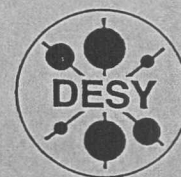


Z

DEUTSCHES ELEKTRONEN-SYNCHROTRON



DESY-THESIS-1999-036
WUB-DIS 99-17
November 1999



Die Bestimmung von disconnected Diagrammen
in flavor-singlet Matrixelementen der vollen QCD

von

J. Viehoff

Eigentum der Property of	DESY	Bibliothek library
Zugang: Accessions:	22. Dez. 1999	
Keine Ausleihe Not for loan		

ISSN 1435-8085

NOTKESTRASSE 85 - 22607 HAMBURG

DESY behält sich alle Rechte für den Fall der Schutzrechtserteilung und für die wirtschaftliche Verwertung der in diesem Bericht enthaltenen Informationen vor.

DESY reserves all rights for commercial use of information included in this report, especially in case of filing application for or grant of patents.

To be sure that your reports and preprints are promptly included in the
HEP literature database
send them to (if possible by air mail):

DESY
Zentralbibliothek
Notkestraße 85
22603 Hamburg
Germany

DESY
Bibliothek
Platanenallee 6
15738 Zeuthen
Germany



FACHBEREICH PHYSIK
BERGISCHE UNIVERSITÄT
GESAMTHOCHSCHULE WUPPERTAL

NIC

Die Bestimmung von disconnected Diagrammen in flavor-singlet Matrixelementen der vollen QCD

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

vorgelegt von

Jochen Viehoff ✓

aus Wuppertal

WUB-DIS 99-17

September 1999



FACHBEREICH PHYSIK
BERGISCHE UNIVERSITÄT
GESAMTHOCHSCHULE WUPPERTAL

NIC

Determination of disconnected diagrams for flavor singlet matrix elements in full QCD

PhD Thesis

Jochen Viehoff

WUB-DIS 99-17

September 1999

Abstract

Flavor-singlet phenomena play a fundamental role in the low energy regime of QCD since they are directly related to the vacuum properties of the theory. For observables which contain flavor-singlet currents, the impact of quantum fluctuations is reflected in terms of disconnected diagrams. Quantum fluctuations and a non-trivial QCD vacuum structure are considered to solve some of the main discrepancies between phenomenology, perturbative predictions and experimental results, e.g. chiral symmetry breaking, the proton spin or the η' mass. In lattice calculations disconnected diagrams are directly accessible with stochastic estimator techniques (SET).

We review and improve the stochastic estimator techniques with complex Z2 noise and achieve clear evidence for contributions from disconnected diagrams in the pion-nucleon σ -term, $\sigma_{\pi n}$, and the flavor-singlet axial coupling of the proton, G_A^1 . The analysis is based on the SESAM gauge-field configurations with 2 flavors of dynamical Wilson fermions. Furthermore a set of configurations from the $T\chi L$ collaboration is analyzed as well. The lattice size is $16^3 \times 32$, respectively $24^3 \times 40$ for the $T\chi L$ configurations, with lattice spacing $a_\rho^{-1} \simeq 2.3\text{GeV}$ and $m_\pi/m_\rho = 0.84 - 0.69$.

We find disconnected contributions for $\sigma_{\pi N}$ in the same order of magnitude as from the connected insertion and obtain $\sigma_{\pi N} = 18(5)\text{MeV}$. The situation is less clear for G_A^1 since the results suffer from large statistical errors in the disconnected part of the analysis. However, disconnected diagrams and vacuum fluctuations spoil the excellent signals from the connected insertions in the G_A^1 analysis, but can not be neglected in lattice calculations. We find $G_A^1 = 0.21(12)$ which is in agreement with experiments.

Furthermore we have determined the topological charge Q_L on the gauge-field configurations with cooling techniques and with the Atiyah-Singer index-theorem in combination with SET. Both methods demonstrate the decorrelation of topology in our HMC simulations which is a basic requirement for the determination of flavor-singlet matrix elements.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Gitterregulierte QCD	11
2.1	QCD im Kontinuum	11
2.1.1	Symmetrien der Lagrangedichte	11
2.1.2	Pfadintegralformalismus	13
2.2	QCD auf dem Gitter	14
2.2.1	Die diskrete gluonische Wirkung der QCD	14
2.2.2	Die diskrete fermionische Wirkung der QCD	15
2.2.3	Die quenched Näherung	16
2.3	Die SESAM und $T\chi L$ Gittersimulationen	17
3	Stochastische Matrixinversionen	19
3.1	Anwendung in der flavor-singlet Physik	19
3.2	Theoretische Grundlagen	20
3.2.1	Test mit der freien Konfiguration	21
3.3	Verbesserte stochastische Matrixinversionen	24
3.3.1	Die spin-explizite Methode	24
3.3.2	Die Rauschsubtraktionsmethode	26
3.3.3	Rauschunterdrückung mit größeren Gittern	27
3.3.4	Korreliertes Rauschen	27
3.3.5	Anmerkungen zur Rauschunterdrückung	29
3.4	Anwendung in der vollen QCD	31

4 Die topologische Ladung	33
4.1 Das $U_A(1)$ Problem und die axiale Anomalie	33
4.2 Topologische Ladung auf dem Gitter	35
4.2.1 Die feldtheoretische Methode	35
4.2.2 Cooling	35
4.2.3 Die fermionische Methode	36
4.3 Numerische Tests und Ergebnisse	37
5 Korrelationsfunktionen und disconnected Diagramme	44
5.1 Mehrpunkt-Korrelationsfunktionen	44
5.2 Test auf Grundzustand: Plateau-Methode	47
5.3 Numerische Techniken auf dem Gitter	49
5.3.1 Grundlagen	49
5.3.2 Disconnected Diagramme	50
5.3.3 Connected Diagramme	51
6 Disconnected Diagramme und der Pion-Nukleon σ-Term	53
6.1 $\sigma_{\pi N}$ und chirale Symmetriebrechung	53
6.2 Experimentelle Bestimmung von $\sigma_{\pi N}$	54
6.3 Disconnected Beiträge zu $\sigma_{\pi N}$	55
6.4 Bestimmung von $\sigma_{\pi N}$ in Gittersimulationen	57
6.4.1 Bisherige quenched Simulationen	57
6.4.2 Disconnected Diagramme: Volume-Source versus Z2 Rauschen	58
6.4.3 Die Plateau-Akkumulations Methode (PAM)	62
6.5 Connected Diagramme und die chirale Extrapolation für $\sigma_{\pi N}$	66
7 Der Proton-Spin und die axiale flavor-singlet Kopplung G_A^1	68
7.1 Experimentelle Bestimmung von G_A^1	68
7.2 Bestimmung von G_A^1 in Gittersimulationen	71
7.2.1 Die topologische Methode	71

7.2.2 Bisherige Gittersimulationen	72
7.2.3 Connected Diagramme für G_A^1	73
7.2.4 Disconnected Diagramme für G_A^1	75
7.2.5 Extrapolation zum chiralen Limes	80
7.2.6 Renormierung	81
7.3 Anmerkungen zu den Ergebnissen	82
8 Zusammenfassung	83
A Konventionen	86
A.1 Pauli Matrizen	86
A.2 Dirac Matrizen	86

Kapitel 1

Einleitung

Die Quantenchromodynamik (QCD) [2] und das Salam-Weinberg Modell [3] der elektroschwachen Wechselwirkung bilden gemeinsam eine feldtheoretische, fundamentale Beschreibung der Elementarteilchenphysik und werden zusammengefaßt als Standardmodell bezeichnet. Die lokalen Eichtheorien basieren auf den Lie-Gruppen $SU(3)_{color} \times SU(2)_{weak} \times U(1)$ und beschreiben die Wechselwirkungen zwischen den Grundbausteinen der Materie, den Leptonen und den Quarks. Während die QCD mit masselosen Eichbosonen (Gluonen) die Kräfte zwischen 6 unterschiedlichen Quarks (*up*, *down*, *strange*, *charm*, *bottom*, *top*) generiert, verbindet die elektroschwache Wechselwirkung mit den schweren Eichbosonen Z^0 und W^\pm und dem masselosen Photon die Leptonen und Quarks. Sowohl die nachweisbare Renormierbarkeit der Theorien als auch eine Fülle von experimentellen Bestätigungen verfestigten in den vergangenen Jahrzehnten das Standardmodell der Elementarteilchenphysik [4]. Ansätze für eine weitere Vereinheitlichung über das Standardmodell hinaus werden im Rahmen vereinheitlichender Theorien (GUT) diskutiert [5]. Die Gravitation als weitere elementare Wechselwirkung in der Natur konnte bisher in das bestehende Bild nicht integriert werden und verbleibt als separate Kraft.

Innerhalb des Standardmodells sind die 6 massiven Quarks, deren Massen von wenigen MeV (*up*, *down*) bis zu etwa 175 GeV (*top*) reichen, in drei Familienpaaren angeordnet:

$$\begin{pmatrix} \text{up} \\ \text{down} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{charm} \\ \text{strange} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{top} \\ \text{bottom} \end{pmatrix}. \quad (1.1)$$

Aufgrund des zusätzlichen Farb-Freiheitsgrades der QCD, gekennzeichnet durch die $SU(3)_{color}$ Eichsymmetrie, werden einzelne Quarks nicht in der Natur beobachtet (dieses Phänomen wird als *Confinement* [6] bezeichnet) und nur farb-singlet Zusammensetzungen einzelner Quarks zu Mesonen (2 Konstituenten) und Baryonen (3 Konstituenten) entsprechen dem observierten Spektrum der Elementarteilchen. Ferner impliziert die lokale $SU(3)_{color}$ Symmetrie mit den Generatoren einer nicht-abelschen Lie-Algebra die Selbstwechselwirkung der zugehörigen Eichbosonen (Gluonen) und prägt dadurch insbesondere die Grundeigenschaften des QCD-Vakuums.

Quantenfeldtheorien wie die QCD oder auch die Quantenelektrodynamik (QED) zeichnen sich durch einen energieabhängigen Kopplungsparameter (*running coupling*) aus [17]. Während bei hohen Energien der Kopplungsparameter α_s der QCD klein ist¹, und damit eine störungstheoretische Näherung gerechtfertigt werden kann, divergiert α_s bei kleinen Energien bzw. großen Abständen. In diesem niederenergetischen Bereich der QCD, nahe an dem komplexen Grundzustand (Vakuum) der Theorie, kann die Physik allein mit nicht-störungstheoretischen Methoden erforscht werden. Die Gitterrenormalisierung ist in diesem Zusammenhang definitionsgemäß eine nicht-störungstheoretische Technik und wird in der vorliegenden Arbeit für flavor-singlet Matrixelemente bzw. topologische Anregungen des QCD Vakuums angewendet [10].

Die Gittereichtheorie der starken Wechselwirkung basiert auf einer Pfadintegralformulierung [11] der QCD mit einem diskreten, euklidischen Gitter und stellt ein Analyse-Werkzeug für den niederenergetischen Bereich der QCD dar [12]. Das zugrundeliegende Gitter bildet auf natürliche Weise sowohl eine niederenergetische Infrarot- als auch eine Ultraviolett-Regularisierung des Impulses, indem ein endlicher Gitterabstand a den maximalen Impuls definiert, während das endliche Volumen V den IR-Impulsbereich beschränkt. Im Kontinuumslimites $a \rightarrow 0$ verschwindet die nackte Kopplungskonstante, $g^2 \rightarrow 0$, und die Gittertheorie, die als statistisches System interpretiert werden kann, durchläuft einen Phasenübergang mindestens zweiter Ordnung. Ein weiterer Phasenübergang der QCD im Kontinuum und auf dem Gitter findet bei endlicher Temperatur statt, wenn das System von der sogenannten *confined* Phase in das Quark-Gluon Plasma übergeht, in dem die chirale Symmetrie wiederhergestellt ist und Quarks nicht in Mesonen und Baryonen gebunden sind (*deconfined*). Für sehr kleine Gitterabstände a , nahe am Kontinuumslimites, wird das System von der Callan-Symanzik β -Funktion beschrieben [12]. In diesem Bereich, der auch als *Scaling*-Region bezeichnet wird, können vom zugrundeliegenden Gitter unabhängige Resultate erzielt werden, die für $a \rightarrow 0$ die Kontinuumsphysik reproduzieren.

Mit der Interpretation der Gittereichtheorie als Modell der statistischen Physik eröffnen sich gängige Monte-Carlo Integrationen als adäquate Lösungsansätze. Anstatt das zugrundeliegende Pfadintegral vollständig zu berechnen, werden auf einem repräsentativen Ensemble, nach der Wichtung im Pfadintegral generiert, die physikalischen Observablen ausgewertet. Bedingt durch ein endliches Ensemble resultiert ein zusätzlicher statistischer Fehler, der mit wachsender Anzahl der erzeugten Konfigurationen unterdrückt wird. Die Quarkfelder der QCD werden im Pfadintegralformalismus durch Grassmann-Variablen repräsentiert, weil sie als Fermionen dem Pauli-Prinzip gehorchen müssen. Eine direkte Simulation der entsprechenden Wirkung ist mit derzeit bekannten Algorithmen nicht möglich. Statt dessen werden fermionische Freiheitsgrade ausintegriert und auf einen Ausdruck in den gluonischen Feldern und eine globale Determinante zurückgeführt. Simulationen in der sogenannten quenched Näherung [13, 14] vernachlässigen die globale Determinante und unterdrücken

¹Zur asymptotischen Freiheit der Quarks bei hohen Energien bzw. kleinen Abständen, siehe z.B. [7, 8, 9].

gleichsam freie, dynamische Quark-Antiquark Paare im Vakuum zugunsten eines enorm reduzierten Rechenaufwandes². Beispielsweise für das Teilchenspektrum der QCD, den Mesonen und Baryonen, impliziert die quenched Näherung in den Massenverhältnissen Abweichungen von weniger als 10% [15]. Erheblich schwieriger wird diese Abschätzung, wenn keine oder nur sehr fehlerbehaftete experimentelle Daten zum Vergleich vorliegen, oder die physikalischen Größen sensitiv auf freie Quark-Antiquark Paare im Vakuum sind.

In diesem Zusammenhang hat sich die SESAM bzw. $T\chi L$ Kollaboration zum Ziel gesetzt, den Einfluß dynamischer Quarks sowohl auf das Spektrum der QCD als auch auf Matrixelemente zu untersuchen, und es wurden umfangreiche Simulationen der vollen QCD mit dynamischen Wilson-Fermionen bei unterschiedlichen Quarkmassen realisiert.

Im Gegensatz zu klassischen Feldtheorien ist der Grundzustand einer Quantenfeldtheorie ein komplexes Vakuum, geprägt von Quantenfluktuationen, das eine Fülle an neuen Prozessen und Phänomenen beinhaltet. Aufgrund dieser Quantenfluktuationen können beispielsweise Quark-Antiquark Paare spontan aus einem Teilchensee heraus generiert werden und in Wechselwirkung mit anderen Komponenten der Theorie treten. Der bereits angesprochene energieabhängige Kopplungsparameter α_s der QCD ist ebenso bedingt durch eine nicht-triviale Vakuumstruktur, sowie der Zusammenschluß der Quarks (confinement), topologische Eigenschaften und (spontan) gebrochene Symmetrien der Lagrangedichte. Obwohl in den letzten Jahren zahlreiche Arbeiten über den Grundzustand der QCD erschienen sind, konnte bisher die zugrundeliegende Vakuumstruktur nicht vollständig aufgeklärt werden. Eine detaillierte Einführung sowie weiterführende Literatur zu den gängigen Modellen des QCD Vakuums findet sich beispielsweise in [16].

Hauptgegenstand dieser Arbeit sind die Wechselwirkungen eines Nukleons N mit einem externen Strom A_μ , zusammengefaßt in dem Matrixelement $M = \langle N|A_\mu|N \rangle$. Im nicht-störungstheoretischen Sektor der QCD – bei kleinen Energien – können solche Matrixelemente, die z.B. in der chiralen Symmetriebrechung und beim Spin des Protons eine entscheidende Rolle spielen, nur in Gittersimulationen bestimmt werden. Neben der direkten Ankopplung von A_μ an ein Konstituentenquark des Nukleons, als *connected* Diagramm bezeichnet, kann aus feldtheoretischer Sicht auch eine rein gluonische Wechselwirkung mittels eines aus dem Vakuum erzeugten Quark-Antiquark Paares stattfinden. Diese Beiträge von reinen QCD Quantenfluktuationen werden als *disconnected* Diagramme bezeichnet, und ihre Berechnung basiert auf stochastischen Matrixinversionen. In den folgenden Kapiteln dieser Arbeit werden skalare und axiale flavor-singlet Matrixelemente diskutiert. Der Schwerpunkt liegt auf der Bestimmung von disconnected Diagrammen mit stochastischen Matrixinversionen, weil die Quantenfluktuationen für diese Amplituden sensitiv auf mögliche Effekte dynamischer Fermionen sind und den Zielen der SESAM bzw. $T\chi L$ Kollaboration

²Wenn hingegen dynamische Fermionen (Quark-Antiquark Paare) in Gittersimulationen einbezogen werden, also die globale Determinante der Fermionenmatrix in der Simulation beständig mitberücksichtigt wird, erhöht sich der Rechenaufwand um einen Faktor $\mathcal{O}(1000)$.

entsprechen [42, 43]. Das Ziel dieser Arbeit ist, an unterschiedlichen Observablen aufzuzeigen, daß disconnected Diagramme in Gittersimulationen grundsätzlich mit den diskutierten Techniken direkt bestimmt werden können. Diese Observablen sind: Der Pion-Nukleon σ -Term und die flavor-singlet axiale Kopplung des Protons.

Der Pion-Nukleon σ -Term $\sigma_{\pi N}$ ist ein Maß für die explizite chirale Symmetriebrechung der QCD [17]. Daß die chirale $SU(3)_V \times SU(3)_A$ Symmetrie auch spontan gebrochen ist, belegen die leichten pseudoskalaren Mesonen und das Fehlen entsprechender Paritätspartner im Teilchenspektrum. Experimentell kann $\sigma_{\pi N}$ aus der $\pi - N$ Streuamplitude bei niedrigen Energien bestimmt werden. Aktuelle Analysen der experimentellen Daten ergeben $\sigma_{\pi N} \simeq 45 MeV$ [67] bzw. $\sigma_{\pi N} = 48 \pm 10 MeV$ [19], die innerhalb der Fehler übereinstimmen.

Erste quenched Gittersimulationen bestimmten zunächst nur die connected Diagramme für $\sigma_{\pi N}$ [20, 21, 22]. Die resultierenden Werte $\sigma_{\pi N} \simeq 15 MeV$ bekräftigten im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen signifikante Beiträge von den disconnected Diagrammen. Folgende Simulationen mit größeren Computerkapazitäten führten neue Techniken (Volume-Source Methode [24] und stochastische Matrixinversionen [58]) in die Berechnung von disconnected Amplituden ein. Zwei vollständige Analysen (connected und disconnected) in der quenched Näherung ergaben $\sigma_{\pi N} = 43(7) MeV$ [24] bzw. $\sigma_{\pi N} = 50(3) MeV$ [23]. In der quenched Näherung werden die freien Quark-Antiquark Paare, welche die disconnected Amplituden bestimmen, im Pfadintegral durch eine Konstante approximiert, sodaß ein zusätzlicher systematischer Fehler in der Gitterrechnung auftritt. Hier ist die Notwendigkeit von Simulationen der vollen QCD mit dynamischen Quarks evident, und im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird $\sigma_{\pi N}$ auf den SESAM/ $T\chi L$ Gittern der vollen QCD mit disconnected und connected Diagrammen analysiert.

