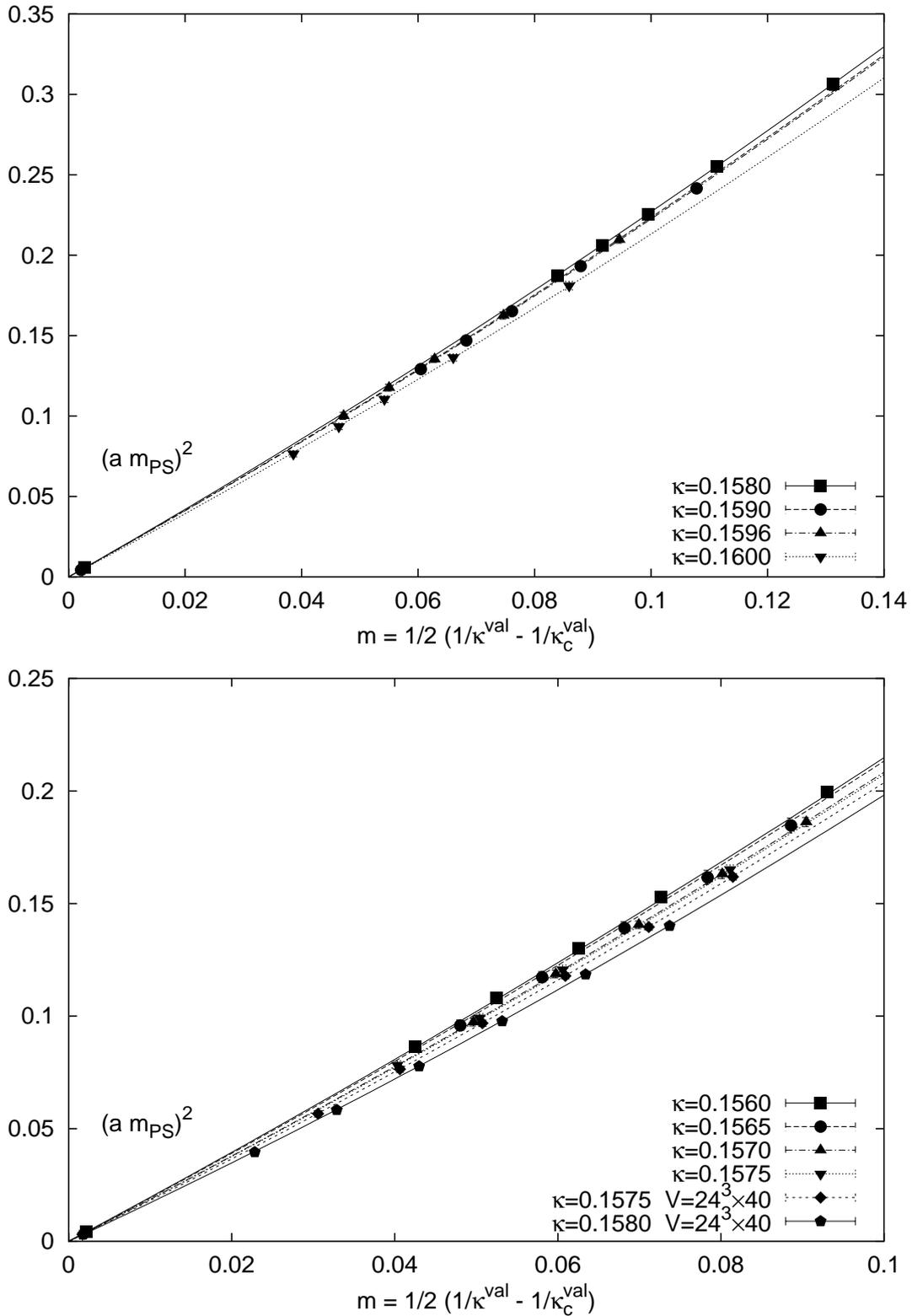


Abbildung 3.5: *Semi-quenched* chirale Extrapolation der pseudoskalaren Masse. Das obere Diagramm zeigt Fits für $\beta = 5.5$, das untere für $\beta = 5.6$. Die eingezeichneten Fehlerbalken sind kleiner als die verwendeten Symbole.

β	$L^3 \times T$	κ^{see}	N_{par}	χ^2/dof	κ_c^{val}	b_{PS}	c_{PS}
5.5	$16^3 \times 32$	0.1580	2	87.7	0.16440(4)	2.774(17)	2.11(13)
			3	0.41	0.16484(7)	2.06(5)	
		0.1590	2	99.2	0.16317(4)	2.564(17)	2.10(12)
			3	0.87	0.16357(5)	2.03(4)	
		0.1596	2	106.8	0.16241(4)	2.460(16)	2.12(12)
			3	0.72	0.16287(6)	2.01(3)	
		0.1600	2	31.2	0.16210(4)	2.35(2)	2.1(2)
			3	2.45	0.16241(7)	1.92(5)	
5.6	$16^3 \times 32$	0.1560	2	100.7	0.16026(3)	2.403(15)	2.14(13)
			3	1.31	0.16066(5)	1.93(3)	
		0.1565	2	64.2	0.16015(4)	2.515(16)	2.24(16)
			3	0.71	0.16043(6)	1.91(5)	
		0.1570	2	104.8	0.15943(3)	2.426(16)	2.36(14)
			3	0.19	0.16000(6)	1.85(4)	
		0.1575	2	38.6	0.15916(5)	2.225(19)	2.4(3)
			3	4.15	0.15953(8)	1.84(6)	
	$24^3 \times 40$	0.1575	2	169.7	0.15946(2)	2.241(8)	2.57(10)
			3	0.20	0.15954(3)	1.78(2)	
0.1580	2	128.8	0.15884(2)	2.127(11)	3.00(13)		
	3	0.37	0.15915(3)	1.68(2)			

Tabelle 3.4: *Semi-quenched* chirale Extrapolation der pseudoskalaren Masse.

Parameter bei den unterschiedlichen Gittergrößen vor, was eine erste Abschätzung der *finite-size* Effekte erlaubt. Ein Vergleich der Ergebnisse in Tabelle 3.3 zeigt, dass sie sich für die pseudoskalare Masse nur geringfügig unterscheiden. Dies pflanzt sich auch in die zugehörigen Fitergebnisse fort, wenn man die Werte für beide Gittergrößen einfließen lässt. Da sich jedoch später herausstellen wird, dass im Fall der Vektor-Masse keine stabilen Fitergebnisse bei Verwendung beider Punkte zu erzielen sind, wird auch hier bereits nur das Ergebnis vom größeren $T\chi L$ -Gitter mit $24^3 \times 40$ Gitterpunkten benutzt.

β	N_{par}	χ^2/dof	κ_c	b_{PS}	c_{PS}
5.5	2	1.9	0.16090(3)	5.30(9)	11(9)
	3	1.58	0.16104(15)	4.4(8)	
5.6	2	1.2	0.15849(2)	3.96(6)	4(5)
	3	1.35	0.15852(5)	3.7(3)	

Tabelle 3.5: Direkte chirale Extrapolation der pseudoskalaren Masse.

Tabelle 3.5 zeigt die Resultate der so erzeugten Fits. Die Notwendigkeit, einen quadratischen Fit durchführen zu müssen, ist deutlich schwächer geworden, vor allem bei dem Fit zu $\beta = 5.5$ aber immer noch vorhanden. Dies zeigt sich zum einen daran, dass bereits die linearen Fits ein χ^2/dof von $\mathcal{O}(1)$ haben, zum anderen ist der Fitparameter des quadratischen Terms c_{PS} nicht mehr mit derselben Signifikanz von Null verschieden. Eine visuelle Kontrolle der quadratischen Fits in Abbildung 3.6 überzeugt jedoch davon, im weiteren

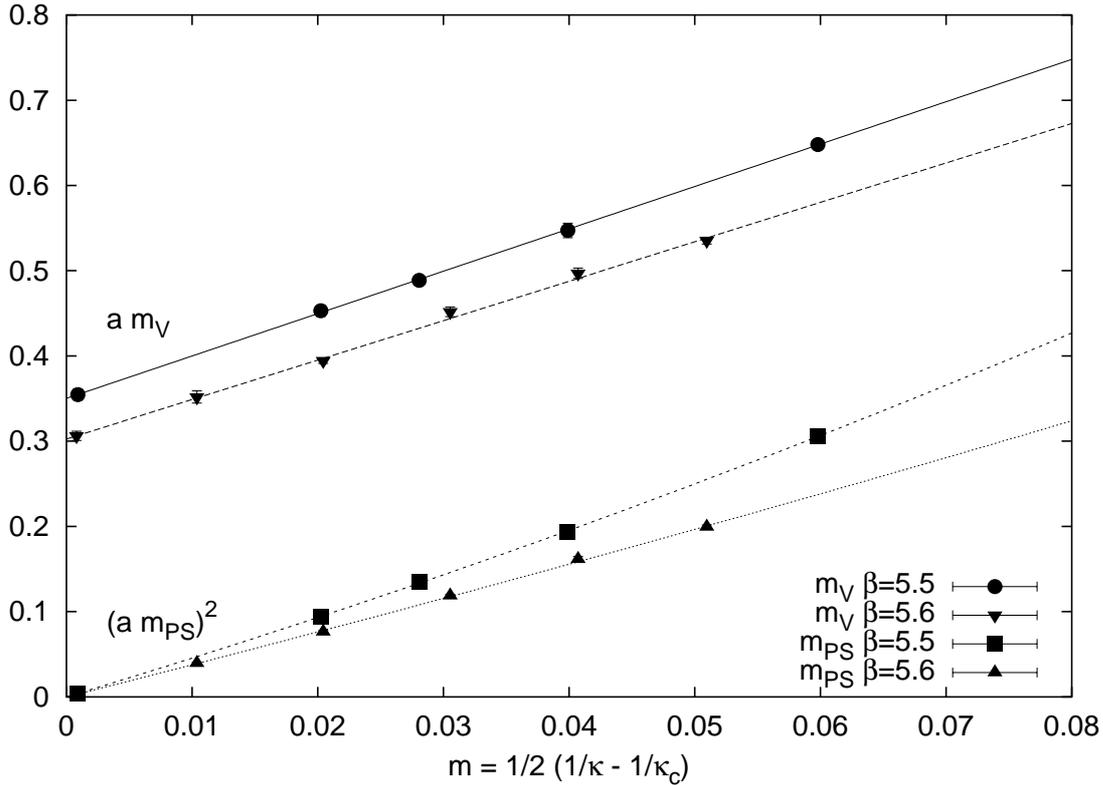


Abbildung 3.6: Direkte chirale Extrapolation der pseudoskalaren und der Vektor-Masse. Die eingezeichneten Fehlerbalken sind kleiner als die verwendeten Symbole.

diese Ergebnisse zu verwenden. Sie können Tabelle 3.5 entnommen werden.

3.6 Chirale Extrapolation in m_V

Wie bereits in Gleichung (3.7) bemerkt, erwartet man auf Grund der chiralen Störungstheorie in höherer Ordnung für die Vektor-Masse eine Abhängigkeit der Form

$$m_V = b_V + c_V m + d_V m^{3/2} + e_V m^2 \quad (3.28)$$

von der Quarkmasse m [67]. Im Gegensatz zur pseudoskalaren Masse ist der führende Korrekturterm hier proportional zu $m^{3/2}$, ein Term mit quadratischer Abhängigkeit von m ist jedoch ebenfalls vorhanden.

Unglücklicherweise zeigt es sich, dass Fits, bei denen alle vier Parameter gleichzeitig variiert werden, sehr instabil sind¹¹. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die beiden höheren Terme im relativ kleinen Bereich von m , der von den Daten jeweils abgedeckt wird, nur sehr schlecht zu unterscheiden sind, zumal auch nur wenige Datenpunkte im Verhältnis zur Zahl der Parameter vorliegen. Daher werden, neben den linearen Fits, zwei Fitansätze

¹¹Für $\beta = 5.6$ und $\kappa^{see} = 0.1575$ ist ein solcher Fit gar nicht möglich, da nur Massen für insgesamt vier verschiedene κ^{val} vorliegen.

mit drei Parametern verfolgt, die alternativ den m^2 -Term (im weiteren als 3a bezeichnet) oder den $m^{3/2}$ -Term (mit 3b gekennzeichnet) benutzen.

β	N_{par}	χ^2/dof	b_V	c_V	d_V/e_V
5.5	2	0.09	0.350(6)	4.97(15)	
	3a	0.03	0.36(4)	4(2)	8(24)
	3b	0.02	0.37(5)	4(4)	4(12)
5.6	2	1.41	0.303(5)	4.63(13)	
	3a	1.50	0.288(19)	6(1)	-16(19)
	3b	1.63	0.29(2)	6(2)	-5(8)

Tabelle 3.6: Direkte chirale Extrapolation der Vektor-Masse.

Tabelle 3.6 zeigt die Resultate dieser drei Fitansätze im Fall der direkten chiralen Extrapolation. Wie bereits bei der entsprechenden Analyse der pseudoskalaren Massen besteht auch hier keine Notwendigkeit, Korrelationen zwischen den Datenpunkten zu beachten. Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass der lineare Ansatz in beiden Fällen der geeignete ist, was sowohl an χ^2/dof , als auch an der Nullverträglichkeit von d_V bzw. e_V festgemacht werden kann. Auch die visuelle Kontrolle der in Abbildung 3.6 dargestellten Fits bestätigt diese Beobachtung. Daher wird für die direkte chirale Extrapolation in beiden Fällen der lineare Ansatz benutzt.

In Tabelle 3.7 sind die Ergebnisse präsentiert, die aus den korrelierten Fits der *semi-quenched* Analyse an die Vektor-Massen erzielt wurden. Wie deutlich zu erkennen ist, zeigt sich hier jedoch kein so einheitliches Bild wie im Fall der pseudoskalaren Massen. Es kann kein Fitansatz identifiziert werden, der bei allen Datensätzen die besten Resultate liefert. Vielmehr stellt der lineare Ansatz bei einem Teil der Datensätze – ähnlich wie bei der direkten Extrapolation – das Optimum dar, sowohl was den Wert von χ^2/dof angeht, als auch was die Nullverträglichkeit der Parameter der höheren Terme bei den Fits mit 3 Parametern betrifft. Bei anderen Datensätzen erweist sich dieser Ansatz hingegen als ungeeignet. Dies ist noch nicht unbedingt am Wert von χ^2/dof festzumachen, der durchaus auch eine Größe $\mathcal{O}(1)$ annehmen kann. Eine visuelle Kontrolle zeigt in diesen Fällen jedoch, dass die gefittete Gerade die Daten nicht beschreibt, sondern vielmehr parallel neben den Datenpunkten verläuft ohne die Fehlerbalken zu berühren. Allerdings ist in diesen Fällen oft auch keine klare Präferenz für einen der beiden 3-Parameter Fits auszumachen.

Die Entscheidung, welcher der Fitansätze für die chirale Extrapolation benutzt wird, läuft daher so ab, dass zunächst versucht wird, den linearen Fit zu verwenden. Ist dies aus den bereits genannten Gründen nicht möglich, wird aus den beiden Fits mit 3 Parametern derjenige gewählt, der zu dem kleineren Wert von χ^2/dof führt. In Tabelle 3.7 sind die schließlich verwendeten Fits durch Fettdruck hervorgehoben. Abbildung 3.7 zeigt die verwendeten Datensätze sowie die verwendeten Fits.

3.6.1 Diskussion – *Finite-size* Effekte

In den Diagrammen fallen insbesondere die Datensätze für $\beta = 5.5$ und $\kappa^{see} = 0.1600$ sowie für $\beta = 5.6$ und $\kappa^{see} = 0.1575$ auf dem Gitter mit $16^3 \times 32$ Punkten auf. Sie basieren

β	$L^3 \times T$	κ^{see}	N_{par}	χ^2/dof	b_V	c_V	d_V/e_V	
5.5	$16^3 \times 32$	0.1580	2	0.02	0.415(7)	1.77(2)		
			3a	0.03	0.415(12)	1.77(15)	-0.0(5)	
			3b	0.03	0.415(14)	1.8(3)	0.0(5)	
		0.1590	2	1.33	0.395(10)	1.83(6)		
			3a	0.20	0.366(19)	2.17(19)	-1.2(6)	
			3b	0.21	0.36(2)	2.4(3)	-1.0(5)	
		0.1596	2	0.37	0.368(6)	1.92(3)		
			3a	0.15	0.363(8)	2.04(14)	-0.6(7)	
			3b	0.18	0.361(9)	2.1(2)	-0.4(5)	
		0.1600	2	1.46	0.363(7)	1.90(4)		
			3a	1.53	0.376(14)	1.6(3)	1(1)	
			3b	1.30	0.381(15)	1.3(4)	1.2(9)	
	5.6	$16^3 \times 32$	0.1560	2	1.14	0.362(4)	1.890(17)	
				3a	1.64	0.361(5)	1.91(6)	-0.1(3)
				3b	1.68	0.361(6)	1.92(12)	-0.1(2)
			0.1565	2	0.25	0.347(7)	1.93(3)	
3a				0.11	0.341(10)	2.02(12)	-0.4(6)	
3b				0.13	0.340(11)	2.1(2)	-0.3(4)	
0.1570			2	1.14	0.342(5)	1.932(19)		
			3a	0.17	0.331(8)	2.09(10)	-0.7(4)	
			3b	0.13	0.328(10)	2.24(17)	-0.6(3)	
0.1575			2	0.16	0.331(5)	1.95(3)		
			3a	0.01	0.328(7)	2.03(14)	-0.4(8)	
			3b	0.00	0.328(8)	2.1(2)	-0.3(5)	
$24^3 \times 40$		0.1575	2	1.56	0.315(3)	2.024(15)		
			3a	0.83	0.306(6)	2.18(8)	-0.7(4)	
			3b	0.94	0.305(6)	2.28(14)	-0.5(3)	
		0.1580	2	1.54	0.302(4)	2.06(3)		
	3a		1.94	0.298(9)	2.15(16)	-0.5(8)		
	3b		2.03	0.300(10)	2.1(3)	-0.2(6)		

Tabelle 3.7: *Semi-quenched* chirale Extrapolation der Vektor-Masse. Die im weiteren benutzten Fits sind durch Fettdruck hervorgehoben.

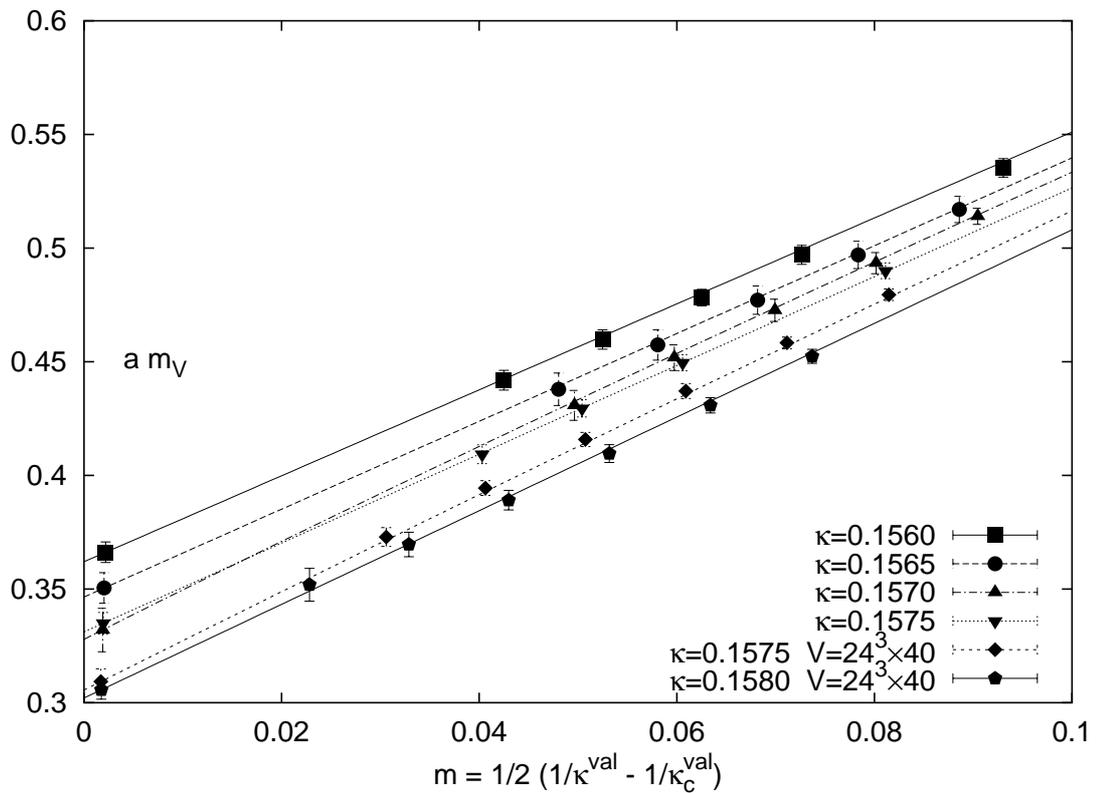
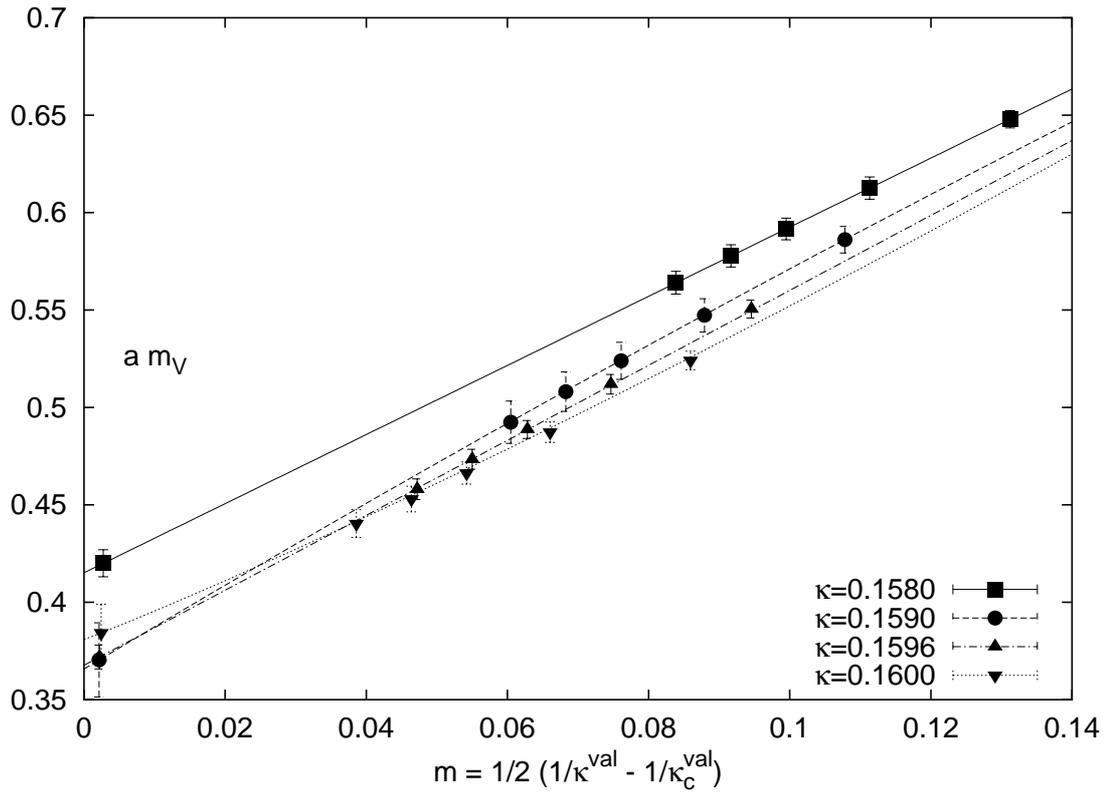


Abbildung 3.7: *Semi-quenched* chirale Extrapolation der Vektor-Masse. Das obere Diagramm zeigt Fits für $\beta = 5.5$, das untere für $\beta = 5.6$.

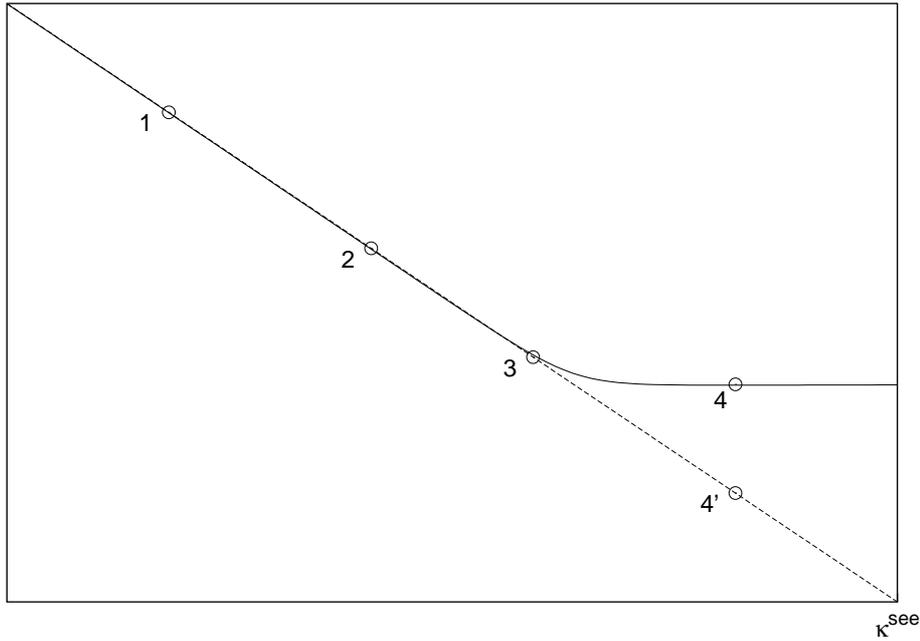


Abbildung 3.8: Szenario der effektiven Masse des Seequark-Hintergrundfeldes in Abhängigkeit von κ^{see} . Ab Punkt 3 setzen *finite-size* Effekte ein. Sie bewirken, dass die effektive Masse von $4'$ zu 4 verschoben wird.

auf den jeweils leichtesten Seequarks bei dieser Gittergröße. Die zugehörigen Fits zeigen ein qualitativ deutlich unterschiedliches Verhalten als die anderen Datensätze. Während letztere einen im wesentlichen parallelen Verlauf nehmen, schneiden diese Extrapolationen die anderen. Eine visuelle Kontrolle zeigt, dass dies nicht etwa auf einen qualitativ schlechten Fit zurückzuführen ist, sondern dass vielmehr die Datenpunkte sehr gut mit dem Fit in Einklang sind, was auch für die geschnittenen Fits und die zugehörigen Datenpunkte zutrifft. Somit muss die Erklärung dieses Effekts in den Daten selbst gesucht werden.

Einen guten Ansatz, diesen Effekt zu erklären, findet man durch Betrachtung des unteren Diagramms in Abbildung 3.7. Dort fällt insbesondere auf, dass die beiden Datensätze für $\beta = 5.6$ und $\kappa^{see} = 0.1575$, die bei unterschiedlichen Gittergrößen ermittelt wurden, nicht miteinander verträglich sind. Gleichzeitig ist jedoch der aus den T χ L-Simulationen stammende Datensatz auf dem größeren Gitter gut zu den übrigen Datensätzen der SESAM-Simulationen passend. Dies legt die Vermutung nahe, dass es sich bei dem angesprochenen Effekt um die Folge eines für die gewählten Parameter zu kleinen Gitters handelt. Gegen diese Erklärung spricht zunächst, dass solche *finite-size* Effekte naiv eigentlich am stärksten bei den leichtesten Gittermassen erwartet werden, die Analyse der pseudoskalaren Masse jedoch keine besonderen Probleme zu Tage gefördert hat. Die nun folgende Argumentation soll diese Frage klären.