Die axiale Kopplung des Protons G_A^1 ist definiert als $s_\mu G_A^1 = \langle p, s | A_\mu^0(q) | p, s \rangle_{q^2=0}$ mit dem Proton-Spin s_μ und dem axialen flavor-singlet Strom A_μ^0 [27]. Innerhalb des Parton-Modells [28, 29] kann G_A^1 mit dem geringen Teil des Proton-Spins identifiziert werden, der von den Konstituentenquarks getragen wird. Ergebnisse der European Muon Collaboration (EMC) lösten mit einem sehr kleinen Wert für das erste Moment der Proton-Spin Strukturfunktion, $\Gamma_1^p = 0.126 \pm 0.018$ [73], die sogenannte Proton-Spin Krise aus. Im Gegensatz zu Vorhersagen aus Ellis-Jaffe QCD Summenregeln [74] sollte also nur ein sehr kleiner Teil des Proton-Spins von den Quarks getragen werden ($G_A^1 \simeq 0$). Diese Diskrepanz, die in neueren Experimenten jedoch kleiner geworden ist [78, 81, 79, 80, 75], kann mit signifikanten Beiträgen von disconnected Diagrammen aufgelöst werden [27]. In bisherigen quenched Gittersimulationen [25, 26] sind negative Beiträge von disconnected Diagrammen zu G_A^1 bereits nachgewiesen worden. In der vorliegenden Arbeit wird die axiale flavor-singlet Kopplung des Protons G_A^1 unter Berücksichtigung von connected wie auch disconnected Diagrammen in der vollen QCD bestimmt.

Die vorliegende Arbeit ist folgendermaßen gegliedert:

Nach der Einleitung werden im zweiten Kapitel die elementaren Konzepte einer gitterregulierten QCD vorgestellt, Notationen eingeführt und die Diskretisierung der gluonischen und fermionischen Wirkung diskutiert. Ferner werden die Simulationen der SESAM und $T\chi L$ Kollaboration in der vollen QCD kurz resümiert. Die daraus hervorgegangenen Eichfeldkonfigurationen mit dynamischen Wilson-Fermionen bilden die Basis aller weiteren Untersuchungen dieser Arbeit.

Das dritte, technisch orientierte Kapitel führt in die Methoden der stochastischen Matrixinversionen mit komplexem Z_2 Rauschen ein, welche erforderlich sind für die Bestimmung der disconnected Diagramme bei $\sigma_{\pi N}$ und der axialen Kopplung des Protons G_A^1 , aber ebenso Anwendung bei der topologischen Ladung Q_L finden. Basierend auf den Grundtechniken werden zwei verbesserte Methoden vorgestellt.

Für die Bestimmung der topologischen Ladung Q_L kommen im vierten Kapitel die verbesserten stochastischen Matrixinversionen zur Anwendung. Die Resultate werden mit den Ergebnissen für Q_L aus der feldtheoretische Definition auf gekühlten Konfigurationen verglichen. Eine ausreichend große Fluktuation von Q_L in den HMC Simulationen der vollen QCD ist notwendige Voraussetzung, wenn z.B. die axiale flavor-singlet Kopplung des Protons in Gittersimulationen bestimmt werden soll.

Das fünfte Kapitel beschreibt Gittertechniken für Mehrpunkt-Korrelationsfunktionen. Diese Techniken bilden die Grundlage für eine Bestimmung von connected und disconnected Diagrammen in den Matricelementen $\langle N|\bar{q}\Gamma q|N\rangle$.

Das sechste Kapitel analysiert die Beiträge von disconnected Diagrammen für die flavor-singlet Größe $\sigma_{\pi N}$. Zusammen mit den Beiträgen der connected Diagramme ergibt sich auf den SESAM Eichfeldkonfigurationen $\sigma_{\pi N} = 18(5) MeV$. Hierbei unterscheidet sich das Verhältnis der disconnected zu connected Amplituden signifikant von den quenched Analysen [24, 23], ein Befund der als Effekt dynamischer Fermionen interpretiert werden kann. Da soweit nur ein einziger Gitterabstand in den SESAM/ $T\chi L$ Simulationen realisiert wurde, können systematische Fehler (*finite a* Effekte) in der Gitterbestimmung von $\sigma_{\pi N}$ nicht vollständig abgeschätzt werden.

Im anschließenden siebten Kapitel werden bei der Bestimmung von der axialen Kopplung des Protons G_A^1 die zuvor gewonnenen Erkenntnisse auf eine weitere flavor-singlet Observable angewandt. Die Spin-Struktur in G_A^1 reduziert das Signal-Rausch Verhältnis in der disconnected Amplitude um etwa vier Größenordnungen gegenüber $\sigma_{\pi N}$. Bei der leichtesten SESAM Quarkmasse werden die Daten der $T\chi L$ Gitter in die disconnected Analyse eingeschlossen, und es ergibt sich für die axiale flavor-singlet Kopplung $G_A^1 = 0.21(12)$.

Das achte Kapitel der vorliegenden Arbeit faßt die Ergebnisse der Simulationen zusammen und zeigt die Möglichkeiten weiterführender Untersuchungen auf.

Vor dem Erscheinen dieser Arbeit sind die verbesserten Techniken der stochastischen Matrixinversionen und die wichtigsten Resultate bereits veröffentlicht worden:

- Verbesserte stochastische Matrixinversionen [35, 36]
- Der Pion-Nukleon σ -Term [37, 38]
- Axiale Kopplung des Protons G_A^1 [39]
- Die topologische Ladung Q_L und die Dekorrelation topologischer Größen mit dem HMC Algorithmus [40, 41]

Allgemeine Informationen zu den Simulationen und weitere Ergebnisse der SESAM bzw. $T\chi L$ Kollaboration finden sich zusätzlich in [42, 43, 44, 45].

Eine ausführliche Abhandlung über flavor-singlet Phänomene in der gitterregulierten QCD stellt die Habilitationsschrift von Stephan Güsken "Flavor Singlet Phenomena in Lattice QCD" [1] dar.

Kapitel 2

Gitterregulierte QCD

In diesem einführenden Kapitel wird die QCD als eine gitterregulierte Eichtheorie mit dynamischen Fermionen vorgestellt. Dafür werden zuerst die Grundgleichungen und Notationen bereitgestellt und die Übertragung einer Kontinuumstheorie in eine euklidische Gittertheorie skizziert. Eine detaillierte Einführung findet sich z.B. in [12, 47]. Weiterhin werden die Simulationen der SESAM und $T\chi L$ Kollaboration vorgestellt, in denen mit dem Hybrid Monte-Carlo (HMC) Algorithmus in einem Großcomputerexperiment dynamische Eichfeldkonfigurationen erzeugt wurden. Dieser Datenbestand bildet die Basis der folgenden Untersuchungen.

2.1 QCD im Kontinuum

2.1.1 Symmetrien der Lagrangedichte

Klassische und quantisierte Feldtheorien bilden ein effektives Werkzeug für die Beschreibung von elementaren Wechselwirkungen. Den Ausgangspunkt stellt eine Lagrangedichte $\mathcal{L}(\psi(x), \partial_\mu \psi(x))$ in den Feldern der Theorie dar. Für ein freies Teilchen mit Spin und Masse m lautet die Lagrangedichte [48]:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(x)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x). \quad (2.1)$$

Die resultierende Wirkung

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(\psi(x), \partial_\mu \psi(x)) \quad (2.2)$$

wird genau dann minimal, wenn die Dirac-Gleichung erfüllt ist.

Gleichung 2.1 beschreibt Fermionen ohne zusätzliche Wechselwirkung. Mit der Forderung nach lokaler Eichinvarianz, völlig analog zur Elektrodynamik oder Quantenelektrodynamik, werden Eichfelder eingeführt, die mit den entsprechenden Eichbosonen die Wechselwirkung induzieren. Dazu betrachtet man die Symmetrieeigenschaften von \mathcal{L} . Die Spinoren der drei Fermionenfelder ψ_q , entsprechend den Quarks

up, *down*, *strange* mit den Massen m_u , m_d und m_s , können zu einem Vektor zusammengefaßt werden:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_u(x) \\ \psi_d(x) \\ \psi_s(x) \end{pmatrix}, \quad m_q = \begin{pmatrix} m_u \\ m_d \\ m_s \end{pmatrix}. \quad (2.3)$$

Für $\psi(x)$ gelte unter der Eichtransformationen U :

$$\psi(x) \rightarrow U\psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x)U^{-1}. \quad (2.4)$$

U ist Element der nicht-abelschen Lie-Gruppe $SU(3)$ und kann dargestellt werden als

$$U = \exp\left(-ig\theta^a \frac{\lambda_a}{2}\right), \quad (2.5)$$

mit beliebigen Winkeln θ^a und den Generatoren der Lie-Algebra (Gell-Mann Matrizen) λ_a aus der Vertauschungsrelation

$$[\lambda_a, \lambda_b] = if_{ab}^c \lambda_c, \quad a = 1, \dots, 8. \quad (2.6)$$

f_{ab}^c sind die Strukturkonstanten der zugrundeliegenden nicht-abelschen Lie-Algebra. Unter der globalen Eichtransformation U ist Gleichung 2.1 invariant.

Die Forderung nach lokaler Invarianz ($\theta \rightarrow \theta(x); U = U(x)$) unter Gleichung 2.4 kann nur mit 8 zusätzlichen Eichfeldern $A_\mu(x) = A_\mu^a(x)\lambda_a/2$ realisiert werden, wenn die partielle Ableitung in ihre kovariante Form übergeht:

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = (\partial_\mu - igA_\mu(x)). \quad (2.7)$$

Mit der Kopplungskonstante g und dem Transformationsverhalten für die Eichfelder

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) - \lambda_a \partial_\mu \theta^a(x) \quad (2.8)$$

resultiert die Invarianz von

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(x)(i\gamma^\mu D_\mu - m_q)\psi(x) \quad (2.9)$$

unter lokalen $SU(3)$ Symmetrietransformationen.

Zur Einführung der Eichfelddynamik kann – analog zur Elektrodynamik – ein Feldstärketensor

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu} &= \frac{i}{g} [D_\mu, D_\nu] \\ &= \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig[A_\mu, A_\nu] \end{aligned} \quad (2.10)$$

definiert werden, dessen Spur eichinvariant ist und zu \mathcal{L} addiert wird. Für N_f explizit ausgeschriebene Quarkfelder $\psi_k(x)$ lautet die Lagrangedichte mit Wechselwirkung:

$$\mathcal{L} = \sum_{k=1}^{N_f} \bar{\psi}_k(x)(i\gamma^\mu D_\mu - m_k)\psi_k(x) - \frac{1}{2} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}. \quad (2.11)$$

Zusammenfassend gesagt beinhaltet die Theorie soweit N_f Fermionenfelder und die 8 Eichfelder $A_\mu^a(x)$ als Träger der Wechselwirkung. Aufgrund der nicht-abelschen Eichsymmetrie ist eine Selbstwechselwirkung der masselosen Vektorfelder zu erwarten. Im folgenden Schritt werden Quantenfluktuationen mittels der Pfadintegralformulierung und eine Diskretisierung der Felder eingeführt.

2.1.2 Pfadintegralformalismus

Zwei unterschiedliche Ansätze führen Quantenfluktuationen in eine klassische Feldtheorie ein:

Mit der 2. Quantisierung werden die Felder der Theorie in Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren überführt, die bestimmten Kommutationsregeln unterliegen. Dieser Zugang wird hier nicht weiter verfolgt. Eine Beschreibung der 2. Quantisierung findet sich z.B. in [48]. Im folgenden wird der Pfadintegralformalismus als Quantisierung von Feldtheorien diskutiert. Für eine detaillierte Einführung siehe z.B. [63].

Mit der Wirkung einer Feldtheorie

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(x) \quad (2.12)$$

kann nach einer Wick-Rotation zur euklidischen Zeit,

$$x_0 \rightarrow x'_0 = -ix_4, \quad iS \rightarrow -S^E, \quad (2.13)$$

formal ein statistisches System mit der Zustandssumme

$$Z_E = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}A e^{-S^E[\psi, \bar{\psi}, A]} \quad (2.14)$$

und dem Boltzmann-Faktor $\exp(-S^E)$ definiert werden. Physikalische Observablen \mathcal{O} können als Erwartungswerte in diesem Formalismus gemäß den Regeln der statistischen Physik abgeleitet werden:

$$\langle \mathcal{O}(\psi, \bar{\psi}, A) \rangle = \frac{1}{Z_E} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}A \mathcal{O}(\psi, \bar{\psi}, A) e^{-S^E[\psi, \bar{\psi}, A]}. \quad (2.15)$$

Speziell in der QCD ist die euklidische Wirkung definiert als

$$S_{QCD}^E = \int d^4x \left(\sum_{k=1}^{N_f} \bar{\psi}_k(x) (\gamma_\mu^E D_\mu + m_k) \psi_k(x) + \frac{1}{2} \text{Tr}[F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x)] \right) \quad (2.16)$$

mit den γ -Matrizen in euklidischer Form,

$$\gamma_4^E = \gamma^0, \quad \gamma_j^E = -i\gamma^j. \quad (2.17)$$

Für kontinuierliche Felder $\psi(x)$ und $A_\mu(x)$ hat das Pfadintegral nur eine symbolische Bedeutung, und erst mit einer Gitterregularisierung entstehen mathematisch wohldefinierte Ausdrücke.

2.2 QCD auf dem Gitter

Gegeben sei ein diskretes, äquidistantes, 4-dimensionales Gitter

$$G = [n = (n_1, n_2, n_3, n_4) | n_i = 1, \dots, L_i] \quad (2.18)$$

mit L_i Punkten in der zugehörigen Dimension und mit dem Gesamtvolumen $V = L_1 * L_2 * L_3 * L_4$. Der Abstand benachbarter Punkte sei für alle Richtungen a .

Kontinuierliche Größen sind in einer gitterregularisierten Theorie nur auf den zum Gitter gehörenden Punkten definiert, z.B.:

$$\psi(x) \rightarrow \psi(x_i) = \psi_i, \quad x_i = a * n_i. \quad (2.19)$$

Im Falle der QCD werden sowohl die drei räumlichen als auch die zeitliche Dimension diskretisiert, und es kann nur ein endlicher Bereich des physikalischen Impulsraumes dargestellt werden. Der endliche Gitterabstand a definiert dabei die obere Grenze (ultraviolett), und die endliche Anzahl der Gitterpunkte L_i die untere Grenze (infrarot) des Impulsspektrums. Nur im Kontinuumslimit, $L_i \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$ steht das vollständige Spektrum zur Verfügung. Dem Ansatz von Wilson folgend [10] wird zunächst der gluonische Teil der Wirkung S_{QCD} und anschließend der fermionische Teil diskretisiert.

2.2.1 Die diskrete gluonische Wirkung der QCD

Im Kontinuum ist die gluonische Wirkung, die nur die Vektorfelder $A_\mu(x)$ enthält, definiert als:

$$S_{gluon} = \int d^4x \frac{1}{2} \text{Tr}[F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x)]. \quad (2.20)$$

Für die Konstruktion eines entsprechenden Ausdrucks auf dem Gitter wird zunächst die Link-Variable $U_\mu(x)$ eingeführt. $U_\mu(x)$ verbindet den Gitterpunkt $x = a\hat{n}$ mit dem in μ Richtung benachbarten Punkt $x + a\hat{\mu}$:

$$U_\mu(x) = \mathcal{P} \left[\exp \left(-ig \int_{x+a\hat{\mu}}^x dy A_\mu(y) \right) \right] \quad (2.21)$$

mit der Kopplungskonstante g und dem zeitordnenden Operator \mathcal{P} . Für kleine Abstände a gilt näherungsweise:

$$U_\mu(x) \simeq 1 + iag A_\mu(x + \frac{1}{2}a\hat{\mu}) + \mathcal{O}(a^2). \quad (2.22)$$

Der kleinste, geschlossene Weg auf dem Gitter ist die sogenannte Plaquette, ein geschlossenes Viereck in der $\mu - \nu$ Ebene, welches von vier Link-Variablen gebildet wird:

$$\square_{\mu\nu}(x) = U_\mu(x) U_\nu(x + a\hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + a\hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x). \quad (2.23)$$

Wilson formierte aus den elementaren Plaquetten eine gluonische Gitterwirkung mit $\mathcal{O}(a)$ Genauigkeit, die im Kontinuumslimites S_{gluon} reproduziert:

$$\begin{aligned} S_W[U_\mu(x)] &= \beta \sum_{x,\mu>\nu} \left(1 - \frac{1}{3} \text{Re}(\text{Tr}[\square_{\mu\nu}(x)])\right) \\ &= \int d^4x \frac{1}{2} \text{Tr}[F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}] + \mathcal{O}(a^2) \end{aligned} \quad (2.24)$$

mit $\beta = 6/g^2$ für $N_f = 3$. Gleichung 2.24 stellt nur eine mögliche Diskretisierung von S_{gluon} dar. Allein die Forderung, daß im Kontinuumslimites S_{gluon} reproduziert werden muß, erlaubt unendlich viele, unterschiedliche Definitionen von $S_W[U_\mu(x)]$. Sogenannte verbesserte Wirkungen mit $\mathcal{O}(a^4)$ Genauigkeit können auf endlichen Gittern kleinere Diskretisierungsfehler erzwingen, wenngleich dadurch die Computersimulationen mehr Rechenzeit in Anspruch nehmen. Die Freiheit in der Wahl der Diskretisierung hat ihrerseits ein eigenes Forschungsgebiet innerhalb der Gittertheorien entstehen lassen. Das Spektrum reicht von verbesserten Wirkungen [49] bis zu sogenannten perfekten Wirkungen, die alle Diskretisierungsfehler bis zu einer bestimmten Ordnung unterdrücken [50].

2.2.2 Die diskrete fermionische Wirkung der QCD

Fermionen implizieren auf dem Gitter weitaus mehr Komplikationen als die gluonische Wirkung, die aus den elementaren Plaquetten $\square_{\mu\nu}(x)$ aufgebaut ist. Die euklidische, fermionische Wirkung im Kontinuum

$$S_f^E = \int d^4x \bar{\psi}(x) (\gamma_\mu^E D_\mu + m_q) \psi \quad (2.25)$$

enthält die kovariante Ableitung $D_\mu = (\partial_\mu - igA_\mu)$. Eine naive, symmetrische Diskretisierung von ∂_μ auf dem Gitter,

$$\partial_\mu \rightarrow d_\mu = \frac{1}{2} [\delta_{m,n+\hat{\mu}} - \delta_{m,n-\hat{\mu}}], \quad (2.26)$$

führt auf das bekannte Fermionen-Doppler Problem [46]. Anstatt einen fermionischen Freiheitsgrad zu repräsentieren, beinhaltet die naiv diskretisierte Wirkung

$$\begin{aligned} S_f^{naive} &= \frac{1}{2a} \sum_{x,\mu} [a^4 \bar{\psi}(x) \gamma_\mu (U_\mu(x) \psi(x+a\hat{\mu}) - U_\mu^\dagger(x-a\hat{\mu}) \psi(x-a\hat{\mu})) \\ &\quad + a^4 m_q \bar{\psi}(x) \psi(x)] \end{aligned} \quad (2.27)$$

2^d (in d Dimensionen) entartete Fermionen mit gleicher Masse, wie an den Polen im Quark-Propagator abgezählt werden kann. Unterschiedliche Ansätze für die Lösung des Fermionen-Doppler Problems wurden vorgeschlagen. Die bekanntesten stammen von Wilson [10] bzw. von Kogut und Susskind [51]. Wilsons Grundidee ist dabei folgende: Zusätzliche Terme in der Wirkung, die im Kontinuumslimites verschwinden,

unterdrücken die $2^d - 1$ unphysikalischen Fermionen-Doppler auf dem Gitter, brechen aber explizit die chirale Symmetrie der Lagrangedichte.

Die fermionische Wilson-Wirkung

$$S_f^W = - \sum_{x,\mu} a^4 \frac{r}{2a} \bar{\psi}(x) [U_\mu(x) \psi(x+a\hat{\mu}) - 2\psi(x) + U_\mu^\dagger(x-a\hat{\mu}) \psi(x-a\hat{\mu})] \quad (2.28)$$

fixiert die Fermionen-Doppler durch einen zusätzlichen Massenterm $m_q + 2r/a^{-1}$ mit dem Wilson-Parameter r . Gemeinsam mit der gluonischen Wirkung folgt:

$$\begin{aligned} S &= S_{gluon}^W + S_f^{naive} + S_f^W \\ &= S_{gluon}^W + \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) M_{x,y} \psi(y) \end{aligned} \quad (2.29)$$

mit der Wilson-Fermionenmatrix

$$M_{x,y} = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu=1}^4 [(r - \gamma_\mu) U_\mu(x) \delta_{x+a\hat{\mu},y} + (r + \gamma_\mu) U_\mu^\dagger(x-a\hat{\mu}) \delta_{x-a\hat{\mu},y}] \quad (2.30)$$

und dem Hoppingparameter $\kappa = (2am_q + 8r)^{-1}$, der die Quarkmasse m_q mit dem Wilson-Term verknüpft:

$$m_q a = \frac{1}{2\kappa} - 4r. \quad (2.31)$$

In der Theorie ohne Wechselwirkung gilt $m_q a = 0$ für $\kappa = 1/8r = \kappa_c$ mit dem kritischen Hopping-Parameter κ_c . Zumeist wird in Simulationen $r = 1$ gewählt, sodaß $\kappa = \kappa_c = 1/8$ gerade $m_q a = 0$ entspricht. In der wechselwirkenden Theorie verschiebt sich der kritische Hoppingparameter, weil der zusätzlich eingeführte Massenterm in der Wilson-Wirkung vom Gitterabstand a abhängt, und κ_c muß aus den Simulationen bestimmt werden.

2.2.3 Die quenched Näherung

Bisher wurde eine diskrete Wirkung auf einem euklidischen Gitter definiert, die einerseits für $a \rightarrow 0$ und $V \rightarrow \infty$ die Kontinuumswirkung reproduziert und andererseits die auftretenden Fermionen-Doppler mit zusätzlichen Massentermen beseitigt.

Die Wilson-Wirkung S^W definiert das Boltzmann-Gewicht in einem statistischen System, das mit der Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S^W[\bar{\psi},\psi,U]} \quad (2.32)$$

beschrieben wird. Integriert wird über alle möglichen Feldkonfigurationen $\bar{\psi}$, ψ und U unter Berücksichtigung, daß die Fermionenfelder Grassmann-Variablen sind und einfachen (Anti-)Vertauschungsrelationen gehorchen [46]. Observablen werden in diesem statistischen System bestimmt durch

$$\langle \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, U) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, U) e^{-S^W[\bar{\psi},\psi,U]}. \quad (2.33)$$

Eine unmittelbare Auswertung von Gleichung 2.32 mit Monte-Carlo Integrationen ist aufgrund der Grassmann-Variablen nicht möglich, allerdings erlaubt die quadratische Form von ψ in 2.32 (Gauss-Integral) die Reduktion auf gluonische Freiheitsgrade im Exponenten:

$$\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_W[\bar{\psi}, \psi, U]} = \int \mathcal{D}U \det(M[U])^{N_f} e^{-S_{gluon}^W[U]}. \quad (2.34)$$

Im Gegensatz zur verbleibenden gluonischen Wirkung S_{gluon}^W ist die Determinante der Fermionenmatrix eine nicht-lokale Größe. Die computergestützte Berechnung von $\det(M[U])$ in einer Gittersimulation erhöht das Rechenzeitaufkommen gegenüber einer rein gluonischen Simulation um einen Faktor $\mathcal{O}(1000)$, weswegen in der quenched Näherung $\det(M[U]) = 1$ gesetzt wird und damit Vakuumpolarisationen in Form von freien Quark-Antiquark Paaren unterdrückt werden [13, 14].

Die quenched Näherung führt im QCD Spektrum zu Abweichungen von weniger als 10% von den experimentellen Daten, wenn entsprechende Massenverhältnisse gebildet werden [15].

2.3 Die SESAM und $T\chi L$ Gittersimulationen

Dynamische Fermionen können mit dem Hybrid Monte-Carlo Algorithmus (HMC) [52] in Gittersimulationen implementiert werden. In der praktischen Anwendung kombiniert der HMC einen Metropolis-Algorithmus mit Standard-Molekulardynamik. Eine Einführung und technische Details finden sich beispielsweise in [53, 40].

Im Rahmen der SESAM¹ und $T\chi L$ ² Kollaboration wurden umfangreiche HMC Simulationen mit zwei entarteten dynamischen Wilson-Quarks durchgeführt [45]. Die rechenzeitintensiven Simulationen mit dynamischen Quarks erlaubten bisher nur einen Wert für die Kopplungskonstante, $\beta = 5.6$, bei den SESAM ($16^3 \times 32$ Gitter) und $T\chi L$ ($24^3 \times 40$ Gitter) Konfigurationen, was einer Gitterauflösung von etwa $a_p^{-1} \simeq 2.3 \text{ GeV}$, also $a \simeq 0.1 \text{ fm}$ entspricht. Folglich ist eine Analyse der Skalenabhängigkeit mit den vorliegenden Daten für einen einzigen Gitterabstand nicht möglich. Weiterführende Simulationen bei $\beta = 5.7$ ($T\chi L$ Gitter) und bei $\beta = 5.5$ (SESAM Gitter) sind bereits gestartet worden. Die neuen Simulationen ermöglichen in Zukunft Skalenanalysen für physikalische Observablen.

Die Quarkmassen für die SESAM Konfigurationen variieren zwischen $m_\pi/m_\rho = 0.833(3) \dots 0.686(11)$ [45]. Die Parameter der $T\chi L$ Gitter wurden als Fortsetzung der SESAM Simulationen konzipiert und haben einen gemeinsamen Schnittpunkt bei $\kappa = 0.1575$. Eine weitere, leichtere Quarkmasse ($\kappa = 0.158$) wurde ebenfalls auf den großen Gittern gerechnet, um näher zum chiralen Limes zu gelangen ($m_q \rightarrow 0$). Maßgeblich für die Wahl der Parameter waren vorausgehende, explorative Arbeiten mit dem HMC Algorithmus [54].

¹Sea Quark Effects in Spectrum And Matrix Elements

² $T\chi L$: Towards the chiral limit

Pro Quarkmasse wurden 6000 Trajektorien mit dem HMC generiert. Dabei wurden jeweils 1000 Trajektorien der Thermalisierungsphase zugeordnet und verworfen. Autokorrelationsanalysen der SESAM und $T\chi L$ Kollaboration belegen, daß ein Ensemble statistisch unabhängiger Eichfeldkonfigurationen bei einer Separation von 25 Trajektorien in der Monte-Carlo Zeit entsteht [40]. Folglich verbleiben 200 statistisch unabhängige Konfigurationen pro Quarkmasse. Alle Eichfeldkonfigurationen wurden zur Auswertung und Analyse am ZAM³ (Forschungszentrum Jülich) gespeichert und archiviert.

Sämtliche Simulationen wurden auf Quadrics APE100 Maschinen an den Standorten Rom bzw. Cassaccia und Zeuthen durchgeführt. Technische Details und Rechenleistungen der Maschinen sind in Tabelle 2.1 zusammengetragen. Als Inverter für die dünnbesetzten Matrizen wurde ein stabilisierter *Conjugate Gradient* Algorithmus mit *even/odd* bzw. SSOR Präkonditionierung verwendet. Die grundlegenden Inversions-Techniken werden z.B. in [55] erklärt; SSOR Präkonditionierung und weitere Details finden sich in [56]. Bei der leichtesten Quarkmasse erzielte die HMC Implementierung auf APE/Quadrics eine Maschineneffizienz von über 60% !

Bezeichnung	Prozessoren	Topologie	GFlops	Standort
QH1	128	8*4*4	6.4	ENEA ^a , IFH ^b
QH2	256	8*8*4	12.8	INFN ^c , IFH
QH4 (tower)	512	8*8*8	25.6	IFH, ENEA

Tabelle 2.1: Quadrics/APE100 Rechner für die SESAM und $T\chi L$ Produktionen. Standorte der Produktionen: ^a ENEA, *Ente per le Nuove Tecnologie, l'Energia e l'Ambiente*, Cassaccia, Italien; ^b IFH, *Deutsches Elektronen Synchrotron Zeuthen*, Zeuthen; ^c INFN, *Istituto Nazionale di Fisica Nucleare*, Rom, Italien

³Zentrum für angewandte Mathematik

Kapitel 3

Stochastische Matrixinversionen

Dieses Kapitel dient der Einführung in die Methoden der stochastischen Matrixinversionen. Ausgehend von einer physikalischen Motivation werden die grundlegenden Techniken vorgestellt und am Beispiel des chiralen Kondensats $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ auf ihre Anwendbarkeit hin untersucht. Im zweiten Teil des Kapitels werden neue, verbesserte Ansätze vorgestellt: die spin-explizite und die neu entwickelte Rauschsubtraktions-Methode. Ferner wird geprüft, inwieweit die größeren Gitter der $T\chi L$ Kollaboration den statistischen Fehler in stochastischen Matrixinversionen reduzieren. Die weiter entwickelten Techniken werden in den folgenden Kapiteln dieser Arbeit für die Berechnung von flavor-singlet Matrixelementen benötigt.

3.1 Anwendung in der flavor-singlet Physik

Flavor-singlet Matrixelemente und topologische Strukturen sind unmittelbar mit den Eigenschaften des QCD Vakuums verbunden. Sogenannte disconnected Diagramme repräsentieren beispielsweise die Korrelation eines Protons mit einem aus dem QCD Vakuum erzeugten Quark-Antiquark-Paar $\bar{q}q$ [38, 39]. Die Berücksichtigung aller nicht-lokalen, geschlossenen Quark-Loops in diesen Diagrammen führt bei Wilson-Fermionen auf die Berechnung der vollständigen Spur über die inverse Matrix M^{-1} :

$$Tr(\Gamma M^{-1}) = \frac{1}{12V} \sum_x \sum_{\mu=1}^4 \sum_{\alpha=1}^3 (\Gamma M^{-1})_{(x,\mu,\alpha);(x,\mu,\alpha)}. \quad (3.1)$$

Hierbei ist M die Fermionenmatrix, Γ eine beliebige Matrix im Spin-Unterraum, und die Spur wird über alle Dirac- und Farb-Indizes, sowie Raum- und Zeitpunkte berechnet und auf dieses Volumen normiert. Der Faktor 12 beinhaltet also drei Farb- und vier Spin-Freiheitsgrade. Unterschiedliche Γ Kontraktionen definieren die Spin-Struktur des $\bar{q}q$ Loops.

Konventionelle Krylov-Löser für dünn besetzte Matrizen, beispielsweise der Conjugate Gradient (CG) [55], müssen für die Berechnung von Gleichung 3.1 genau

12V mal angewendet werden, weil die iterativen Algorithmen nur eine Spalte, bzw. eine Reihe der inversen Matrix M^{-1} berechnen. Wenn Matrizen der Dimension $n \sim 10^6, 10^7$ mit Krylov-Lösern vollständig invertiert werden sollen, werden Gittersimulationen selbst auf den derzeit leistungsfähigsten parallelen Supercomputern zu aufwendig [57].

Stochastische Matrixinversionen dagegen liefern einen Schätzwert für $Tr(\Gamma M^{-1})$, der mit zunehmender Anzahl an Inversionen genauer wird. Die entsprechenden Grundtechniken werden im folgenden vorgestellt. Ursprünglich wurden stochastische Matrixinversionen in Gittersimulationen der QCD für die Berechnung des chiralen Kondensats $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ eingeführt [58].

3.2 Theoretische Grundlagen

Im folgenden sei M eine komplexe Matrix der Dimension n . Gegeben sei ein Ensemble von komplexen Quellen η_i mit $i = 1, \dots, N$, ebenfalls der Dimension n . Die Komponenten der Vektoren werden durch hochgestellte Indizes beschrieben. Erwartungswerte sind definiert als

$$\langle \eta^j \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i^j. \quad (3.2)$$

Alle Komponenten der Vektoren seien normiert:

$$\langle \eta^j \eta^j \rangle = 1. \quad (3.3)$$

Ferner soll im statistischen Grenzwert $N \rightarrow \infty$ gelten:

$$\langle \eta^i \eta^j \rangle = 0, \quad i \neq j. \quad (3.4)$$

Die Bedingungen sind erfüllt, wenn beispielsweise die Komponenten der Vektoren ein komplexes Z_2 Rauschen oder ein Gaußsches Rauschen tragen.

Für jeden Vektor η_i wird das lineare Gleichungssystem

$$M x_i = \eta_i \quad (3.5)$$

mit Standardmethoden gelöst. Die Lösungsvektoren x_i werden in einem iterativen Prozeß (z.B. CG) bis zu einer vorgegebenen Genauigkeit berechnet und es gilt:

$$x^i = \sum_{k=1}^n M_{i,k}^{-1} \eta^k. \quad (3.6)$$

Es folgt dann:

$$\begin{aligned} \langle \eta^i x^i \rangle &= \langle \eta^j \sum_k M_{i,k}^{-1} \eta^k \rangle \\ &= \sum_k M_{i,k}^{-1} \langle \eta^j \eta^k \rangle \\ &= M_{i,j}^{-1} \langle \eta^j \eta^j \rangle + \sum_{k \neq j} M_{i,k}^{-1} \langle \eta^j \eta^k \rangle \\ &= M_{i,j}^{-1} \quad \text{für } N \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Im Prinzip können mit stochastischen Matrixinversionen alle Elemente einer inversen Matrix berechnet werden. Hierbei hängt die Genauigkeit der Schätzungen von der Anzahl N der Rauschvektoren und der Beschaffenheit der Matrix M ab.

M sei jetzt die komplexe Wilson-Fermionenmatrix für die SESAM/ $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen, die zwei entartete dynamische Quarks enthalten ($r = 1$):

$$M_{x,y} = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \left[(r - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta_{x+a\hat{\mu},y} + (r + \gamma_{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(x - a\hat{\mu}) \delta_{x-a\hat{\mu},y} \right] \quad (3.8)$$

mit der Quarkmasse m in Gittereinheiten

$$ma = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c} \right), \quad (3.9)$$

dem Hopping-Parameter κ und dem Gitterabstand a . In [37] wurde gezeigt, daß komplexes Z_2 Rauschen bei $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ kleinere statistische Fehler impliziert als Gaußsches Rauschen. Alle weiteren Untersuchungen verwenden daher komplexe Z_2 Rauschvektoren.

3.2.1 Test mit der freien Konfiguration

Als erstes wird die Methode der stochastischen Matrixinversion anhand der freien Konfiguration,

$$U_{\mu}(x) = 1, \quad (3.10)$$

überprüft, weil in diesem Fall exakte Ergebnisse für $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ zur Verfügung stehen. Das chirale Kondensat ist auf dem Gitter definiert als [58]:

$$\langle \bar{\psi}\psi \rangle_U = \frac{1}{12V} \text{Tr}(M^{-1}). \quad (3.11)$$

Im Spin-Unterraum rotierte Observablen werden später ebenfalls benötigt:

$$\langle \bar{\psi}\Gamma\psi \rangle_U = \frac{1}{12V} \text{Tr}(\Gamma M^{-1}) \quad (3.12)$$

mit den unterschiedlichen Spin-Rotationen $\Gamma = \gamma_5, \gamma_1\gamma_5, \gamma_2\gamma_5, \gamma_3\gamma_5$. Die Konvention der γ Matrizen ist im Anhang aufgeführt. Im weiteren Verlauf des Kapitels wird stets nur der Realteil der unterschiedlichen Observablen betrachtet.

In Bild 3.1 ist die stochastische Schätzung von $\langle \bar{\psi}\psi \rangle_U$ mit 400 komplexen Z_2 Rauschvektoren η_i auf der freien Konfiguration ($16^3 \times 32$ Gitter, $\kappa = 0.124$) mit statistischen Fehlern im Vergleich zum exakten Wert für $\langle \bar{\psi}\psi \rangle_U$ dargestellt. Sehr deutlich läßt sich das Plateau erkennen, das sich nach ca. 200 Inversionen ausbildet und einen sehr guten Schätzwert für das chirale Kondensat liefert. Bild 3.2 zeigt $\text{Tr}(\gamma_5 M^{-1})$ bei gleichen Parametern. Gemäß der theoretischen Erwartung¹ für eine freie Konfiguration findet man – innerhalb des Fehlerbandes – ein mit Null verträgliches Resultat.

¹ $\text{Tr}(\gamma_5 M^{-1})$ kann mit der topologischen Ladung Q der Konfiguration U identifiziert werden. Eine freie Konfiguration hat stets $Q = 0$, siehe dazu Kapitel 4.

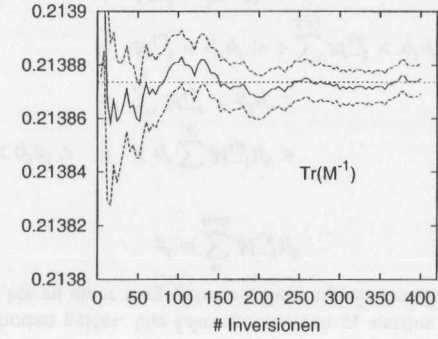


Abbildung 3.1: Das chirale Kondensat $\langle \bar{\psi}\psi \rangle_U \sim \text{Tr}(M^{-1})$ mit Fehlerband (obere und untere Linie) auf der freien Konfiguration (komplexes Z_2 Rauschen, $16^3 \times 32$ Gitter, $\kappa = 0.124$) und der exakte Wert für $\langle \bar{\psi}\psi \rangle_U$ (horizontale Linie). Die Anzahl der Inversionen entspricht N .

Bild 3.3 zeigt, wie der statistische Fehler des Mittelwertes

$$\frac{\sigma}{\sqrt{N}} = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} \quad (3.13)$$

verläuft, eingezeichnet für die Spin-Kombinationen $\Gamma = 1$ (skalar), $\Gamma = \gamma_5$, $\Gamma = \gamma_1\gamma_5$ und $\Gamma = \gamma_3\gamma_5$. Auffallend ist hierbei, daß der statistische Fehler für die skalare Spur und für $\Gamma = \gamma_3\gamma_5$ deutlich kleiner ist als bei den anderen Größen. Grund dafür sind die großen Kontaktterme (Diagonalelemente) in M^{-1} , welche in den Fehler für nicht-diagonale Elemente eingehen. Auf dieses Phänomen wird im folgenden Abschnitt genauer eingegangen, und zwei Verbesserungen werden diskutiert.

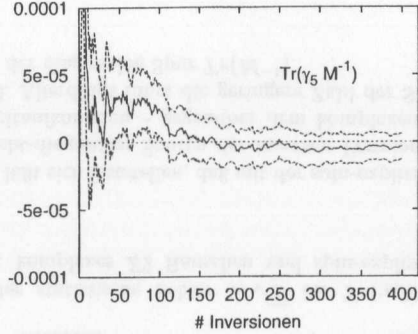


Abbildung 3.2: $Tr(\gamma_5 M^{-1})$ auf der freien Konfiguration (komplexes Z2 Rauschen, $16^3 \times 32$ Gitter, $\kappa = 0.124$).

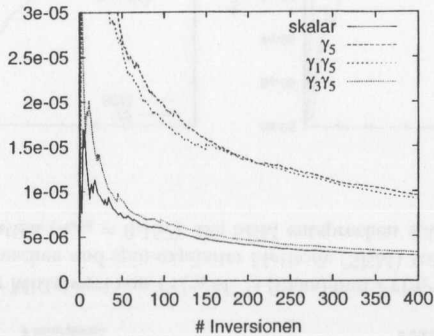


Abbildung 3.3: Der statistische Fehler σ/\sqrt{N} für unterschiedliche Kombinationen Γ im Spin-Unterraum (komplexes Z2 Rauschen, $16^3 \times 32$ Gitter, $\kappa = 0.124$) im freien Fall.