Bei Simulationen mit dynamischen Fermionen muss zunächst zwischen zwei unterschiedlichen *finite-size* Effekten unterschieden werden. Diese können zum einen auf Grund von zu leicht gewählten dynamischen Seequarks auftreten, zum anderen führt aber auch die

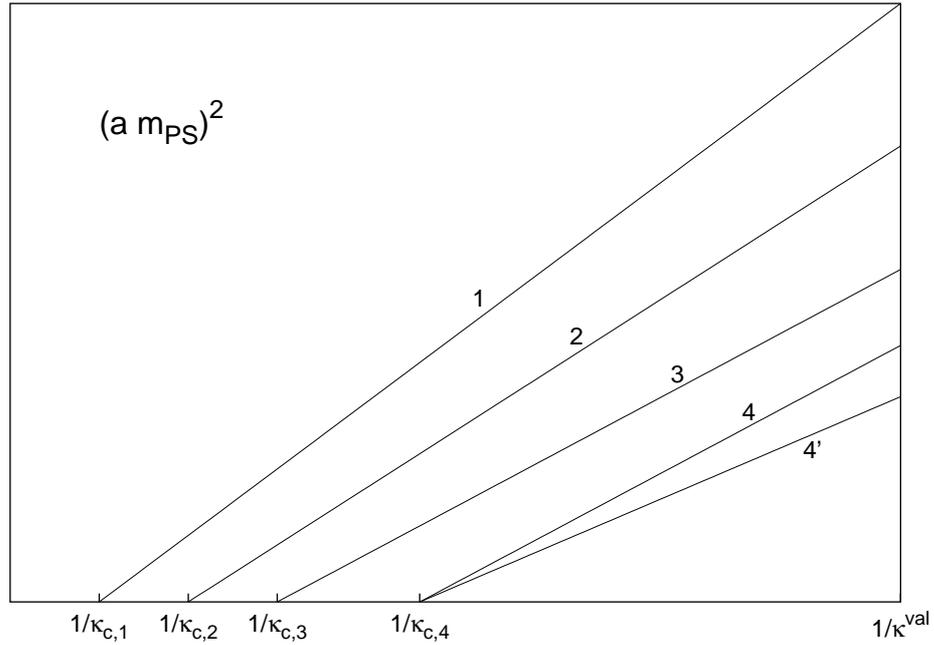


Abbildung 3.9: Szenario der Abhängigkeit der pseudoskalaren Masse von κ^{val} . Die verschiedenen Linien entsprechen den κ^{see} in Abbildung 3.8. *Finite-size* Effekte wirken sich schwach auf die Steigung, nicht aber auf κ_c aus.

Wahl zu leichter Valenzquark bei der Propagatorberechnung zu solchen Effekten. Hier soll nun zunächst auf das erste Szenario eingegangen werden. Auf Basis dieser Diskussion folgt dann später eine qualitative Abschätzung der *finite-size* Effekte der Valenzquarks. Bei Massenberechnungen in der vollen QCD wirken sich die Seequarks nur indirekt durch ein Hintergrundfeld aus. Die effektive Masse¹² dieses Seequark-Hintergrundfeldes kann in gewissen Grenzen durch den Massenparameter κ^{see} eingestellt werden. Solange keine *finite-size* Effekte auftreten, kann diese effektive Masse durch die Wahl eines größeren κ^{see} verkleinert werden. Dies ist in Abbildung 3.8, die den Zusammenhang zwischen effektiver Masse und κ^{see} skizziert, durch die ersten drei Punkte angedeutet. Eine Reduzierung der effektiven Masse geht dabei mit einem Zuwachs der zugehörigen Korrelationslänge einher. Wächst die Korrelationslänge des Hintergrundfeldes relativ zur Gitterausdehnung zu stark an, so tritt es auf Grund der periodischen Randbedingungen mit sich selbst in Wechselwirkung und erzeugt so dynamisch einen weiteren Beitrag zur effektiven Masse. Auf Grund dieses *finite-size* Effektes gelingt es nicht, die effektive Masse unter ein kritisches Niveau zu senken, das natürlich von der Gittergröße abhängt. Dies soll in Abbildung 3.8 durch die Punkte 4' und 4 angedeutet werden.

Die *finite-size* Effekte des Seequark-Hintergrundfeldes sollten dann jedoch auch Auswirkungen auf die Massenberechnungen zeigen. Ermittelt man auf Hintergrundfeldern mit unterschiedlichem κ^{see} etwa die pseudoskalare Masse in Abhängigkeit von κ^{val} , so ergibt

¹²Mit diesem Terminus soll die Eigenschaft des Hintergrundfeldes bezeichnet werden, die Beweglichkeit der Eichfelder einzuschränken. Je „leichter“ das Hintergrundfeld ist, desto weniger findet eine Einschränkung statt.

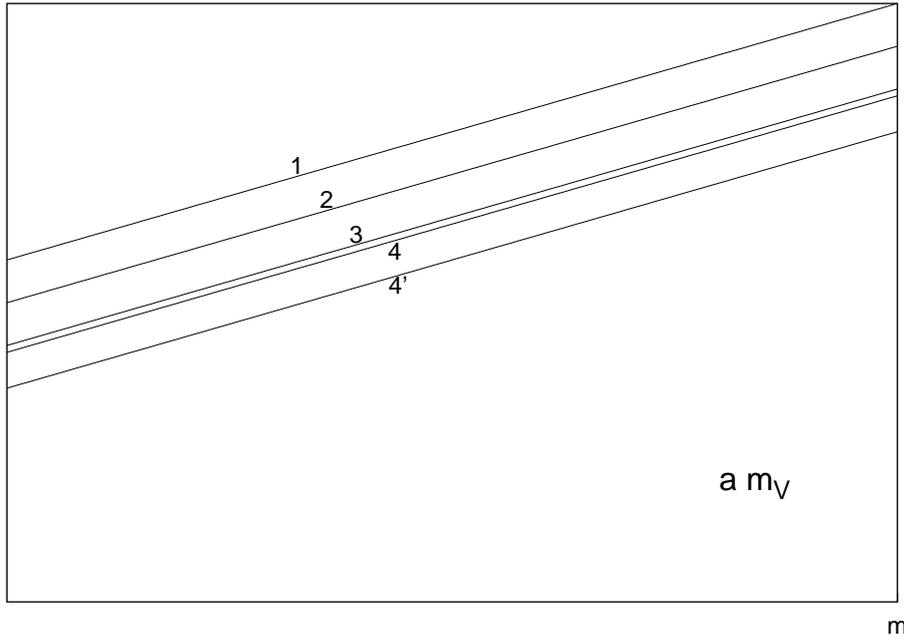


Abbildung 3.10: Szenario der Abhängigkeit der Vektor-Masse von der Valenzquarkmasse m . Die verschiedenen Linien entsprechen den κ^{see} in Abbildung 3.8. *Finite-size* Effekte wirken sich stark auf den Achsenabschnitt aus.

sich ein Bild ähnlich dem in Abbildung 3.9 skizzierten. Aus der chiralen Störungstheorie wird in niedrigster Ordnung ein linearer Zusammenhang zwischen $(am_{PS})^2$ und $1/\kappa^{val}$ erwartet. Aus der Variation der Seequarkmasse resultieren ohne *finite-size* Effekte zwei Veränderungen der zugehörigen Geraden. Auf der einen Seite ist eine Verschiebung von κ_c^{val} , und damit des Achsenabschnitts, in Abhängigkeit von κ^{see} festzustellen, zum anderen erfährt die Steigung der Geraden eine Änderung. Die mit 1, 2, 3 und 4' gekennzeichneten Geraden in Abbildung 3.9 deuten dieses Verhalten an, das so auch in den vorliegenden Daten gefunden wird¹³.

Den Daten für $\beta = 5.6$ und $\kappa^{see} = 0.1575$ auf den beiden Gittergrößen ist nun zu entnehmen, wie sich *finite-size* Effekte auf die Berechnung der pseudoskalaren Masse auswirken. Für κ_c^{val} ist dabei keine signifikante Abhängigkeit von der Gittergröße festzustellen, allerdings unterscheiden sich die Steigungen signifikant. Gleichzeitig ist zu erkennen, dass die Steigungen für $\kappa^{see} = 0.1570$ und $\kappa^{see} = 0.1575$ auf dem kleineren Gitter gut übereinstimmen. Abbildung 3.9 skizziert dieses Verhalten, indem die κ_c der Geraden 4 und 4' übereinstimmen, die Steigung der Geraden 4 gegenüber der von 4' jedoch vergrößert wurde.

Damit sollten sich *finite-size* Effekte allein aus der Bestimmung von κ_c^{val} noch nicht ermitteln lassen, auch wenn sie sich auf Grund der falschen Steigung der pseudoskalaren Masse natürlich auf Größen wie κ_l und daraus abgeleiteten auswirken.

Einen deutlicheren Effekt haben die *finite-size* Effekte jedoch auf die Bestimmung der

¹³Die Werte für κ_c sind der Tabelle 3.4 zu entnehmen, die Steigungen können in Abbildung 3.5 abgelesen werden bzw. sind durch b_{PS} ebenfalls in Tabelle 3.4 dargestellt.

Vektor-Masse. Das Verhalten dieser Größe in Abhängigkeit von κ^{see} und der Valenzquarkmasse m skizziert Abbildung 3.10. Hier sagt die chirale Störungstheorie in niedrigster Ordnung eine lineare Abhängigkeit der Vektor-Masse am_V von der Quarkmasse voraus, allerdings verschwindet sie nicht mit der Quarkmasse, sondern bleibt auch am chiralen Punkt endlich. Verschiedene effektive Massen des Seequark-Hintergrundfeldes beeinflussen die Steigung der Vektor-Masse nur wenig. Gleichzeitig erfährt der Achsenabschnitt jedoch eine deutliche Änderung, was in der Skizze zu den parallelen Geraden führt, die mit 1 bis 4' markiert sind.

Auch hier soll wieder der Vergleich der Daten für $\beta = 5.6$ und $\kappa^{see} = 0.1575$ auf den zwei unterschiedlichen Gittergrößen dazu dienen, die Auswirkungen des *finite-size* Effektes auf die Seequarks abzuschätzen. So ist in Abbildung 3.7 keine signifikante Auswirkung auf die Steigung zu erkennen, allerdings ist zu bemerken, dass die Massen deutlich zu größeren Werten verschoben sind. Damit erfährt auch der Achsenabschnitt der Vektor-Masse, der dem Wert am chiralen Punkt entspricht, eine Vergrößerung. Insgesamt resultiert daraus eine Verschiebung der Vektor-Masse auf Werte, die einem kleineren κ^{see} entsprechen. Dieses Szenario ist in Abbildung 3.10 dadurch angedeutet, dass die Gerade 4 wesentlich näher an die mit 3 als an die mit 4' gekennzeichnete rückt.

Zusammenfassend kann damit festgestellt werden, dass der *finite-size* Effekt des Seequark-Hintergrundfeldes, entgegen der obigen naiven Annahme, einen deutlich stärkeren Effekt auf die Vektor-Massen als auf die pseudoskalaren Massen hat.

Neben dem bisher diskutierten *finite-size* Effekt des Seequark-Hintergrundfeldes existiert natürlich ein ebensolcher bei den Valenzquarks. Es liegt nahe, für die Auswirkungen beider Effekte ein ähnliches Verhalten anzunehmen. Dies bedeutet, dass die Massen unter Variation von κ^{val} zunächst das lineare Verhalten zeigen, das die chirale Störungstheorie vorhersagt. Das Einsetzen der *finite-size* Effekte sorgt dann dafür, dass die beobachteten Massen größere Werte annehmen, als bei einem linearen Verlauf zu erwarten ist, die Gerade bei kleineren Valenzquarkmassen also nach oben „abknicken“. Dies erklärt insbesondere die Beobachtung, dass die Vektormassen bei $\beta = 5.5$ und $\kappa^{see} = 0.1600$ sowie $\beta = 5.6$ und $\kappa^{see} = 0.1575$ auf dem kleineren Gitter die Fits der anderen Massen schneiden.

Die Auswirkung des *finite-size* Effektes der Valenzquarks auf die pseudoskalare Masse ist jedoch schwieriger zu erkennen. Zum einen zeigt diese Größe ohnehin nur eine schwache Abhängigkeit von solchen Effekten, zum anderen scheint das „Abknicken“ zum Teil in dem quadratischen Term des Fitansatzes kompensiert werden zu können. Dies äußert sich effektiv in einem leichten Zuwachs von κ_c , der wiederum die Daten im Diagramm der Vektormasse leicht nach rechts verschiebt. Eine solche Verschiebung ist jedoch nicht von dem *finite-size* Effekt zu unterscheiden, der aus dem Seequark-Hintergrundfeld resultiert. Ein Indiz dafür, dass auch bei den pseudoskalaren Massen *finite-size* Effekte zu Tage treten, ist in dem ungewöhnlich großen χ^2/dof selbst der quadratischen Fits bei $\beta = 5.5$ und $\kappa^{see} = 0.1600$ sowie $\beta = 5.6$ und $\kappa^{see} = 0.1575$ auf dem kleineren Gitter zu sehen.

Damit ist ein vollständiges Bild erstellt, das die Beobachtungen in selbstkonsistenter Weise plausibel erklärt. Eine endgültige Klärung des beobachteten Verhaltens, das natürlich auch auf einer Kombination von Effekten beruhen kann, erfordert jedoch eine detailliertere Untersuchung, die über den Rahmen dieser Arbeit hinausgeht. Ein solches Projekt wird gerade in Angriff genommen [81].

Auf Grund der obigen Diskussion wird klar, dass vor allem die Daten zu $\beta = 5.5$ und

$\kappa^{see} = 0.1600$ sowie $\beta = 5.6$ und $\kappa^{see} = 0.1575$ auf dem kleineren Gitter mit *finite-size* Effekten behaftet sind, und ihre Aussagekraft für die *semi-quenched* Analyse nur als sehr eingeschränkt bezeichnet werden kann. Dies rechtfertigt im nachhinein außerdem, dass die Daten zu $\kappa^{see} = 0.1575$ auf dem kleineren Gitter bei der direkten Analyse von $\beta = 5.6$ außer Acht gelassen wurden.

Eine genauere Betrachtung der Daten für $\kappa^{see} = 0.1580$ auf dem großen Gitter offenbart weiterhin, dass auch hier die Tendenz des „Abknickens“ bei den Daten des Vektor-Mesons festzustellen ist. Damit stehen auch diese Daten im Verdacht, mit kleinen *finite-size* Effekten behaftet zu sein.

In einer früheren Analyse der SESAM-Daten traten diese *finite-size* Effekte nicht in solcher Deutlichkeit zu Tage. Dies ist wohl vor allem darauf zurückzuführen, dass die Korrelationen zwischen den Observablen in der *semi-quenched* chiralen Extrapolation nicht berücksichtigt wurden.

3.6.2 Bestimmung von κ_l

Auf Grundlage der chiralen Extrapolationen von pseudoskalarer und Vektor-Masse kann nun der leichte *hopping*-Parameter κ_l bestimmt werden. Dazu wird an Hand der gerade erzeugten Fits derjenige *hopping*-Parameter ermittelt, bei dem das Verhältnis von pseudoskalarer und Vektor-Masse mit dem physikalischen Wert von $m_\pi/m_\rho = 0.1784$ übereinstimmt.

In der *semi-quenched* Analyse wird natürlich nur der *hopping*-Parameter der Valenzquarks variiert. Entsprechend erhält man für jedes κ^{see} ein gesondertes Ergebnis für den *hopping*-Parameter, der hier als κ_l^{val} bezeichnet wird.

Die Resultate dieser Extrapolation sind in den Tabellen 3.10 und 3.11 wiedergegeben.

3.7 Bestimmung des Gitterabstands a

Die Bestimmung des Gitterabstands erfolgt durch Betrachtung der Sommer-Skala r_0 [66]. Sie ist mittels des statischen Potentials $V(r)$ zwischen unendlich schweren Quarks definiert, das durch die Betrachtung von Wilson-Schleifen – d.h. von Produkten der Link-Variablen entlang geschlossener Pfade – bestimmt werden kann. Die Sommer-Skala ist dann als der Abstand auf dem Gitter definiert, bei dem

$$r^2 \left. \frac{dV}{dr} \right|_{r=r_0} = 1.65 \quad (3.29)$$

gilt.

Die Betrachtung verschiedener effektiver nichtrelativistischer Potentialmodelle für schwere Quarks zeigt, dass die durch (3.29) beschriebene Definition die größtmögliche Unabhängigkeit der Skala r_0 von der Wahl des Potentialmodells zeigt. Gleichzeitig kann in diesen Modellen der physikalische Werte der Sommer-Skala von $r_0^{-1} = 394(20) \text{ MeV}^{14}$ bestimmt werden [66, 82, 83].

¹⁴Dieser Wert entspricht einem Radius von $r_0 \approx 0.5 \text{ fm}$.

β	$L^3 \times T$	κ^{see}	r_0	$a_{r_0}^{-1}$ [GeV]
5.5	$16^3 \times 32$	0.1580	4.027(24)	1.587(9)
		0.1590	4.386(26)	1.728(10)
		0.1596	4.675(34)	1.842(13)
		0.1600	4.889(30)	1.926(12)
	bei κ_l	0.16100(14)	5.460(54)	2.15(2)
5.6	$16^3 \times 32$	0.1560	5.104(29)	2.011(11)
		0.1565	5.283(52)	2.08(2)
		0.1570	5.475(72)	2.16(3)
		0.1575	5.959(77)	2.35(3)
	$24^3 \times 40$	0.1575	5.892(27)	2.321(11)
		0.1580	6.230(60)	2.45(2)
	bei κ_l	0.15848(5)	6.571(51)	2.589(20)

Tabelle 3.8: Die Sommerskala r_0 und die Gitterkonstante.

Die in Tabelle 3.8 wiedergegebenen Werte der Sommer-Skala für $\beta = 5.6$ wurden bereits in [84] veröffentlicht. Um eine einheitliche Analyse zu ermöglichen, wurden die Resultate für $\beta = 5.5$ ebenfalls mit der dort beschriebenen Methode bestimmt. Aus diesen Ergebnissen kann unter Verwendung des physikalischen Wertes direkt die Gitterskala $a_{r_0}^{-1}$ bestimmt werden, welche ebenfalls in Tabelle 3.8 angegeben sind.

Die so ermittelten Gitterskalen liegen für $\beta = 5.5$ im Bereich von 1.6 – 1.9 GeV, was einem Gitterabstand von 0.1 – 0.12 fm entspricht. Analog erhält man für $\beta = 5.6$ Werte von 2.0 – 2.5 GeV, die Gitterabständen von 0.08 – 0.1 fm korrespondieren.

Zur Bestimmung des Gitterabstands für die Quarkmassenbestimmung mittels der direkten chiralen Extrapolation ist es notwendig, die Sommer-Skala zum leichten *hopping*-Parameter κ_l zu extrapolieren. Empirisch kann gezeigt werden, dass die Sommer-Skala dabei der Beziehung

$$\frac{1}{r_0}(m) = \frac{1}{r_0^\chi} + B_{r_0} m \quad (3.30)$$

genügt, wobei r_0^χ die Skala bei verschwindender Quarkmasse ist [75]. Die damit bestimmten extrapolierten Skalen sind ebenso in Tabelle 3.8 wiedergegeben.

Die den extrapolierten Gitterskalen entsprechenden Gitterabstände von $a = 0.092$ fm bzw. $a = 0.076$ fm liegen im angestrebten Bereich von $a < 0.1$ fm.

3.8 Berechnung der Renormierungsfaktoren

In diesem Kapitel wurde bereits mehrmals darauf eingegangen, dass die bis zu diesem Punkt im Prinzip bestimmten Quarkmassen zwar in physikalischen Einheiten vorliegen, diese allerdings im Gitterrenormierungsschema ermittelt wurden. Damit sind sie nicht direkt mit den Resultaten anderer Rechnungen zu vergleichen, die typischerweise im $\overline{\text{MS}}$ -Schema vorliegen. Außerdem sind die Quarkmassen bei einer Skala bestimmt, die durch den inversen Gitterabstand gegeben ist, und damit noch nicht einmal untereinander vergleichbar. In diesem Abschnitt sollen daher zum einen die Renormierungskonstanten be-

stimmt werden, welche die Gitterwerte in das $\overline{\text{MS}}$ -Schema überführen, zum anderen aber auch die notwendigen Kopplungsparameter $\alpha_{\overline{\text{MS}}}$, die für eine Reskalierung der Quarkmassen im $\overline{\text{MS}}$ -Schema benötigt werden.

Die Renormierung der Quarkmassen erfolgt mit $Z_M = Z_S^{-1}$, also der inversen Renormierungskonstante skalarer Größen. Durch Martinelli und Zhang [85] wurde in einer störungstheoretischen 1-Schleifen Rechnung gezeigt, dass sie durch

$$Z_M(\mu a) = 1 - \frac{1}{4\pi} (8 \log(\mu a) - 17.27) \alpha_{\overline{\text{MS}}}(q^*) \quad (3.31)$$

gegeben ist, wenn Gitter- und $\overline{\text{MS}}$ -Schema verbunden werden sollen. Hier ist μ die Skala und $\alpha_{\overline{\text{MS}}}$ der Kopplungsparameter im $\overline{\text{MS}}$ -Schema sowie a der Gitterabstand. Die Skala q^* wird durch den mittleren Impuls bestimmt, der für die zu renormierende Größe relevant ist. Er wird üblicherweise als π/a angenommen [86].

3.8.1 Der Kopplungsparameter $\alpha_{\overline{\text{MS}}}$

Zur Berechnung der Renormierungskonstante (3.31) wird die Kopplungskonstante $\alpha_{\overline{\text{MS}}}$ benötigt, deren Wert ebenfalls aus der Gitterrechnung zu bestimmen ist. Lepage und Mackenzie zeigten in [86], dass die Wahl des Entwicklungsparameters α auf dem Gitter einen signifikanten Einfluss auf die Genauigkeit der 1-Schleifen Näherung hat. Daher schlugen sie vor, statt der nackten Gitterkopplung $\alpha_{\text{lat}} = g_0^2/4\pi$ eine aus dem statischen Quarkpotential auf dem Gitter abgeleitete renormierte Kopplung α_V zu verwenden. Für diese Entwicklungsvariable konnten sie schließlich zeigen, dass die in der Störungstheorie und der Simulation ermittelten Werte bis auf einen Fehler von 10% übereinstimmen.

Die Definition des Kopplungsparameters α_V geschieht unter Verwendung des Erwartungswertes des Plaquette-Operators $\langle \frac{1}{3} \text{Sp} \square \rangle$. In 1-Schleifen Näherung gilt

$$-\log \langle \frac{1}{3} \text{Sp} \square \rangle = \frac{4\pi}{3} \alpha_V(3.41/a) (1 - (1.1870 + 0.0249n_f) \alpha_V(3.41/a)), \quad (3.32)$$

wobei $n_f = 2$ die Zahl der dynamischen Quarkflavors ist [86, 87, 88]. Der Faktor 3.41 verschiebt die Gitterskala $1/a$ zu einer auf den Plaquetteoperator optimierten effektiven Skala. Mit dem Kopplungsparameter im $\overline{\text{MS}}$ -Schema ist α_V durch

$$\alpha_{\overline{\text{MS}}}(e^{-5/6} 3.41/a) = \alpha_V(3.41/a) \left(1 + \frac{2}{\pi} \alpha_V(3.41/a) \right) \quad (3.33)$$

verbunden [89]. Die verschobene Skala für $\alpha_{\overline{\text{MS}}}$ resultiert aus Korrekturen, die diese Beziehung unabhängig von n_f machen.

Um die Kopplung im $\overline{\text{MS}}$ -Schema schließlich bei anderen Skalen zu erhalten, kann die integrierte 2-Schleifen β -Funktion

$$\frac{\alpha_{\overline{\text{MS}}}(\mu)}{4\pi} = \frac{1}{\beta_0 \log(\mu^2/\lambda_{QCD}^2)} \left(1 - \frac{\beta_1 \log[\log(\mu^2/\lambda_{QCD}^2)]}{\beta_0^2 \log(\mu^2/\lambda_{QCD}^2)} \right), \quad (3.34)$$

β	$L^3 \times T$	κ	$\alpha_V(3.41/a)$	$\alpha_{\overline{MS}}(\pi/a)$	$\alpha_{\overline{MS}}(1/a)$	$\alpha_{\overline{MS}}(2 \text{ GeV})$
5.5	$16^3 \times 32$	0.1580	0.181	0.159	0.237	0.2145(5)
		0.1590	0.179	0.157	0.233	0.2190(5)
		0.1596	0.177	0.156	0.231	0.2229(7)
		0.1600	0.177	0.156	0.230	0.2259(6)
	direkt	0.1610	0.175	0.154	0.226	0.2333(10)
5.6	$16^3 \times 32$	0.1560	0.170	0.151	0.218	0.2185(5)
		0.1565	0.169	0.150	0.217	0.2206(9)
		0.1570	0.169	0.150	0.216	0.2227(12)
		0.1575	0.168	0.149	0.215	0.2297(13)
	$24^3 \times 40$	0.1575	0.168	0.149	0.215	0.2286(5)
		0.1580	0.167	0.149	0.214	0.2330(10)
	direkt	0.1585	0.167	0.149	0.213	0.2375(8)

Tabelle 3.9: Werte der regularisierten Kopplungskonstante. Es sind nur die Fehler von $\alpha_{\overline{MS}}(2 \text{ GeV})$ angegeben, die auf Grund des Fehlers in der Bestimmung des Gitterabstands a relativ groß sind. Die Fehler der anderen Kopplungen liegen im Promillebereich und sind daher vernachlässigt¹⁶.

mit

$$\begin{aligned}\beta_0 &= \frac{11N - 2n_f}{3} \\ \beta_1 &= \frac{34}{3}N^2 - \frac{10}{3}Nn_f - \frac{N^2 - 1}{N}n_f\end{aligned}\quad (3.35)$$

benutzt werden [90]. Hier ist $N = 3$ die Zahl der Farbfreiheitsgrade und $n_f = 2$ wiederum die Zahl der dynamischen Quarks. Aus den in Tabelle 2.1 angegebenen Werten für die Plaquette ergeben sich die in Tabelle 3.9 dargestellten Ergebnisse für die Kopplungskonstante.

3.8.2 Tadpole-Verbesserung

Ebenfalls durch Lepage und Mackenzie wurde bemerkt, dass die in (3.31) gegebene Form der Renormierungskonstante durch sehr große $\mathcal{O}(g^2)$ -Korrekturen beeinflusst ist, die für typische Gitterrechnungen in derselben Größenordnung wie die unkorrigierten Werte liegen. Daher schlugen sie vor, die Gitteroperatoren durch eine *mean field* Näherung zu verbessern und damit sogenannte *tadpole*-Graphen zu beseitigen.

Wie in (2.29) gezeigt wurde, basiert die Konstruktion von Operatoren auf dem Gitter auf der Entwicklung der Link-Variablen

$$U_\mu \approx 1 + iag_0 A_\mu(x). \quad (3.36)$$

¹⁶ Anders als naiv zu erwarten wäre, sind die Berechnungen der Kopplungen $\alpha_V(3.41/a)$, $\alpha_{\overline{MS}}(\pi/a)$ und $\alpha_{\overline{MS}}(1/a)$ unabhängig vom tatsächlichen Gitterabstand a , da gemeinsame Faktoren in der Skala gekürzt werden können. Erst beim Übergang auf eine von a unabhängige Skala muss der Gitterabstand wieder eingefügt werden.