3.3 Verbesserte stochastische Matrixinversionen

Ausgehend von dem Standardverfahren der stochastischen Matrixinversionen werden nun zwei Varianten vorgestellt, die den statistischen Fehler der geschätzten Größen reduzieren können. Weiterhin wird ein komplexes Z2 Rauschen für die Inversionen benutzt. Damit die Effizienz verbesserter stochastischer Matrixinversionen bei leichten Quarkmassen, wie sie in Gittersimulationen tatsächlich verwendet werden, beurteilt werden kann, dienen nunmehr Eichfeldkonfigurationen der SESAM/ $T\chi L$ Kollaboration als Grundlage.

3.3.1 Die spin-explizite Methode

Zum statistischen Fehler bei der Bestimmung von $Tr(M_{i,i}^{-1})$ tragen auch die nicht-geschlossenen Loop-Terme bei, die erst im Grenzwert $N \rightarrow \infty$ ($\langle \eta^i \eta^j \rangle = \delta_{i,j}$) vollständig unterdrückt sind:

$$\sigma(M_{i,i}^{-1}) \sim \sum_{k \neq i} M_{i,k}^{-1} \langle \eta^i \eta^k \rangle. \quad (3.14)$$

Für die Wilson-Fermionenmatrix mit den gegebenen Parametern gilt stets:

$$Tr(M_{i,i}^{-1}) \gg Tr(M_{i,j}^{-1}), \quad i \neq j. \quad (3.15)$$

Wenn nun Elemente von $M_{i,j}^{-1}$ geschätzt werden sollen, die nicht auf der Diagonalen liegen ($i \neq j$), gehen auch die großen Diagonalelemente $M_{i,i}^{-1}$ zusätzlich in den statistischen Fehler ein:

$$\sigma(M_{i,j}^{-1}) \sim M_{i,i}^{-1} \langle \eta^i \eta^j \rangle. \quad (3.16)$$

Folglich haben Ausdrücke der Form

$$Tr(\Gamma M^{-1}), \quad \Gamma = \gamma_5, \gamma_1 \gamma_5 \quad (3.17)$$

größere statistische Fehler als beispielsweise $Tr(M_{i,i}^{-1})$ (siehe Bild 3.3).

Bei der spin-expliziten Methode (SEM) werden exakte Inversionen im Spin-Unterraum durchgeführt. Das komplexe Z2 Rauschen wird also nur auf jeweils eine Spin-Komponente gesetzt. Dadurch erhöht sich der Inversionsaufwand um einen Faktor 4 (400 Z2 Inversionen entsprechen gerade 100 SEM Inversionen). Auf der anderen Seite tragen nur ein Viertel der nicht-geschlossenen Terme zum statistischen Fehler bei. Bild 3.4 veranschaulicht die Wirkung von SEM gegenüber dem komplexen Z2 Rauschen. Dargestellt ist die Schätzung nicht-diagonaler Spuren $\Gamma = \gamma_5, \gamma_1 \gamma_5$ auf einer SESAM Konfiguration ($\kappa_{sea} = 0.157$), wobei die Anzahl der Inversionsschritte bei SEM für den direkten Vergleich mit einem Faktor 4 reskaliert wurden. Ganz deutlich sind die geringeren Fluktuationen im Mittelwert zu erkennen, wenn SEM anstatt Z2 Rauschen angewendet wird (Bild 3.4). Der statistische Fehler des Mittelwertes σ/\sqrt{N} von $Tr(\gamma_5 M^{-1})$ ist in Bild 3.5 aufgezeichnet. Die spin-explizite Methode reduziert σ/\sqrt{N} etwa um einen Faktor 2. Allerdings wächst der Fehler bei $Tr(M^{-1})$ an, wie in Bild 3.5 rechts zu erkennen ist.

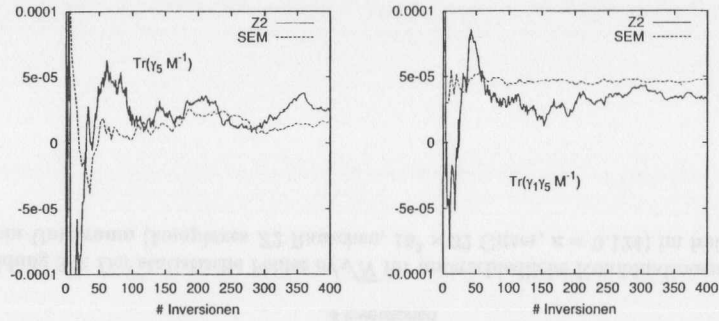


Abbildung 3.4: Der Mittelwert von $Tr(\gamma_5 M^{-1})$ (links) und $Tr(\gamma_1 \gamma_5 M^{-1})$ (rechts) mit komplexem Z_2 Rauschen und spin-expliziter Methode (SEM) auf einer individuellen SESAM Konfiguration ($\kappa_{sea} = 0.157$). Bei SEM entsprechen 400 Inversionen genau 100 Quellen.

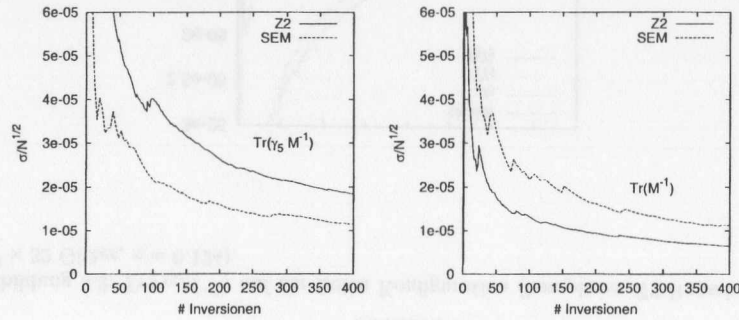


Abbildung 3.5: Der statistische Fehler σ/\sqrt{N} für $Tr(\gamma_5 M^{-1})$ (links) und für $Tr(M^{-1})$ (rechts): komplexes Z_2 Rauschen und spin-explizite Methode (SEM), $\kappa_{sea} = 0.157$.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß mit der spin-expliziten Methode der statistische Fehler nicht-diagonaler Spuren der inversen Fermionenmatrix M^{-1} – bei gleichem Rechenzeitaufkommen – gegenüber dem komplexen Z_2 Rauschen deutlich reduziert wird. Allerdings führt die geringere Zahl der Schätzungen zu einem größeren Fehler in der diagonalen Spur $Tr(M^{-1})$.

3.3.2 Die Rauschsubtraktionsmethode

Die Elemente von $M_{i,j}^{-1}$, die nicht auf der Diagonalen liegen ($i \neq j$), sind grundsätzlich schwieriger mit stochastischen Methoden zu schätzen, weil die vergleichsweise großen Kontaktterme $M_{i,i}^{-1}$ zum statistischen Fehler σ/\sqrt{N} beitragen und erst im Grenzwert $N \rightarrow \infty$ vollständig unterdrückt werden (siehe letzten Abschnitt). Mit der spin-expliziten Methode konnte die Schätzung beispielsweise für $Tr(\gamma_5 M^{-1})$ bereits verbessert werden. Gleichzeitig vergrößerte sich aber der Fehler für $Tr(M^{-1})$. Dieser Makel kann mit der Rauschsubtraktionsmethode vermieden werden.

Die Kontaktterme $M_{i,i}^{-1}$ können selbst mit stochastischen Matrixinversionen nach verhältnismäßig wenigen Inversionen relativ genau abgeschätzt werden. Diesen Vorteil nutzt die Rauschsubtraktionsmethode (RSM) aus, indem die Schätzung im Fall $i \neq j$ abgeändert wird zu:

$$\langle \eta^j x^i \rangle^{RSM} = M_{i,j}^{-1} \langle \eta^j \eta^i \rangle + \sum_{k \neq j} M_{i,k}^{-1} \langle \eta^j \eta^k \rangle - E(M_{i,i}^{-1}) \langle \eta^j \eta^i \rangle. \quad (3.18)$$

$E(M_{i,i}^{-1})$ ist der aktuelle Schätzwert für $M_{i,i}^{-1}$, der mit zunehmender Anzahl an Quellen immer genauer wird. Die modifizierte Schätzung in Gleichung 3.18 geht für $N \rightarrow \infty$ in die herkömmliche Schätzung (Gleichung 3.7) über, weil

$$E(M_{i,i}^{-1}) \langle \eta^j \eta^i \rangle \rightarrow 0 \quad (3.19)$$

für $N \rightarrow \infty$ und $i \neq j$.

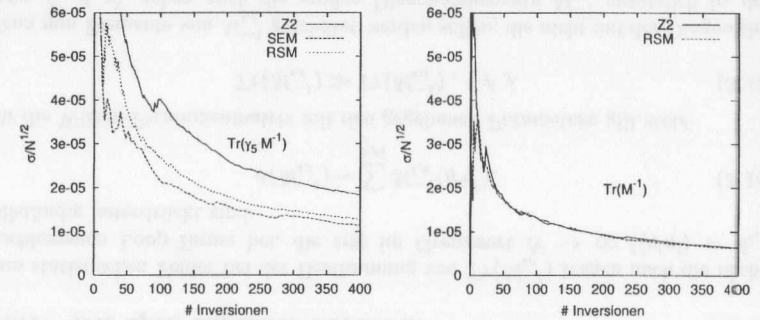


Abbildung 3.6: Der statistische Fehler σ/\sqrt{N} für $Tr(\gamma_5 M^{-1})$ (links) bzw. für $Tr(M^{-1})$ (rechts) mit komplexem Z_2 Rauschen und RSM auf einer SESAM Konfiguration ($\kappa_{sea} = 0.157$).

In Bild 3.6 (links) ist dargestellt, wie RSM den statistischen Fehler σ/\sqrt{N} für die nicht-diagonale Spur $Tr(\gamma_5 M^{-1})$ um einen Faktor 2 reduziert, während der Fehler von $Tr(M^{-1})$ – im Gegensatz zur spin-expliziten Methode – unverändert bleibt (Bild 3.6 rechts). Zusammenfassend läßt sich sagen: RSM wirkt als Rauschfilter bei nicht-diagonalen Spuren, aber ohne den Fehler der diagonalen Spuren zu vergrößern.

3.3.3 Rauschunterdrückung mit größeren Gittern

Als weitere, naheliegende Methode der Rauschunterdrückung bei stochastischen Matrixinversionen kann mit den $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen der Einfluß größerer Gitter, das sogenannte *Self Averaging*, untersucht werden.

In Bild 3.7 ist hierfür der statistische Fehler auf jeweils 10 Eichfeldkonfigurationen nach 400 Inversionen mit komplexen Z2 Rauschen bei $\kappa_{sea} = 0.156$ und $\kappa_{sea} = 0.1575$ eingetragen. Man sieht, daß gegenüber den SESAM Konfigurationen ($16^3 \times 32$ Gitter) der Fehler auf einem $T\chi L$ $24^3 \times 40$ Gitter durchschnittlich halbiert wird!

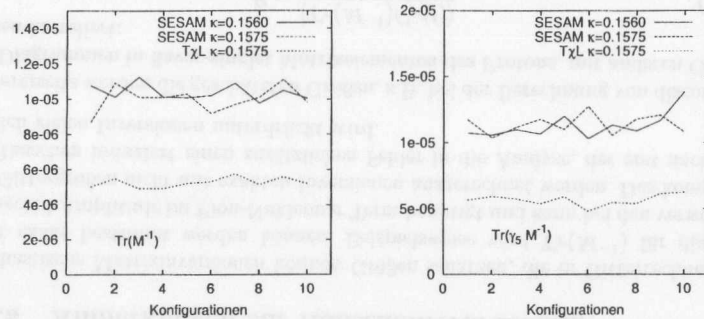


Abbildung 3.7: Der statistische Fehler σ/\sqrt{N} für $Tr(M^{-1})$ (links) und $Tr(\gamma_5 M^{-1})$ (rechts) auf 10 SESAM bzw. $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen nach 400 Inversionen (komplexes Z2 Rauschen). Für die SESAM Konfigurationen sind zwei κ_{sea} Werte eingezeichnet.

Für die Volumina beider Gitter gilt näherungsweise:

$$\frac{V_{T\chi L}}{V_{SESAM}} = \frac{24^3 * 40}{16^3 * 32} \simeq 4. \quad (3.20)$$

Erwartungsgemäß verkleinert sich der statistische Fehler σ/\sqrt{N} bei gleicher Quarkmasse $\kappa_{sea} = 0.1575$ wie $1/\sqrt{V}$.

3.3.4 Korreliertes Rauschen

In den vorangehenden Abschnitten stellte sich heraus, daß die Schätzungen von $Tr(\gamma_1 \gamma_5 M^{-1})$ oder $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ in der Größenordnung 10^{-5} liegen, obwohl der statistische Fehler demjenigen der skalaren Größe $Tr(M^{-1})$ entspricht, deren Mittelwert bei $\mathcal{O}(1)$ liegt (s. Bild 3.4 und Bild 3.5). Dementsprechend reduziert sich das Signal-zu-Rausch Verhältnis um mindestens vier Größenordnungen, wenn beispielsweise $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ mit stochastischen Matrixinversionen bestimmt werden soll. Der Grund dafür liegt in der Spin-Struktur der Observablen:

$$Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1}) = i Tr \left(\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} M^{-1} \right). \quad (3.21)$$

Die Konvention für die γ Matrizen ist im Anhang aufgeführt. Im Gegensatz zu der skalaren Spin-Struktur in $Tr(M^{-1})$, bei der alle Spin-Komponenten aufsummiert werden, wird in Gleichung 3.21 eine Differenz in den Komponenten gebildet. Diese Differenzbildung reduziert das Signal-zu-Rausch Verhältnis in $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ um etwa vier Größenordnungen.

In der späteren Analyse der axialen flavor-singlet Kopplung des Protons G_A^1 wird $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ auf allen Eichfeldkonfigurationen benötigt. Hier erwartet man größere statistische Fehler und schwächere Signale für die entsprechenden disconnected Amplituden als beim Pion-Nukleon Sigma-Term, für den die skalare Größe $Tr(M^{-1})$ geschätzt werden muß.

Um den statistischen Fehler in Observablen mit einer Differenz in der Spin-Struktur zu verringern, kann korreliertes Rauschen eingesetzt werden. Speziell für Wilson-Fermionen gilt für alle Diagonalelemente von M^{-1} im komplexen Spin-Unterraum:

$$\begin{aligned} Re(M_{x,\alpha=1;x,\alpha=1}^{-1}) &= +Re(M_{x,\alpha=3;x,\alpha=3}^{-1}) \\ Im(M_{x,\alpha=1;x,\alpha=1}^{-1}) &= -Im(M_{x,\alpha=3;x,\alpha=3}^{-1}) \\ Re(M_{x,\alpha=2;x,\alpha=2}^{-1}) &= +Re(M_{x,\alpha=4;x,\alpha=4}^{-1}) \\ Im(M_{x,\alpha=2;x,\alpha=2}^{-1}) &= -Im(M_{x,\alpha=2;x,\alpha=2}^{-1}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Beim korrelierten Rauschen werden die Quellen so gewählt, daß die Symmetrien in Gleichung 3.22 automatisch erfüllt sind, indem nicht auf allen Spin-Komponenten unabhängiges komplexes Z2 Rauschen gesetzt wird. Korreliertes Rauschen ist äquivalent zu der Spin-expliziten Methode, wenn nur die ersten beiden Spin-Komponenten geschätzt werden, und die verbleibenden Komponenten aus Gleichung 3.22 abgeleitet werden. Dadurch verringert sich der Inversionsaufwand um einen Faktor 2.

In Bild 3.8 ist die Schätzung von $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ auf einer individuellen SESAM Eichfeldkonfiguration ($\kappa_{sea} = 0.157$, $\kappa_{loop} = 0.1513$) mit reellem korreliertem Z2 Rauschen dargestellt. Im Gegensatz zu $Tr(M^{-1})$ ist die Schätzung für $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ selbst nach $\mathcal{O}(100)$ Inversionen noch nicht signifikant von Null verschieden. Es werden mindestens $\mathcal{O}(1000)$ Inversionen pro Eichfeldkonfiguration benötigt, und dies läßt sich mit aktuellen Computerressourcen kaum realisieren. Die relativ großen statistischen Fehler bei $\mathcal{O}(100)$ Inversionen in $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ werden in der G_A^1 Analyse besonders deutlich.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß mit den hier vorgestellten verbesserten stochastischen Matrixinversionen bei $\mathcal{O}(100)$ komplexen Z2 Quellen eine gute Schätzung

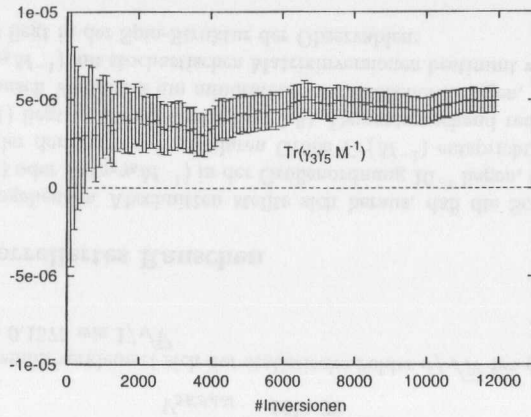


Abbildung 3.8: Schätzung von $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ mit korreliertem, reellem Z2 Rauschen auf einer individuellen SESAM Konfiguration ($\kappa_{sea} = 0.157$, $\kappa_{loop} = 0.1513$).

von der skalaren Größe $Tr(M^{-1})$ möglich ist, während beispielsweise $Tr(\gamma_3 \gamma_5 M^{-1})$ mit großen statistischen Fehlern behaftet ist.

3.3.5 Anmerkungen zur Rauschunterdrückung

Stochastische Matrixinversionen können Größen schätzen, die in Gitterrechnungen nicht exakt bestimmt werden können. Beispielsweise wird $Tr(M^{-1})$ für die disconnected Amplitude im Pion-Nukleon σ Term benötigt und kann bei den verwendeten Gittergrößen nicht mit exakten Inversionen ausgerechnet werden. Das komplexe Z2 Rauschen induziert einen zusätzlichen Fehler in die Analyse, der erst nach unendlich vielen Inversionen unterdrückt wird.

Andererseits werden die geschätzten Größen, z.B. bei der Berechnung von disconnected Diagrammen in flavor-singlet Matrixelementen des Protons, mit anderen Observablen korreliert:

$$R \sim \frac{\langle Tr(M^{-1}) C_P(t) \rangle}{\langle C_P(t) \rangle}. \quad (3.23)$$

Hier steht $C_P(t)$ für den Proton-Propagator (siehe Kapitel 5). Das resultierende Signal entsteht erst im Mittel über die Eichfeldkonfigurationen und trägt auf einem endlichen Ensemble einen weiteren statistischen Fehler. In realistischen Gittersimulationen – insbesondere in der vollen QCD mit dynamischen Fermionen – steht nur eine begrenzte Anzahl an Konfigurationen und Z2 Inversionen zur Verfügung. Eine Abhängigkeit der Korrelation von den beiden unterschiedlichen Fehlerquellen (stochastische Matrixinversion und endliches Ensemble) ist nicht auszumachen. Dies

erschwert die Findung der optimalen Strategie hinsichtlich des Mitteleinsatzes. Zwei Extreme seien genannt:

- $Tr(M^{-1})$ wird zu genau geschätzt angesichts des Fehlers, der durch das endliche Ensemble bedingt ist, und damit wird Rechenzeit in den stochastischen Matrixinversionen verschenkt.
- Es werden nicht genug Z2 Quellen verwendet, sodaß in Gl. 3.23 $Tr(M^{-1})$ eine einseitige Verschiebung der Resultate (*bias*) nicht ausgeschlossen, oder aber aufgrund der großen Fluktuationen in $Tr(M^{-1})$ gar keine Korrelation nachgewiesen werden kann.