Diese Näherung ist natürlich nur für kleine Gitterkonstanten a gut. Allerdings erweist sich, dass die Korrekturterme nicht von der Größe $\mathcal{O}(a^2)$ sind, wie naiv anzunehmen wäre. Vielmehr führen ultraviolette Divergenzen dazu, dass die zusätzlichen Potenzen in a gerade wieder eliminiert werden. Daher sind die Korrekturen von der Größe $\mathcal{O}(g^2)$ und führen zu großen Renormierungen der Operatoren auf dem Gitter im Vergleich zu den entsprechenden Kontinuumsgrößen.

Bei der *tadpole*-Verbesserung wird nun versucht, diese Beiträge zu den Gitteroperatoren durch einen *mean field* Ansatz zu beseitigen. Dazu werden die Eichlinks so normiert, dass ihr Vakuumerwartungswert den Kontinuumswert annimmt:

$$U_\mu(x) \rightarrow u_0(1 + iag_0 A_\mu(x)). \quad (3.37)$$

Der mittlere Eichlink u_0 ist dabei über den nichtstörungstheoretisch ermittelten Erwartungswert des Plaquetteoperators definiert:

$$u_0 = \left\langle \frac{1}{3} \text{Sp} \square \right\rangle^{1/4}. \quad (3.38)$$

Völlig analog kann auch für den fermionischen Teil der Wirkung eine Renormierung der Quarkfelder gemäß

$$\sqrt{2\kappa}\psi \rightarrow \sqrt{8\kappa_c}\sqrt{1 - 3\kappa/4\kappa_c}\psi \quad (3.39)$$

hergeleitet werden. Dabei werden Quarkmassen durch einen fermionischen *tadpole*-Faktor skaliert [91]

$$m^{lat}(\kappa) \rightarrow 8\kappa_c m^{lat}(\kappa), \quad (3.40)$$

der auch im weiteren Verlauf dieser Arbeit verwendet werden soll. Ebenfalls in [91] wurde für die störungstheoretische Entwicklung des fermionischen *tadpole*-Faktors gezeigt, dass sie durch

$$1 + \frac{1}{4\pi} 17.13 \alpha_{\overline{\text{MS}}}(q^*) \quad (3.41)$$

gegeben ist. Damit erhält man für den Renormierungsfaktor der Quarkmassen:

$$Z_M(\mu a) = 1 - \frac{1}{4\pi} (8 \log(\mu a) - 0.13) \alpha_{\overline{\text{MS}}}(q^*). \quad (3.42)$$

Der Vergleich mit (3.31) zeigt sofort die deutlich kleineren $\mathcal{O}(g^2)$ -Korrekturen in diesem Ausdruck.

Eine weitere Folge der *tadpole*-Verbesserung ist die Veränderung des relevanten mittleren Impulses, der in die Berechnung des Renormierungsfaktors eingeht. Es stellt sich heraus, dass nun $q^* = \mu = 1/a$ zu wählen ist. Tabelle 3.9 zeigt daher auch den Kopplungsparameter $\alpha_{\overline{\text{MS}}}$ bei dieser Skala.

3.9 Bestimmung der leichten Quarkmasse

Mit den bisher präsentierten Ergebnissen ist es nun möglich, die Masse des leichten Quarks zu bestimmen. Dazu werden zunächst die chiralen Extrapolationen der pseudoskalaren und der Vektor-Masse benutzt, um das Verhältnis m_{PS}/m_V zu bestimmen. Anschließend

wird die Quarkmasse ermittelt, bei der dieses Verhältnis mit dem physikalischen Wert [63],

$$\frac{m_\pi}{m_\rho} = 0.1784, \quad (3.43)$$

übereinstimmt. Der so bestimmte Wert ist die leichte Quarkmasse in Gittereinheiten im Gitterrenormierungsschema bei einer Skala von $1/a$. Sie wird mit $\overline{m}^{lat}(1/a)$ bezeichnet. Die ermittelten Ergebnisse sind in Tabelle 3.10 für die *semi-quenched* Analyse und in Tabelle 3.11 für die direkte chirale Extrapolation wiedergegeben.

Diese Quarkmasse ist im Grunde bereits ermittelt gewesen, da sie über die Beziehung

$$a\overline{m}^{lat} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa_l} - \frac{1}{\kappa_c} \right) \quad (3.44)$$

mit den weiter oben bestimmten Werten für κ_l und κ_c verbunden ist. Obwohl die Differenz der *hopping*-Parameter nur mit etwa einer Standardabweichung aufgelöst werden kann, zeigt die leichte Quarkmasse relativ kleine Fehler. Dies ist auf die sehr starke Korrelation der in (3.44) eingehenden *hopping*-Parameter zurückzuführen, die jedoch durch das *Jackknife*-Verfahren eliminiert werden kann.

β	$L^3 \times T$	κ^{see}	κ_l^{val}	$a\overline{m}^{lat}(1/a)$	$\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(1/a)$	$\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV})$
5.5	$16^3 \times 32$	0.1580	0.16469(7)	0.00272(8)	5.70(16)	5.44(16)
		0.1590	0.16346(5)	0.0022(2)	4.9(5)	4.7(5)
		0.1596	0.16275(6)	0.00218(8)	5.25(20)	5.16(20)
		0.1600	0.16228(7)	0.00244(19)	6.1(5)	6.1(5)
5.6	$16^3 \times 32$	0.1560	0.16055(5)	0.00220(5)	5.71(15)	5.71(15)
		0.1565	0.16033(6)	0.00204(7)	5.47(20)	5.5(2)
		0.1570	0.15990(6)	0.00190(11)	5.2(3)	5.3(4)
		0.1575	0.15943(8)	0.00194(7)	5.8(2)	6.0(2)
	$24^3 \times 40$	0.1575	0.15946(3)	0.00171(6)	5.07(18)	5.22(19)
		0.1580	0.15906(3)	0.00176(4)	5.52(15)	5.75(17)

Tabelle 3.10: Die leichte Quarkmasse in der *semi-quenched* Analyse. $a\overline{m}^{lat}$ ist in Gittereinheiten, $\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}$ in MeV angegeben.

β	chir. Extrap.	κ_l	$a\overline{m}^{lat}(1/a)$	$\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(1/a)$	$\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV})$
5.5	direkt	0.16100(14)	0.00090(16)	2.50(44)	2.54(45)
	<i>semi-quenched</i>				4.82(41)
5.6	direkt	0.15848(5)	0.00080(7)	2.63(24)	2.77(25)
	<i>semi-quenched</i>				4.88(37)

Tabelle 3.11: Die leichte Quarkmasse bei $\kappa^{see} = \kappa_l^{see}$. $a\overline{m}^{lat}$ ist in Gittereinheiten, $\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}$ in MeV angegeben.

Durch Multiplikation mit der zur jeweiligen Skala $1/a$ zugehörigen Renormierungskonstante $Z_M(\mu a)$ werden die Quarkmassen anschließend ins $\overline{\text{MS}}$ -Schema übertragen. Da in dieser Analyse nur *tadpole*-verbesserte Renormierungskonstanten benutzt werden, ist

außerdem noch mit dem *tadpole*-Faktor $8\kappa_c$ zu multiplizieren. Auch die so ermittelten Quarkmassen im $\overline{\text{MS}}$ -Schema, die immer noch bei einer Skala von $1/a$ vorliegen, sind in den Tabellen 3.10 und 3.11 angegeben.

Die Werte der leichten Quarkmasse bei einer Skala von 2 GeV erhält man schließlich unter Verwendung der 2-Schleifenbeziehung [90]:

$$\frac{m^{\overline{\text{MS}}}(Q)}{m^{\overline{\text{MS}}}(\mu)} = \left(\frac{\alpha_{\overline{\text{MS}}}(Q)}{\alpha_{\overline{\text{MS}}}(\mu)} \right)^{\gamma_0/2\beta_0} \left[1 + \frac{\alpha_{\overline{\text{MS}}}(Q) - \alpha_{\overline{\text{MS}}}(\mu)}{4\pi} \times \left(\frac{\gamma_1\beta_0 - \gamma_0\beta_1}{2\beta_0^2} \right) \right]. \quad (3.45)$$

Die Werte für β_0 und β_1 sind bereits aus (3.35) bekannt, die γ_0 und γ_1 sind durch

$$\begin{aligned} \gamma_0 &= 6 \frac{N^2 - 1}{2N}, \\ \gamma_1 &= \frac{97N}{3} \frac{N^2 - 1}{2N} + 3 \left(\frac{N^2 - 1}{2N} \right)^2 - \frac{10n_f}{3} \frac{N^2 - 1}{2N} \end{aligned} \quad (3.46)$$

gegeben. Wie bereits in (3.35) ist auch hier $N = 3$ die Zahl der Farbfreiheitsgrade und $n_f = 2$ die Zahl der dynamischen Quarks.

Damit ergeben sich die ebenfalls in den Tabellen 3.10 und 3.11 angegebenen leichten Quarkmassen im $\overline{\text{MS}}$ -Schema bei einer Skala von 2 GeV, $\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV})$. Dies sind jedoch immer noch keine physikalischen Größen. Zum einen beinhalten sie immer noch Gitterartefakte, da die Massenbestimmung auf einem Gitter mit Gitterabstand a erfolgt ist und nicht im Kontinuum, zum anderen sind die Werte aus der *semi-quenched* Analyse bei Massen der dynamischen Quarks bestimmt, die deutlich über den physikalischen liegen.

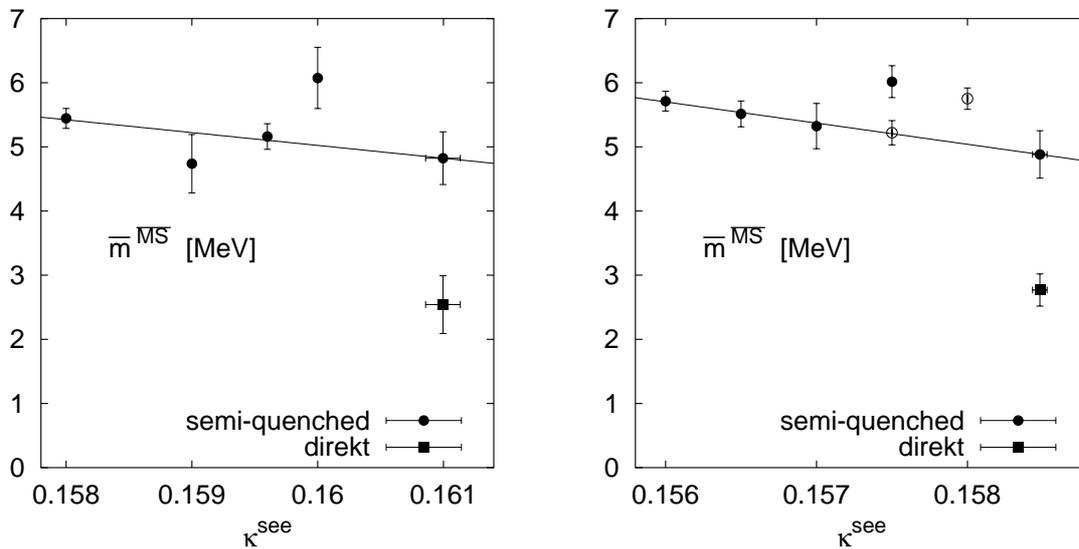


Abbildung 3.11: Die renormierte Masse der leichten Quarks in Abhängigkeit von κ^{see} . Alle Massen in MeV bei einer Skala von 2 GeV. Die Diagramme zeigen links die Werte für $\beta = 5.5$, rechts für $\beta = 5.6$. Die Werte von T χ L sind durch leere Symbole markiert.

Um die Abhängigkeit von der Seequarkmasse zu beseitigen, werden daher die Werte aus der *semi-quenched* Analyse zum leichten *hopping*-Parameter der Seequarks extrapoliert,

der in der direkten Analyse bestimmt wurde. Diese Extrapolationen sind in Abbildung 3.11 dargestellt, die daraus resultierenden extrapolierten Werte in Tabelle 3.11 angegeben. Damit liegen die Quarkmassen bei physikalischen Seequarkmassen vor.

Betrachtet man die in Tabelle 3.11 wiedergegebenen Ergebnisse genauer, so stellt man fest, dass sowohl die Resultate aus der direkten Extrapolation, als auch die aus der *semi-quenched* Extrapolation jeweils im Rahmen der Fehler übereinstimmen, die Werte der verschiedenen Methoden sich jedoch signifikant um einen Faktor 2 unterscheiden. Dieses Verhalten konnte bereits bei der ersten Quarkmassenanalyse der SESAM/T χ L Daten festgestellt werden [41] und wurde in der Folgezeit in mehreren Veröffentlichungen von verschiedenen Seiten diskutiert [76, 73].

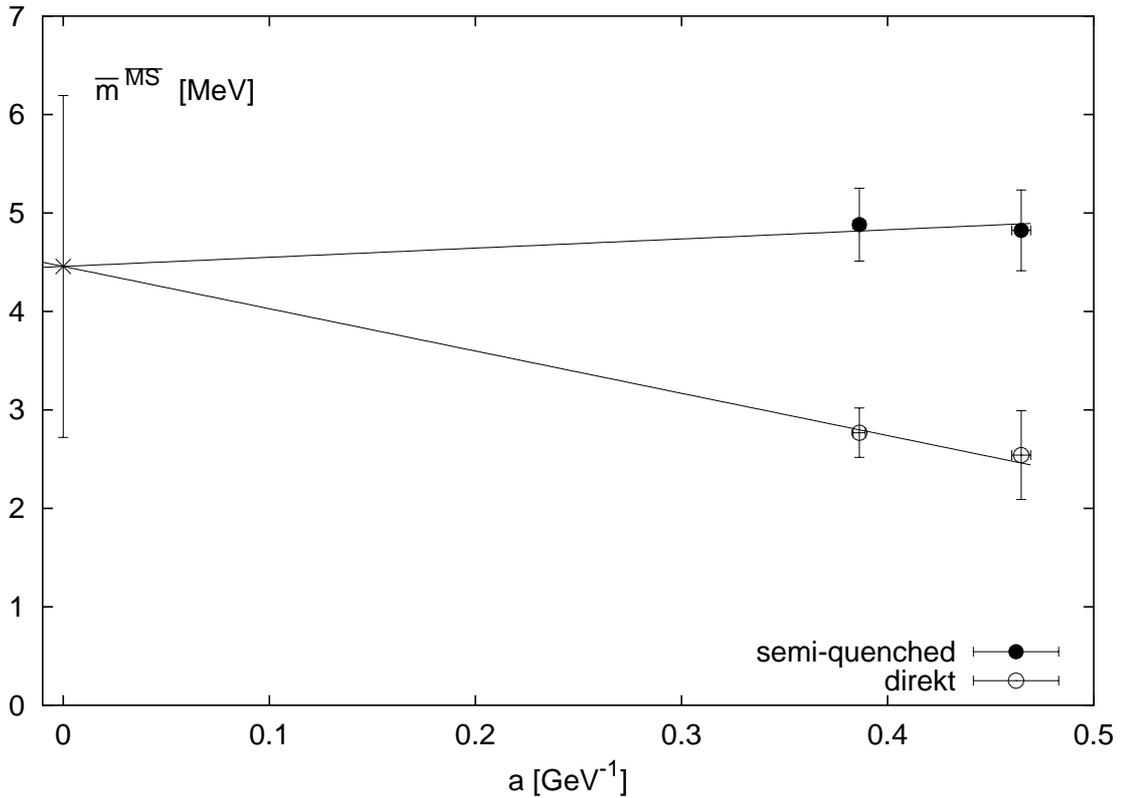


Abbildung 3.12: Die renormierte leichte Quarkmasse in Abhängigkeit des Gitterabstands.

Die ermittelten Werte für das leichte Quark sind in Abhängigkeit vom ebenfalls bestimmten Wert des Gitterabstands in Abbildung 3.12 dargestellt. Neben der bereits erwähnten Abhängigkeit der Quarkmasse von der Bestimmungsmethode fällt hier besonders auf, dass die Gitterabstände nur einen relativ kleinen Bereich abdecken, der zudem noch recht weit vom Kontinuumswert $a = 0$ entfernt ist. Dies wird natürlich zu einer Beeinträchtigung der Qualität der Kontinuumsextrapolation führen, die unter dem sehr kurzen Hebelarm in a leiden wird.

Um in dieser Situation trotz allem eine Kontinuumsextrapolation durchzuführen, werden im folgenden nacheinander drei Standpunkte eingenommen:

- In der früheren Analyse von SESAM/T χ L [41] wurde argumentiert, dass der Fak-

tor 2 zwischen den beiden verschiedenen Quarkmassendefinitionen gut über rein geometrische Argumente verstanden werden kann, der manifest nur bei endlichem Gitterabstand a eine Rolle spielt. Allerdings ist a *a priori* keine Definition ausgezeichnet, und die aufgezeigten Diskrepanzen sollten im Kontinuumslimit verschwinden. In der zitierten Arbeit wurde dann die direkte chirale Extrapolation zur Ermittlung der finalen Ergebnisse benutzt.

Folgt man diesem Vorgehen und extrapoliert die beiden Werte aus der direkten Methode linear zu $a = 0$, so erhält man für die leichte Quarkmasse einen Wert von

$$\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 3.9(2.3) \text{ MeV}. \quad (3.47)$$

- Bhattacharya und Gupta haben in [76] hingegen argumentiert, dass der Unterschied zwischen den Quarkmassendefinitionen auf Basis unterschiedlicher Definitionen der Renormierungskonstanten Z_M zu verstehen sei und eine nichtstörungstheoretische Bestimmung derselben den Faktor 2 kompensieren würde. Die vorliegende Definition der Renormierungskonstanten sei jedoch besser mit der *semi-quenched* Analyse verträglich.

Folgt man dieser Argumentation, ist der korrekte Kontinuumswert aus den beiden Punkten der *semi-quenched* chiralen Extrapolation zu ermitteln. Die lineare Extrapolation der beiden Punkte zu $a = 0$ ergibt:

$$\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 5.2(2.6) \text{ MeV}. \quad (3.48)$$

- Ali Khan *et al.* haben in [75] gezeigt, dass die Unterschiede zwischen den beiden hier präsentierten Definitionen der leichten Quarkmasse, und darüberhinaus auch für eine dritte Definition, die aus der axialen Ward-Identität motiviert ist, im Limes $a \rightarrow 0$ verschwinden. Die von ihnen dazu benutzte Fermionformulierung beruht auf $\mathcal{O}(a)$ -Verbesserung, wobei zum einen die Eichwirkung ebenfalls modifiziert wurde, zum anderen jedoch keine nichtperturbativ berechneten Parameter verwendet wurden. Folgt man diesem Ergebnis auch für Wilson-Fermionen und führt an die jeweils zwei Punkte einen linearen Fit unter der Nebenbedingung durch, dass der Achsenabschnitt übereinstimmt, so ergibt sich das in Abbildung 3.12 dargestellte Bild. Hieraus erhält man für die leichte Quarkmasse einen Wert von

$$\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 4.5(1.7) \text{ MeV}. \quad (3.49)$$

Wie nicht anders zu erwarten, sind die Fehler der ins Kontinuum extrapolierten leichten Quarkmassen sehr groß, was ohne Zweifel auf den kleinen Hebelarm in a zurückzuführen ist. Innerhalb dieser großen Fehler sind die Ergebnisse jedoch miteinander kompatibel. Da alle drei Resultate im Kontinuum dieselbe Gültigkeit besitzen, ist es legitim, den Mittelwert zu bilden. Dabei müssen natürlich die Korrelationen der Einzelergebnisse berücksichtigt bleiben, was durch das zur Fehlerberechnung verwendete *Jackknife*-Verfahren gewährleistet ist. Für diesen abschließenden Wert der Quarkmasse erhält man schließlich:

$$\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 4.5(1.7) \text{ MeV}. \quad (3.50)$$

3.9.1 Diskussion

Diese Ergebnisse sollen als erstes mit früheren Ergebnissen für Wilson-Fermionen verglichen werden. Hierbei ist zunächst zu bemerken, dass dies nur für die nicht zu $a = 0$ extrapolierten Werte möglich ist, da Quarkmassen, die ins Kontinuum extrapoliert wurden, auf Basis der Wilson-Wirkung bisher in der Literatur nicht präsentiert wurden.

Als erste Referenz sollen daher die Ergebnisse von SESAM auf den $\beta = 5.6$ Gittern dienen, die in [41] veröffentlicht wurden. Der dort angegebene Wert für die direkte Extrapolation von $\bar{m} = 2.7(2)$ MeV wird gut reproduziert. Auch der nur in der Dissertation von Uwe Glässner [93] angegebene Wert für die *semi-quenched* Analyse von $\bar{m} = 5.5(3)$ MeV stimmt mit dem hier ermittelten im Rahmen der Fehler überein.

Als Referenz zur Quarkmasse aus den $\beta = 5.5$ Konfigurationen dient das Ergebnis der SCRI-Gruppe [94]. Sie geben die leichte Quarkmasse mit $\bar{m} = 2.52(11)$ MeV an, wobei dieser Wert aus einer direkten Analyse stammt und im Rahmen der Fehler mit dem hier ermittelten übereinstimmt. Ein Wert für die Quarkmasse aus einer *semi-quenched* Analyse wird von ihnen nicht präsentiert.

Von einem weiteren Ergebnis mit Wilson-Fermionen der APE-Gruppe berichtet Lubicz in [73]. Ohne genauer auf die Simulationsparameter oder die Analysemethode einzugehen, wird eine Quarkmasse von $\bar{m} \approx 5.5$ MeV bei einem inversen Gitterabstand von $a^{-1} = 2.6$ GeV angegeben. Auch dieses Ergebnis ist verträglich mit der *semi-quenched* Analyse für $\beta = 5.6$.

Das einzige bisher publizierte Ergebnis zur Bestimmung der leichten Quarkmasse im Kontinuumslimites mit Hilfe der Gittermethode stammt von der CP-PACS Kollaboration [75]. Ihr Resultat für die leichte Quarkmasse im Kontinuum ist mit

$$\bar{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 3.44_{-0.22}^{+0.14} \text{ MeV} \quad (3.51)$$

angegeben. Das hier erzielte Gesamtresultat von $\bar{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 4.5(1.7)$ MeV sowie die einzelnen Extrapolation stimmen mit diesem Wert im Rahmen der Fehler überein.

Ein wesentlicher Unterschied zwischen der hier präsentierten Analyse und dem in [75] vorgestellten Ergebnis ist die resultierende Größe der Fehler der Quarkmassen. Dies ist wohl vor allem darauf zurückzuführen, dass die von der CP-PACS Kollaboration durchgeführten Simulationen einen wesentlich größeren Bereich des Gitterabstands abdecken. Gleichzeitig wirft jedoch die genauere Betrachtung der dort gemachten Kontinuumsextrapolation Zweifel auf, wie belastbar die angegebenen Fehlerintervalle tatsächlich sind. Betrachtet man dazu deren Diagramm der Kontinuumsextrapolation, das in Abbildung 3.13 wiedergegeben ist, sollten die Werte für χ^2/dof der linearen Fits für die direkte und die *semi-quenched* Analyse auf Grund der deutlich zu erkennenden Krümmung wesentlich größer als 1 sein. Tatsächlich sind sie mit 2.4 für die Extrapolation der *semi-quenched* Daten und mit 10.8 für die direkten Daten angegeben [75]. Würde man die linearen Fits durch quadratische ersetzen, wäre die Situation, die durch die eigentlich recht unwahrscheinlichen linearen Extrapolationen als sehr klar suggeriert wird, wesentlich weniger eindeutig.

Schließlich darf ein Vergleich mit anderen theoretischen Ansätzen jenseits der Gittermethode natürlich auch nicht fehlen. Der dazu betrachtete Wert der *Particle Data Group*,

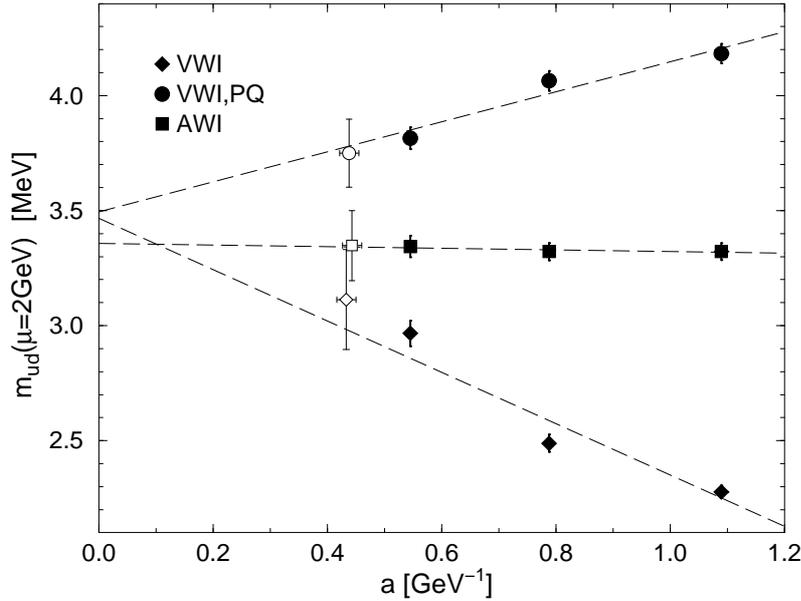


Abbildung 3.13: Die renormierte leichte Quarkmasse in Abhängigkeit des Gitterabstands aus [75]. Die mit VWI gekennzeichneten Punkte entstammen einer direkten, die mit VWI,SQ einer *semi-quenched* Analyse.

der bereits am Anfang dieses Kapitels mit $\bar{m} = 2.5 - 6$ MeV zitiert wurde [63], ist ebenfalls mit allen hier erzielten Ergebnissen verträglich.

3.10 Bestimmung der *strange* Quarkmasse

Die Bestimmung der Masse des *strange* Quarks ist auf dem Gitter prinzipiell leichter zu bewerkstelligen als die Berechnung der leichten Quarkmasse. Dies liegt an der Tatsache, dass Quarks mit Massen im Bereich des *strange* Quarks bei heutigen Simulationen direkt behandelt werden können. Vor diesem Hintergrund verwandeln sich die chiralen Extrapolationen zur leichten Quarkmasse in Interpolationen zur *strange* Quarkmasse.

Gleichzeitig entstehen jedoch neue Schwierigkeiten daraus, dass die Berechnungen auf Grund der nun beteiligten unterschiedlichen Quarkmassen weniger symmetrisch werden. So sind direkte chirale Extrapolationen nicht mehr möglich, da damit Mesonen beschrieben würden, bei denen *strange* Valenzquarks von *strange* Seequarks umgeben sind. Wegen der im Vergleich zu den leichten Quarks relativ großen Masse des *strange* Quarks würde dies die Realität nur sehr schlecht beschreiben, da man erwartet, dass die wesentlichen Effekte des Quarksees auf die leichtesten Quarks zurückzuführen sind. Daher werden in diesem Kapitel nur Ergebnisse einer *semi-quenched* Analyse präsentiert¹⁷.

Die Bestimmung der Masse des *strange* Quarks kann auf Basis verschiedener Massenverhältnisse betrieben werden. Im folgenden werden drei davon genauer beschrieben.

¹⁷Eine Variante der direkte Analyse ist bei der Quarkmassenbestimmung aus dem K - bzw. K^* -Meson zwar prinzipiell möglich, allerdings erwiesen sich die von SESAM/T χ L gewählten Werte der *hopping*-Parameter der Valenzquarks als schlecht geeignet.

Beim ersten Verfahren wird das physikalische Massenverhältnis zwischen ϕ - und ρ -Meson als Ausgangsbasis der Massenbestimmung benutzt. Dabei liegt dieser Analyse die Annahme zu Grunde, dass die Valenzquarkbestandteile des ϕ -Meson überwiegend aus *strange* Quarks bestehen.

Zur Bestimmung der *strange* Quarkmasse wird das Massenverhältnis aus Vektor-Masse und der Vektor-Masse bei der leichten Quarkmasse betrachtet. Unter Variation der Quarkmasse im Zähler wird der Quotient

$$\frac{am_V(am_s)}{am_V(a\bar{m})}, \quad (3.52)$$

mit dem physikalischen Wert

$$\frac{m_\phi}{m_\rho} = 1.325 \quad (3.53)$$

bei der *strange* Quarkmasse m_s übereinstimmen. Die funktionale Abhängigkeit der Vektormasse von der Quarkmasse wird hier wiederum der in Abschnitt 3.6 bestimmten chiralen Extrapolation entnommen. Die ebenfalls Verwendung findende leichte Quarkmasse stammt aus dem letzten Abschnitt.

Anschließend werden die so ermittelten Gittermassen ins $\overline{\text{MS}}$ -Schema übertragen und die zugehörige Skala zu 2 GeV verschoben. Dies geschieht ebenso wie die Extrapolation zu $\kappa^{see} = \kappa_l$ in völliger Analogie zur leichten Quarkmasse. Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind in Tabelle 3.12 in den mit ϕ gekennzeichneten Zeilen wiedergegeben. Dort sind auch die extrapolierten Werte zu finden. Abbildung 3.14 zeigt in den zwei oberen Diagrammen die zugehörigen Extrapolationen.

Die beiden weiteren hier zu besprechenden Methoden sind im Vergleich zum gerade vorgestellten Vorgehen komplizierter. Für sie müssen insbesondere weitere chirale Extrapolationen auf den bisher nicht verwendeten Observablen mit unsymmetrischen Werten von κ^{val} gemacht werden.

Hier soll nun zunächst die Bestimmung der Masse des *strange* Quarks aus dem K -Meson detailliert besprochen werden. Die Quarkmassenbestimmung auf Basis der Masse der K^* -Mesons erfolgt dann völlig analog.

Das K -Meson ist wie das π -Meson ein pseudoskalares Teilchen. Im Gegensatz zu diesem besteht es jedoch nicht aus zwei leichten Quarks. Vielmehr ist eines der beiden leichten Valenzquarks durch ein *strange* Quark ersetzt. Dementsprechend dürfen bei einer chiralen Extrapolation die Massen der beiden Valenzquarks nicht symmetrisch behandelt werden. An diesem Punkt kommen die Observablen der pseudoskalaren Masse zum Einsatz, bei denen die Massen der Valenzquarks unabhängig voneinander variiert wurden. Mit Hilfe dieser Ergebnisse ist es nun möglich, eines der beiden Valenzquarks zur leichten Quarkmasse zu extrapolieren, während die andere festgehalten wird. Als Resultat erhält man die Masse eines K -Mesons, dessen leichtes Valenzquark die richtige Masse besitzt, während die Masse des *strange* Valenzquark – ebenso wie die der Seequarks – einen unphysikalischen Wert annimmt.

Als nächster Schritt wird die chirale Extrapolation dieser abgeleiteten Größen in der zweiten Valenzquarkmasse gesucht. Mit Hilfe dieser Extrapolation kann dann schließlich die zweite Quarkmasse variiert und der Wert gesucht werden, bei dem das Verhältnis

β	$L^3 \times T$	κ^{see}	Input	κ_s	$am_s^{lat}(1/a)$	$m_s^{\overline{\text{MS}}}(1/a)$	$m_s^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV})$	
5.5	$16^3 \times 32$	0.1580	ϕ	0.16062(12)	0.080(2)	167(5)	160(5)	
			K	0.16137(14)	0.0651(19)	137(4)	130(4)	
			K^*	0.16064(18)	0.079(3)	166(7)	159(7)	
		0.1590	ϕ	0.1604(4)	0.060(8)	135(17)	131(17)	
			K	0.1608(3)	0.053(5)	120(11)	116(10)	
			K^*	0.1606(5)	0.056(10)	127(22)	124(21)	
		0.1596	ϕ	0.15949(9)	0.0650(19)	156(5)	154(5)	
			K	0.16005(15)	0.054(2)	130(5)	128(5)	
			K^*	0.15951(18)	0.065(3)	155(9)	153(9)	
		0.1600	ϕ	0.1584(5)	0.077(10)	193(25)	192(24)	
			K	0.1594(3)	0.059(5)	147(11)	146(11)	
			K^*	0.1583(7)	0.081(13)	202(33)	201(33)	
		extrap.	ϕ				147(11)	
			K				123(12)	
			K^*				143(16)	
	5.6	$16^3 \times 32$	0.1560	ϕ	0.15737(8)	0.0652(13)	169(4)	169(4)
K				0.15798(11)	0.0528(15)	137(4)	137(4)	
K^*				0.15740(11)	0.065(2)	167(5)	167(5)	
0.1565			ϕ	0.15735(10)	0.0610(19)	163(5)	165(5)	
			K	0.15793(13)	0.0494(17)	132(4)	133(5)	
			K^*	0.15733(14)	0.062(3)	165(8)	166(8)	
0.1570			ϕ	0.15732(20)	0.053(4)	147(12)	150(13)	
			K	0.15764(15)	0.047(2)	129(7)	131(7)	
			K^*	0.1576(4)	0.048(8)	133(23)	135(24)	
0.1575			ϕ	0.15664(11)	0.0577(15)	173(5)	179(5)	
			K	0.15723(17)	0.046(2)	138(6)	142(7)	
			K^*	0.15674(17)	0.056(3)	167(9)	173(9)	
$24^3 \times 40$			0.1575	ϕ	0.15710(11)	0.049(2)	144(7)	149(7)
				K	0.15747(9)	0.0413(15)	123(5)	126(5)
				K^*	0.15714(18)	0.048(4)	142(11)	147(11)
			0.1580	ϕ	0.15665(6)	0.0500(13)	157(4)	163(4)
K		0.15710(8)		0.0410(12)	128(4)	134(4)		
K^*		0.15661(15)		0.051(3)	160(10)	166(10)		
		extrap.	ϕ				135(13)	
			K				120(10)	
			K^*				133(20)	

Tabelle 3.12: Die strange Quarkmasse in der *semi-quenched* Analyse. am_s^{lat} ist in Gittereinheiten, $m_s^{\overline{\text{MS}}}$ in MeV angegeben.

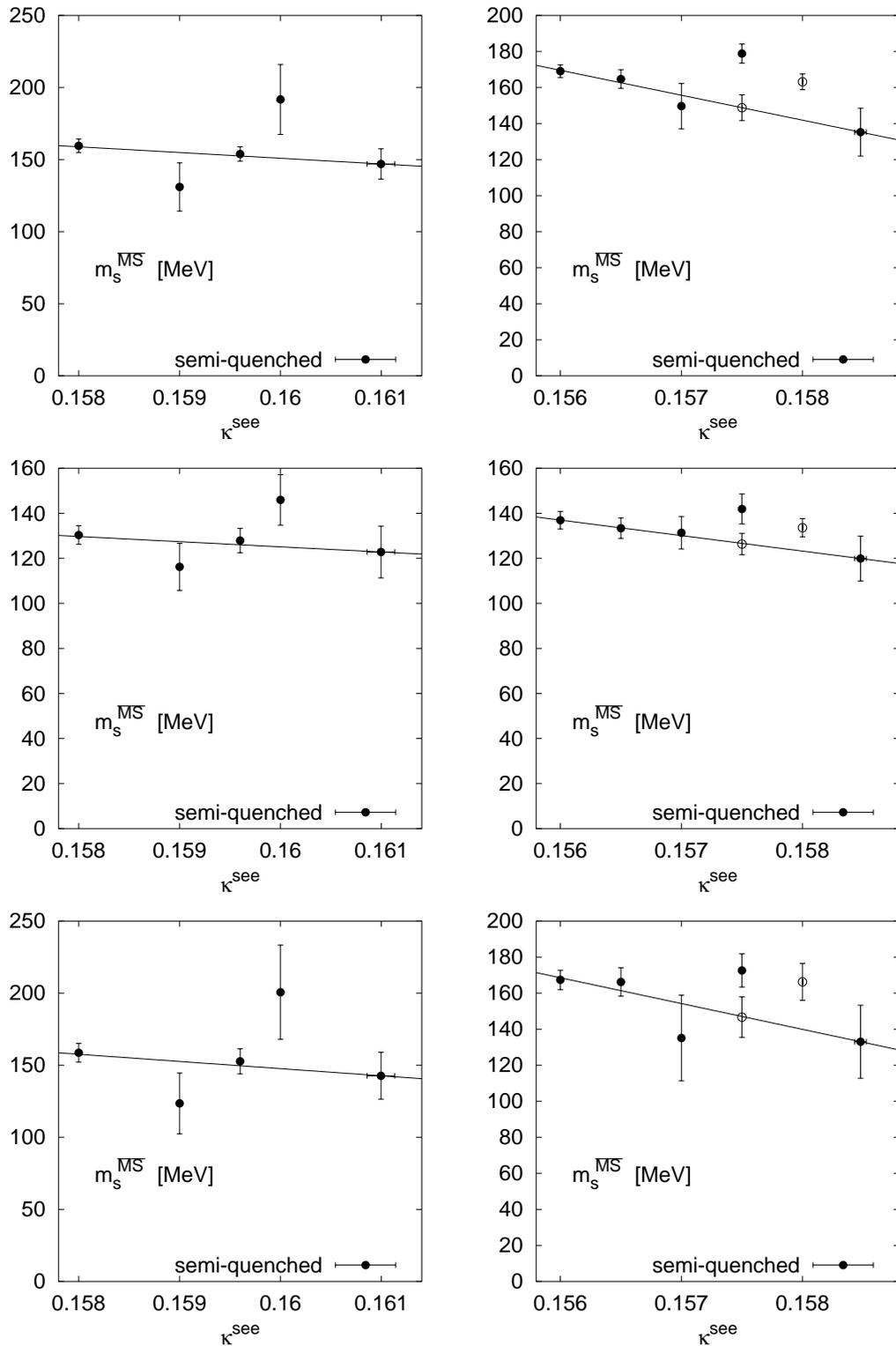


Abbildung 3.14: Die renormierte Masse der *strange* Quarks in Abhängigkeit von κ^{see} . Alle Massen in MeV bei einer Skala von 2 GeV. Die Diagramme zeigen links die Werte für $\beta = 5.5$, rechts für $\beta = 5.6$. Von oben nach unten erfolgte die Massenbestimmung durch das ϕ -, K - bzw. das K^* -Meson. Die Werte von T χ L sind durch leere Symbole markiert.

des so beschriebenen K -Mesons zur pseudoskalaren Masse bei κ_l^{val} , die dem π -Meson entspricht, den physikalischen Wert von [63]

$$\frac{m_K}{m_\pi} = 3.611 \quad (3.54)$$

annimmt. Als weitere Schritte zur Berechnung der Masse des *strange* Quark schließen sich auch hier wieder der Übergang ins $\overline{\text{MS}}$ -Schema sowie das Verschieben des Ergebnisses zu einer Skala von 2 GeV an, was wiederum in völliger Analogie zu den bisher besprochenen Analysen geschieht.

Die so erzielten Ergebnisse sind in Tabelle 3.12 in den mit K gekennzeichneten Zeilen zu finden. Auch hier wurde im letzten Schritt eine Extrapolation zu $\kappa^{see} = \kappa_l$ durchgeführt. Diese Ergebnisse sind ebenfalls in Tabelle 3.12 wiedergegeben. Die zugehörigen Diagramme sind die mittleren in Abbildung 3.14.

Für die in den mit K^* markierten Zeilen der Tabelle 3.12 dargestellten Ergebnisse, die aus dem K^* -Meson ermittelt wurden, ist das Vorgehen prinzipiell gleich, nur werden Vektormassen statt pseudoskalarer Massen für die Extrapolationen verwendet und zur Fixierung der *strange* Quarkmasse das physikalische Massenverhältnis von K^* -Meson zum ρ -Meson benutzt, das durch [63]

$$\frac{m_{K^*}}{m_\rho} = 1.159 \quad (3.55)$$

gegeben ist. Die zugehörigen Extrapolationen in der Seequarkmasse sind in den beiden unteren Diagrammen von Abbildung 3.14 dargestellt.

Eine zusätzliche Schwierigkeit bei dem gerade skizzierten Vorgehen stellt die Frage nach dem richtigen Ansatz für die chiralen Extrapolationen dar. In dieser Analyse wurden die bereits bei der chiralen Extrapolation der Vektor-Masse beschriebenen Fitansätze verwendet. Auch die endgültige Auswahl der im weiteren Verlauf benutzten Fits geschieht nach der dort beschriebenen Strategie. Allerdings wurde diese Auswahl nicht für jeden einzelnen Fit gemacht, vielmehr geschah dies nur für jede Kombination von β und κ einmal für die Auswahl des Fit zur Extrapolation in der ersten Valenzquarkmasse und anschließend unabhängig von der ersten Wahl für den Fit zur Fixierung der Masse des *strange* Quarks.

Auch die in Tabelle 3.12 wiedergegebenen Ergebnisse sind natürlich noch keine physikalischen Werte, da sie immer noch eine Abhängigkeit von dem zur Berechnung auf dem Gitter verwendeten Gitterabstand a in sich tragen. Da außerdem nur Ergebnisse aus der *semi-quenched* Analyse vorliegen, ist die Vielzahl der im letzten Abschnitt verwendeten Methoden der Kontinuumsextrapolation hier nicht zu erwarten. Gleichzeitig existiert allerdings weiterhin das dort bereits besprochene Problem des kleinen Hebelarms für die Extrapolation in a , da sich die Werte des Gitterabstands natürlich nicht verändert haben¹⁸. Allerdings kommt bei der Ermittlung des Kontinuumswertes hier der Umstand zu Hilfe, dass die Masse des *strange* Quarks auf drei unabhängige Weisen bestimmt wurde, die im Kontinuum natürlich wieder übereinstimmen sollten. Daher wurden – ähnlich dem Vorgehen bei der kombinierten Extrapolation der leichten Quarkmasse – auch hier jeweils lineare Extrapolationen der beiden Quarkmassenwerte zu $a = 0$ gesucht, wobei die Übereinstimmung des Kontinuumswertes durch eine Nebenbedingung erzwungen wurde.

¹⁸Auch hier wird der aus der Sommer-Skala r_0 ermittelte Gitterabstand verwendet.

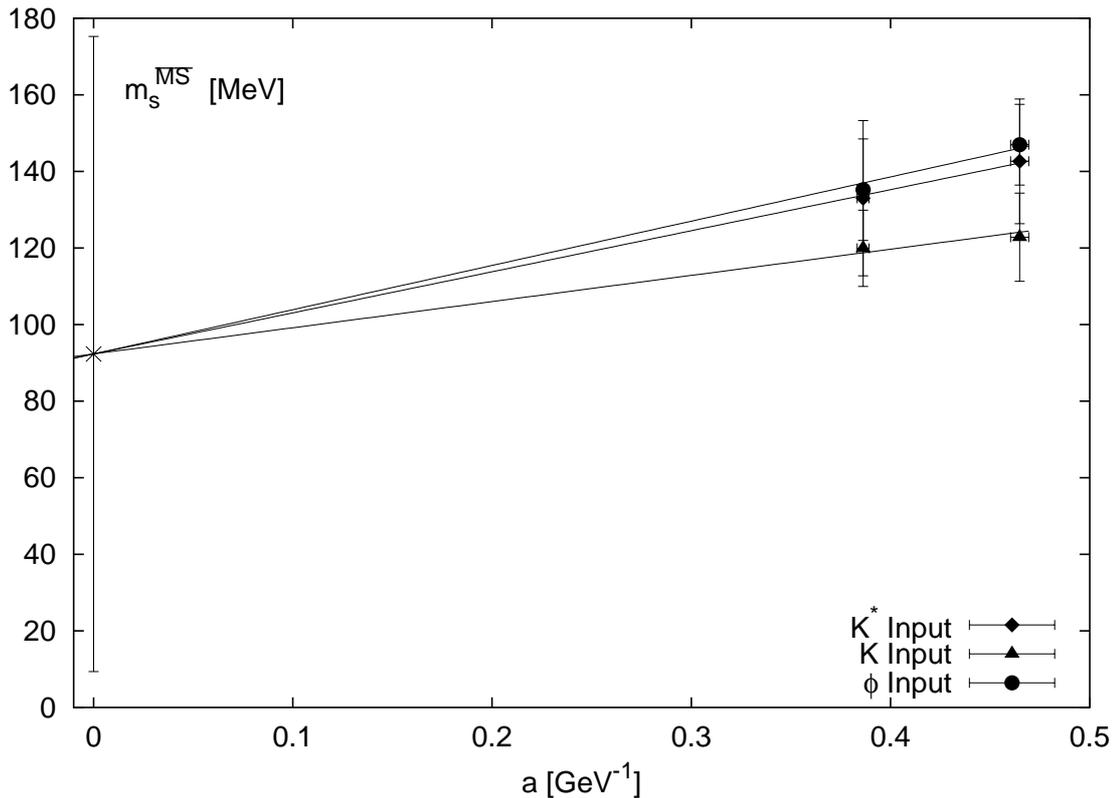


Abbildung 3.15: Die renormierte Masse des *strange* Quarks in Abhängigkeit des Gitterabstands.

Abbildung 3.15 zeigt – neben den bereits in Tabelle 3.12 wiedergegebenen Quarkmassen – die so erzielten Fits sowie den Kontinuumswert der *strange* Quarkmasse im $\overline{\text{MS}}$ -Schema bei einer Skala von 2 GeV. Er ist durch

$$m_s^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 92(83) \text{ MeV} \quad (3.56)$$

gegeben. Auch dieser Wert ist, wie auch schon der Kontinuumswert der leichten Quarkmasse, auf Grund des kurzen Hebelarms bei der Extrapolation in a mit sehr großen Fehlern behaftet.

3.10.1 Diskussion

Wie bereits bei der leichten Quarkmasse liegen auch beim *strange* Quark bisher keine zu $a = 0$ extrapolierten Werte für Wilson-Fermionen vor. Daher sollen zunächst wieder die nicht extrapolierten Ergebnisse mit früheren Resultaten verglichen werden.

Auf den Konfigurationen mit $\beta = 5.6$ wurde in einer früheren Analyse bereits die in [41] veröffentlichte Masse von $m_s = 140(20)$ MeV ermittelt. Dieser Wert ist eine Mittelwert der drei vorgestellten Definitionen. Er stimmt im Rahmen der Fehler mit den oben angegebenen Werten überein.

Für $\beta = 5.5$ hingegen gibt es in der Literatur keinen Vergleichswert. Der von der SCRI-Gruppe in [94] angegebene Wert von $m_s = 73(8)$ MeV stammt aus einer direkten Extrapo-

lation auf Basis der Masse des ϕ -Mesons. Damit werden jedoch, wie bereits oben bemerkt, *strange* Valenzquarks in einem See von *strange* Quarks beschrieben, was natürlich nicht der in der Natur realisierten Situation entspricht.

Bei der von Lubicz in [73] angesprochenen Analyse der APE-Gruppe werden getrennte Ergebnisse für die Quarkmasse bei einem inversen Gitterabstand von $a^{-1} = 2.6$ GeV auf Basis der Masse des ϕ -Mesons bzw. des K -Mesons angegeben. Die Werte sind mit $m_s = 112(15)$ MeV aus dem K -Meson und $m_s = 108(26)$ MeV aus dem ϕ -Meson etwas kleiner als die hier ermittelten Massen, stimmen im Rahmen der Fehler jedoch überein. Vergleichswerte für ins Kontinuum extrapolierte Quarkmassen aus Gitterrechnungen sind auch im Fall des *strange* Quarks nur von der CP-PACS Kollaboration verfügbar. Sie geben in [75] ebenfalls getrennte Werte für die Quarkmasse aus dem K -Meson, $m_s = 88_{-6}^{+4}$ MeV, und dem ϕ -Meson, $m_s = 90_{-11}^{+5}$ MeV, an, die jedoch im Rahmen der Fehler übereinstimmen. Auch das hier ermittelte Ergebnis von $m_s^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 92(83)$ MeV stimmt mit diesem Wert überein.

Beide Ergebnisse, sowohl das hier ermittelte als auch das der CP-PACS Kollaboration, liegen damit im unteren Bereich der von der *Particle Data Group* angegebenen Spanne von $m_s = 75 - 170$ MeV [63].

Einen weiteren interessanten Vergleich erlaubt die Betrachtung des Massenverhältnisses zwischen dem *strange* Quark und dem leichten Quark, das in erster Ordnung der chiralen Störungstheorie in (3.6) zitiert ist. Neuere Rechnungen von Leutwyler [95] geben diesen Wert mit $24.4(1.5)$ an, wobei sich der Fehler aus systematischen Unsicherheiten ableitet. Berechnet man diesen Quotienten aus den in (3.50) und (3.56) angegebenen Quarkmassen, so erhält man

$$\frac{m_s}{m} = 20(16). \quad (3.57)$$

Im Rahmen des recht großen Fehlers von deutlich über 50% stimmt dieser Wert mit der Vorhersage aus der chiralen Störungstheorie überein.



Kapitel 4

Präkonditionierung von QCD-Invertern

In den Kapiteln 2 und 3 wurde bereits darauf hingewiesen, dass die Lösung des durch die fermionischen Matrix M bestimmten linearen Gleichungssystems $M\psi = \phi$ das zentrale numerische Problem bei Berechnungen der QCD auf dem Gitter darstellt. Gerade wenn die Effekte dynamischer Fermionen berücksichtigt werden sollen und die Berechnungen mit Hilfe des HMC Algorithmus vorgenommen werden, wird der Rechenzeitbedarf im wesentlichen durch die immer wiederkehrende Inversion der fermionischen Matrix in jedem Schritt der Molekulardynamik bestimmt. Daher muss ein besonderes Augenmerk auf die möglichst effektive Lösung dieser Aufgabe gelegt werden. Gelingt es etwa, durch den Einsatz effizienterer Algorithmen eine Verbesserung von 10% zu erzielen, so kann bei einer angenommenen Gesamtlaufzeit einer Monte-Carlo Simulation von einem Jahr mehr als ein Monat gespart werden. Es wundert daher nicht, dass in den letzten Jahren ein beträchtlicher Aufwand getrieben wurde, um solche Verbesserungen zu erzielen [37, 96, 38]. Rein numerisch betrachtet ist M eine nichthermitische, komplexe Matrix¹. Bei Rechnungen auf einem Gitter mit einem vierdimensionalen euklidischen Volumen von $V = 16^3 \times 32 = 131072$ Punkten, einer bei heutigen Simulationen üblichen Gittergröße, hat sie 1572864×1572864 komplexe Einträge. Dementsprechend wäre der Speicherbedarf für die volle Matrix selbst bei einfacher Genauigkeit etwa 20 TB und damit weit jenseits der Kapazität, die auf aktuellen Supercomputern zur Verfügung steht. Glücklicherweise ist M jedoch dünn besetzt, d.h. annähernd alle Einträge der vollen Matrix sind 0, und es ist relativ leicht möglich, die Multiplikation der fermionischen Matrix mit einem Vektor ψ zu programmieren. Zu speichern sind dabei für die Matrix nur die Eichfelder U , wobei der hierbei benötigte Speicher von etwa 36 MB bei heutigen Rechnern keine besondere Anforderung darstellt.

Daher setzen vor allem der Rechenaufwand sowie die numerische Stabilität der Lösung die strengsten Anforderungen an die Auswahl der Algorithmen. Eine direkte Lösung, die auf die vollbesetzte Matrix zurückgreifen würde, wäre schon aus diesen Gründen nicht realisierbar. Die Methoden der Wahl stellen vielmehr iterative Gleichungslöser dar. Als Beispiele seien hier etwa *Conjugate Gradient* (CG) [97] oder *Minimal Residual* (MR) [98] genannt. Diese grundlegenden Methoden werden normalerweise noch mittels einer Präkonditionierung speziell an das gegeben Problem angepasst. Beispiele hierfür sind *even-odd* (EO) oder *Jacobi* [99].

Ein besonderes Augenmerk bei der Wahl der Methode muss auf die Parallelisierbarkeit gelegt werden. Dies folgt aus dem immensen Rechenzeitbedarf der zugehörigen Rechnungen sowie der Tatsache, dass es sich bei praktisch allen aktuellen Höchstleistungscomputern um Parallelrechner handelt. Einen guten Überblick über die verfügbaren Methoden sowie ihre Vor- und Nachteile bietet [100].

Als *de facto* Standard für die Lösung der fermionischen Matrix bei Wilson-Fermionen

¹Allerdings genügen die in dieser Arbeit besprochenen fermionischen Matrizen alle der γ_5 -Symmetrie: $M^\dagger = \gamma_5 M \gamma_5$

kann heute die *BiConjugate Gradient Stabilized* (BiCGStab) Methode angesehen werden, eine Verallgemeinerung des CG. Als Präkonditionierer dient dabei entweder die leichter zu implementierende (und damit besser zu optimierende) EO Methode oder der *Symmetric Successiv OverRelaxed* (SSOR) Algorithmus, der ein schnelleres Konvergenzverhalten als EO zeigt. Bisher wenig untersucht ist die Präkonditionierung für andere Formulierungen der fermionischen Wirkung.

In diesem Kapitel soll die Wirkung des SSOR Präkonditionierers bei der Lösung der fermionischen Matrix von $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen sowie bei hyperkubischen Fermionen mit dem BiCGStab untersucht werden. Dazu wird zunächst ein kurzer Überblick über iterative Gleichungslöser gegeben. Der anschließende Abschnitt behandelt die Theorie der Präkonditionierung und geht insbesondere auf die Beschränkungen bei der Auswahl einer Methode auf Grund der Forderung nach Parallelisierbarkeit ein. Die beiden letzten Abschnitte präsentieren die Ergebnisse für $\mathcal{O}(a)$ -verbesserte und hyperkubische Fermionen.

4.1 Iterative Gleichungslöser

Unter den Begriff *iterative Gleichungslöser* fällt eine große Klasse von Algorithmen, bei denen durch sukzessive Approximation Schritt für Schritt genauere Lösungen x eines linearen Gleichungssystems,

$$Mx = b, \tag{4.1}$$

erzielt werden. Grundsätzlich wird zwischen stationären und nicht stationären Methoden unterschieden. Auf erstere, zu denen etwa Jacobi, Gauß-Seidel oder auch SSOR gehören, soll hier nicht genauer eingegangen werden².

Nichtstationäre Methoden basieren in der Regel auf der Konstruktion einer Serie von Lösungsvektoren, wobei sich die Methoden in der Konstruktionsvorschrift unterscheiden. Grundsätzlich liegt der Unterschied zu den stationären Methoden darin, dass die jeweiligen Iterationen von Informationen beeinflusst werden, die durch die Berechnungen von inneren Produkten der Residuen oder anderer Vektoren ermittelt werden. Damit hängt der Verlauf der Bestimmung der Lösung des linearen Gleichungssystems direkt von der behandelten Matrix ab.

4.1.1 CG

Eines der einfachsten und ältesten Verfahren aus der Klasse der nichtstationären iterativen Methoden ist der *Conjugate Gradient*. Dieser Algorithmus ist auf symmetrische, positiv definite Matrizen anwendbar. Das Verfahren beruht darauf, eine Reihe von Lösungsvektoren $x^{(i)}$ zu generieren, welche die tatsächliche Lösung x Schritt für Schritt besser approximieren. Der i -te Vektor ist dabei ein Element des Unterraums, der durch den frei zu wählenden Startvektor $x^{(0)}$ sowie die daraus konstruierten Vektoren $r^{(0)}$, $Mr^{(0)}$, \dots , $M^{i-1}r^{(0)}$ aufgespannt wird, wobei $r^{(0)} = b - Mx^{(0)}$ das zum Startvektor gehörige Residuum ist. Der Unterraum wird als Krylov-Unterraum bezeichnet. Der Vektor wird jeweils

²Auf die SSOR-Methode wird allerdings im Rahmen der Präkonditionierung zurückgegriffen. Sie wird in dem dort gegebenen Kontext besprochen.

so gewählt, dass der Ausdruck $(x^{(i)} - x)^\dagger M(x^{(i)} - x)$ minimiert wird. Abbildung 4.1 zeigt den Pseudocode des daraus resultierenden Algorithmus.

```

Wähle  $x^{(0)}$       {Startwert des Lösungsvektors}
 $r^{(0)} = b - Mx^{(0)}$  {Startwert des Residuums}
for  $i = 1, 2, \dots$  do
   $\rho_{i-1} = (r^{(i-1)})^\dagger r^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$  then
     $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_i - 2$ 
     $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  end if
   $q^{(i)} = Mp^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / (p^{(i)})^\dagger q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  if  $\text{Norm}(r^{(i)}) < \text{Abbruchkriterium}$  then
    STOP
  end if
end for

```

Abbildung 4.1: Die CG-Methode.