Im Rahmen perturbativer Rauschunterdrückung wurden Techniken vorgeschlagen, mit denen der Rechenaufwand in stochastischen Matrixinversionen drastisch reduziert werden kann. Grundlage dafür bildet die Hopping-Parameter Entwicklung für die Wilson-Fermionenmatrix M . Eine Einführung zur perturbativen Rauschunterdrückung und ihre Anwendungen findet sich in [59, 60]. Die Autoren von [59, 60] orientieren sich jedoch allein an der verkleinerten Varianz ihrer Schätzung, können also nicht absehen, welchen Einfluß die Methode auf die physikalisch interessante Korrelation Gl. 3.23 hat. An dieser Stelle wird kein Weg daran vorbei führen, relevante Korrelationen jeweils auf einem bestimmten Ensemble auszuwerten, um die Effizienz von verbesserten stochastischen Matrixinversionen abschätzen zu können. Diese Analyse ist extrem rechenzeitintensiv und aufwendig. Trotzdem kann nur anhand solcher Untersuchungen ermittelt werden, wie groß die Anzahl stochastischer Quellen bei einer gegebenen Quarkmasse m_q und einer bestimmten Methode sein muß, damit die Korrelation Gl. 3.23 einerseits keine gerichtete Verschiebung erfährt (*bias*) und andererseits nicht mehr von dem stochastischen Fehler in $Tr(M^{-1})$ überdeckt wird.

Die vorliegende Arbeit geht über die Untersuchung des Fehlers in $Tr(M^{-1})$ auf einzelnen Konfigurationen hinaus und präsentiert die aufwendige Gitterbestimmung von disconnected Diagrammen mit Gleichung 3.23 in flavor-singlet Matrixelementen.

3.4 Anwendung in der vollen QCD

In einer umfangreichen Computersimulation wurden alle statistisch unabhängigen Eichfeldkonfigurationen der SESAM $16^3 \times 32$ Gitter, wie auch der $T\chi L$ $24^3 \times 40$ Gitter für $\kappa_{sea} = 0.1575$ mit stochastischen Matrixinversionen analysiert. Geschätzt wurden auf jeder Konfiguration die Quark-Loop Beiträge $Tr(\Gamma M^{-1})$ für die Wilson-Fermionenmatrix M . Damit die Daten sowohl für die Analyse von $\sigma_{\pi N}$ als auch für die axiale Kopplung des Protons G_A^1 benutzt werden können, wurden alle Spin-Komponenten von Γ getrennt bestimmt, sodaß skalare und axiale Kontraktionen bei der Datenauswertung durchgeführt werden konnten. Zur Anwendung kamen die spin-explizite Methode und die Rauschsubtraktionsmethode. Die Tabelle 3.1 faßt alle Simulationsparameter, benutzte Maschinen bzw. Methoden und die jeweilige Anzahl der stochastischen Matrixinversionen zusammen. Bisher konnten die $T\chi L$ Konfigurationen mit $\kappa_{sea} = 0.1580$ aufgrund des großen Rechenzeitaufwandes nicht mitberücksichtigt werden. Tabelle 3.2 zeigt die technischen Daten der APE-Maschinen, die entweder für die Entwicklung der verbesserten stochastischen Matrixinversionen oder für die eigentliche Simulation Verwendung fanden.

Für die Inversionen der Wilson-Fermionenmatrix M wurde ein Standard-Algorithmus (stabilisierter BiCG mit Even/Odd bzw. SSOR Präkonditionierung) verwendet. Erläuterungen und Details diesbezüglich finden sich in [56].

	κ_{sea}	Konfigurationen	Inversionen/Methode	Maschine
SESAM ($16^3 \times 32$)	0.1560	200	100/SEM	QH2 ^a
	0.1565	200	400/RSM	QH4 ^b
	0.1570	200	100/SEM	QH2 ^a
	0.1575	200	400/RSM	QH4 ^b
$T\chi L$ ($24^3 \times 40$)	0.1575	180	100/SEM	QH4 ^b

Tabelle 3.1: Übersicht über die verwendeten Maschinen, Eichfeldkonfigurationen und Algorithmen, der spin-expliziten Methode (SEM) und der Rauschsubtraktionsmethode (RSM).

Bezeichnung	Prozessoren	Topologie	Speicher [MB]	GFlops
Q1 (cube) ^b	8	2*2*2	32(128)	0.4
Q4 ^{c,d}	16	8*2*2	128(512)	1.6
Q16 (tube) ^b	128	32*2*2	512(2048)	6.4
QH2 ^{a,b}	256	8*8*4	1024(4096)	12.8
QH4 (tower) ^b	512	8*8*8	2048(8192)	25.6

Tabelle 3.2: Quadrics/APE100 Parallelcomputer für Entwicklung und Simulation. Standorte der APE Maschinen: ^a Universität Bielefeld, ^b IFH Zeuthen (DESY), ^c Neumann Institut für Computing (NIC), Forschungszentrum Jülich, ^d Universität Wuppertal.

Kapitel 4

Die topologische Ladung

Als erste physikalische Anwendung der verbesserten stochastischen Matrixinversionen werden in diesem Kapitel topologische Anregungen des QCD Vakuums untersucht und das $U_A(1)$ Problem der QCD diskutiert. Für die Bestimmung der topologischen Ladung Q_L auf den SESAM Eichfeldkonfigurationen wird eine in Gittersimulationen bisher unberücksichtigte Methode vorgestellt, in der das Index-Theorem zur Anwendung kommt. Für die Bestimmung des Index einer Eichkonfiguration muß eine nicht-diagonale Spur der inversen Fermionenmatrix geschätzt werden. Zum Vergleich wird Q_L konventionell mit Cooling-Techniken im gluonischen Sektor analysiert.

Das Hauptziel dieses Kapitels ist es, aufzuzeigen, daß mit dem HMC Algorithmus in den SESAM bzw. $T\chi L$ Simulationen alle topologischen Sektoren der vollen QCD erfaßt werden. Diese Dekorrelation der topologischen Ladung Q_L mit dem HMC ist Grundvoraussetzung für eine Analyse von Observablen, die über die axiale Anomalie mit der Topologie verbunden sind (z.B. die axiale flavor-singlet Kopplung des Protons G_A^1).

4.1 Das $U_A(1)$ Problem und die axiale Anomalie

Die QCD Lagrangedichte hat im chiralen Limes $m_q \rightarrow 0$ eine $SU(3)_V \times SU(3)_A$ flavor-Symmetrie, die auf die Vektor- und Axial-Vektor Ward-Identitäten führt [17]. Während die Vektor-Symmetrie exakt erhalten ist, also

$$\partial_\mu V_\mu = 0 \quad (4.1)$$

gilt, ergeben sich bei Anwesenheit von Fermionen in erster Ordnung Störungstheorie anomale Dreiecks-Diagramme, welche die axiale Symmetrie explizit brechen (axiale Anomalie) [82]. Für den axialen flavor-singlet Strom

$$A_\mu^0 = \sum_{q=u,d,s} \bar{q} \gamma_\mu \gamma_5 q \quad (4.2)$$

ergeben sich zusätzliche, rein gluonische Beiträge:

$$\partial_\mu A_\mu^0 = 2N_f q(x) \quad (4.3)$$

mit der topologischen Ladungsdichte

$$q(x) = \frac{g^2}{64\pi^2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} G_{\mu\nu}^a(x) G_{\rho\sigma}^a(x), \quad (4.4)$$

N_f Quarkfeldern, der nackten Kopplung g und dem gluonischen Feldstärketensor $G_{\mu\nu}$. Die nicht-singlet Ströme A_μ^a dagegen sind erhalten, und die zugehörigen Symmetrien sind nicht explizit, sondern spontan gebrochen. Daraus resultieren die leichten pseudo-skalaren Mesonen, die sogenannten Goldstone-Bosonen [17].

Wenn die axiale $U_A(1)$ Transformation eine exakte Symmetrie der QCD wäre, also

$$\partial_\mu A_\mu^0 = 0, \quad (4.5)$$

sollten im Teilchenspektrum entweder entsprechende Paritätspartner auftreten, oder für eine spontan gebrochene Symmetrie die Ungleichung

$$m_{\eta'} \leq \sqrt{3}m_\pi \quad (4.6)$$

für das Teilchen mit den Quantenzahlen des η' Mesons gelten. Allerdings werden weder die Paritätspartner im Spektrum beobachtet, noch entspricht die große η' Masse der genannten Ungleichung [96]. Lange bevor die QCD als Theorie der starken Wechselwirkung eingeführt wurde, war dieses Rätsel als $U_A(1)$ Problem bekannt. Eine nicht-triviale topologische Struktur des QCD Vakuums löst dieses Problem, indem in Gleichung 4.3 mit $q(x) \neq 0$ die Symmetrie auch explizit gebrochen wird.

Allerdings ist die $U_A(1)$ Transformation eine exakte Symmetrie in unterster Ordnung in einer Entwicklung nach $1/N_c$ [97], mit der Anzahl der Farbfreiheitsgrade N_c , und die $U_A(1)$ Anomalie kann als eine Störung interpretiert werden [98, 99]. Diesem Ansatz folgend ist die η' Masse mit der topologischen Suszeptibilität χ verknüpft [30, 31]:

$$\frac{2n_f}{f_\pi^2} \chi = m_\eta^2 + m_{\eta'}^2 - 2m_K^2 \quad (4.7)$$

mit der Pion-Zerfallskonstanten f_π und

$$\chi = \int d^4x \langle 0|T(q(x)q(0))|0\rangle. \quad (4.8)$$

Die topologische Suszeptibilität χ , die über die topologische Ladungsdichte $q(x)$ definiert ist, spielt demnach eine entscheidende Rolle in dem η' Massenpuzzle und dem $U_A(1)$ Problem der QCD. Im folgenden wird aufgezeigt, wie $q(x)$ bzw. χ in Gittersimulationen bestimmt werden können, und zwar mit konventionellen lokalen Operatoren und Cooling-Techniken, bzw. mit fermionischen Observablen.

4.2 Topologische Ladung auf dem Gitter

4.2.1 Die feldtheoretische Methode

Die topologische Ladungsdichte $q(x)$ kann auf dem Gitter als lokaler Operator $q_L(x)$ definiert werden, der im Kontinuumslimit in $q(x)$ übergeht, also

$$\lim_{a \rightarrow 0} q_L(x) = q(x). \quad (4.9)$$

Die topologische Ladungsdichte auf dem Gitter ist keine Divergenz eines Stromes und muß multiplikativ renormiert werden [100]:

$$q_L(x) = Z(\beta)q(x)a^4 + \mathcal{O}(a^6) \quad (4.10)$$

mit $\beta = 6/g^2$ und dem Gitterabstand a . (Insbesondere muß die topologische Gesamtladung einer Gitterkonfiguration Q_L keine ganze Zahl wie im Kontinuum sein).

Die topologische Suszeptibilität auf dem Gitter χ_L ist dann definiert als

$$\chi_L = \langle \sum_x q_L(x)q_L(0) \rangle \quad (4.11)$$

und muß zusätzlich additiv renormiert werden [101]:

$$\chi_L = Z(\beta)^2 a^4 \chi + M(\beta) + \mathcal{O}(a^6). \quad (4.12)$$

Der lokale Operator $q_L(x)$ ist nicht eindeutig definiert. Unterschiedliche Ansätze für naive und verbesserte Implementierungen wurden daher diskutiert [102, 103]. Eine naive Diskretisierung von $q_L(x)$ ist beispielsweise [102]

$$q_L(x) = \frac{-1}{512\pi^2} \sum_{\mu\nu\rho\sigma=\pm 1}^{\pm 4} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \text{Tr}(\square_{\mu\nu}(x)\square_{\rho\sigma}(x)). \quad (4.13)$$

In jedem Falle müssen die Renormierungskonstanten Z und M berechnet werden, was mit nicht-störungstheoretischen Methoden möglich ist [104, 105].

Dieser Zugang zur topologischen Suszeptibilität und zur η' Masse ist im Prinzip korrekt, wenngleich das Signal stark verrauscht und mit Gitterartefakten behaftet ist, die für die Analyse herausgefiltert werden müssen. Die Resultate für χ reproduzieren mit Gleichung 4.7 eine mit dem Experiment verträgliche Masse für das η' Meson [103].

4.2.2 Cooling

Eine alternative Methode für die Bestimmung von χ ist die sogenannte Cooling-Technik [106]. Die Idee hierbei ist, mit lokalen Algorithmen die kurzreichweitigen Quantenfluktuationen „einzufrieren“, sodaß nur die relevanten langreichweitigen Korrelationen zu dem lokalen Operator beitragen.

Ausgehend von der Plaquette-Wirkung im Eich-Sektor,

$$S_{g\text{luon}} = \beta \sum_{x,\mu>\nu} \left[1 - \frac{1}{2} \text{Tr} \square_{\mu\nu}(x) \right], \quad (4.14)$$

wird in einem sequentiellen iterativen Prozeß jede Link-Variable so modifiziert, daß die resultierende lokale Plaquette-Wirkung minimal wird. Diese Methode wird als vollständiges oder maximales Cooling bezeichnet. Andere Ansätze verfolgen ein sanfteres Abkühlen der Konfiguration, indem nicht das absolute Minimum der lokalen Plaquette-Wirkung für den entsprechenden Link gewählt wird. Man spricht dann von adiabatischem Cooling [106]. Unterschiedlich kann auch die Reihenfolge des lokalen Algorithmus sein, z.B. dem seriellen Gitter folgend, oder einer even/odd Aufteilung der Gitterpunkte. Ausführlich wurde das Verhalten von den Standard-Techniken z.B. in [107] untersucht.

Ein Nachteil von allen Cooling-Techniken ist, daß nach unendlich vielen Iterationen die Konfiguration vollständig eingefroren ist, also auch sämtliche langreichweitigen Korrelationen verschwunden sind. In einer physikalischen Interpretation können außerdem während des Abkühlens sowohl Instantonen als auch Anti-Instantonen durch das Gitter diffundieren und gegebenenfalls annihilieren. Verbesserte Cooling Algorithmen wurden daraufhin entwickelt und mit den konventionellen Methoden verglichen [108, 109]. Gemeinsames Ziel der Bemühungen ist es, Instantonen und Anti-Instantonen während des Abkühlens zu fixieren.

Aus der Verteilung der topologischen Ladung Q_L kann die Suszeptibilität χ_L prinzipiell bestimmt werden:

$$\chi_L = \frac{\langle Q_L^2 \rangle}{V}. \quad (4.15)$$

Unter der Annahme, daß nach einer ausreichenden Zahl an Cooling-Iterationen näherungsweise für die additive und multiplikative Renormierungskonstante

$$M = 0, Z = 1 \quad (4.16)$$

gilt, kann die physikalische Suszeptibilität χ abgeleitet werden. Mit unterschiedlichen Cooling-Techniken ist χ in Gittersimulationen bestimmt worden. Die Ergebnisse stimmen innerhalb der Fehler mit den Resultaten auf ungekühlten Konfigurationen überein und liefern mit Gleichung 4.7 die experimentell gemessene Masse des η' Mesons [108, 109].

4.2.3 Die fermionische Methode

Das Atiyah-Singer Index-Theorem im Kontinuum setzt die topologische Ladung einer Eichfeldkonfiguration mit fermionischen Größen und dem Dirac-Operator in Verbindung [32]:

$$\text{Tr}(\gamma_5 G_{xx}) = \frac{n_+ - n_-}{m_q} = \frac{Q}{m_q}. \quad (4.17)$$

G_{xx} ist der Propagator des Fermionenfeldes mit der Masse m_q ; n_+ bzw. n_- entsprechen der Anzahl der rechts- bzw. linkshändigen Nullmoden des Dirac-Operators, also der Eigenzustände von γ_5 mit definierter Chiralität. Q ist die topologische Ladung des Eichfeldes. Die Spur wird über alle Raum-Zeitpunkte x , Farb- und Spinfreiheitsgrade gebildet.

Dem Ansatz von Smit und Vink [110, 111] folgend, läßt sich Gleichung 4.17 auf dem Gitter für Wilson-Fermionen schreiben als

$$m_q \kappa_P \langle \text{Tr}(\gamma_5 G_{xx}) \rangle_U = Q_L, \quad (4.18)$$

mit einer zusätzlichen Renormierungskonstanten κ_P . In bisherigen Gittersimulationen mit chiralen Fermionen wurde anstatt der direkten aber aufwendigen Bestimmung von $\text{Tr}(\gamma_5 G_{xx})$ auf den jeweiligen Eichfeldkonfigurationen die kleinsten Eigenwerte und -moden des Dirac-Operators berechnet und daraus die Topologie abgeleitet. Eine Zusammenfassung der erzielten Ergebnisse findet sich in [112].

Für Wilson-Fermionen mit der Masse m_q in einem Hintergrundfeld U gilt für den Quark-Propagator:

$$G_{xx} = M_{x,x}^{-1}[U] \quad (4.19)$$

mit der Fermionenmatrix $M = 1 - \kappa D$ und dem Hopping-Parameter κ . Die topologische Ladung Q_L kann also auf jeder Konfiguration bestimmt werden, indem $\text{Tr}(\gamma_5 M_{x,x}^{-1})$ – analog zu den flavor-singlet Matrixelementen in den folgenden Kapiteln – mit verbesserten stochastischen Matrixinversionen geschätzt wird. Diese Daten können mit den topologischen Ladungen verglichen werden, wenn Gleichung 4.13 auf gekühlten Konfigurationen angewendet wird.

Der Vollständigkeit wegen sei abschließend noch die sogenannte geometrische Definition der topologischen Ladung Q genannt [113, 114], bei der eine reale Eichfeldkonfiguration mit einer Kontinuumskonfiguration interpoliert wird, sodaß die topologische Ladung stets eine exakte Integerzahl ist.

4.3 Numerische Tests und Ergebnisse

Die topologische Ladung Q auf der freien Eichfeldkonfiguration ist

$$Q^{free} = Q_L^{free} = 0 \quad (4.20)$$

für alle Quarkmassen m_q . Stochastische Matrixinversionen müssen folglich in diesem Testfall

$$\text{Tr}(\gamma_5 M_{x,x}^{-1}) = 0 \quad (4.21)$$

innerhalb der statistischen Fehler ergeben.

Bild 4.1 zeigt die Bestimmung von $\text{Tr}(\gamma_5 M_{x,x}^{-1})$ mit komplexen Z2 Rauschvektoren auf einem $16^3 \times 32$ Gitter (freie Konfiguration, $\kappa = 0.124$). Der statistische Fehler σ/\sqrt{N} ist in Gleichung 3.13 definiert.

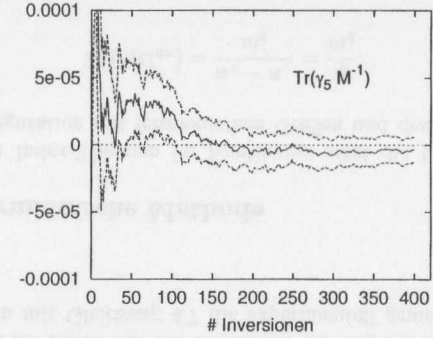


Abbildung 4.1: Bestimmung von $\text{Tr}(\gamma_5 M_{x,x}^{-1})$ mit komplexem Z2 Rauschen auf einem $16^3 \times 32$ Gitter (freie Konfiguration, $\kappa = 0.124$).

Nach ca. 200 Inversionen mit stochastischen Quellen stimmt die Schätzung für $\text{Tr}(\gamma_5 M_{x,x}^{-1})$ mit der theoretischen Erwartung überein; eine freie Konfiguration hat per Definition die topologische Ladung $Q = 0$.

Bild 4.2 dahingegen zeigt $\text{Tr}(\gamma_5 M_{x,x}^{-1})$ auf einer SESAM Konfiguration ($\kappa_{sea} = 0.175$) mit dynamischen Fermionen und einer nicht-trivialen Topologie – mit Gleichung 4.13 findet man auf der gekühlten Konfiguration $Q = -3$. Nach 400 Inversionen ergibt die Schätzung für $\text{Tr}(\gamma_5 M_{x,x}^{-1})$ signifikant $Q_L < 0$. Inwieweit die Schätzung quantitativ mit der feldtheoretischen Definition übereinstimmt wird im nächsten Abschnitt diskutiert.

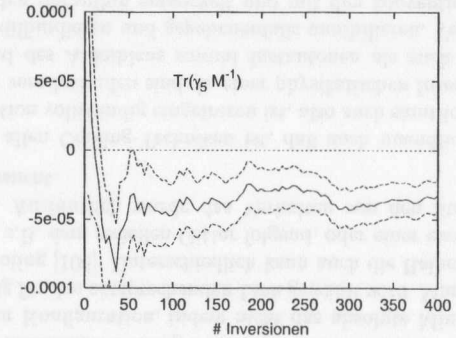


Abbildung 4.2: Bestimmung von $\text{Tr}(\gamma_5 M_{x,x}^{-1})$ mit komplexem Z2 Rauschen auf einem SESAM $16^3 \times 32$ Gitter ($\kappa = 0.157$) mit $Q_L = -3$.

Nach diesen Voruntersuchungen werden entsprechend Gleichung 4.18 alle SESAM Eichfeldkonfigurationen auf ihren topologischen Gehalt hin analysiert. Dabei wer-

den die in Kapitel 3 ausführlich diskutierten, verbesserten Inversionsverfahren angewandt, hier speziell die Spin-explizite Methode mit 100 Inversionen für $\kappa = 0.156$ und $\kappa = 0.157$, bzw. 400 Inversionen mit der zusätzlichen Rauschunterdrückung für nicht-diagonale Elemente (RSM) bei $\kappa = 0.1565$ und $\kappa = 0.1575$. Aufgrund der nicht-diagonalen Struktur von γ_5 sind die vorgestellten verbesserten Methoden für stochastische Matrixinversionen (siehe Kapitel 3) in dieser Anwendung besonders effizient.

In Bild 4.3 sind die Ergebnisse beider Methoden für Q_L eingetragen. Für die Renormierungskonstante¹ in Gleichung 4.18 wurde

$$\kappa_P = 2 \quad (4.22)$$

gewählt, um die Daten zu skalieren, d.h. die bestmögliche Übereinstimmung beider Definitionen zu erzielen. Interessant ist in diesem Zusammenhang, daß in Gleichung 4.18 das Produkt $\kappa_P m_q$ in die Definition für Q_L eingeht. In Simulationen der vollen QCD ist die leichte Quarkmasse m_q etwa um einen Faktor zwei kleiner als in vergleichbaren quenched Rechnungen [45]. Somit könnte $\kappa_P = 2$ auch eine um 50% zu kleine leichte Quarkmasse in Simulationen der vollen QCD kompensieren.

Die eingetragenen Fehlerbalken in Bild 4.3 für die fermionische topologische Ladung sind statistische Fehler. Zum Vergleich sind die Werte für Q_L aus dem gluonischen, lokalen Operator in Gleichung 4.13 eingezeichnet. Dafür wurden die Konfigurationen zuvor mit 100 Iterationen gekühlt (vollständige Minimierung, even/odd Reihenfolge).²

Deutlich zu erkennen ist die starke Korrelation der Daten, wenn einerseits die feldtheoretische Definition von Q_L (Gl. 4.13 auf gekühlten Konfigurationen) und andererseits das Index-Theorem und stochastische Matrixinversionen benutzt werden. Bild 4.4 faßt die Ergebnisse für die fermionische Methode in Histogrammen für die vier SESAM Quarkmassen zusammen.

In weiterführenden Arbeiten ließe sich mit der fermionischen Methode auch die topologische Suszeptibilität χ und die η' Masse bestimmen. Zur Zeit fehlen für eine konsistente Analyse von χ_L :

- die flavor-singlet Renormierungskonstante κ_P
- die additive Renormierung von χ_L auf den ungekühlten Konfigurationen
- eine ausreichend große Statistik ($\gg \mathcal{O}(200)$) für die Gauss-Verteilung von Q_L

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß stochastische Matrixinversionen und das Index-Theorem Werte für Q_L liefern, die innerhalb der statistischen Fehler eine sehr starke Korrelation mit den Ergebnissen der feldtheoretischen Definition auf

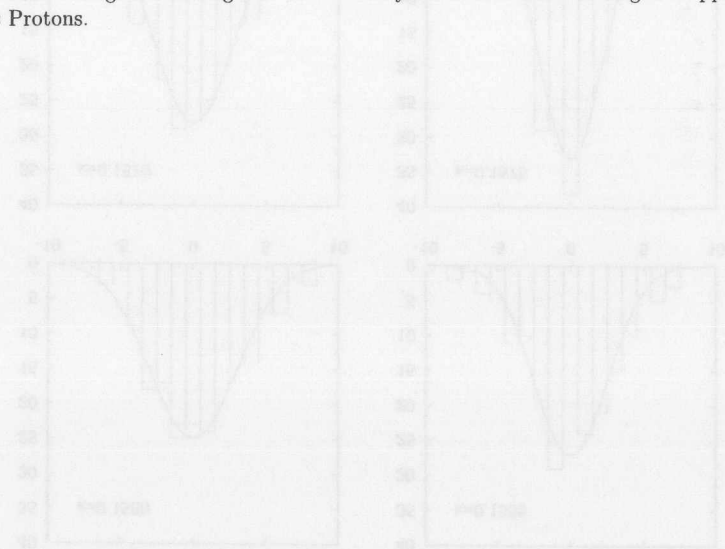
¹Die Renormierungskonstanten der flavor-singlet Ströme sind auf dem Gitter weder für die volle QCD noch für die quenched Näherung berechnet worden.

²Die Daten für Q_L auf den gekühlten Konfigurationen stellte freundlicherweise Gunnar Bali zur Verfügung.

den gekühlten Konfigurationen aufweisen. Offensichtlich wird der Zusammenhang zwischen fermionischen Observablen, hier dem Quark-Propagator G_{xx} , und gluonischen Operatoren in der vollen QCD - auch auf dem Gitter - über das Indextheorem vermittelt.

Abschließend ist in Bild 4.5 die topologische Ladung auf allen SESAM und $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen mit der feldtheoretischen Definition und der fermionischen Methode eingezeichnet. Während für die SESAM Quarkmassen der verwendete HMC Algorithmus die topologische Ladung Q_L hinreichend dekorreliert [40] - dies wurde mit zwei vollkommen unterschiedlichen Methoden nachgewiesen - ist die Simulation mit der leichtesten $T\chi L$ Masse ($\kappa = 0.158$) nicht im statistischen Gleichgewicht, wenn Observablen gemessen werden sollen, die mit der Topologie des Systems zusammenhängen. Eine ähnliche Beobachtung wurde bereits in Simulationen mit staggered Fermionen gemacht [115]. Bei sehr leichten Quarkmassen verbleibt das System über mehrere hundert HMC-Trajektorien hinweg im selben topologischen Sektor.

Es konnte also gezeigt werden, daß die SESAM Eichfeldkonfigurationen und die $T\chi L$ Gitter bei $\kappa_{sea} = 0.1575$ alle topologischen Sektoren repräsentieren. Dieses Resultat ermöglicht die folgende Gitter-Analyse der axialen flavor-singlet Kopplung des Protons.



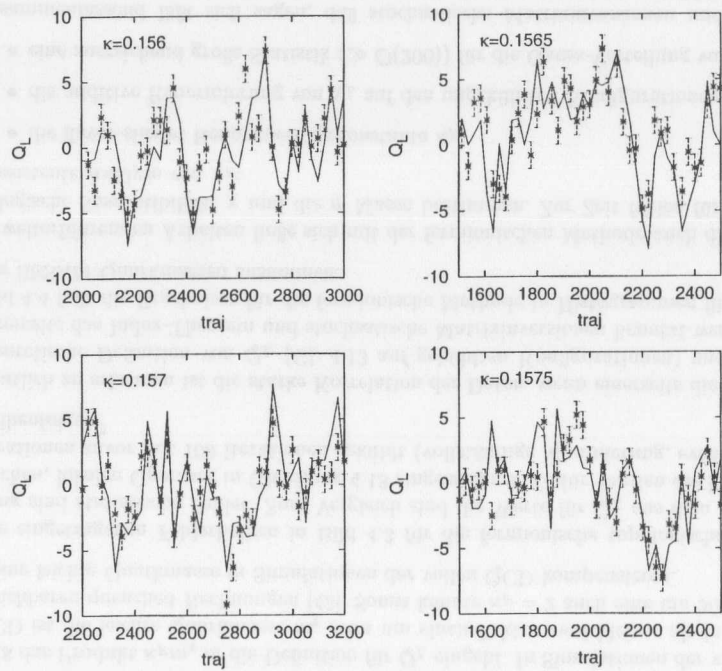


Abbildung 4.3: Die topologische Ladung Q_L auf den SESAM Konfigurationen. Die Datenpunkte mit Fehlerbalken entsprechen der fermionischen Definition über das Index-Theorem (Gl. 4.18) und die durchgezogenen Linien der feldtheoretischen Definition auf gekühlten Konfigurationen. Die Trajektoriennummer (traj) ist der HMC Simulation entnommen.

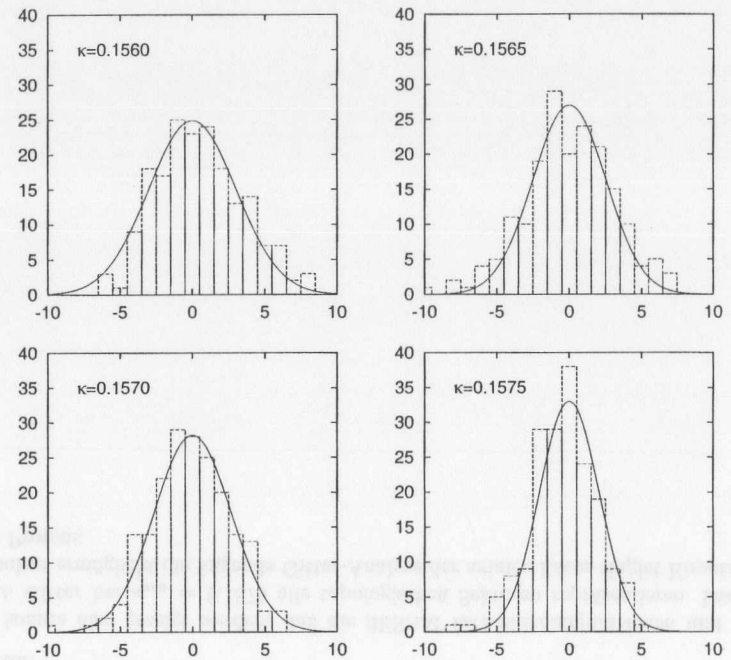


Abbildung 4.4: Histogramme für die topologische Ladung Q_L der SESAM Konfigurationen (fermionische Methode) mit den dazugehörigen gausschen Extrapolationen.

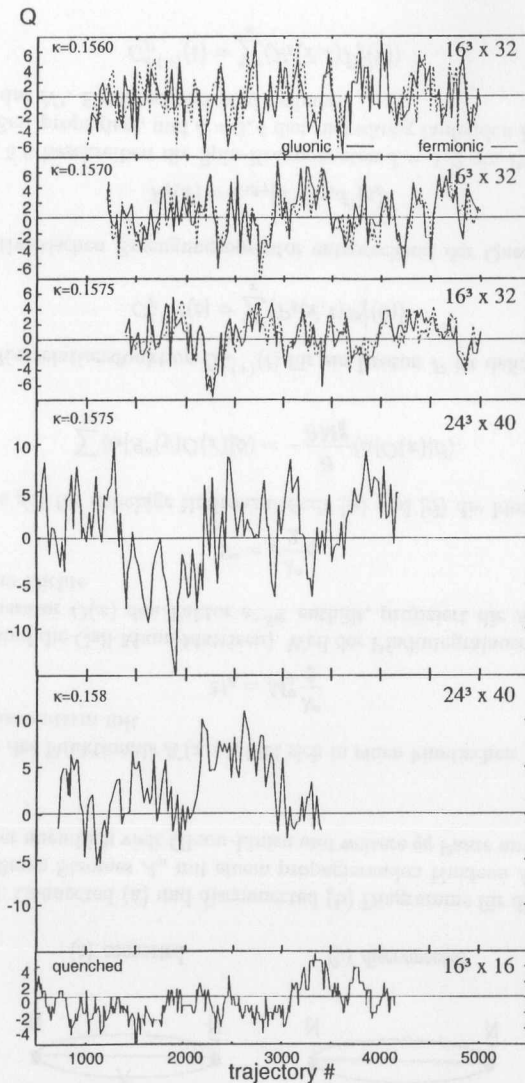


Abbildung 4.5: Die topologische Ladung Q_L auf den SESAM ($16^3 \times 32$) und $T\chi L$ ($24^3 \times 40$) Eichfeldkonfigurationen mit der feldtheoretischen Definition auf gekühlten Konfigurationen (durchgezogene Linien) und mit dem Index-Theorem (gestrichelte Linien). Die quenched Analyse entspricht einer HMC Simulation bei $\beta = 6.0$ auf einem $16^3 \times 16$ Gitter.

Kapitel 5

Korrelationsfunktionen und disconnected Diagramme

Gittersimulationen der starken Wechselwirkung stellen einen *ab-initio* Ansatz für das Studium hadronischer Eigenschaften im niederenergetischen Sektor der QCD dar. Neben dem Teilchenspektrum der Theorie sind hierbei insbesondere Matrixelemente relevant, die mit der chiralen Symmetriebrechung der QCD verknüpft sind oder topologische Anregungen des Vakuums einschließen, wie beispielsweise der $\sigma_{\pi N}$ Term oder die axiale flavor-singlet Kopplungskonstante des Protons G_A^1 . In beiden Fällen müssen hadronische Matrixelemente

$$M = \langle N | \bar{q} \Gamma q | N \rangle \quad (5.1)$$

zwischen einem Nukleon N und einem externen, in den Quark-Feldern bilinearen Strom berechnet werden. In diesem Kapitel werden die Methoden vorgestellt, mit denen M in nicht-störungstheoretischen Gittersimulationen bestimmt werden kann. In den folgenden Kapiteln werden dann flavor-singlet Ströme mit skalarer und axialer Spin-Struktur Γ relevant. In feldtheoretischer Hinsicht kann der externe Strom $A_\mu = \bar{q} \Gamma q$ direkt an das Nukleon ankoppeln (connected Diagramme) oder über ein Quark-Antiquark Paar (disconnected Diagramme) im Hintergrundfeld des Nukleons wechselwirken (siehe Bild 5.1).

Im allgemeinen tragen sowohl connected als auch disconnected Diagramme zu M bei. Die unterschiedlichen Beiträge werden hier einzeln behandelt. Während connected Diagramme mit der üblichen Insertion-Technik [20] berechnet werden, müssen für disconnected Beiträge stochastische Matrixinversionen angewendet werden [58, 61].

5.1 Mehrpunkt-Korrelationsfunktionen

Der fermionische Teil der Wilson-Wirkung S_W , der geschrieben werden kann als

$$S_W = \sum_{x,y} \bar{q}(x) K(x,y) q(y) = S_{kin} + \sum_x \bar{q}(x) M_0 q(x) \quad (5.2)$$

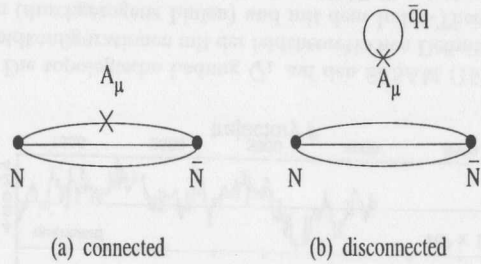


Abbildung 5.1: Connected (a) und disconnected (b) Diagramme für die Wechselwirkung eines äußeren Stromes A_μ mit einem propagierenden Nukleon N . Der Quark-Loop $\bar{q}q$ ist über unendlich viele Gluon-Linien und weitere $\bar{q}q$ Paare mit dem Nukleon verbunden.

mit dem Kern des Funktionals $K(x, y)$, läßt sich in einen kinetischen Term S_{kin} und einen Quarkmassenterm mit

$$M_0 = M_0^a \frac{\lambda^a}{2} \quad (5.3)$$

aufteilen (λ^a sind die Gell-Mann Matrizen). Weil der Pfadintegralausdruck für einen beliebigen Operator $O(x)$ den Faktor e^{-S_W} enthält, projiziert die Ableitung nach M_0 eine skalare Dichte

$$S^a = \bar{q} \frac{\lambda^a}{2} q \quad (5.4)$$

heraus, und es gilt für beliebige Hadronzustände $|\alpha\rangle$ und $|\beta\rangle$ die Identität:

$$\sum_y \langle \alpha | S^a(y) O(x) | \beta \rangle = - \frac{\partial}{\partial M_0^a} \langle \alpha | O(x) | \beta \rangle. \quad (5.5)$$

Die 2-Punkt Korrelationsfunktion $C_P^{\delta(+)}(t)$ für ein Proton P ist definiert als:

$$C_P^{\delta(+)}(t) = \sum_{\vec{x}} \langle \mathcal{P}_\delta(\vec{x}, t) \mathcal{P}_\delta^\dagger(0) \rangle \quad (5.6)$$

mit dem relativistischen Erzeugungsoperator entsprechend der Quantenzahlen des Protons [62]:

$$\mathcal{P}_\delta(x) = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} [u^\alpha C \gamma_5 d^\beta] u_\gamma^\dagger. \quad (5.7)$$

In Gleichung 5.6 beschreiben die Spin-Komponenten $\delta = 1, 2$ ein Proton, das vorwärts in der Zeit propagiert, und $\delta = 3, 4$ den rückwärtig laufenden Paritätspartner des Protons, das N^* . Entsprechend wird definiert:

$$C_P^{\delta(-)}(t) = \sum_{\vec{x}} \langle \bar{\mathcal{P}}_\delta(\vec{x}, t) \bar{\mathcal{P}}_\delta^\dagger(0) \rangle. \quad (5.8)$$

Die Invarianz unter Ladungskonjugation impliziert¹ ($\delta = 1, 2, 3, 4$)

$$C_P^{(-)}(t) = -C_P^{(+)}(T-t). \quad (5.9)$$

Für eine höhere Statistik und kleinere statistische Fehler kann in Gittersimulationen die Kombination vorwärts bzw. rückwärts gerichteter Korrelationsfunktionen,

$$C_P(t) = C_P^{(+)}(t) - C_P^{(-)}(T-t), \quad (5.10)$$

benutzt werden. Für große Zeiten $t \gg 0$ gilt dann:

$$C_P(t) = Z_P e^{-M_P t} - Z_{N^*} e^{-M_{N^*}(T-t)} \quad (5.11)$$

mit den zugehörigen Massen des Protons M_P und des Paritätspartners M_{N^*} .