Es kann leicht gezeigt werden, dass die hier gewählte Vorschrift die Orthogonalität zwischen dem neuen Residuum $r^{(i)}$ und allen seinen Vorgängern garantiert. Damit ist klar, dass die Norm der Residuen $\|r^{(i)}\| \leq \|r^{(i-1)}\|$ genügt und somit die Konvergenz der Methode zur richtigen Lösung sichergestellt ist.

An dieser Stelle muss bemerkt werden, dass die in Kapitel 2 besprochenen fermionischen Matrizen die von der CG Methode geforderten Bedingungen nicht erfüllen. Um sie trotzdem anwenden zu können, ist vielmehr die Lösung des hermiteschen Gleichungssystem $M^\dagger Mx = b$, auf das der CG anwendbar ist, mit M^\dagger zu multiplizieren³. Dieses Gleichungssystem wird als Normalform von M bezeichnet. Auf Grund der einfachen Implementierung und der numerischen Robustheit war dieser Algorithmus lange Zeit in den Simulationen der Gittereichtheorie weit verbreitet.

Die von iterativen Algorithmen verbrauchte Rechenzeit wird neben den Kosten für jeden Iterationsschritt vor allem dadurch bestimmt, wieviele solcher Schritte insgesamt benötigt werden, um die gewünschte Genauigkeit der Lösung zu erreichen. Im Fall des CG kann gezeigt werden, dass die Zahl der benötigten Iterationen direkt von der Konditionszahl C der behandelten Matrix M abhängt, die als das Verhältnis zwischen größtem und kleinsten Eigenwert der Matrix definiert ist:

$$C(M) = \lambda_{\max}(M) / \lambda_{\min}(M). \quad (4.2)$$

Mit $\alpha = (\sqrt{C} - 1) / (\sqrt{C} + 1)$ kann für die Lösungsvektoren des CG nach N_{CG} Iterationen

³Im Fall des HMC ist jedoch ohnehin das Gleichungssystem $M^\dagger Mx = b$ zu behandeln.

gezeigt werden⁴ [101]:

$$\|x^{(i)} - x\|_M \leq 2\alpha^{N_{CG}} \|x^{(0)} - x\|_M. \quad (4.3)$$

Um eine gewünschte Genauigkeit zu erreichen, d.h. um $\|x^{(i)} - x\|_M / \|x\|_M < \epsilon$ gültig werden zu lassen, sind demnach

$$N_{CG} \sim \frac{1}{\log(\alpha)} = \frac{1}{2 \operatorname{artanh}(\frac{1}{\sqrt{C}})} \quad (4.4)$$

Iterationen notwendig. Für große Konditionszahlen C erhält man entsprechend:

$$N_{CG} \sim \sqrt{C} \quad (4.5)$$

4.1.2 BiCGStab

Um die Lösung eines linearen Gleichungssystems mit weniger Iterationen, als vom CG benötigt, berechnen zu können, ist es notwendig, die Konstruktionsvorschrift für die orthogonalen Vektoren zu variieren. Darüberhinaus ist gerade für die Berechnung von Propagatoren eigentlich ein Verfahren gesucht, das, anders als der CG, auch nichtsymmetrische Matrizen behandeln kann. Dies ist insbesondere deshalb wünschenswert, da die symmetrisierte Matrix $M^\dagger M$ eine Konditionszahl besitzt, die im Bereich des Quadrats der Konditionszahl der einfachen Matrix M liegt. Damit wird das Lösen des linearen Gleichungssystems als numerische Aufgabe ungleich schwieriger.

In [100] werden eine ganze Reihe von Verallgemeinerungen des CG besprochen, etwa der *BiConjugate Gradient* (BiCG), der *Conjugate Gradient Squared* (CGS) oder der *BiConjugate Gradient Stabilized* (BiCGStab). Da sich letzterer als der am besten geeignete für Berechnungen in der Gitter-QCD erwiesen hat [37], soll auf diese Methode nun genauer eingegangen werden.

Die BiCGStab-Methode wurde entwickelt, um nichtsymmetrische lineare Gleichungssysteme behandeln zu können [39]. Sie stellt eine Synthese der BiCG [102] und der CGS [103] Methoden dar, die ebenfalls auf nichtsymmetrische Systeme anwendbar sind. Anders als beim CG ist bei diesen Methoden nicht sichergestellt, dass das Residuum in jedem Schritt kleiner wird. Vielmehr kommt es durchaus vor, dass in einzelnen Schritten die Entfernung vom korrekten Ergebnis zunimmt, wobei über alle Schritte gemittelt jedoch ein schnelleres Konvergenzverhalten festzustellen ist, als bei einem vergleichbaren CG Prozess zu beobachten wäre. Die verschiedenen nichtsymmetrischen Methoden unterscheiden sich vor allem in diesen Störungen des Konvergenzverhaltens. Der BiCGStab zeigt dabei im allgemeinen das am wenigsten irreguläre Verhalten, wobei die Geschwindigkeit der Konvergenz mit der des CGS vergleichbar und der des BiCG überlegen ist.

Der BiCGStab kann interpretiert werden als ein Produkt aus der BiCG Methode mit wiederholter Anwendung des GMRES. In Abbildung 4.2 ist der Algorithmus in Pseudocode dargestellt.

Ein Vergleich der beiden hier besprochenen Methoden zeigt, dass der Aufwand, was sowohl die Anzahl der Operationen als auch den Speicherbedarf angeht, beim BiCGStab größer ist als beim CG. Neben der Matrix, für deren vollständige Bestimmung natürlich nur die

⁴Die M -Norm eines Vektors x ist definiert als $\|x\|_M = \sqrt{x^\dagger M x}$.

```

Wähle  $x^{(0)}$       {Startwert des Lösungsvektors}
 $r^{(0)} = b - Mx^{(0)}$  {Startwert des Residuums}
Wähle  $\tilde{r}$           {z. B.  $\tilde{r} = r^{(0)}$  oder  $\tilde{r}$  zufällig}
for  $i = 1, 2, \dots$  do
   $\rho_{i-1} = (\tilde{r}^\dagger r^{(i-1)})$ 
  if  $\rho_{i-1} = 0$  then
    Abbruch: Methode nicht anwendbar
  end if
  if  $i = 1$  then
     $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = (\rho_{i-1}/\rho_i - 2)(\alpha_{i-1}/\omega_{i-1})$ 
     $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1}(p^{(i-1)} - \omega_{i-1}v^{(i-1)})$ 
  end if
   $v^{(i)} = Mp^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1}/(\tilde{r}^\dagger v^{(i)})$ 
   $s = r^{(i-1)} - \alpha_i v^{(i)}$ 
  if Norm( $s$ ) klein genug then
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
    ENDE
  end if
   $t = Ms$ 
   $\omega_i = (t^\dagger s)/(t^\dagger t)$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)} + \omega_i s$ 
   $r^{(i)} = s - \omega_i t$ 
  if Norm( $r^{(i)}$ ) < Abbruchkriterium then
    STOP
  end if
end for

```

Abbildung 4.2: Die BiCGStab-Methode.

Eichfelder gespeichert sind, werden für den BiCGStab 8 Vektoren benötigt, während sich der CG mit 5 Vektoren begnügt. In jeder Iteration sind beim BiCGStab neben 2 Matrix-Vektor Multiplikationen noch 4 innere Produkte zu berechnen sowie 6 AXPY-Operationen⁵ durchzuführen, womit vordergründig exakt der doppelte Aufwand zu treiben ist wie im CG. Allerdings ist zu beachten, dass die Matrix-Vektor Multiplikation im CG mit der Matrix $M^\dagger M$ ausgeführt wird und damit im Vergleich zur Multiplikation mit M im BiCGStab den doppelten Aufwand bedeutet. Insgesamt erweisen sich die Iterationen von CG und BiCGStab also in Hinsicht auf die Komplexität der Rechnungen als gleich aufwändig.

Während im Fall des CG eine umfassende Theorie des Konvergenzverhaltens vorliegt, in deren Rahmen die in Gleichung (4.3) beschriebenen Schranken für das Residuum im i -ten Iterationsschritt bewiesen werden können, gibt es solche Betrachtungen beim BiCGStab nicht. Es kann lediglich gezeigt werden, dass für die Residuen $r^{(i)} = Q_i(M)P_i(M)r^{(0)}$ gilt, wobei Q und P Polynome vom Grad i sind, deren Koeffizienten implizit während der Iterationsschritte ermittelt werden. Anders als beim CG ist jedoch noch nicht einmal sichergestellt, dass die $r^{(i)}$ in jedem Schritt kleiner werden. Vielmehr ist bei der Anwendung unter realen Bedingungen sogar zu beobachten, dass in manchen Schritten das Residuum wieder größer wird. Aus dem Gesagten wird klar, dass die Abhängigkeit der benötigten Anzahl an Iterationen von der Konditionszahl *a priori* nicht offensichtlich ist.

Der Mangel an theoretischem Wissen kann jedoch teilweise durch empirische Untersuchungen ausgeglichen werden. So zeigt sich im Fall der Gitter-QCD, dass der BiCGStab dem CG deutlich überlegen ist. In [37] wurde etwa die Anwendung beider Methoden auf die fermionische Matrix der Wilson-Fermionen bei verschiedenen κ und damit für verschiedene Konditionszahlen untersucht. Es zeigte sich, dass der BiCGStab dem CG sowohl in der Zahl der Iterationen, als auch im Rechenzeitbedarf um mehr als einen Faktor 2 überlegen ist. Aus der Tatsache, dass das Verhältnis der Iterationszahlen im untersuchten Bereich nicht stark variiert, kann für die Abhängigkeit der zur Erlangung einer gewünschten Genauigkeit benötigten Iterationen $N_{BiCGStab}$ von der Konditionszahl C

$$N_{BiCGStab} \sim C \tag{4.6}$$

angenommen werden.

Auf Grund dieser Ergebnisse stellt der BiCGStab heute den *de facto* Standard für Inverter in QCD Simulationen dar.

4.2 Präkonditionierung

Bei beiden vorgestellten Verfahren zur iterativen Lösung eines linearen Gleichungssystems zeigt das Konvergenzverhalten eine Abhängigkeit von der Konditionszahl der zu invertierenden Matrix. Dies führt recht schnell zu der Überlegung, das zu lösende System durch ein äquivalentes zu ersetzen, welches durch eine kleinere Konditionszahl ausgezeichnet ist und dessen Lösung daher mit weniger Aufwand berechnet werden kann. Dieser Ansatz wird als *Präkonditionierung* bezeichnet.

⁵Damit wird in der BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) Bibliothek die Operation $\vec{y} = \alpha \vec{x} + \vec{y}$ mit $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{C}^N$ und $\alpha \in \mathbb{C}$ bezeichnet.

Formal können bei der Lösung des Gleichungssystems $Mx = b$ zwei nichtsinguläre Matrizen V_L und V_R eingeführt werden, mit denen ein neues System,

$$V_L^{-1} M V_R^{-1} \tilde{x} = \tilde{b}, \quad (4.7)$$

formuliert werden kann. Für die präkonditionierten Vektoren \tilde{x} und \tilde{b} gilt

$$\tilde{x} = V_R x \quad \text{sowie} \quad \tilde{b} = V_L^{-1} b. \quad (4.8)$$

Die Matrizen V_L und V_R werden als Links- bzw. Rechtspräkonditionierer bezeichnet, der Ausdruck $\tilde{M} = V_L^{-1} M V_R^{-1}$ ist die präkonditionierte Matrix. Es soll betont werden, dass die Effektivität der Präkonditionierung nur vom Produkt der beiden Matrizen $V = V_L V_R$ abhängt und nicht davon, wie V in V_L und V_R faktorisiert wird.

Im Prinzip kann das neue Gleichungssystem (4.7) direkt in den BiCGStab Algorithmus einbezogen werden, allerdings würde dies zu präkonditionierten Lösungen $\tilde{x}^{(i)}$ und präkonditionierten Residuen $\tilde{r}^{(i)}$ führen. Daher wird der Algorithmus oft so umformuliert, dass implizite Rücktransformationen auf das ursprüngliche System durchgeführt werden. Daraus resultiert ein Algorithmus, der dem in Abbildung 4.2 ähnlich ist, jedoch je zwei zusätzliche Lösungen des Systems mit der Matrix V sowie zwei Systeme mit der Matrix V_L in jeder Iteration beinhaltet.

Um die Präkonditionierung möglichst effektiv zu gestalten, sollte V^{-1} eine hinreichend gute Näherung der Inversen von M darstellen. Unter dieser Voraussetzung ist die präkonditionierte Matrix $\tilde{M} = V_L^{-1} M V_R^{-1}$ nahe an der Einheitsmatrix und die Konditionszahl wird klein. Gleichzeitig sollten die Lösungen der Systeme V und V_L möglichst ökonomisch zu berechnen sein, um den zusätzlichen Aufwand für die Präkonditionierung klein zu halten und den Nutzen zu maximieren.

Die verschiedenen Präkonditionierungsmethoden unterscheiden sich in der Wahl der V_L und V_R . Im weiteren sollen zwei Präkonditionierer besprochen werden, zum einen der *even-odd* Präkonditionierer (EO), zum anderen der *Symmetric Successiv OverRelaxed* Präkonditionierer (SSOR).

4.2.1 EO

Der EO Präkonditionierer [104, 105] beruht auf der Beobachtung, dass im Fall der Wilson-Fermionen bzw. der $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen die fermionische Matrix,

$$M = \begin{pmatrix} 1 + D_{oo} & -\kappa D_{oe} \\ -\kappa D_{eo} & 1 + D_{ee} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

nur solche Einträge besitzt, die entweder auf der (Block-)Diagonale⁶ liegen oder aber gerade Gitterpunkte⁷ mit ungeraden verbinden und umgekehrt. Dann können für diese Matrix

$$V_L = \begin{pmatrix} 1 + D_{oo} & 0 \\ -\kappa D_{eo} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad V_L^{-1} = \begin{pmatrix} (1 + D_{oo})^{-1} & 0 \\ \kappa D_{eo} (1 + D_{oo})^{-1} & 1 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

⁶Im Fall der Wilson-Fermionen ist $D_{oo} = D_{ee} = 0$ und es liegt eine echte Diagonale vor. Bei $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen sind D_{oo} und D_{ee} jedoch komplexe 12×12 Matrizen, auf deren spezielle Struktur weiter unten eingegangen wird.

⁷Bei einem geraden Gitterpunkt ist die Summe der Koordinaten gerade. Daraus folgt unmittelbar, dass alle nächsten Nachbarn eines geraden Gitterpunktes ungerade sind.

als Linkspräkonditionierer sowie

$$V_R = \begin{pmatrix} 1 + D_{oo} & -\kappa D_{oe} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad V_R^{-1} = \begin{pmatrix} (1 + D_{oo})^{-1} & \kappa(1 + D_{oo})^{-1}D_{oe} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

als Rechtspräkonditionierer gewählt werden. Damit erhält man für die präkonditionierte Matrix

$$\tilde{M} = V_L^{-1} M V_R^{-1} = \begin{pmatrix} (1 + D_{oo})^{-1} & 0 \\ 0 & 1 + D_{ee} - \kappa^2 D_{eo}(1 + D_{oo})^{-1}D_{oe} \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

wobei $1 + D_{ee} - \kappa^2 D_{eo}(1 + D_{oo})^{-1}D_{oe}$ als Matrix des EO reduzierten Systems bezeichnet wird. In diesem speziellen Fall erlaubt die Struktur der präkonditionierten Matrix, dass sie explizit in den iterativen Gleichungslöser eingefügt werden kann. Da die Matrix \tilde{M} eine 2×2 blockdiagonale Struktur aufweist, entkoppeln die Berechnungen für die verschiedenen Blöcke vollständig, und die Operationen auf dem zweiten Block sind identisch mit der direkten Lösung des EO reduzierten Systems. Der vollständige Lösungsvektor kann dann durch Anwendung von V_R^{-1} auf den reduzierten Lösungsvektor rekonstruiert werden.

Der EO Präkonditionierer wurde lange Zeit als der einzige angesehen, der erfolgreich in einer parallelen Programmierumgebung einsetzbar ist. Für typische Parameter, die in aktuellen Simulationen der Gitter-QCD benutzt werden, gewinnt man mit dieser Art der Präkonditionierung etwa einen Faktor 2-3 sowohl in der Zahl der Iterationen als auch in der Rechenzeit gegenüber dem nicht präkonditionierten System [106, 37].

4.2.2 SSOR

Eine weitere Möglichkeit der Präkonditionierung stellt die SSOR-Methode dar, von der in [107] gezeigt wurde, dass sie auf Vektorcomputern bessere Ergebnisse als EO erzielt. Von dieser Präkonditionierung wurde jedoch lange angenommen, dass sie nicht effektiv auf Parallelrechnern zu implementieren sei [108]. In [38] konnte jedoch gezeigt werden, dass bei einer geschickten Wahl der Ordnung der Gitterpunkte eine solche Implementierung durchaus möglich ist und der EO Präkonditionierer bei Wilson-Fermionen um etwa einen Faktor 2 geschlagen werden kann.

Sei $M = D - L - U$ die Zerlegung der Matrix M in ihren (block-)diagonalen Teil D , sowie ihre untere bzw. obere (Block-)Dreieckmatrix $-L$ und $-U$. Bei gegebenem Relaxationsfaktor $\omega \neq 0$ können dann die SSOR Präkonditionierer

$$V_L = \left(\frac{1}{\omega} D - L \right) \left(\frac{1}{\omega} D \right)^{-1} \quad \text{und} \quad V_R = \frac{1}{\omega} D - U \quad (4.13)$$

definiert werden. Die präkonditionierte Matrixmultiplikation $z = \tilde{M}x = V_L^{-1} M V_R^{-1} x$ wird durch Anwendung des *Eisenstat Tricks* [109], der auf der Identität

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\omega} D \left(\frac{1}{\omega} D - L \right)^{-1} (D - L - U) \left(\frac{1}{\omega} D - U \right)^{-1} \\ &= \frac{1}{\omega} D \left\{ \left(\frac{1}{\omega} D - L \right)^{-1} \left[\mathbf{1} + \left(\frac{\omega - 2}{\omega} D \right) \left(\frac{1}{\omega} D - U \right)^{-1} \right] + \left(\frac{1}{\omega} D - U \right)^{-1} \right\} \\ &= (\mathbf{1} - \omega L D^{-1})^{-1} \left[\mathbf{1} + (\omega - 2) (\mathbf{1} - \omega U D^{-1})^{-1} \right] + (\mathbf{1} - \omega U D^{-1})^{-1} \end{aligned} \quad (4.14)$$

beruht, in ihrem arithmetischen Aufwand wesentlich reduziert, da sie damit recht einfach durch den in Abbildung 4.3 dargestellten Algorithmus ausgeführt werden kann. Dabei sind die Matrizen $\mathbf{1} - \omega UD^{-1}$ und $\mathbf{1} - \omega LD^{-1}$ untere bzw. obere Dreiecksmatrizen und die beiden linearen Systeme, die im Laufe des Algorithmus 4.3 zu lösen sind, reduzieren sich zu einem vorwärts- bzw. rückwärtslaufenden Substitutionsprozess. Als Beispiel ist in Abbildung 4.4 dargestellt, wie der vorwärtslaufende Substitutionsprozess zur Lösung von $(\mathbf{1} - \omega LD^{-1})v = W$ abläuft. Die Blockkomponenten der Vektoren v und w sowie der Matrizen L und D werden dabei als v_i und w_i bzw. als D_{ii} und L_{ij} bezeichnet. Der Algorithmus für die rückwärtslaufende Substitution zur Lösung von $(\mathbf{1} - \omega UD^{-1})y = x$ verhält sich völlig analog.

Löse $(\mathbf{1} - \omega UD^{-1})y = x$
 $w = x + (\omega - 2)y$
 Löse $(\mathbf{1} - \omega LD^{-1})v = w$
 $z = v + y$

Abbildung 4.3: Die präkonditionierte Matrix-Multiplikation.

for $i = 1, \dots, N$ **do**
 $v_i = w_i + \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij}s_j$
 $s_i = \omega D_{ii}^{-1}v_i$
end for

Abbildung 4.4: Die Vorwärtssubstitution.

Die Blöcke D_{ii} sind normalerweise dicht besetzt, und es erweist sich als effektiv, deren Inverse D_{ii}^{-1} bereits im Voraus zu berechnen. Unter dieser Voraussetzung stellt man fest, dass die Anwendung des Algorithmus in 4.4 bis auf die Multiplikation mit ω genausoviele Operationen erfordert, wie die direkte Multiplikation eines Vektors mit $D - L$. Ein Vergleich der rückwärtslaufenden Substitution mit der Multiplikation mit $D - U$ führt zu dem analogen Ergebnis. Es bleibt zu bemerken, dass die beiden Multiplikationen mit $D - L$ bzw. mit $D - U$ denselben Aufwand bedeuten, wie eine Multiplikation mit der gesamten Matrix zuzüglich einer Multiplikation mit der Diagonalen D . Damit ist es möglich, den Mehraufwand auf Grund der Präkonditionierung mit dem SSOR unter Verwendung des *Eisenstat Tricks* exakt zu quantifizieren [110]:

- *Initialisierung:* Die Inverse D_{ii}^{-1} der (block-)diagonalen Matrix D muss vor Beginn der Iteration berechnet werden. Aus Effizienzgründen wird die Inverse sofort mit dem Relaxationsfaktor ω skaliert.
- *Iteration:* In jedem Iterationsschritt ist als zusätzlicher Aufwand eine Multiplikation mit der Matrix D , die Skalierung eines Vektors mit $(\omega - 2)$ sowie zwei Summationen von Vektoren zu verbuchen.

4.2.3 Ordnungen

In der fermionischen Matrix M , die etwa mit Gleichung (2.40) für Wilson-Fermionen, mit Gleichung (2.43) für $\mathcal{O}(a)$ -verbesserte Fermionen oder mit Gleichung (2.57) für die hyperkubischen Fermionen identifiziert werden kann, hat man die Freiheit, die Gitterpunkte

in jeder gewünschten Art zu ordnen. Die unterschiedlich geordneten Matrizen können durch Transformationen $M \rightarrow P^\dagger MP$, wobei P eine Permutationsmatrix ist, ineinander übergeführt werden. Im allgemeinen ist nicht zu erwarten, dass $P^\dagger LP$ und $P^\dagger UP$ untere oder obere Dreiecksmatrizen von $P^\dagger MP$ sein werden, und dementsprechend unterscheiden sich die präkonditionierten Matrizen von M und $P^\dagger MP$ nicht nur durch Permutationen, sondern sind signifikant verschieden. Daher muss man erwarten, dass die Qualität der SSOR-Präkonditionierung vom Ordnungsschema abhängt, das für die Matrix benutzt wird.

Gleichzeitig bestimmt die Ordnung der Gitterpunkte den Grad an Parallelität, der innerhalb der Vorwärts- und Rückwärtssubstitutionen ausgenutzt werden kann. Normalerweise muss man zwischen dem Grad der Parallelität, den eine Ordnung erlaubt, und der Qualität der SSOR Präkonditionierung abwägen und versuchen, ein Optimum zu finden. Im folgenden werden drei verschiedene Ordnungen und deren Auswirkungen auf Präkonditionierung und Parallelisierbarkeit besprochen.

Die Diskussion von Ordnungen der $N = n_1 \times n_2 \times n_3 \times n_4$ Gitterpunkte soll auf der Basis von Einfärbungen geführt werden. Dazu muss jedoch zunächst der Begriff der Nachbarschaft eines Punktes geklärt werden, mit der dieser verbunden ist. Sie wird mit $n(x)$ bezeichnet und beinhaltet alle die Punkte, zu denen in der fermionischen Matrix eine Kopplung ausgehend vom Punkt x existiert. Beispiele sind

- $n(x) = \{y \mid y = x \pm \hat{\mu}, \mu = 1, \dots, 4\}$ für die nächsten Nachbarn,
- $n(x) = \{y \neq x \mid \sum_{\mu=1}^4 |x_\mu - y_\mu| \leq 2\}$ für nächste und übernächste Nachbarn oder
- $n(x) = \{y \neq x \mid |x_\mu - y_\mu| \leq 1, \mu = 1, \dots, 4\}$ für die hyperkubischen Kopplungen.

Als Einfärbung wird eine Partitionierung der Menge der Gitterpunkte in disjunkte Teilmengen C_1, \dots, C_k bezeichnet, wenn für jedes $l \in \{1, \dots, k\}$ die Beziehung

$$x \in C_l \Rightarrow y \notin C_l \text{ für alle } y \in n(x) \quad (4.15)$$

gilt. Identifiziert man jede Menge C_l mit einer eigenen Farbe, so ist (4.15) gleichbedeutend mit der Aussage, dass jeder Gitterpunkt nur mit Punkten anderer Farbe koppelt. Die zu einer Einfärbung gehörende Ordnung erhält man, indem zunächst alle Punkte der Menge C_1 nummeriert werden, anschließend die aus C_2 und so fort. Die Gitterpunkte werden in dem in Abbildung 4.4 dargestellten Algorithmus dann entsprechend dieser Nummerierung abgearbeitet. Für einen gegebenen Gitterpunkt beinhalten dann die entsprechenden Zeilen in L oder U genau die Nachbarn, die eine Nummer bekommen haben, die kleiner bzw. größer ist als die des Gitterpunkts. Bei einer aus einer Einfärbung abgeleiteten Ordnung ist leicht zu zeigen, dass Punkte einer bestimmten Farbe parallel bearbeitet werden können. Als erstes Beispiel soll die **globale lexikographische Ordnung** betrachtet werden, die natürliche Ordnung der Gitterpunkte entsprechend ihrer Koordinaten. Sie entsteht, indem ein Punkt $x = (i_1, i_2, i_3, i_4)$ genau dann mit einer kleineren Nummer als ein Punkt $x' = (i'_1, i'_2, i'_3, i'_4)$ belegt wird, wenn $(i_4 < i'_4)$ oder $(i_4 = i'_4 \text{ und } i_3 < i'_3)$ oder $(i_4 = i'_4, i_3 = i'_3 \text{ und } i_2 < i'_2)$ oder $(i_4 = i'_4, i_3 = i'_3, i_2 = i'_2 \text{ und } i_1 < i'_1)$ ist. Hierbei beinhalten die C_l jeweils nur einen Gitterpunkt. Dies ist die ursprünglich von Oyanagi vorgeschlagene Ordnung⁸ [107], für die er zeigte, dass sie der EO Präkonditionierung überlegen ist, was die Anzahl der Iterationen anbelangt. Es ist jedoch bei dieser Ordnung sehr kompliziert und wenig

⁸Für $\omega = 1$ ist der resultierende Präkonditionierer identisch mit dem *incomplete lower upper* (ILU).

effizient, eine parallele Implementierung vorzunehmen. Dies liegt vor allem daran, dass streng genommen immer nur ein Gitterpunkt bearbeitet werden kann und es somit keinerlei Parallelität gibt. Tatsächlich können zwar Punkte, die auf einer diagonalen Hyperebene im Gitter liegen, gleichzeitig bearbeitet werden, in [108] wurde jedoch gezeigt, dass sich dabei der Vorteil gegenüber der EO Präkonditionierung in der Anzahl der Iterationen hinsichtlich der Laufzeit auf einem Parallelrechner in einen Nachteil verwandeln kann.