Die 3-Punkt Korrelationsfunktionen mit einer eingefügten skalaren Dichte $S = \bar{u}u$, bzw. $S = \bar{d}d$ sind definiert als:

$$I_u(t) = \sum_{\vec{x}, \delta} \langle \mathcal{P}_\delta(\vec{x}, t) \left(\sum_y \bar{u}u(y) \right) \mathcal{P}_\delta^\dagger(0) \rangle + (\mathcal{P} \rightarrow \bar{\mathcal{P}}, t \rightarrow T-t) \quad (5.12)$$

$$I_d(t) = \sum_{\vec{x}, \delta} \langle \mathcal{P}_\delta(\vec{x}, t) \left(\sum_y \bar{d}d(y) \right) \mathcal{P}_\delta^\dagger(0) \rangle + (\mathcal{P} \rightarrow \bar{\mathcal{P}}, t \rightarrow T-t). \quad (5.13)$$

Für die Verhältnisse

$$R_u(t) = I_u(t)/C_P(t) - \langle \sum_y \bar{u}u(y) \rangle \quad (5.14)$$

$$R_d(t) = I_d(t)/C_P(t) - \langle \sum_y \bar{d}d(y) \rangle \quad (5.15)$$

liefert die Identität in Gl. 5.5 z.B.:

$$I_u(t) = - \frac{\partial}{\partial M_0^u} C_P(t), \quad (5.16)$$

und es folgt

$$R_u(t) = \frac{\partial}{\partial M_0^u} \ln[C_P(t)] \quad (5.17)$$

$$= \text{const} + \frac{\partial M_P}{\partial M_0^u} t \quad (5.18)$$

bzw.

$$R_d(t) = \frac{\partial}{\partial M_0^d} \ln[C_P(t)] \quad (5.19)$$

$$= \text{const} + \frac{\partial M_P}{\partial M_0^d} t, \quad (5.20)$$

¹Für antiperiodische Randbedingungen in der Zeit.

falls das Proton im Grundzustand ist ($C_P(t) \sim e^{-M_P t}$). Im nächsten Schritt führt das Feynman-Hellmann Theorem [63], das die Ableitung der Protonmasse M_P nach der Quarkmasse M_q in Relation zu dem gesuchten Matrixelement setzt, also

$$\frac{\partial M_P}{\partial M_q} = \langle P|\bar{q}q|P\rangle, \quad (5.21)$$

zum wichtigen Resultat:

$$R_u(t) = \text{const} + \langle P|\bar{u}u|P\rangle t \quad (5.22)$$

$$R_d(t) = \text{const} + \langle P|\bar{d}d|P\rangle t. \quad (5.23)$$

Prinzipiell eröffnen sich nun zwei Möglichkeiten für die Bestimmung des Matrixelementes $\langle P|\bar{q}q|P\rangle$:

- $\partial M_P/\partial M_q$ wird unmittelbar mit Gittersimulationen bestimmt, indem die Proton-Masse M_P für mehrere unterschiedliche Quarkmassen M_q bestimmt wird. Gerade aber die numerische Ableitung von M_P nach M_q impliziert große statistische Fehler und wird hier nicht weiter betrachtet.
- Die Verhältnisse $R_u(t)$ und $R_d(t)$ werden direkt gebildet, indem die zugehörigen 2- und 3-Punktfunktionen auf dem Gitter bestimmt werden. Der lineare Anstieg in $R_u(t)$ und $R_d(t)$ für $t \gg 0$ entspricht $\langle P|\bar{u}u|P\rangle$ bzw. $\langle P|\bar{d}d|P\rangle$.

Die vorliegende Arbeit konzentriert sich auf die direkte Bestimmung von $R_u(t)$ und $R_d(t)$. Maiani et al. führten diese sogenannte Summationsmethode, bei der über alle Gitterpunkte in der eingesetzten skalaren Dichte S (Gleichung 5.13) summiert wird, in [21] ein. Fortan werden die resultierenden Verhältnisse mit

$$R_u^{SUM}(t) \quad \text{bzw.} \quad R_d^{SUM}(t) \quad (5.24)$$

bezeichnet.

Bevor im übernächsten Abschnitt die Techniken vorgestellt werden, mit denen $C_P(t)$ und $I_q(t)$ auf dem Gitter zugänglich sind, wird mit der sogenannten *Plateau-Methode* diskutiert, in welchem Bereich die Grundzustandsnäherung für das Proton in Gleichung 5.23 angewendet werden kann.

5.2 Test auf Grundzustand: Plateau-Methode

Die Herleitung für $R_q^{SUM}(t)$ benutzt die Grundzustandsnäherung für das Proton, die strikt nur für große x_0 und große y_0 in den Gleichungen 5.13 gilt. Weil in Gl. 5.13 aber über alle y_0 summiert wird, können für große Zeiten $t = x_0$ trotzdem angeregte Zustände mit kleinem y_0 zur Korrelation beitragen. Um auszuschließen, daß diese Beiträge das Signal verfälschen, wird die sogenannte Plateau-Methode benutzt, bei der in Gl. 5.13 nicht über y_0 summiert wird, sondern y_0 als freie Variable beibehalten wird.

Dazu wird die 3-Punkt Korrelationsfunktion

$$I_q^{PLA}(x_0, y_0) = \sum_{\vec{x}, \vec{\delta}} \sum_{\vec{y}} \langle P_\delta(\vec{x}, x_0) \bar{q}(\vec{y}, y_0) q(\vec{y}, y_0) P_\delta^\dagger(0) \rangle \quad (5.25)$$

definiert. Nach Einsetzen eines vollständigen Satzes von Eigenzuständen des Hamilton-Operators,

$$1 = \sum_n |n\rangle \langle n|, \quad (5.26)$$

folgt mithilfe des Transfer-Matrix-Formalismus für große zeitliche Abstände [1]:

$$R_q^{PLA}(x_0, y_0) = \frac{I_q^{PLA}(x_0, y_0)}{C_P(x_0)} = \langle \sum_{\vec{y}} \bar{q}q(\vec{y}, y_0) \rangle = \langle P|\bar{q}q|P\rangle. \quad (5.27)$$

In Gleichung 5.27 wird kein linearer Anstieg für R_q^{PLA} erwartet. Vielmehr indiziert der Bereich, in dem R_q^{PLA} konstant bleibt, den Grundzustandsbereich des Protons. Dort entspricht R_q^{PLA} dem gesuchten Matrixelement $\langle P|\bar{q}q|P\rangle$. Weil y_0 als freie Variable nicht absummiert wird, kann für alle Zeitschichten y_0 das Plateau-Verhalten geprüft werden, wenngleich dies mit geringerer Statistik zu größeren statistischen Fehlern in R_q^{PLA} gegenüber R_q^{SUM} führen kann. In einer anschaulichen Interpretation wird Zeitschicht für Zeitschicht die Kontraktion des Operators $\bar{q}q(y)$ (Quark-Loop) mit dem Proton getestet und auf Grundzustandsverhalten untersucht. Niedrigere Statistik heißt hierbei, daß nicht alle Quark-Loops für die Kontraktion verwendet werden, sondern nur die jeweiligen aus der entsprechenden Zeitschicht y_0 .

Schließlich wird noch die Methode der *Plateau-Akkumulation* (PAM) vorgestellt, die als Kombination beider Techniken die gemeinsamen Vorteile zu vereinen sucht. Anstatt nur eine einzige Zeitschicht y_0 zu betrachten, tragen zu der Korrelation alle Zeitschichten bei, für die das Proton im Grundzustand befindlich angenommen wird:

$$R_q^{PAM}(x_0, \Delta x_0, \Delta x'_0) = \sum_{y_0=\Delta x_0}^{x_0-\Delta x'_0} R_q^{PLA}(x_0, y_0). \quad (5.28)$$

Das gesuchte Matrixelement $\langle P|\bar{q}q|P\rangle$ ergibt sich sodann für $1 \leq \Delta x_0, \Delta x'_0 \leq x_0$ aus

$$R_q^{PAM}(x_0, \Delta x_0, \Delta x'_0) = \text{const} + \langle P|\bar{q}q|P\rangle t' \quad (5.29)$$

mit $t' = x_0 - \Delta x'_0 - \Delta x_0$.

Bild 5.2 verdeutlicht schematisch die Plateau-Akkumulations Methode (PAM). Für die zeitlichen Abstände $x_0 = 3$ und $x_0 = 5$ und $\Delta x_0 = \Delta x'_0 = 1$ sind die Zeitschichten angedeutet, die zur Korrelation des Protons mit den Quark-Loops beitragen.

Insbesondere für die disconnected Diagramme wird PAM in den folgenden Kapiteln dieser Arbeit die besten Signale für $\langle P|\bar{q}\Gamma q|P\rangle$ liefern. Am Beispiel der skalaren Dichte $\Gamma = \bar{q}q$ und des $\sigma_{\pi N}$ Terms werden im folgenden Kapitel die hier vorgestellten Methoden ausführlich getestet.

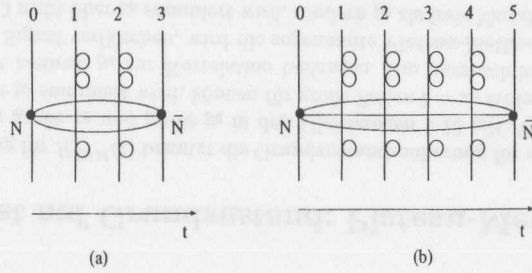


Abbildung 5.2: PAM: die Quark-Loops der Zeitschichten sind schematisch eingezeichnet, die für die Korrelation mit dem Nukleon berücksichtigt werden (bei (a) $x_0 = 3$ und (b) $x_0 = 5$, $\Delta x_0 = \Delta x'_0 = 1$).

5.3 Numerische Techniken auf dem Gitter

5.3.1 Grundlagen

Zusammengesetzte Teilchen des QCD Spektrums bestehen aus Linearkombinationen elementarer Quarks. Beispielsweise beinhaltet das Proton eine farb-singlet Überlagerung von drei leichten u bzw. d Quarks.

Der freie Quarkpropagator (Spin-Indizes sind unterdrückt)

$$\Delta_q^{\gamma,\gamma'}(x, y) = \bar{q}^\gamma(x) q^{\gamma'}(y), \quad (5.30)$$

mit dem ein Quark am Ort x erzeugt und bei y vernichtet wird, ist die relevante Grundgröße in hadronischen Analysen. Ausgehend vom Pfadintegralformalismus findet man [12, 46]:

$$\Delta_q(x, y) = M_{y,x}^{-1} \quad (5.31)$$

mit der Wilson-Fermionenmatrix M . Spin- und Farb-Indizes sind unterdrückt. Sei nun die Quelle bei $x = 0$ fixiert, dann kann Δ_q aus der Gleichung

$$M_{x,x'} \Delta_q(0, x') = \delta_{x,0} \quad (5.32)$$

bestimmt werden. Formal beschreibt Gl. 5.32 ein System linearer Gleichungen, das mit Standard-Algorithmen, z.B. sogenannte Krylov-Löser, numerisch aufgelöst werden kann. Wichtige Krylov-Löser dafür sind beispielsweise der *Conjugate Gradient* oder *Minimal Residuum* Algorithmus. Weil der Quellpunkt des Quarkpropagators festgelegt wurde, entspricht eine Spalte der inversen Fermionenmatrix einer Lösung

von Gleichung 5.32. Ein Gitterpunkt hat zusätzlich 4 Spin- und 3 Farb-Indizes, so daß insgesamt 12 Spalten der inversen Fermionenmatrix M^{-1} einen vollständigen Quark-Propagator ergeben. Obwohl die Dimension von M

$$\dim(M) = L_x * L_y * L_z * L_t * N_c * 4 = 12 * V \quad (5.33)$$

für ein Gitter der Ausdehnung $V = L_x * L_y * L_z * L_t$ mit $N_c = 3$ ist, sind die oben genannten Standard-Lösungsverfahren mit den SESAM/ $T\chi L$ Gittern anwendbar, wenn Parallel- oder Vektor-Supercomputer zur Verfügung stehen.

Komplexere Korrelationsfunktionen sind aus unterschiedlichen Kombinationen der Quark-Propagatoren aufgebaut. Für die 2-Punkt Korrelationsfunktion des Nukleons, speziell für den Propagator eines Protons, ergibt sich beispielsweise:

$$\begin{aligned} C_P^{\gamma,\gamma'}(x_0) &= \sum_{\vec{x}} \langle M_{x,0,\gamma,\gamma'}^{-1} [C\gamma_5 M_{x,0}^{-1} C\gamma_5]_{\alpha,\alpha'} M_{x,0,\alpha,\alpha'}^{-1} \\ &+ M_{x,0,\gamma,\alpha'}^{-1} [C\gamma_5 M_{x,0}^{-1} C\gamma_5]_{\alpha,\alpha'} M_{x,0,\alpha,\gamma'}^{-1} \rangle. \end{aligned} \quad (5.34)$$

5.3.2 Disconnected Diagramme

Setzt man in Gleichung 5.13 die entsprechende Kombination von Quarkpropagatoren Δ_q für die auftretenden Operatoren $\mathcal{P}_\delta(\vec{x}, t)$ und $q(x)$ ein, kann einer der resultierenden Terme als disconnected Amplitude in $I_q(t)$ identifiziert werden:

$$I_q^{disc}(t) = \langle C_P(t) \sum_y Tr(M_{y,y}^{-1}) \rangle. \quad (5.35)$$

Die Spur $Tr(M_{y,y}^{-1})$ wird über Spin- und Farb-Indizes gebildet. Anschaulich repräsentiert $\sum_y Tr(M_{y,y}^{-1})$ sämtliche Quarkpropagationen von y nach y , also alle geschlossenen $\bar{q}q$ Loops aus Bild 5.1. Diese Größe wird in $I_q^{disc}(t)$ mit der 2-Punktfunktion (Propagator) des Protons $C_P(t)$ korreliert und ergibt eine rein disconnected Amplitude in $I_q(t)$.

In Gleichung 5.35 werden alle Diagonalelemente der inversen Fermionenmatrix M^{-1} – inklusive dem Spin- und Farb-Unterraum – benötigt, so daß herkömmliche iterative Krylov-Löser für alle Quellen-Punkte des Gitters angewendet werden müßten ($\dim(M)$ mal auf jeder Eichfeldkonfiguration!). Dieser Rechenaufwand kann jedoch selbst mit den derzeit verfügbaren parallelen Supercomputern auf den SESAM/ $T\chi L$ Gittern ($\dim(M) \sim 10^6, 10^7$) nicht bewältigt werden.

Stochastische Matrixinversionen, wie sie in Kapitel 3 dieser Arbeit vorgestellt wurden, liefern einen Schätzwert für $Tr(M_{x,x}^{-1})$ und können bei der Berechnung von disconnected Diagrammen in $I_q(t)$ bzw. $\langle P|\bar{q}q|P \rangle$ eingesetzt werden. Auf jeder Eichfeldkonfiguration U muß dafür berechnet werden:

- Die 2-Punkt Korrelationsfunktion des Protons $C_P(t)$ mit Standard-Inversionsroutinen

- Die Schätzung von $Tr(M_{x,x}^{-1})$ mittels einer gewissen Anzahl komplexer Z2 Rauschvektoren
- Das Verhältnis

$$R_q^{disc}(t) = \frac{\langle C_P(t) \sum_y Tr(M_{y,y}^{-1}) \rangle}{\langle C_P(t) \rangle} - \langle \sum_y Tr(M_{y,y}^{-1}) \rangle$$

$$= const + \langle P|\bar{q}q|P \rangle t \quad (5.36)$$

Im Mittel über die Eichfeldkonfigurationen wird $\langle P|\bar{q}q|P \rangle$ aus dem linearen Anstieg von R_q^{disc} für $t \gg 0$ bestimmt.

5.3.3 Connected Diagramme

Beiträge von connected Diagrammen (Bild 5.1 (a)) zu $I_q(t)$ bzw. $\langle P|\bar{q}q|P \rangle$ berücksichtigen die Tatsache, daß ein Quark des propagierenden Protons an einem Ort y an den Strom A_μ koppelt und danach mit den zwei „unberührten“ Quarks am Ort x gemeinsam vernichtet wird. Im Gegensatz zu der regulären 2-Punkt Korrelationsfunktion des Protons, $C_P(t)$, wird also ein Quarkpropagator $\Delta_q(0, x)$ in Gleichung 5.34 ersetzt durch

$$\Delta_q(0, x) \rightarrow \tilde{\Delta}_q(0, x) = \sum_y \Delta_q(y, x) \Delta_q(0, y). \quad (5.37)$$

Die Berechnung von $\tilde{\Delta}_q(0, x)$ erfolgt in zwei Schritten und wird als Insertion-Technik bezeichnet [20]:

- Zuerst wird $\Delta_q(0, x)$ aus

$$M_{x,x'} \Delta_q(0, x') = \delta_{x,0} \quad (5.38)$$

mit Standard-Lösern bestimmt.

- Es gilt:

$$M_{x,x'} \tilde{\Delta}_q(0, x') = M_{x,x'} M_{x',y}^{-1} M_{y,0}^{-1} = M_{x,0}^{-1}. \quad (5.39)$$

Folglich kann $\tilde{\Delta}_q(0, x')$ wiederum mit Standard-Lösern iterativ gefunden werden, wenn als Quellen-Vektor anstatt $\eta(x) = \delta_{x,0}$

$$\eta(x) = M_{x,0}^{-1} = \Delta_q(0, x) \quad (5.40)$$

gewählt wird.

Dieses 2-Schritt Verfahren verdoppelt den Rechenaufwand für connected Diagramme gegenüber normalen 2-Punkt Korrelationsfunktionen, weil zuerst der Quarkpropagator $\Delta_q(0, x)$ iterativ berechnet werden muß und dann ein Gleichungssystem mit der modifizierten Quelle $\eta(x) = \Delta_q(0, x)$ gelöst wird. Die Beiträge zu

$I_q(t)$ von connected Diagrammen stellen trotz dieser Verdoppelung des Rechenaufwandes nicht den zeitkritischen Teil in Berechnungen von flavor-singlet Observablen dar. Statt dessen definieren die disconnected Diagramme mit $\mathcal{O}(400)$ stochastischen Matrixinversionen, wie in der vorliegenden Arbeit verwendet, den Gesamtaufwand der Computersimulation.

Kapitel 6

Disconnected Diagramme und der Pion-Nukleon σ -Term

Die spontane und explizite Brechung der $SU(3)_V \times SU(3)_A$ chiralen Symmetrie des QCD Vakuums ist eng verknüpft mit Observablen der flavor-singlet Physik [17]. Der Pion-Nukleon σ -Term $\sigma_{\pi N}$ indiziert per Definition die explizite chirale Symmetriebrechung der QCD und enthält sowohl Beiträge von connected wie auch von disconnected Diagrammen, die im vorhergehenden Kapitel eingeführt wurden. Der Schwerpunkt dieses Kapitels liegt auf der Berechnung der disconnected Diagramme für $\sigma_{\pi N}$ mit stochastischen Matrixinversionen. Gemeinsam mit den Amplituden der connected Diagramme folgt für die SESAM Eichfeldkonfigurationen mit dynamischen Wilson-Fermionen $\sigma_{\pi N} = 18(5)MeV$ [38]. Aktuelle Experimente ergeben in Übereinstimmung mit bisherigen quenched Analysen [23, 24] einen größeren Wert von $\sigma_{\pi N} \simeq 45MeV$ [67]. In der vorliegenden Gitterbestimmung von $\sigma_{\pi N}$ kann keine Skalenanalyse durchgeführt werden, weil nur ein Gitterabstand a zur Verfügung steht. Deshalb können systematische Fehler, wie z.B. die Cut-Off Abhängigkeit, nicht abgeschätzt werden. Weitere Unsicherheiten resultieren aus der Bestimmung der leichten Quarkmasse m_{light} in Simulationen der vollen QCD.

6.1 $\sigma_{\pi N}$ und chirale Symmetriebrechung

Die Lagrangedichte \mathcal{L}_{QCD} der QCD mit 3 entarteten Quark-flavors (u, d, s) hat für $m_q = 0$ eine chirale $SU(3)_V \times SU(3)_A$ Symmetrie, die spontan gebrochen ist. Daraus resultieren, als Goldstone Bosonen, die 8 leichten pseudo-skalaren Mesonen, bzw. für die $SU(2)_V \times SU(2)_A$ Symmetrie ($m_u = m_d = 0$) die Pionen π^-, π^+ und π^0 .