Als zweites Beispiel soll die **even-odd Ordnung** betrachtet werden, bei der jeweils alle geraden Gitterpunkte und alle ungeraden Gitterpunkte in einer Teilmenge zusammengefasst sind. Diese Ordnung ist natürlich nur für Kopplungen zwischen nächsten Nachbarn anwendbar. Damit erhält man für den Substitutionsprozess in Vorwärtsrichtung den in Abbildung 4.5 dargestellten Algorithmus. Für die Rückwärtsrichtung erhält man einen entsprechenden Algorithmus, bei dem jedoch gerade und ungerade Punkte vertauscht sind.

```

for Gitterpunkt ist gerade do
     $v_i = w_i$ 
     $s_i = \omega D_{ii}^{-1} v_i$ 
end for
for Gitterpunkt ist ungerade do
     $v_i = w_i + \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij} s_j$ 
     $s_i = \omega D_{ii}^{-1} v_i$ 
end for

```

Abbildung 4.5: Die Vorwärtssubstitution in der EO Ordnung.

Eine genauere Betrachtung zeigt, dass die Hintereinanderausführung einer Rückwärts- und einer Vorwärtssubstitution, wie bei der präkonditionierten Matrixmultiplikation vorgesehen, zu einem Iterationsschritt führt, der dem des EO Präkonditionierers entspricht. Dementsprechend ist zu erwarten, dass mit dieser Ordnung eine ähnlich effiziente Präkonditionierung wie mit EO zu erzielen ist. Auch in der Parallelisierbarkeit unterscheiden sich die beiden Präkonditionierer natürlich nicht signifikant.

Für komplizierte Kopplungen, wie sie etwa bei den hyperkubischen Fermionen auftreten, wird es hingegen immer schwieriger, Einfärbungen mit einer minimalen Farbenzahl zu finden. So werden für die Kopplungen der hyperkubischen Fermionen bereits 16 Farben benötigt, was die effektive Implementierung eines solchen Präkonditionierers recht schwierig gestaltet.

Tatsächlich erweist sich jedoch die Strategie, eine minimale Anzahl von Farben zu verwenden, als ungünstig. Dies kann bereits daran erkannt werden, dass die globale lexikographische Ordnung, bei der die maximal mögliche Zahl an Farben auf dem Gitter verwendet wird, sich als besser als die EO Ordnung erweist, bei der nur zwei Farben zum Einsatz kommen. Heuristisch kann dies dadurch erklärt werden, dass bei einer kleinen Zahl von Farben die zugehörigen Teilmengen C_l groß sind. Da Informationen nur zwischen Gitterpunkten verschiedener Farbe ausgetauscht werden, gibt es jedoch keinerlei Informationsaustausch innerhalb der großen Teilmengen C_l . Kleinere Teilmengen stellen hingegen einen effektiveren Informationsaustausch sicher.

Als bessere Strategie erweist es sich daher, eine Einfärbung zu suchen, die eine mög-

lichst große Zahl von Farben verwendet, gleichzeitig jedoch beachtet, dass eine effektive Parallelisierung möglich ist.

Als drittes Beispiel soll daher die **lokale lexikographische Ordnung** besprochen werden, die in [38] als eine Art Mittelweg zwischen den beiden vorgenannten Ordnungen vorgeschlagen wurde. Anders als diese, ist sie speziell an den Gebrauch eines Parallelrechners angepasst und erweist sich auch für komplizierte Kopplungen als adäquate Wahl.

Zur weiteren Diskussion wird angenommen, dass die Prozessoren des Parallelrechners in einem vierdimensionalen Gitter der Ausdehnung $p_1 \times p_2 \times p_3 \times p_4$ angeordnet sind. Indem einzelne $p_i = 1$ gesetzt werden, können auch Prozessorgitter mit kleinerer Dimension behandelt werden. Das Raum-Zeit Gitter der Gitter-QCD Simulation kann dann in natürlicher Weise auf das Prozessorgitter verteilt werden, indem die lokalen Gitterausdehnungen zu $n_i^{loc} = n_i/p_i$ gesetzt werden⁹.

Auf dieser Grundlage kann das globale Gitter in $n^{loc} = n_1^{loc}n_2^{loc}n_3^{loc}n_4^{loc}$ Teilmengen unterteilt werden, wobei jede einer festen Position im lokalen Gitter entspricht und alle die Punkte beinhaltet, die an dieser Position in ihrem jeweiligen lokalen Gitter sitzen. Indem jeder Teilmenge eine Farbe zugewiesen wird, erhält man eine Einfärbung im oben genannten Sinn, solange die Kopplungen in der fermionischen Matrix kurzreichweitig genug sind. Tatsächlich erweist es sich als hinreichend, wenn für alle $y \in n(x)$ die Beziehung $|y_\mu - x_\mu| < n_\mu^{loc}$ für $\mu = 1, \dots, 4$ erfüllt ist. Daher soll im weiteren Verlauf vorausgesetzt werden, dass für die Ausdehnungen des lokalen Gitters $n_i^{loc} \geq 2$ gilt und die hier betrachteten Kopplungen somit ohne Probleme behandelt werden können.

Als lokal lexikographische (*ll*) Ordnung wird nun diejenige bezeichnet, bei der alle Punkte einer gegebenen Farbe hinter den Punkten mit Farben angeordnet werden, deren korrespondierende Position im lokalen Gitter lexikographisch vor der gegebenen Farbe liegt. In Abbildung 4.6 führt dies auf die alphabetische Ordnung der Farben a - q hinaus. Das dort dargestellte 2-dimensionale Beispiel mit $n_1^{loc} = n_2^{loc} = 4$ zeigt außerdem, dass für diese Ordnung bei Kopplungen zwischen nächsten Nachbarn bzw. hyperkubischen Kopplungen parallele Operationen auf den Teilmengen tatsächlich möglich sind.

Der Pseudocode einer parallelen Version des in Abbildung 4.4 dargestellten Algorithmus der Vorwärtssubstitution ist in Abbildung 4.7 wiedergegeben. Dabei bezeichnet die Relation $x \leq_{ll} y$ zwischen Gitterpunkten, dass x in der *ll* Ordnung vor y angeordnet ist.

Wenn sich der zu behandelnde Gitterpunkt x am Rand des lokalen Gitters befindet, wie etwa die Gitterpunkte h , i oder q in Abbildung 4.6, so können in der mit dem Punkt verbundenen Nachbarschaft $n(x)$ Gitterpunkte zu finden sein, die sich nicht auf dem lokalen Prozessor befinden. Daher müssen in diesem Fall die zugehörigen s_y von dem entsprechenden benachbarten Prozessor kommuniziert werden. Im Fall einer fermionischen Matrix mit Kopplungen zum nächsten Nachbar wären dann Kommunikationsoperationen mit insgesamt 8 Nachbarprozessoren durchzuführen. Für hyperkubische Kopplungen sind jedoch bereits Operationen mit 80 Nachbarn notwendig, wenn die Parallelisierung in allen vier Gitterrichtungen erfolgt. Bei 3- bzw. 2-dimensionaler Parallelisierung reduziert sich die Zahl auf 26 bzw. 8. In Abbildung 4.6 sind die Kopplungen, die bei der Vorwärtssubstitution in Erscheinung treten, für einige Gitterpunkte eingezeichnet. Dabei sind diejenigen zu nächsten Nachbarn durch die dickeren und die zu den (2-dimensionalen) hyperkubischen

⁹An dieser Stelle wird vorausgesetzt, dass p_i jeweils Teiler von n_i ist.

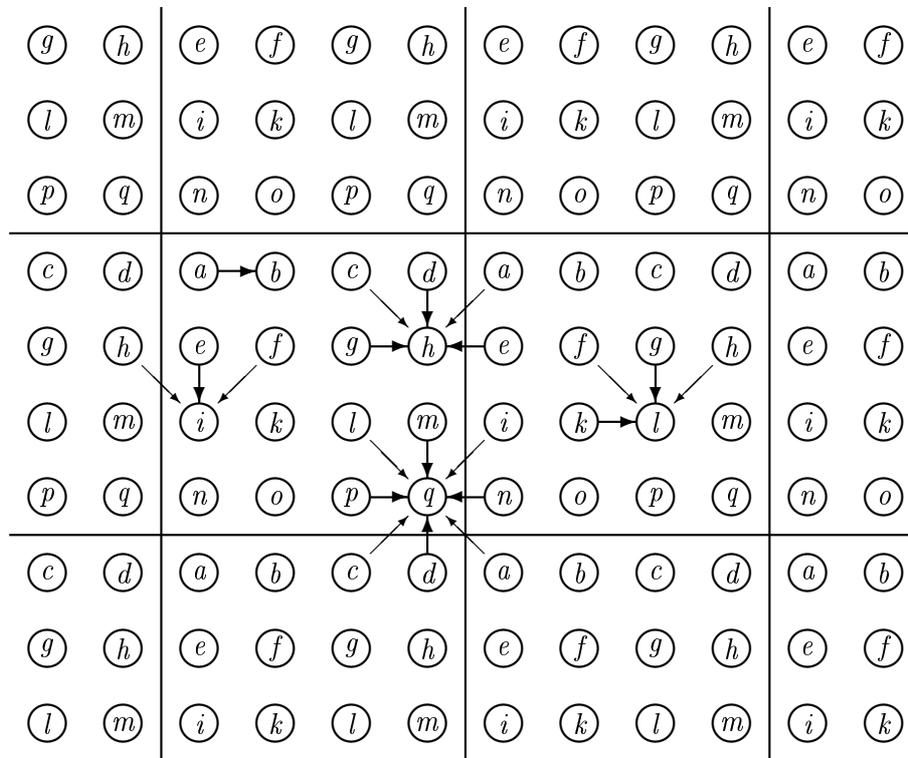


Abbildung 4.6: Lokal-lexikographische Ordnung und Abhängigkeiten beim Lösen in Vorwärtsrichtung für 2 Dimensionen. Die dickeren Pfeile kennzeichnen nächste Nachbarn, bei Hyperkubus Kopplungen sind die dicken und dünnen Pfeile gültig.

```

for Farbe der lexikographischen Ordnung do
  for all Prozessoren do
     $x := \text{Gitterpunkt der Farbe auf diesem Prozessor}$ 
     $v_x = w_x + \sum_{y \in n(x), y \leq_{ll} x} L_{xy} s_y$ 
     $s_x = \omega D_{xx}^{-1} v_x$ 
  end for
end for

```

Abbildung 4.7: Die Vorwärtssubstitution in der ll Ordnung.

Nachbarn durch dünnere Pfeile repräsentiert. Am Beispiel von Kopplungen zu nächsten Nachbarn ist das prinzipielle Kommunikationsschema der Vorwärtssubstitution dem Pseudocode in Abbildung 4.8 zu entnehmen. Im Fall von hyperkubischen Kopplungen sind natürlich weitere Terme und entsprechende Kommunikationen für die Terme entlang der verschiedenen Diagonalen einzufügen. Für Richtungen, in denen $p_\mu = 1$ gilt, können die Kommunikationsoperationen hingegen ausgelassen werden.

```

for  $i_4 = 1, \dots, n_4^{loc}$  do
  for  $i_3 = 1, \dots, n_3^{loc}$  do
    for  $i_2 = 1, \dots, n_2^{loc}$  do
      for  $i_1 = 1, \dots, n_1^{loc}$  do
         $x := (i_1, i_2, i_3, i_4)$ 
         $v_x = w_x$ 
        for  $\mu = 1, \dots, 4$  do
          if  $i_\mu > 1$  then
             $v_x = v_x + L_{x, x-\hat{\mu}} s_{x-\hat{\mu}}$ 
          end if
          if  $i_\mu = n_\mu^{loc}$  then
            Empfange  $s_{x+\hat{\mu}}$  von Prozessor  $\pi + \hat{\mu}$ 
             $v_x = v_x + L_{x, x+\hat{\mu}} s_{x+\hat{\mu}}$ 
          end if
        end for
         $s_x = \omega D_{xx}^{-1} v_x$ 
        for  $\mu = 1, \dots, 4$  do
          if  $i_\mu = 1$  then
            Sende  $s_x$  zu Prozessor  $\pi - \hat{\mu}$ 
          end if
        end for
      end for
    end for
  end for
end for

```

Abbildung 4.8: Die Vorwärtssubstitution für nächste Nachbar Kopplungen mit Kommunikation auf Prozessor π in der ll Ordnung.

Wie die parallele Implementierung der ll -SSOR präkonditionierten Matrixmultiplikation tatsächlich erfolgt, wird jedoch immer von den Gegebenheiten der vorhandenen Rechen- und Kommunikationsarchitektur abhängen. In dem skizzierten Kommunikationsschema wird z.B. das Konzept verfolgt, Nachrichten so früh wie möglich zu schicken und diese erst dann zu empfangen, wenn die Informationen wirklich benötigt werden. So muss zwischen dem Senden von Daten auf Grund der Bedingung $i_\mu = 1$ an den linken Nachbarprozessor $\pi - \hat{\mu}$ und dem Empfang der Daten wegen $i_\mu = n_\mu^{loc}$ vom rechten Nachbarprozessor $\pi + \hat{\mu}$ im Fall von $\mu = 1$ noch für $(n_1^{loc} - 2)$ Gitterpunkte die Substitution durchgeführt werden, ohne dass Kommunikationsoperationen in dieser Richtung notwendig sind. Die Zahl dieser lokalen Operationen steigert sich über $n_1^{loc}(n_2^{loc} - 2)$ für $\mu = 2$ und $n_1^{loc}n_2^{loc}(n_3^{loc} - 2)$ für

$\mu = 3$ auf $n_1^{loc} n_2^{loc} n_3^{loc} (n_4^{loc} - 2)$ für $\mu = 4$. Falls die verwendete Kommunikationshardware einen asynchronen Betrieb unterstützt und schnell genug ist, kann damit die Kommunikation hinter den Berechnungen versteckt werden, d.h. der durch die Kommunikation eigentlich hervorgerufene zeitliche Mehraufwand kann ignoriert werden, da zur gleichen Zeit Rechenoperationen durchgeführt werden.

Gleichzeitig verfolgt das in Abbildung 4.8 dargestellte Kommunikationsschema jedoch auch den Ansatz, jedes Datum einzeln zu schicken. Dies ist nur empfehlenswert, solange die Latenzzeit der Kommunikation hinreichend kurz ist, wie etwa bei Maschinen mit *shared memory* Architektur oder Spezialmaschinen wie der APE100. Auf allen anderen Plattformen kann es hingegen sinnvoll sein, eine Parallelisierung nur in einigen Richtungen vorzunehmen und Daten paketweise erst dann zu verschicken, wenn eine zusammenhängende Oberfläche komplett bearbeitet wurde.

4.3 SSOR für $\mathcal{O}(a)$ -verbesserte Fermionen

Nachdem in den beiden vorangegangenen Abschnitten die Idee der l -SSOR Präkonditionierung präsentiert wurde, soll nun gezeigt werden, dass dieser Ansatz erfolgreich auch auf Matrizen anwendbar ist, die eine kompliziertere Struktur besitzen, als die in der ursprünglichen Veröffentlichung [38] angesprochene. Die in diesem Abschnitt gezeigten Resultate sind bereits an verschiedenen Stellen veröffentlicht worden [110, 111, 112].

Wie schon im Kapitel 2 dargelegt, kann die fermionische Matrix für $\mathcal{O}(a)$ -verbesserte Fermionen als

$$M_{SW}(x, y) = \left[\mathbf{1} + \frac{c_{SW}}{2} \kappa \sum_{\mu, \nu} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \right] \delta_{x,y} \quad (4.16)$$

$$- \kappa \sum_{\mu} \left[(\mathbf{1} - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta_{x, y - \hat{\mu}} + (\mathbf{1} + \gamma_{\mu}) U_{-\mu}(x) \delta_{x, y + \hat{\mu}} \right]$$

geschrieben werden. Der Sheikholeslami-Wohlert-Parameter c_{SW} muss dabei so angepasst werden, dass ein Verschwinden der Diskretisierungsfehler der Größe $\mathcal{O}(a)$ tatsächlich eintritt.

Der lokale Sheikholeslami-Wohlert-Term ist eine komplexe 12×12 Matrix, deren explizite Struktur im Raum der Dirac-Indizes durch

$$\frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} F_1 & F_2 & F_3 & F_4 \\ F_2^{\dagger} & -F_1 & F_4^{\dagger} & -F_3 \\ F_3 & F_4 & F_1 & F_2 \\ F_4^{\dagger} & -F_3 & F_2^{\dagger} & -F_1 \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

gegeben ist, wobei die Einträge F_i komplexe 3×3 Matrizen sind. Sie sind Abkürzungen für Linearkombinationen der in Gleichung (2.44) definierten $F_{\mu\nu}$:

$$\begin{aligned} F_1 &= -F_{12}, & F_2 &= -F_{23} - iF_{13}, \\ F_3 &= F_{34}, & F_4 &= F_{14} - iF_{24}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Legt man diese Struktur zu Grunde, so gibt es verschiedene natürliche Wahlmöglichkeiten, den blockdiagonalen Teil D der Matrix festzulegen, der implizit die eigentliche SSOR

Präkonditionierung bestimmt. Zum einen kann der gesamte Sheikholeslami-Wohlert-Term zum Diagonalterm erklärt werden, was im weiteren Verlauf mit $D^{(12)}$ bezeichnet werden soll. Als weitere Möglichkeiten werden außerdem $D^{(6)}$, $D^{(3)}$ und $D^{(1)}$ behandelt, welche jeweils die diagonalen Blöcke der Dimensionen 6, 3 und 1 repräsentieren sollen, wobei der diagonale „Block“ der Dimension 1 natürlich die echte Diagonale der Matrix ist. Entsprechend sind, unter Vernachlässigung der Parameter κ und c_{SW} , die vier 3×3 Blöcke in $D^{(3)}$ durch $\mathbf{1} + F_1$, $\mathbf{1} - F_1$, $\mathbf{1} + F_1$ und $\mathbf{1} - F_1$ gegeben. Die beiden 6×6 Blöcke von $D^{(6)}$ sind identisch und haben die Form

$$\begin{pmatrix} \mathbf{1} + F_1 & F_2 \\ F_2^\dagger & \mathbf{1} - F_1 \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

	$D^{(12)}$	$D^{(6)}$	$D^{(3)}$	$D^{(1)}$
MVM	144V (27.2%)	72V (13.6%)	36V (6.8%)	V (0.2%)
INV	10	2.5	2	1

Tabelle 4.1: Zusätzlicher Aufwand für die verschiedenen Größen der diagonalen Blöcke D . Angegeben die Kosten für eine Matrix-Vektor Multiplikation (MVM) und die Inversion (INV). MVM ist in *cflop*, INV in MVMs. V ist das lokale Volumen.

In Tabelle 4.1 ist der zusätzliche Berechnungsaufwand wiedergegeben, der für die verschiedenen Möglichkeiten der Wahl von D anfällt. Dieser Aufwand wird in der Einheit *cflop* angegeben, die genau einer komplexen Multiplikation und einer komplexen Addition entspricht. In Einheiten von herkömmlichen reellen Operationen entspricht dies jeweils vier reellen Multiplikationen und Additionen. Mit V wird hier das lokale Gittervolumen bezeichnet.

In der Zeile MVM ist angegeben, wieviele Operationen die zusätzliche Multiplikation des Vektors mit D^{-1} in jedem Iterationsschritt in Anspruch nimmt. Die Prozentzahlen in Klammern zeigen diesen Aufwand in Relation zu einer vollständigen Matrix-Vektor Multiplikation an, die mit $528V$ *cflops* zu Buche schlägt. Entsprechend der Diskussion im letzten Abschnitt, entspricht diese Zeile dem zusätzlichen Aufwand der SSOR Präkonditionierung.

In der Zeile INV ist eine Abschätzung des Aufwands zur Berechnung von D vor Beginn der Iteration wiedergegeben. Als Einheit ist hier die Zahl der Matrix-Vektor Multiplikationen (MVM) gewählt. Die genauen Zahlen hängen natürlich vom verwendeten Algorithmus ab, die angegebenen Zahlen beziehen sich auf die Verwendung der Cramerschen Regel auf 3×3 Blöcke unter Zuhilfenahme der zusätzlichen Struktur in $D^{(6)}$ und $D^{(12)}$.

4.3.1 Ergebnisse

Die l -SSOR Präkonditionierung von M_{SW} wurde im Rahmen der *quenched*-Näherung der QCD für den BiCGStab untersucht. Dazu wurden 10 unkorrelierte Eichkonfigurationen auf einem 16^4 Gitter bei $\beta = 6.0$ erzeugt. Die Untersuchungen wurden für drei Werte von c_{SW} durchgeführt, bei $c_{SW} = 0$ als Vergleich zur Implementation der reinen Wilson-Wirkung, bei $c_{SW} = 1.0$, dem störungstheoretisch richtigen Wert des Parameters und bei $c_{SW} = 1.769$, dem nichtstörungstheoretisch ermittelten Wert des Koeffizienten für die hier

gemachte Wahl von β [113]. Als Referenzimplementierung des Inverters wurde der in [96] dargestellte EO präkonditionierte BiCGStab verwendet.

Maschinenunabhängige Zahlen werden in Form von Iterationszahlen präsentiert, die direkt proportional zur Zahl der benötigten Gleitkommaoperationen sind. Gleichzeitig sollen aber auch echte Laufzeiten auf parallelen und skalaren Maschinen gezeigt werden. Dazu wurde das Verfahren sowohl auf der parallelen APE100 Architektur als auch auf SUN Ultra Workstations implementiert.

Als Abbruchkriterium des iterativen Gleichungslösers wurde $r = \frac{\|MX-\phi\|}{\|X\|} \leq 10^{-6}$ gewählt. Die verwendete Quelle ϕ war punktförmig, d.h. alle Einträge bis auf einen werden als 0 gewählt, der verbleibende ist 1. Am Ende einer jeden Berechnung wurde überprüft, wie weit das echte Residuum vom dem im Algorithmus akkumulierten abweicht. Es stellte sich heraus, dass diese Abweichung nur sehr klein ist und das echte Residuum in allen Fällen ebenfalls das Abbruchkriterium erfüllte. Außerdem wurden die Unterschiede der Lösungen ψ betrachtet, die zum einen mit dem EO, zum anderen mit dem l -SSOR präkonditionierten Inverter berechnet wurden. Hier zeigte sich, dass die relativen Abweichungen bei den Normen der Lösungsvektoren mit 10^{-6} im Rahmen der berechneten Genauigkeit lagen.

Als erster Schritt wurde der optimale Wert des in Gleichung (4.13) eingeführten Relaxationsfaktors ω bestimmt. Dazu wurde die Abhängigkeit der zur Lösung des Gleichungssystems benötigten Iterationen von diesem Parameter für $c_{SW} = 1.769$ und $\kappa = 0.1333$ untersucht, wobei der gewählte Wert für κ nahe beim kritischen Wert κ_c liegt. Bei den in Abbildung 4.9 gezeigten Ergebnissen errechnet sich der Verbesserungsfaktor als der Quotient aus den Iterationszahlen des l -SSOR und des EO präkonditionierten BiCGStab. Ist dieser Faktor größer als 1, so wird eine Überlegenheit des l -SSOR Präkonditionierers angezeigt, ansonsten ist der EO Präkonditionierer im Vorteil.

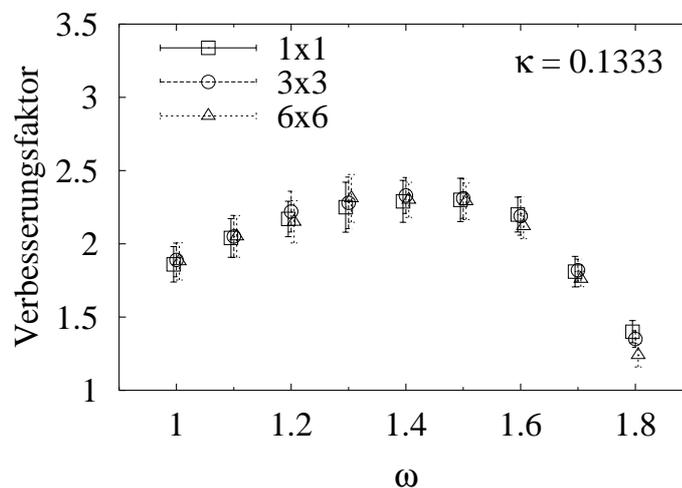


Abbildung 4.9: Die ω Abhängigkeit des l -SSOR Präkonditionierers. Gezeigt ist die Verbesserung durch l -SSOR Präkonditionierung gegenüber EO.

Abbildung 4.9 zeigt den Verbesserungsfaktor für drei verschiedene Größen der diagonalen Blöcke, 1×1 , 3×3 und 6×6 . Bei den Ergebnissen ist nur eine leichte Abhängigkeit von der

Blockgröße festzustellen, wobei die Unterschiede innerhalb der ermittelten Fehler liegen¹⁰. Man erkennt deutlich ein Minimum der Iterationszahlen für den SSOR bei $\omega \approx 1.4$, das auch für andere Werte von c_{SW} und κ bestätigt werden konnte¹¹. Auf Grund dieses Ergebnisses wurde der Relaxationsfaktor ω für alle weiteren Berechnungen mit der $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Wirkung auf 1.4 festgelegt.

Als nächstes wurde die Kompetitivität des l -SSOR Präkonditionierers gegenüber der EO-Präkonditionierung untersucht. Als Ergebnis zeigt Abbildung 4.10 den Verbesserungsfaktor für den l -SSOR für die drei gewählten c_{SW} Werte. In den beiden unteren Diagrammen sind wiederum verschiedene Optionen für den Diagonalterm D dargestellt.

Es ist eine wesentliche Verbesserung durch den l -SSOR Präkonditionierer gegenüber dem EO zu beobachten. In der Nähe von κ_c , dem eigentlich interessanten Bereich, da dort der Aufwand zur Lösung des linearen Gleichungssystems immer weiter wächst, wird ein Verbesserungsfaktor von bis zu 2.5 gefunden. Eine signifikante Abhängigkeit der Ergebnisse von der Blockgröße kann auch hier nicht festgestellt werden. Allerdings wird sich bei der Zeitmessung auf den APE100 Maschinen herausstellen, dass die $D^{(3)}$ bezeichneten 3×3 Blöcke die beste Performance erzielen.

Die gerade besprochenen Ergebnisse wurden auf eine APE Q4 Maschine mit $p = 32$ Prozessoren erzielt. Mit einem Volumen von $V = 65536$ Gitterpunkten bestand das lokale Untergitter aus 2048 Punkten. Da die im Präkonditionierungsprozess unabhängig behandelten Regionen genauso groß sind wie das auf einem Prozessor befindliche Untergitter, folgt die Parallelität des Algorithmus genau der Anzahl der Prozessoren. Gleichzeitig nimmt die Effektivität der Präkonditionierung mit der Größe des lokalen Gitters zu.

Für die 3×3 Blöcke wurde daher das Verhalten der Präkonditionierung in Abhängigkeit von der lokalen Gittergröße genauer untersucht. Dazu wurde der Inverter auf 4 verschiedenen APE100 Systemen implementiert, einer Q4 mit 32 Prozessoren, einer QH1 mit 128 Prozessoren, einer QH2 mit 256 Prozessoren sowie einer QH4 mit 512 Prozessoren. Die lokalen Gittergrößen entsprechen dabei dem Inversen der jeweiligen Prozessorzahl. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.11 wiedergegeben. Es zeigt sich, dass die Verbesserungen im untersuchten Bereich um etwa 10% variieren, wobei die Tendenz des größer werden des Verbesserungsfaktors mit abnehmender Prozessorzahl und damit zunehmender lokaler Gittergröße der Erwartung entspricht.

Gleichzeitig wird klar, dass auf aktuellen Parallelrechnern, deren Prozessorzahlen in der Größe zwischen $\mathcal{O}(10)$ und $\mathcal{O}(1000)$ liegen, die üblicherweise behandelten Systeme zu hinreichend großen Untergittern führen, um den l -SSOR zu einem effektiven parallelen Präkonditionierer zu machen.

Diesem Ergebnis folgend, erwartet man die maximale Verbesserung bezüglich der Iterationszahl bei einer Behandlung des Systems mit nur einem Prozessor¹². Deshalb wurde in einem weiteren Schritt untersucht, wie groß diese maximal zu erwartende Verbesserung in dem hier untersuchten Parameterbereich ist, indem eine serielle Implementierung der SSOR Präkonditionierung auf einer SUN Ultra Workstation vorgenommen wurde. Ab-

¹⁰Die Fehler geben die Variation der Ergebnisse über die 10 unabhängigen Eichkonfigurationen wieder.

¹¹In [38] wurde nur der Fall $\omega = 1$ und $c_{SW} = 0$ untersucht.

¹²Diese Bemerkung bezieht sich ausdrücklich nur auf Iterationszahlen. Eine parallele Implementierung ist in Hinsicht auf die Zahl der benötigten Iterationen oft nur suboptimal. Dieser Nachteil wird durch die parallele Verarbeitung in der Regel jedoch bei weitem wett gemacht.

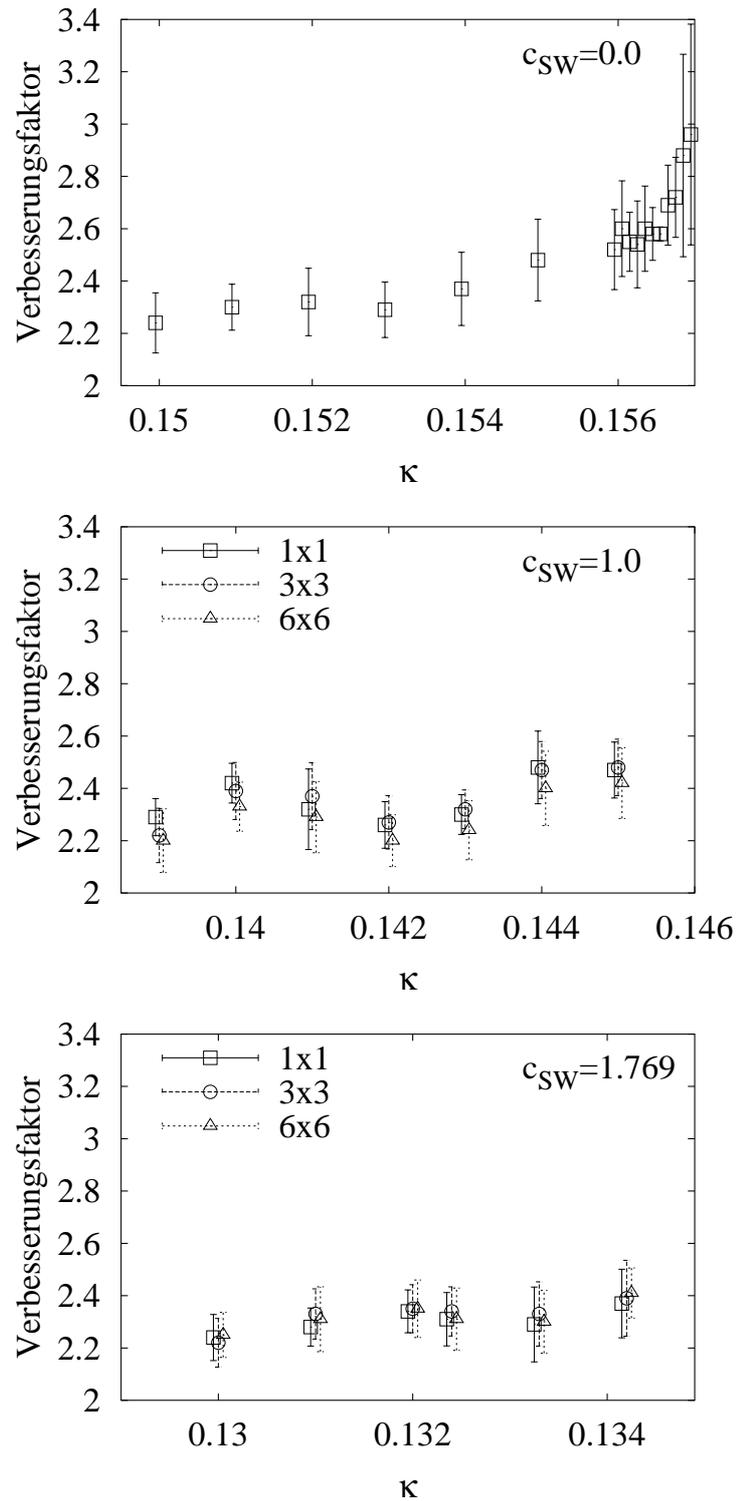


Abbildung 4.10: Die κ Abhängigkeit des l -SSOR Prädiktionierers für 3 verschiedene c_{SW} . Gezeigt ist die Verbesserung durch l -SSOR Prädiktionierung gegenüber EO.

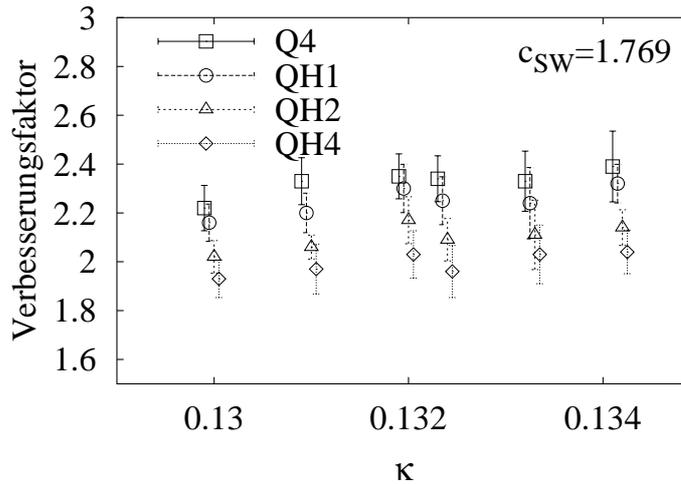


Abbildung 4.11: Die Abhängigkeit des ll -SSOR Präkonditionierers von der lokalen Gittergröße. Gezeigt ist die Verbesserung durch ll -SSOR Präkonditionierung gegenüber EO für 32 (Q4), 128 (QH1), 256 (QH2) sowie 512 (QH4) Prozessoren bei fester globaler Gittergröße.

bildung 4.12 zeigt die damit erzielten Ergebnisse für die drei gewählten c_{SW} Werte, die beiden unteren Diagramme zeigen diesmal allerdings vier verschiedene Optionen für den Diagonalterm D . Neben den bereits in der parallelen Version dargestellten Möglichkeiten kommt noch der 12×12 Block hinzu.

Auch hier zeigen sich keine signifikanten Unterschiede zwischen den verschiedenen Wahlmöglichkeiten des Diagonalterms D . Anders als für $c_{SW} = 0$, wo aus dem größeren lokalen Volumen keine zusätzliche Verbesserung resultiert, ergeben sich bei den beiden anderen Werten für c_{SW} jedoch noch deutliche Steigerungen gegenüber der parallelen Version. Nahe dem kritischen Wert κ_c sind Verbesserungsfaktoren von bis zu 3 zu beobachten, womit die in [107] gemachten Aussagen bestätigt werden.

Neben den bisher dargestellten Ergebnissen für die Iterationszahlen, die im wesentlichen plattform- und implementierungsunabhängig sind, wurde natürlich auch das Verhalten der Implementierungen bezüglich der tatsächlichen Laufzeit untersucht. Dazu wurden die Implementierungen sowohl der SSOR als auch der EO präkonditionierten Gleichungslösern auf beiden Plattformen auf vergleichbarem Niveau optimiert.

Entsprechend den obigen Resultaten wurden als Parameter für die Laufzeitmessungen $\omega = 1.4$, $\kappa = 0.1333$ und $c_{SW} = 1.769$ gewählt. Im Fall des ll -SSOR Präkonditionierers wurden neben den bisher untersuchten Diagonalblöcken der Größen 1×1 , 3×3 und 6×6 hier nun auch die 12×12 Blöcke untersucht, die auch dem EO Präkonditionierer zugrunde liegen. Allerdings muss hier bemerkt werden, dass die Speicherung der vorab invertierten Blöcke im Fall von $D^{(12)}$ den Bedarf von $D^{(1)}$ um den Faktor 9 übertrifft.

Obwohl die Wahl des Diagonalblocks keinen signifikanten Einfluss auf die Iterationszahlen hat, zeigen die in Abbildung 4.13 dargestellten Laufzeiten auf den APE100 Maschinen deutlich, dass diese Wahl durchaus einen Einfluss auf die Laufzeiten haben kann. So erkennt man für diese Plattform zum einen, dass die optimale Wahl des Diagonalblocks durch $D^{(3)}$ repräsentiert wird, zum anderen wird deutlich, dass der Vorteil des SSOR ge-

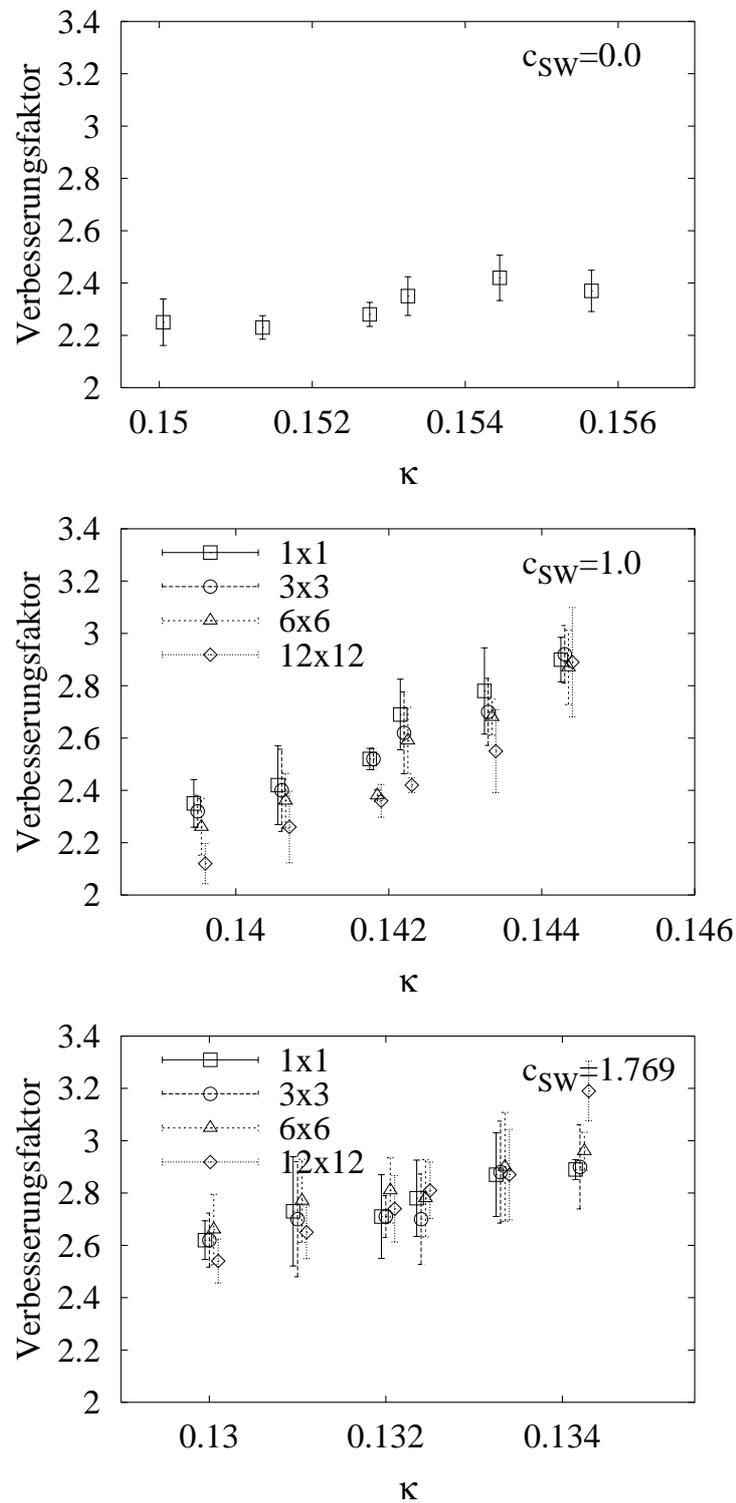


Abbildung 4.12: Die κ Abhängigkeit des SSOR Prädiktionierers für 3 verschiedene c_{SW} . Gezeigt ist die Verbesserung durch SSOR Prädiktionierung gegenüber EO.

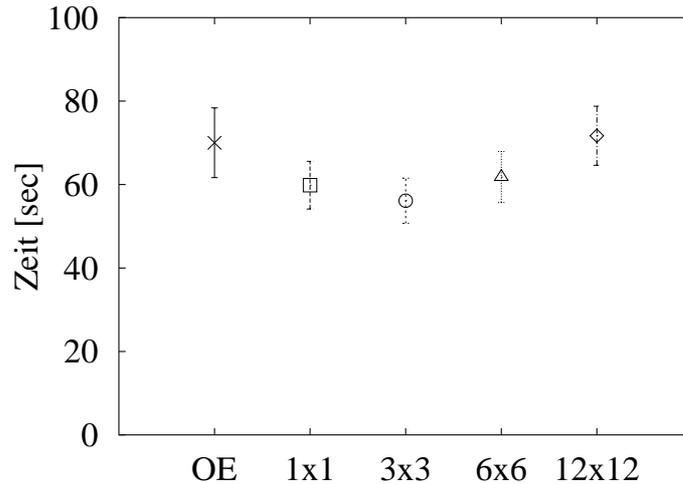


Abbildung 4.13: Zeitmessungen für den l -SSOR Präkonditionierer auf einer APE100 Q4 mit 32 Prozessoren. Vier verschiedene diagonale Blöcke D sowie ein EO Präkonditionierer wurden getestet.

genüber dem EO von einem auf Grund der Iterationszahlen erwarteten Faktor, der größer als 2 ist, bei dieser Plattform auf nur etwa 20% in der gemessenen Laufzeit schrumpft. Dies liegt jedoch vermutlich an der Optimierung der APE100 Hardware auf die deutlich stärker regulären Speicherzugriffe im EO Präkonditionierer.

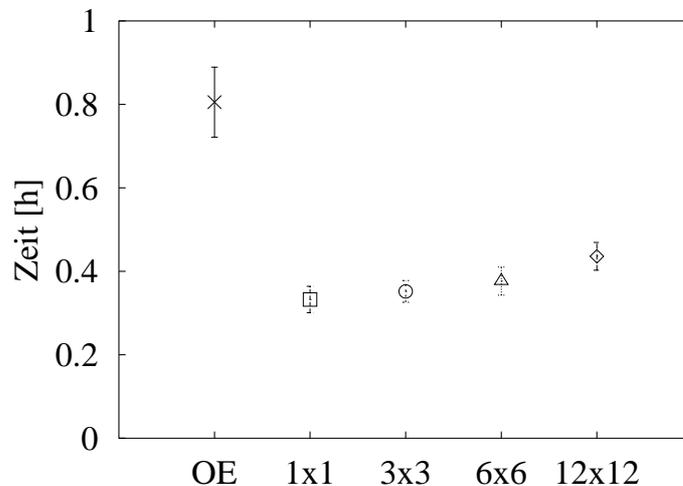


Abbildung 4.14: Zeitmessungen für den SSOR Präkonditionierer auf einer SUN Ultra Workstation. Vier verschiedene diagonale Blöcke D sowie ein EO Präkonditionierer wurden getestet.

Ein Blick auf Abbildung 4.14, welche die entsprechenden Ergebnisse für eine SUN Ultra Workstation darstellt, bestätigt diese Vermutung, ist doch die an Hand der Iterationszahlen erwartete Verbesserung hier auch tatsächlich in der Laufzeit zu beobachten. Auch wird deutlich, dass die optimale Blockgröße, die im Fall der Workstation den 1×1 Blöcken zukommt, durchaus plattformabhängig ist. Gleichzeitig wird durch den Vergleich der

absoluten Zahlen auf APE100 und SUN klar, dass durch die Parallelisierung ein großer Gewinn bei der absoluten Rechenzeit erzielt wird, zumal die Prozessorleistung der verwendeten Workstation mit der eines einzelnen APE100-Prozessors vergleichbar ist.

4.4 SSOR für hyperkubische Fermionen

Als weiterer Test wurde die SSOR Präkonditionierung bei den in Kapitel 2 besprochenen hyperkubischen Fermionen erprobt. Anders als bei den $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen, bei denen eine Erweiterung der SSOR Präkonditionierungs-idee auf Grund des lokalen Diagonalterms notwendig wurde, kann der ursprüngliche Ansatz hier beibehalten werden. Allerdings ist wegen der Verzehnfachung der relevanten Nachbarn trotzdem eine genaue Untersuchung der Auswirkungen der Präkonditionierung notwendig, da die Strukturänderung in der verwendeten Matrix natürlich Folgen bei der Effizienz der Methode zeigen kann. Auch die im folgenden präsentierten Ergebnisse wurden bereits veröffentlicht [110, 112].

Wie in Kapitel 2 gezeigt wurde, kann die fermionische Matrix der hyperkubischen Fermionen als

$$\begin{aligned}
M_{HF}(x, y) = & \lambda_0 \left\{ \delta_{x,y} \right. \\
& + \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} \Gamma_{\mu} U_{\mu}^{(1)}(x) \delta_{x,y-\hat{\mu}} \\
& + \frac{1}{2!} \sum_{\mu,\nu=\pm 1}^{\pm 4} \Gamma_{\mu\nu} U_{\mu+\nu}^{(2)}(x) \delta_{x,y-\hat{\mu}-\hat{\nu}} \\
& + \frac{1}{3!} \sum_{\mu,\nu,\rho=\pm 1}^{\pm 4} \Gamma_{\mu\nu\rho} U_{\mu+\nu+\rho}^{(3)}(x) \delta_{x,y-\hat{\mu}-\hat{\nu}-\hat{\rho}} \\
& \left. + \frac{1}{4!} \sum_{\mu,\nu,\rho,\sigma=\pm 1}^{\pm 4} \Gamma_{\mu\nu\rho\sigma} U_{\mu+\nu+\rho+\sigma}^{(4)}(x) \delta_{x,y-\hat{\mu}-\hat{\nu}-\hat{\rho}-\hat{\sigma}} \right\} \quad (4.20)
\end{aligned}$$

geschrieben werden. Neben dem Parameter λ_0 stecken weitere Parameter κ_i und λ_i mit $i = 1, \dots, 4$ in den Vorfaktoren Γ , die in Gleichung (2.56) definiert wurden. Alle diese Parameter sind im freien Fall – d.h. ohne die Eichfelder U – in Abhängigkeit von einem Massenparameter m berechenbar.

Da für eine Theorie mit nichttrivialen Eichfeldern diese Berechnung bisher nicht durchgeführt werden konnte, wurden für die hier gezeigten Berechnungen, wie bereits in Kapitel 2 beschrieben, die Eichfelder von Hand eingefügt. Auf Grund dessen ist zu erwarten, dass der Massenparameter m der hyperkubischen Fermionen, genau wie das κ der Wilson-Fermionen, eine additive Renormierung erfährt. Da die Auswirkungen der Präkonditionierung vor allem dann interessant werden, wenn die zu untersuchende fermionische Matrix kritisch wird, ist im ersten Schritt zunächst der zugehörige kritische Massenparameter m_c zu bestimmen, um die weiteren Ergebnisse einordnen zu können.

Bisher wurde die SSOR Präkonditionierung für hyperkubische Fermionen nur auf skalaren Maschinen implementiert. Auf Grund der großen Zahl an $SU(3)$ Matrizen, die auf

jedem Gitterpunkt gespeichert werden müssen und welche die korrespondierende Zahl bei $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen um einen Faktor 5 übertrifft, wurden die folgenden Untersuchungen auf einem 8^4 Gitter gemacht. Wiederum wurden 10 statistisch unabhängige Eichkonfigurationen in der *quenched*-Näherung bei $\beta = 6.0$ benutzt. Die Implementierung erfolgte auf einer SUN Ultra Workstation in Fortran 90.

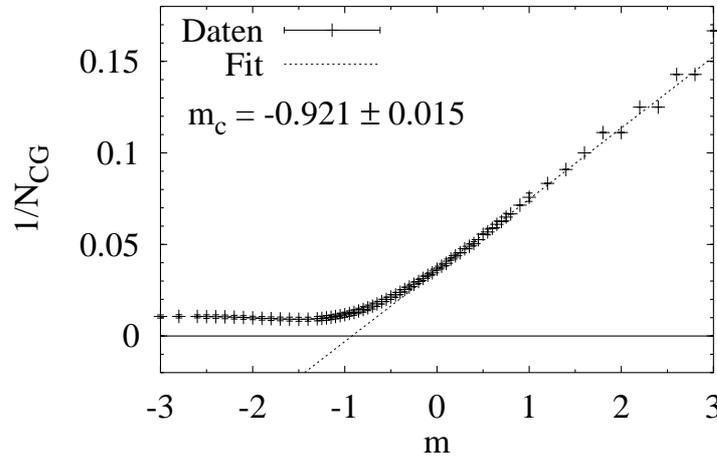


Abbildung 4.15: Bestimmung des kritischen Massenparameters m durch CG Inversionen.

Die Bestimmung des kritischen Massenparameters m_c erfolgte mit der in [114] eingeführten Methode, welche die Abhängigkeit der Zahl der benötigten Iterationen des CG Inverters von der Konditionszahl der Matrix (4.3) benutzt. Dabei wird ausgenutzt, dass die Matrix dann kritisch wird, wenn der kleinste Eigenwert $\lambda_{min} \rightarrow 0$ und damit die Konditionszahl und nach Gleichung (4.5) auch N_{CG} über alle Grenzen wächst. Empirisch findet man, dass $1/N_{CG}$ unter Variation des Massenparameters m in guter Näherung linear abnimmt, wie auch in Abbildung 4.15 zu sehen ist. Der kritische Massenparameter kann dann am Nulldurchgang der an $1/N_{CG}$ gefitteten Geraden abgelesen werden. Für die Wilson-Wirkung konnte gezeigt werden, dass die entsprechende Definition von κ_c mit der in Kapitel 3 besprochenen verträglich ist. Wie in Abbildung 4.15 dargestellt ist, erhält man für die hier gewählte Kopplung und Gittergröße $m_c = -0.921 \pm 0.015$.

In der Nähe der kritischen Masse m_c wurde anschließend der optimale Relaxationsparameter ω für die SSOR Präkonditionierung des BiCGStab bestimmt. Die Resultate für verschiedene m sind in Abbildung 4.16 dargestellt. Da die einfache EO Präkonditionierung bei den hyperkubischen Fermionen nicht verwendet werden kann, ist hier und im folgenden der Verbesserungsfaktor als Quotient aus den Ergebnissen mit und ohne SSOR Präkonditionierung definiert. Auf den Versuch, einen verallgemeinerten EO Präkonditionierer zu implementieren, der auf einer Einfärbung des Gitters mit 16 Farben beruht, wurde verzichtet, da dieser auf Grund der in Abschnitt 4.2.3 gemachten Abschätzungen nicht besser als der SSOR Präkonditionierer sein wird, die Implementierung gleichzeitig jedoch sehr kompliziert wäre.

Den in Abbildung 4.16 dargestellten Ergebnissen folgend, wird für die weitere Untersuchung der Relaxationsfaktor auf $\omega = 1.0$ fixiert. In Abbildung 4.17 sind schließlich die

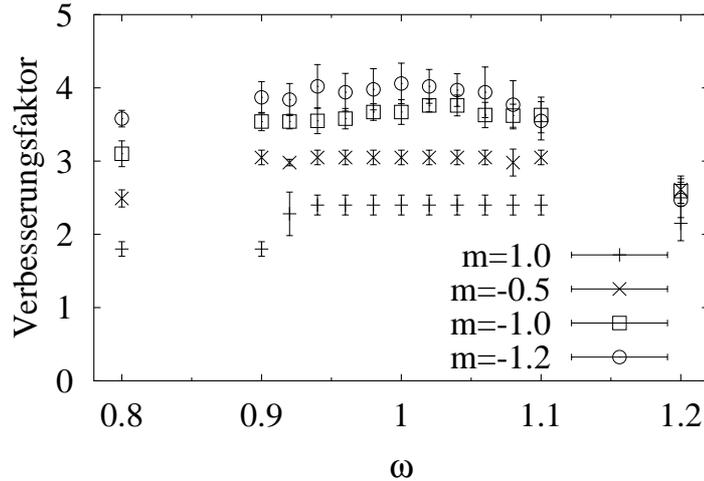


Abbildung 4.16: Die ω Abhängigkeit des SSOR Präkonditionierers. Gezeigt ist die Verbesserung durch SSOR Präkonditionierung beim BiCGStab.

Verbesserungsfaktoren sowohl für die Iterationszahlen als auch für die tatsächliche Laufzeit dargestellt. Es ist zu erkennen, dass für die Iterationszahlen ein Verbesserungsfaktor von bis zu 4 in der Nähe des kritischen Massenparameters festgestellt werden kann. Für die Laufzeiten verbleibt immer noch ein Faktor 3, was zum einen auf den Mehraufwand, vor allem aber auf die weniger regulären Speicherzugriffe zurückzuführen ist.

Die Regularität des Speicherzugriffs beeinflusst die Laufzeit vor allem durch Effekte in den hierarchischen *caches* moderner RISC-Computern. So können sehr reguläre Speicherzugriffe die *prefetch*-Heuristiken, die in allen aktuellen Prozessoren verwendet werden, deutlich besser nutzen als weniger reguläre und die Zahl der *cache-misses* signifikant reduzieren. Daraus ergeben sich im Mittel kürzere Wartezeiten, wenn Daten aus dem Speicher geholt werden müssen, und somit eine höhere Gesamtleistung.

In Hinblick auf den massiven Rechenaufwand für hyperkubische Fermionen, der den für Wilson-Fermionen um einen Faktor 10 überschreitet, ist eine effektive Präkonditionierung die wesentliche Voraussetzung, um diesen Ansatz zu einer kompetitiven Alternative machen zu können. Selbst wenn aus physikalischen Gründen zu der hier dargestellten fermionischen Matrix der hyperkubischen Fermionen noch weitere lokale Terme hinzugefügt werden müssen, so zeigen die in diesem Kapitel präsentierten Ergebnisse, dass der SSOR Präkonditionierer diese Anforderungen erfüllt und mit der ll Ordnung gleichzeitig eine Gitterordnung existiert, die eine effektive Parallelisierung dieser Methode erlaubt.

Eine allgemeinere Betrachtung verschiedener Fermionformulierungen auf dem Gitter zeigt, dass die fermionische Matrix allgemein in der Form

$$M = D + A + B + \dots \quad (4.21)$$

geschrieben werden kann. Dabei ist D ein blockdiagonaler Term, wie er etwa aus dem *clover*-Term der $\mathcal{O}(a)$ -verbesserten Fermionen bekannt ist, A repräsentiert Kopplungen zu nächsten Nachbarn, B zu übernächsten und so weiter.

In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass der ll -SSOR Präkonditionierer potentiell die Inversion jeder Matrix dieser Form beschleunigen kann. Gleichzeitig ist es möglich, dass

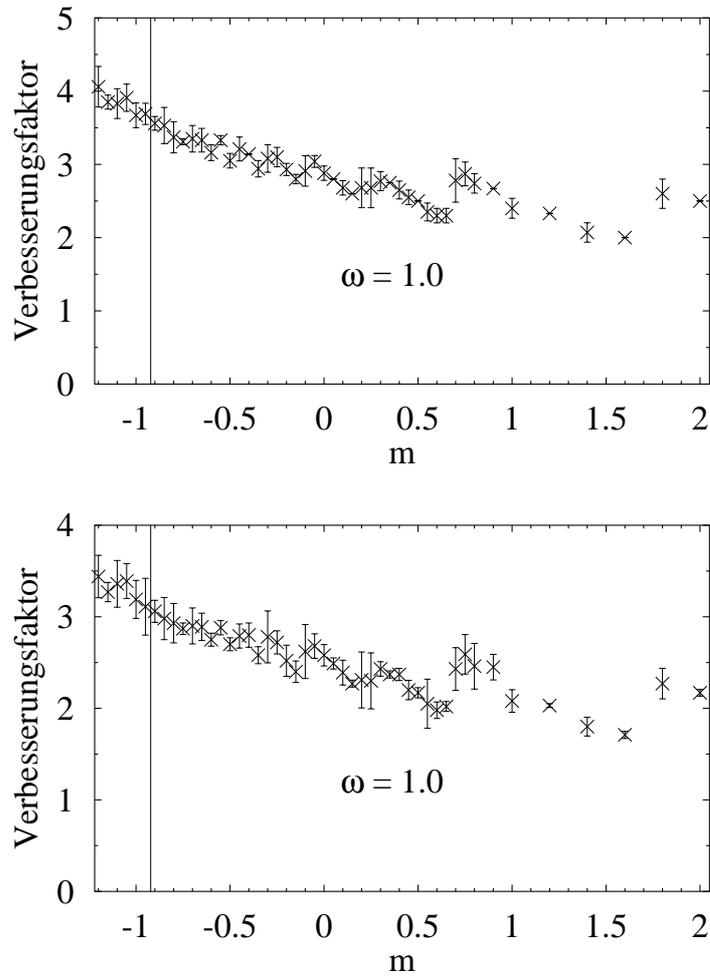


Abbildung 4.17: Die Abhängigkeit des SSOR Präkonditionierers vom Massenparameter m . Das obere Diagramm zeigt die benötigten Iterationen, das untere Laufzeiten. Gezeigt ist die Verbesserung durch SSOR Präkonditionierung beim BiCGStab.

dies in effektiver Weise auf einem Parallelrechner erfolgen kann. Dabei wird die Lokalität der Fermionformulierung den Grad an Granularität bestimmen, mit dem die parallele Implementierung in der Lage ist, umzugehen.



Kapitel 5

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde eine Quarkmassenanalyse der leichten Quarks mit dynamischen Wilson-Fermionen präsentiert. Erstmals ist diese für Wilson-Fermionen bis zu einer Kontinuumsextrapolation betrieben worden. Eine Besonderheit der hier dargestellten Auswertung ist die konsequente Anwendung der *Jackknife*-Methode über alle Stufen des Verfahrens hinweg. Dies macht es möglich, alle in den Ausgangsdaten vorhandenen Korrelationen über die gesamte Analyse hinweg zu verfolgen und neu eingeführte Korrelationen zwischen abgeleiteten Größen zu kontrollieren.

Die noch nicht ins Kontinuum extrapolierten Werte der Quarkmasse stimmen im Rahmen der Fehler mit älteren Ergebnissen für dynamische Wilson-Fermionen überein. Auf Grund eines recht kleinen Hebelarms bei der Kontinuumsextrapolation sind die finalen Ergebnisse für die leichte Quarkmasse, $\overline{m}^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 4.5(1.7) \text{ MeV}$, und die Masse des *strange* Quarks, $m_s^{\overline{\text{MS}}}(2 \text{ GeV}) = 92(83) \text{ MeV}$, mit großen Fehlern behaftet. Im Rahmen dieser großen Fehler findet man jedoch eine Übereinstimmung mit den bisher einzigen Vergleichswerten im Kontinuum aus Gitterrechnungen der CP-PACS Kollaboration.

Eine deutliche Reduzierung der Fehler bei den hier präsentierten Ergebnissen ist nur durch die Quarkmassenbestimmung bei mindestens einem weiteren Gitterabstand a zu erwarten, um zum einen den Hebelarm der Kontinuumsextrapolation zu vergrößern und zum anderen eine Kontrolle darüber zu bekommen, mit welcher funktionalen Abhängigkeit die Extrapolation durchzuführen ist.

Die Entscheidung darüber, ob die Punkte eher bei größeren oder bei kleinerem Gitterabständen liegen sollten, ist jedoch schwierig. Für größere Gitterabstände spricht vor allem, dass dabei der Rechenaufwand zur Produktion der benötigten Konfigurationen deutlich geringer ist, als bei einer Reduzierung des Gitterabstands. Gleichzeitig muss jedoch im Auge behalten werden, dass mit wachsendem Gitterabstand die Gefahr wächst, sich vom *scaling*-Bereich zu entfernen. Geht man hingegen zu kleineren Gitterabständen, so verschärft sich die Situation über den wachsenden Rechenzeitbedarf hinaus insofern, als dass *finite-size* Effekte, die bereits bei den hier vorliegenden Gittergrößen und Simulationsparametern eine Rolle gespielt haben, immer schwieriger unter Kontrolle zu bekommen sind.

Einen Ausweg aus diesem Dilemma könnte der von der CP-PACS Kollaboration eingeschlagene Weg sein, verbesserte Wirkungen sowohl im fermionischen als auch im Eichsektor zu verwenden. Dies führt dazu, dass Simulationen bei wesentlich größeren Gitterabständen durchgeführt werden können, ohne in Gefahr zu laufen, weiter in den Bereich der starken Kopplung zu gelangen. Dies muss jedoch mit komplizierteren Wirkungen und damit erhöhtem Rechenaufwand sowie komplizierteren Operatoren erkauft werden.

Im zweiten Teil der Arbeit wurden Verallgemeinerungen der H -SSOR Präkonditionierungsmethode und ihre Anwendung auf $\mathcal{O}(a)$ -verbesserte Fermionen diskutiert. Die hier präsentierten Ergebnisse zeigen, dass die neue Methode dem bisherigen Standardverfahren für diese Fermionformulierung um etwa einen Faktor 2 überlegen ist, was sich sowohl

an den Iterationszahlen, als auch an der benötigten Rechenzeit auf aktuellen parallelen Architekturen festmachen lässt.

Weiterhin wurde in diesem zweiten Teil die Anwendung der l -SSOR Präkonditionierungsmethode auf die Hyperkubus-Fermionen untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass dieses Verfahren auch auf diese Fermionformulierung anwendbar ist und Verbesserungen in derselben Größenordnung wie bei Wilson-Fermionen beobachtet werden können. Dieses Ergebnis ist um so wichtiger, als dass die Verwendung anderer Präkonditionierungsmethoden bei solchen und ähnlichen Formulierungen von Fermionen auf dem Gitter notorisch schwierig ist.

Schließlich wurde argumentiert, dass bei jeder auf einem Parallelrechner sinnvoll zu implementierenden Gitterformulierung die l -SSOR Präkonditionierungsmethode angewandt werden kann. Auf Grund der präsentierten Resultate sowie theoretischen Überlegungen kann dabei erwartet werden, dass die hier vorgestellte Methode Ergebnisse erzielen wird, die nahe an dem bei einer Implementation gegebener Parallelität möglichen Optimum liegen.



Tabellenverzeichnis

2.1	Die Parameter zur Erzeugung der Konfigurationen.	27
3.1	In der Analyse verwendete Fitparameter.	42
3.2	Gefittete Massen in Gittereinheiten für $\beta = 5.5$	45
3.3	Gefittete Massen in Gittereinheiten für $\beta = 5.6$	46
3.4	<i>Semi-quenched</i> chirale Extrapolation der pseudoskalaren Masse.	49
3.5	Direkte chirale Extrapolation der pseudoskalaren Masse.	49
3.6	Direkte chirale Extrapolation der Vektor-Masse.	51
3.7	<i>Semi-quenched</i> chirale Extrapolation der Vektor-Masse.	52
3.8	Die Sommerskala r_0 und die Gitterkonstante.	59
3.9	Werte der regularisierten Kopplungskonstante.	61
3.10	Die leichte Quarkmasse in der <i>semi-quenched</i> Analyse.	63
3.11	Die leichte Quarkmasse bei $\kappa^{see} = \kappa_l^{see}$	63
3.12	Die strange Quarkmasse in der <i>semi-quenched</i> Analyse.	70
4.1	Zusätzlicher Aufwand für D	90

Abbildungsverzeichnis

2.1	Beiträge zum Feldstärketensor auf dem Gitter.	18
2.2	<i>Hyperlinks</i> in einer, zwei und drei Dimensionen.	21
2.3	Die <i>hopping</i> -Parameter κ_i und λ_i als Funktion der Masse m	22
3.1	Diagramme zur Festlegung der Fitparameter.	41
3.2	Fitresultate für die SESAM-Gitter bei $\beta = 5.5$	43
3.3	Fitresultate für die SESAM-Gitter bei $\beta = 5.6$	44
3.4	Fitresultate für die T χ L-Gitter bei $\beta = 5.6$	45
3.5	<i>Semi-quenched</i> chirale Extrapolation der pseudoskalaren Masse	48
3.6	Direkte chirale Extrapolation der pseudoskalaren und der Vektor-Masse.	50
3.7	<i>Semi-quenched</i> chirale Extrapolation der Vektor-Masse	53
3.8	Szenario der effektiven Masse des Seequark-Hintergrundfeldes.	54
3.9	Szenario der Abhängigkeit der pseudoskalaren Masse von κ^{val}	55
3.10	Szenario der Abhängigkeit der Vektor-Masse von der Valenzquarkmasse.	56
3.11	Die renormierte Masse der leichten Quarks in Abhängigkeit von κ^{see}	64
3.12	Die renormierte leichte Quarkmasse in Abhängigkeit des Gitterabstands.	65
3.13	Die renormierte leichte Quarkmasse in Abhängigkeit des Gitterabstands aus [75].	68
3.14	Die renormierte Masse des <i>strange</i> Quarks in Abhängigkeit von κ^{see}	71
3.15	Die renormierte Masse des <i>strange</i> Quarks in Abhängigkeit des Gitterab- stands.	73
4.1	Die CG-Methode.	77
4.2	Die BiCGStab-Methode.	79
4.3	Die präkonditionierte Matrix-Multiplikation.	83
4.4	Die Vorwärtssubstitution.	83
4.5	Die Vorwärtssubstitution in der EO Ordnung.	85
4.6	Lokal-lexikographische Ordnung in 2 Dimensionen.	87
4.7	Die Vorwärtssubstitution in der ll Ordnung.	87
4.8	Das Kommunikationsschema der Vorwärtssubstitution.	88
4.9	Die ω Abhängigkeit des ll -SSOR Präkonditionierers.	91
4.10	Die κ Abhängigkeit des ll -SSOR Präkonditionierers.	93

4.11 Die Abhängigkeit des l -SSOR Prädiktionierers von der lokalen Gittergröße.	94
4.12 Die κ Abhängigkeit des SSOR Prädiktionierers.	95
4.13 Zeitmessungen des l -SSOR Prädiktionierers.	96
4.14 Zeitmessungen des SSOR Prädiktionierers.	96
4.15 Bestimmung des kritischen Massenparameters m	98
4.16 Die ω Abhängigkeit des SSOR Prädiktionierers.	99
4.17 Die Abhängigkeit des SSOR Prädiktionierers vom Massenparameter m . .	100

Literaturverzeichnis

- [1] H. Weyl, Sitzungsber. Akad. d. Wissenschaften Berlin (1918) 465.
- [2] A. Einstein, Annln. Phys. **35** (1911) 898; Phys. Z. **14** (1913) 1249.
- [3] H. Weyl, Z. Phys. **56**, (1929) 330.
- [4] C. N. Yang, R. Mills, Phys. Rev. **56** (1954) 191.
- [5] OPAL collaboration, G. Abbiendi, et al., Phys Lett. **B499** (2001) 38.
- [6] S. L. Glashow, Nucl. Phys. **22** (1961) 579;
S. Weinberg, Phys. Rev. Lett. **19** (1967) 1264;
A. Salam, *Elementary Particle Physics*, N. Svartholm (Ed.), Stockholm, (1968).
- [7] P. W. Higgs, Phys, Lett. **12** (1964) 132.
- [8] H. Fritzsch, M. Gell-Mann, H. Leutwyler, Phys. Lett. **B47** (1973) 365.
- [9] G. 't Hooft, in *High Energy Physics*, A. Zichini (Ed.), Palermo (1975);
S. Mandelstam, Phys. Rep. **23C** (1976) 245;
G. Parisi, Phys. Rev. **D 11** (1975) 970.
- [10] G. G. Ross, *Grand Unified Theories*, Benjamin/Cummings Publishing Comp., (1985);
P. H. Frampton (Ed.), *Last Workshop on Grand Unification*, World Scientific, (1989).
- [11] J. G. Polchinski, *String theory*, Cambridge University Press (1998).
- [12] SNO collaboration, Q. R. Ahmad, et al., *Measurement of charged current interactions produced by 8B solar neutrinos at the Sudbury Neutrino Observatory*, eingereicht bei Phys. Rev. Lett. (2001).
- [13] G. 't Hooft, Nucl. Phys. **B33** (1971) 173; Nucl. Phys. **B35** (1971) 365.
- [14] C. Callan, Phys. Rev. **D 2** (1970) 1541;
K. Symanzik, Comm. Math. Phys. **18** (1970) 227.
- [15] D. Gross, F. Wilczek, Phys. Rev. **D 8** (1973) 3633;
H. D. Politzer, Phys. Rev. Lett. **30** (1973) 1346.
- [16] M. A. Shifman, A. I. Vainshtein, V. I. Zakharov, Nucl. Phys. **B147** (1979) 385;
M. A. Shifman, A. I. Vainshtein, V. I. Zakharov, Nucl. Phys. **B147** (1979) 448.
- [17] R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 267.
- [18] K. G. Wilson, Phys. Rev. **D 10** (1974) 2445.
- [19] Th. Lippert, K. Schilling, in *Lattice Fermions and Structure of the Vacuum*, V. Mitrjushkin, G. Schierholz (Eds.), Kluwer Academic Publishers (2000).
- [20] F. Jegerlehner, R. D. Kenway, G. Martinelli, O. Pene, B. Petersson, R. Petronzio, C. T. Sachrajda, K. Schilling, *Requirements for High Performance Computing for Lattice QCD*, ECFA Panel Report ECFA/99/200, (1999).
- [21] CP-PACS collaboration, S. Aoki, et al., Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 238.
- [22] SESAM collaboration, U. Glässner, et al., Nucl. Phys. Proc. Suppl. **47** (1996) 386.
- [23] T χ L collaboration, L. Conti, et al., Nucl. Phys. Proc. Suppl. **53** (1997) 222.
- [24] UKQCD collaboration, C. R. Allton, et al., Phys. Rev. **D 60** (1999) 034507.
- [25] CP-PACS collaboration, S. Aoki, et al., Nucl. Phys. Proc. Suppl. **60** (1998) 335.

- [26] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton, D. Roweth, Phys. Lett. **B195** (1987) 216; Phys. Rev. **D 40** (1987) 2072.
S. Gottlieb, et al., Phys. Rev. **D 35** (1987) 2531.
- [27] K. G. Wilson, J. Kogut, Phys. Rep. **C 12** (1974) 75;
K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47** (1975) 773.
- [28] P. Hasenfratz, F. Niedermayer, Nucl. Phys. **B414** (1994) 785.
- [29] D. B. Kaplan, Phys. Lett. **B288** (1992) 342;
Y. Shamir, Nucl. Phys. **B406** (1993) 90.
- [30] R. Narayanan, H. Neuberger, Nucl. Phys. **B443** (1995) 305;
H. Neuberger, Phys. Lett. **B417** (1998) 141; Phys. Lett. **B427** (1998) 353.
- [31] P. H. Ginsparg, K. G. Wilson, Phys. Rev. **D 25** (1982) 2649.
- [32] M. Lüscher, Phys. Lett. **B428** (1998) 342.
- [33] Th. Lippert, in *Numerical Challenges in Lattice Quantum Chromodynamics* A. Frommer, Th. Lippert, B. Medeke, K. Schilling (Eds.), Springer (2000).
- [34] M. Lüscher, Nucl. Phys. **B418** (1994) 637.
- [35] C. Alexandrou, et al., Phys. Rev. **D 60** (1999) 034504;
C. Alexandrou, et al., Preprint `hep-lat/9806004` (1998).
- [36] I. Montvay, in *Numerical Challenges in Lattice Quantum Chromodynamics* A. Frommer, Th. Lippert, B. Medeke, K. Schilling (Eds.), Springer (2000).
- [37] A. Frommer, V. Hannemann, Th. Lippert, B. Nöckel, K. Schilling, Int. J. of Mod. Phys. **C 5** (1994) 1073.
- [38] S. Fischer, A. Frommer, U. Glässner, Th. Lippert, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, Comp. Phys. Comm. **98** (1996) 20.
- [39] H. Van der Vorst, SIAM J. Sci. Statist. Comput. **13** (1992) 631.
- [40] W. Bietenholz, U.-J. Wiese, Nucl. Phys. **B464** (1996) 319.
- [41] N. Eicker, et al., Phys. Lett. **B407** (1997) 290.
- [42] Y. Aharonov, D. Bohm, Phys. Rev. **115** (1959) 485.
- [43] C. Itzykson, J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory*, McGraw-Hill (1980).
- [44] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **55** (1983) 583.
- [45] K. Symanzik, Nucl. Phys. **B226** (1983) 187.
- [46] J. Kogut, L. Susskind, Phys. Rev. **D 11** (1975) 395.
- [47] K. G. Wilson, Phys. Rev. **B 4** (1971) 3174; Phys. Rev. **B 4** (1971) 3184.
- [48] H. Nielsen, M. Ninomiya, Nucl. Phys. **B185** (1981) 20.
- [49] B. Sheikholeslami, R. Wohlert, Nucl. Phys. **B259** (1985) 572.
- [50] R. Wohlert, DESY 87/069 (1987);
M. Lüscher, P. Weisz, Nucl. Phys. **B479** (1996) 429.
- [51] G. C. Rossi, M. Testa, Nucl. Phys. **B163** (1980) 109; Nucl. Phys. **B176** (1980) 477;
K. Symanzik, Nucl. Phys. **B190** [FS3] (1981) 1;
G. C. Rossi, K. Yoshida, Nuovo Cim. **11D** (1989) 101.
- [52] K. Jansen, R. Sommer, Nucl. Phys. **B530** (1998) 185.
- [53] W. Bietenholz, N. Eicker, I. Hip, K. Schilling, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **94** (2001) 603.
- [54] I. Barbour, E. Laermann, Th. Lippert, K. Schilling, Phys. Rev. **D 46** (1992) 3618.
- [55] W. Bietenholz, R. Brower, S. Chandrasekharan, U. J. Wiese, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **53** (1997) 921.

- [56] W. Bietenholz, U.-J. Wiese, Phys. Lett. **B426** (1996) 114.
- [57] K. Orginos, W. Bietenholz, R. Brower, S. Chandrasekharan, U.-J. Wiese, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **63** (1998) 904.
- [58] MILC collaboration, T. DeGrand, Phys. Rev. **D 58** (1998) 094503.
- [59] G. Bhanot, Rep. Prog. Phys. **51** (1988) 429.
- [60] T χ L collaboration, B. Alles, et al., Phys. Rev. **D 58** (1998) 071503;
T χ L collaboration, Th. Lippert, et al., Nucl. Phys. Proc. Suppl. **73** (1999) 521.
- [61] R. Tripicciono, Int. J. of Mod. Phys. **C4** (1993) 425;
C. Battista et al., Int. J. of High Speed Comp. **5** (1993) 637.
- [62] G. Bali et al., Phys. Lett. **B309** (1993) 378; Phys. Rev. **D62** (2000) 054503.
- [63] Particle Data Group, D. E. Groom, et al., Eur. Phys. Jour. **C 15** (2000) 1.
- [64] S. Weinberg, Trans. N. Y. Acad. Sci. **38** (1977) 185.
- [65] J. Gasser, H. Leutwyler, Phys. Reports **87** (1982) 77.
- [66] R. Sommer, Nucl. Phys. **B411** (1994) 839.
- [67] E. Jenkins, A. V. Manohar, M. B. Wise, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 2272.
- [68] S. Guesken, Dissertation WUB-DIS 89-7 (1989).
- [69] C. Alexandrou, et al., Nucl. Phys. **B414** (1994) 815.
- [70] U. Glässner, et al., Int. J. Mod. Phys. **C 6** (1995) 627;
U. Glässner, et al., Int. J. Mod. Phys. **C 7** (1996) 635;
A. Frommer, U. Glässner, SIAM J. Sci. Comput. **19** (1998) 15;
A. Frommer, U. Glässner, Z. Angew. Math. Mech. **77** (1997) 555.
- [71] C. W. Bernard, M. F. L. Goltermann, Phys. Rev. **D 49** (1994) 486.
- [72] S. Sharpe, N. Shoresh, Phys. Rev. **D 62** (2000) 094503.
- [73] V. Lubicz, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **94** (2001) 116.
- [74] M. Bochicchio, L. Maiani, G. Martinelli, G. C. Rossi, M. Testa, Nucl. Phys. **B262** (1985) 331; S. Itoh, Y. Iwasaki, Y. Oyanagi, T. Yoshié, Nucl. Phys. **B274** (1986) 33.
- [75] CP-PACS collaboration, A. Ali Khan, et al., Preprint hep-1at/0105015 (2001).
- [76] R. Gupta, T. Bhattacharya, Phys. Rev. **D 55** (1997) 7203.
- [77] B. Efron, *The Jackknife, the Bootstrap and Other Resampling Plans* SIAM (1982).
- [78] F. James, CERN Program Library Long Writeup D506 (1998).
- [79] CERN Program Library, <http://wwwinfo.cern.ch/asd/cernlib/>
- [80] J. Donoghue, B. Holstein, D. Wyler, Phys. Rev. Lett. **96** (1992) 3444.
- [81] B. Orth, Dissertation, Wuppertal, in Vorbereitung.
- [82] G. S. Bali, Preprint hep-ph/0001312 (2000).
- [83] G. S. Bali, K. Schilling, A. Wachter, Phys. Rev. **D 56** (1997) 2566.
- [84] B. Bolder, et al., Phys. Rev. **D 62** (2000) 054503.
- [85] G. Martinelli, Z. Yi-Cheng, Phys. Lett. **123B** (1983) 433.
- [86] P. Lepage, P. Mackenzie, Phys. Rev. **D 48** (1993) 2250.
- [87] HEMCGC Collaboration, K. Bitar, et al., Phys. Rev. **D 49** (1994) 3546.
- [88] C. T. H. Davies, K. Hornbostel, G. P. Lepage, P. McCallum, J. Shigemitsu, J. H. Sloan, Phys. Rev. **D 56** (1997) 2755.
- [89] S. Brodsky, P. Lepage, P. Mackenzie, Phys. Rev. **D 28** (1983) 228.
- [90] C. Allton, et al., Nucl. Phys. **B431** (1994) 667.
- [91] T. Bhattacharya, D. Daniel, R. Gupta, Preprint hep-1at/9310007 (1993).
- [92] T. Bhattacharya, R. Gupta, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **63** (1998) 95.

- [93] U. Glässner, Dissertation WUB-DIS 97-3 (1997).
- [94] K. Bitar, R. G. Edwards, U. M. Heller, A. D. Kennedy, Phys. Rev. **D 54** (1996) 3546.
- [95] H. Leutwyler, Phys. Lett. **B378** (1996) 313.
- [96] K. Jansen, C. Liu, Comp. Phys. Comm. **99** (1997) 221.
- [97] M. R. Hestenes, E. Stiefel, J. Res. Nat. Bur. Standards **49** (1952) 409.
- [98] S. C. Eisenstat, et al., SIAM J. Numer. Anal. **20** (1983) 345.
- [99] G. Forsythe, E. Strauss, Proc. Amer. Math. Soc. **6** (1955) 340.
- [100] R. Barret, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, H. Van der Vorst, *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*, SIAM (1994).
- [101] G. Golub, C. van Loan, *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press, (1989).
- [102] R. Fletcher, Lecture Notes in Mathematics 506, Springer Verlag Berlin (1976) 73.
- [103] P. Sonneveld, SIAM J. Sci. Statist. Comput. **10** (1989) 36.
- [104] T. Degrand, P. Rossi, Comp. Phys. Comm. **60** (1990) 211.
- [105] K. Jansen, C. Liu, Comp. Phys. Comm. **99** (1997) 221.
- [106] R. Gupta, et al., Phys. Rev. **D 40** (1989) 2072.
- [107] Y. Oyanagi, Comp. Phys. Comm. **42** (1986) 333.
- [108] G. Hockney, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **17** (1990) 301.
- [109] S. Eisenstat, SIAM J. Sci. Statist. Comput. **2** (1981) 1.
- [110] W. Bietenholz, N. Eicker, A. Frommer, Th. Lippert, B. Medeke, K. Schilling, G. Weuffen, Comp. Phys. Comm. **119** (1999) 1.
- [111] N. Eicker, W. Bietenholz, A. Frommer, H. Hoeber, Th. Lippert, K. Schilling, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **63** (1998) 955.
- [112] N. Eicker, W. Bietenholz, A. Frommer, Th. Lippert, B. Medeke, K. Schilling, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **73** (1999) 850.
- [113] M. Lüscher, S. Sint, R. Sommer, P. Weisz, U. Wolff, Nucl. Phys. **B491** (1997) 323.
- [114] I. Barbour, E. Laermann, Th. Lippert, K. Schilling, Phys. Rev. **D 46** (1992) 3618.

Danksagung

An erster Stelle möchte ich meinem Doktorvater Prof. Dr. Klaus Schilling danken, der diese Arbeit initiierte und betreute. Weiterhin gilt mein Dank allen ehemaligen und aktuellen Mitgliedern der SESAM/T χ L Kollaboration, ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Besonders hervorheben möchte ich Thomas Lippert, dessen ständige Diskussionsbereitschaft insbesondere den algorithmischen Teil dieser Arbeit erst ermöglicht hat. Auch für die kritische Durchsicht des Manuskripts möchte ich mich herzlich bedanken.

Boris Orth gebührt besonderer Dank für die Durchführung der Propagatorberechnungen auf den Cray-Systemen in Jülich.

Dr. Gunnar Bali möchte ich für seinen Einsatz danken mit dem er ermöglicht hat, in letzter Minute die Ergebnisse der Sommer-Skala für $\beta = 5.5$ in die Analyse einfließen zu lassen.

Dank auch an all diejenigen, die in den letzten Jahren das Büro F-10.06 mit mir geteilt haben und dabei für die notwendige Motivation und auch Ablenkung gesorgt haben: Francisco 'Paco' Alba, Guido Arnold, Susanne Bielefeld, Thomas Düssel, Thorsten Greiner, Henning Hoerber, Hartmut Neff, Wolfram Schroers und Achim Spitz.

Dies ist ebenfalls der Zeitpunkt meinen Eltern für das Verständnis und die große Unterstützung zu danken, die sie meiner Arbeit und meinen Interessen immer entgegengebracht haben.

Last but not least möchte ich mich bei meiner Frau Anke und meinem Sohn Conrad bedanken, die unter der heißen Phase dieser Arbeit wohl am meisten zu leiden hatten.

Norbert Eicker

Wuppertal, Juli 2001