Soft-Pion Theoreme, wie beispielsweise die Goldberger-Treiman Relation [64] oder die Adler-Weisberger Summenregel [65] basieren auf einer exakten chiralen Symmetrie und sind nicht sensitiv auf die spontane Symmetriebrechung. Als ein Maß für

die chirale Symmetriebrechung kann ein allgemeiner σ -Term definiert werden:

$$\sigma_{\alpha\beta}^{ab} = i \int d^3x \langle \beta(p) | [A_0^a(\vec{x}, 0), \partial^0 A_0^b(0)] | \alpha(p) \rangle \quad (6.1)$$

$$= - \int d^3y \langle \beta(p) | [Q^{5a}, [\mathcal{H}(0), A_0^b(\vec{y}, 0)]] | \alpha(p) \rangle \quad (6.2)$$

$$= \langle \beta(p) | [Q^{5a}, [Q^{5a}, \mathcal{H}(0)]] | \alpha(p) \rangle \quad (6.3)$$

mit der axialen Ladung

$$Q^{5a}(t) = \int d^3x A_0^a(x) \quad \text{und} \quad (6.4)$$

$$A_\mu^a(x) = \bar{q}(x)(\lambda^a/2)\gamma_\mu\gamma_5q(x), \quad (6.5)$$

der Hamilton-Dichte \mathcal{H} und beliebigen hadronischen Zustände $\alpha(p)$ und $\beta(p)$ mit Impuls p . Ohne chirale Symmetriebrechung wäre die axiale Ladung Q^{5a} erhalten und

$$\sigma_{\alpha\beta}^{ab} = 0. \quad (6.6)$$

Speziell für Nukleonen mit Impuls $p = 0$ wird der Pion-Nukleon σ -Term definiert als:

$$\sigma_{\pi N} = \frac{1}{2M} \langle N | [Q^{5a}(0), [Q^{5a}(0), \mathcal{H}(0)]] | N \rangle \quad (6.7)$$

mit der Nukleonmasse M . Exakte Isospin-Symmetrie ($m_u = m_d$) und die Vertauschungsrelationen der Stromalgebra für skalare und pseudo-skalare Dichten, $u_i = \bar{q}\lambda_i q$ bzw. $v_i = -i\bar{q}\lambda_i\gamma_5q$,

$$\delta(x_0)[Q^{5a}(x_0), u_j(\vec{x}, x_0)] = -id_{ajk}v_k(0)\delta^4(x) \quad (6.8)$$

$$\delta(x_0)[Q^{5a}(x_0), v_j(\vec{x}, x_0)] = +id_{ajk}u_k(0)\delta^4(x), \quad (6.9)$$

ergeben zusammen:

$$\sigma_{\pi N} = \frac{1}{2M} \frac{m_u + m_d}{2} \langle N | \bar{u}u + \bar{d}d | N \rangle. \quad (6.10)$$

Hadronische Matrixelemente wie $\langle N | \bar{q}q | N \rangle$ sind im niederenergetischen Bereich der QCD nicht mit störungstheoretischen Methoden zugänglich, und die Gitterregularisierung stellt den einzigen nicht-störungstheoretischen Rechenansatz dar.

6.2 Experimentelle Bestimmung von $\sigma_{\pi N}$

Die Bestimmung von $\sigma_{\pi N}$ aus experimentellen Daten beinhaltet große Unsicherheiten, die im folgenden kurz aufgeführt werden sollen. Ausgehend von der Stromalgebra und PCAC (*partially conserved axial vector current*) Relationen findet man für

die gerade Pion-Nukleon Streuamplitude $\bar{D}^+(t)$ am unphysikalischen Cheng-Dashen Punkt $t = 2m_\pi^2$ [18]:

$$\Sigma = f_\pi^2 \bar{D}^+(2m_\pi^2) = 64(8)MeV \quad (6.11)$$

mit der Pion Zerfallskonstante f_π^2 . Neuere Analysen liefern unter Berücksichtigung höherer Ordnungen in der chiralen Störungsrechnung den leicht reduzierten Wert [67]:

$$\Sigma \simeq 60MeV. \quad (6.12)$$

Die Differenz in der Rücktransformation

$$\Delta = \Sigma(2m_\pi^2) - \Sigma(0) \quad (6.13)$$

von Σ zu dem Punkt $t = 0$, an dem $\sigma_{\pi N}$ definiert ist,

$$\Sigma(0) = f_\pi^2 \bar{D}^+(0) = \sigma_{\pi N}, \quad (6.14)$$

stellt eine weitere theoretische Unsicherheit dar. Die aktuellsten Analysen [67, 19] im Rahmen der chiralen Störungstheorie sind innerhalb der Fehler konsistent und ergeben

$$\sigma_{\pi N} \simeq 45 - 48MeV. \quad (6.15)$$

6.3 Disconnected Beiträge zu $\sigma_{\pi N}$

Im vorangegangenen Kapitel wurden zwei unterschiedliche Diagrammtypen eingeführt, die bei der Bestimmung von hadronischen Matrixelementen grundsätzlich auftreten können:

- Connected Diagramme, Bild 5.1 (a)
- Disconnected Diagramme, Bild 5.1 (b)

Man erwartet eine Aufspaltung gemäß:

$$\begin{aligned} M &= \langle N|A_\mu|N \rangle \\ &= \langle N|A_\mu|N \rangle_{conn} + \langle N|A_\mu|N \rangle_{disc}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

Im Gegensatz zu der direkten Ankopplung eines externen Stromes A_μ an ein Nukleon, z.B. ein Proton, kann auch eine gluonische Wechselwirkung über $\bar{q}q$ Paare, die aus Vakuumfluktuationen der QCD entstehen, stattfinden. Maßgeblich für die Wechselwirkung ist die Struktur von A_μ . Angenommen A_μ sei der flavor-octet Strom

$$A_8^\Gamma = \bar{u}\Gamma u + \bar{d}\Gamma d - 2\bar{s}\Gamma s. \quad (6.17)$$

Unter der Annahme

$$\langle N|\bar{u}\Gamma u|N \rangle_{disc} \simeq \langle N|\bar{d}\Gamma d|N \rangle_{disc} \simeq \langle N|\bar{s}\Gamma s|N \rangle_{disc} \quad (6.18)$$

sollten sich für A_8^Γ die Beiträge von disconnected Diagrammen gegenseitig aufheben.¹

Die Annahme in Gleichung 6.18 bedeutet, daß die Gluonen, welche für die disconnected Amplitude relevant sind, keine unterschiedlichen Quark-flavors „spüren“. Die Gluonen sind flavor-neutral und die Wahrscheinlichkeit für die spontane Erzeugung eines $\bar{q}q$ Loops aus dem Vakuum ist für u , d und s Quarks gleich groß ($m_u = m_d = m_s$). In diesem Falle wäre das QCD Vakuum flavor-symmetrisch, und jeder Quark-flavor trägt gleichermaßen zu den disconnected Diagrammen bei. Ausführlich wird die flavor-Symmetrie des QCD Vakuums in [66] diskutiert.

Viele weitere, physikalisch relevante Ströme haben eine ähnliche Struktur; so der flavor-triplet Strom A_3^Γ , der keine Beiträge von s Quarks mehr enthält:

$$A_3^\Gamma = \bar{u}\Gamma u - \bar{d}\Gamma d, \quad (6.19)$$

oder der in der QED wichtige elektromagnetische Vektor-Strom:

$$j_{em}^\mu = \frac{2}{3}\bar{u}\gamma^\mu u - \frac{1}{3}\bar{d}\gamma^\mu d - \frac{1}{3}\bar{s}\gamma^\mu s. \quad (6.20)$$

Unabhängig davon, wie genau die disconnected Beiträge von u , d und s Quarks auch übereinstimmen mögen, ist die Situation bei flavor-singlet Strömen prinzipiell eine andere, weil überhaupt keine Differenzen zwischen den Beiträgen gebildet werden. Beispielsweise der skalare flavor-singlet Strom,

$$A_1^S = \bar{u}u + \bar{d}d + \bar{s}s, \quad (6.21)$$

addiert alle Beiträge auf, sowohl von den connected wie auch von den disconnected Amplituden.

Für eine erste Abschätzung der disconnected Beiträge in $\sigma_{\pi N}$ werden zwei weitere Matrixelemente definiert:

$$\sigma_0 = \frac{m_u + m_d}{2} \langle N|A_8^1|N \rangle \quad (6.22)$$

mit dem skalaren flavor-octet Strom $A_8^1 = \bar{u}u + \bar{d}d - 2\bar{s}s$ und der sogenannte y Parameter:

$$y = \frac{2\langle N|\bar{s}s|N \rangle}{\langle N|\bar{u}u + \bar{d}d|N \rangle}. \quad (6.23)$$

Der $\sigma_{\pi N}$ Term kann damit umparametrisiert werden:

$$\sigma_{\pi N} = \frac{\sigma_0}{1-y}. \quad (6.24)$$

Wenn Gleichung 6.18 gilt, berechnet man in erster Ordnung Störungstheorie

$$\sigma_0 \simeq 25MeV, \quad (6.25)$$

¹Das gilt natürlich nicht für die connected Beiträge, weil beispielsweise $\langle N|\bar{s}\Gamma s|N \rangle_{conn} = 0 \neq \langle N|\bar{u}\Gamma u|N \rangle_{conn}$ ist.

oder mit zusätzlichen Korrekturtermen [68, 69]:

$$\sigma_0 = 35 \pm 5 \text{ MeV}. \quad (6.26)$$

Mit dem aktuellen experimentellen Wert für $\sigma_{\pi N}$ aus dem letzten Abschnitt folgt sodann

$$\frac{\sigma_{\pi N}}{\sigma_0} = 1.4 - 1.9, \quad (6.27)$$

oder entsprechend:

$$y \simeq 0.3 - 0.5. \quad (6.28)$$

Da ein Proton P , beispielsweise, keine s Quarks als Konstituenten enthält, folgt aus $y \neq 0$ direkt ein Beitrag von disconnected Diagrammen, nämlich

$$\langle P|\bar{s}s|P\rangle = \langle P|\bar{s}s|P\rangle_{disc} \neq 0. \quad (6.29)$$

Eine Bestimmung von $\sigma_{\pi N}$ muß disconnected Diagramme in die Analyse miteinbeziehen. In den folgenden Abschnitten dieses Kapitels wird eine Gitterrechnung für die hadronischen skalaren Matrixelemente $\langle P|\bar{q}q|P\rangle$ und für $\sigma_{\pi N}$, basierend auf den SESAM/ $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen mit dynamischen Wilson-Fermionen, präsentiert.

6.4 Bestimmung von $\sigma_{\pi N}$ in Gittersimulationen

6.4.1 Bisherige quenched Simulationen

In früheren quenched Simulationen [20, 21, 22] wurden stets nur die connected Diagramme für $\sigma_{\pi N}$ mitberücksichtigt mit vergleichsweise kleinen Resultaten,

$$\sigma_{\pi N} = \sigma_{\pi N}^{conn} \simeq 15 \text{ MeV}, \quad (6.30)$$

die, wie bereits gezeigt, auf zusätzliche Beiträge aus disconnected Diagrammen hinweisen. Zwei neuere Arbeiten in der quenched Näherung schließen disconnected Diagramme in die Analyse ein.

Fukugita et al. [24] benutzten für die disconnected Diagramme die Volume-Source Methode [24] und die Insertion-Technik [20] für die connected Beiträge bei einem Gitterabstand $a^{-1} = 1.5 \text{ GeV}$. Diese Methode für die disconnected Diagramme erfordert ein großes Ensemble von Eichfeldkonfigurationen ($\mathcal{O}(300 - 400)$, abhängig von der verwendeten Quarkmasse). Liu et al. [23] dagegen verwendeten stochastische Matrixinversionen mit komplexem Z2 Rauschen für die disconnected Diagramme auf einem kleinen Ensemble (25 Konfigurationen, bzw. 50 für connected Diagramme) bei $a^{-1} = 2 \text{ GeV}$. In beiden genannten Arbeiten werden die Ergebnisse dominiert durch die großen statistischen Fluktuationen in den disconnected Diagrammen. Die Ergebnisse der Gittersimulationen,

$$\begin{aligned} \sigma_{\pi N} &= 40 - 60 \text{ MeV} \text{ (Fukugita)} \\ \sigma_{\pi N} &= 49.7 \pm 2.6 \text{ MeV} \text{ (Liu)}, \end{aligned} \quad (6.31)$$

stimmen innerhalb der statistischen Fehler mit den Experimenten überein. In beiden Simulationen sind die Beiträge der disconnected Amplituden um einen Faktor 2 größer als die connected Beiträge.

Mit den SESAM Eichfeldkonfigurationen ist nun eine $\sigma_{\pi N}$ Analyse in der vollen QCD mit dynamischen Fermionen möglich. Aufgrund des eingeschränkten Ensembles (200 Konfigurationen pro Quarkmasse) werden verbesserte stochastische Matrixinversionen mit komplexem Z2 Rauschen für die disconnected Diagramme verwendet und mit der Volume-Source Methode verglichen.

6.4.2 Disconnected Diagramme: Volume-Source versus Z2 Rauschen

Mit der globalen Summationsmethode können disconnected Amplituden in $\langle P|\bar{q}q|P\rangle$ aus dem Verhältnis

$$\begin{aligned} R_q^{disc}(t) &= \frac{\langle C_P(t) \sum_y Tr(M_{y,y}^{-1}) \rangle}{\langle C_P(t) \rangle} - \langle \sum_y Tr(M_{y,y}^{-1}) \rangle \\ &= const + \langle P|\bar{q}q|P\rangle_{disc} t \end{aligned} \quad (6.32)$$

bestimmt werden. Hierfür wird die Spur über die inverse Wilson-Fermionenmatrix $Tr(M^{-1})$ benötigt. In Kapitel 3 wurde ausführlich erläutert, wie mit verbesserten stochastischen Matrixinversionen $Tr(M^{-1})$ auf den SESAM Eichfeldkonfigurationen geschätzt wird. Das gesuchte Matrixelement wird aus dem linearen Anstieg von R_q^{disc} für $t \gg 0$ bestimmt. Um die Statistik zu erhöhen wird über vorwärts- bzw. rückwärts gerichtete Spinkomponenten gemittelt.

Die resultierenden disconnected Amplituden

$$D_q = \langle P(\kappa_{sea})|\bar{q}q(\kappa_{sea})|P(\kappa_{sea})\rangle_{disc} \quad (6.33)$$

für die unterschiedlichen SESAM Quarkmassen ($\kappa_{sea} = \kappa_{loop}$) sind in Bild 6.1 dargestellt. Die statistischen Fehler bei dieser Methode betragen etwa 50% und resultieren aus einer jackknife-Analyse mit einer Blockgröße von 5 Konfigurationen.

Im Vergleich dazu zeigt Bild 6.2 das Signal für D_q mit der Volume-Source Methode bei $\kappa_{sea} = \kappa_{loop} = 0.1560$, was einer Inversion mit der ausgebreiteten Quelle

$$\eta(x) = 1 \quad (\text{für alle } x) \quad (6.34)$$

entspricht, und gezeigt wird die Amplitude mit komplexem Z2 Rauschen. Bei der Volume-

Source Methode trägt auf jeder Konfiguration ein großer, nicht-eichinvarianter Teil zu $Tr(M^{-1})$ bei, der erst im Mittel über viele Konfigurationen unterdrückt wird [24].

Bei der gleichen Anzahl an Konfigurationen (gleiche Statistik) ergibt die Volume-Source Technik – wie erwartet – das schlechteste Signal für D_q und wird daher im folgenden nicht weiter betrachtet.

Für $\kappa_{loop} = \kappa_s = 0.15608$ ergeben sich die Beiträge zu D_s :

$$D_s = \langle P(\kappa_{sea}) | \bar{q} q(\kappa_{loop}) | P(\kappa_{sea}) \rangle_{disc}. \quad (6.35)$$

Die zugehörigen Signale für D_s sind analog zu $D_{u,d}$. Alle Ergebnisse der linearen Fits mit der globalen Summationsmethode sind in Tabelle 6.1 zusammengetragen. Innerhalb der großen statistischen Fehler wächst D_q bzw. D_s mit abnehmender Quarkmasse an, und eine Brechung der flavor-Symmetrie ($D_q \neq D_s$) ist nicht signifikant.

κ_{sea}	$D_q (\kappa_{loop} = \kappa_{sea})$	$D_s (\kappa_{loop} = 0.15608)$
0.1560	0.86(54)	0.79(54)
0.1565	1.76(76)	1.74(74)
0.1570	3.22(1.68)	3.19(1.61)
0.1575	2.09(1.64)	1.85(1.44)

Tabelle 6.1: Disconnected Amplituden D_q und D_s für die 4 SESAM Quarkmassen (globale Summation, komplexes Z2 Rauschen).

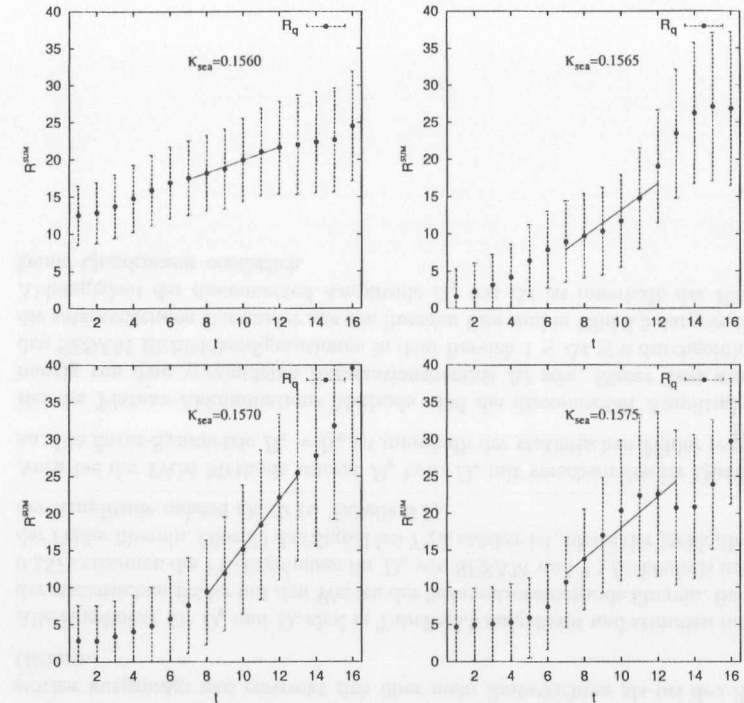


Abbildung 6.1: $R_q^{SUM}(t)$ mit komplexem Z2 Rauschen und globaler Summation auf den 4 SESAM Quarkmassen. Die durchgezogenen Linien entsprechen den linearen Fits für die disconnected Amplituden D_q .

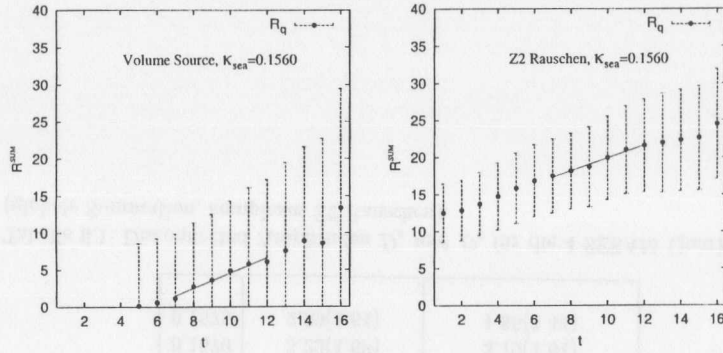


Abbildung 6.2: $R_q^{SUM}(t)$ bei der schwersten SESAM Quarkmasse $\kappa_{sea} = \kappa_{loop} = 0.156$ mit Volume-Source (links) und komplexem Z2 Rauschen (globale Summation).

6.4.3 Die Plateau-Akkumulations Methode (PAM)

Wie im vorausgehenden Kapitel bereits diskutiert wurde, kann die Plateau-Akkumulations Methode (PAM) mit einer besseren Grundzustandsprojektion den statistischen Fehler in den Amplituden von disconnected Diagrammen reduzieren.

Das gesuchte Matrixelement $\langle P|\bar{q}q|P\rangle_{disc}$ folgt aus ($1 \leq \Delta x_0, \Delta x'_0 \leq x_0$):

$$R_q^{PAM}(x_0, \Delta x_0, \Delta x'_0) = const + \langle P|\bar{q}q|P\rangle_{disc} t' \quad (6-36)$$

mit $t' = x_0 - \Delta x'_0 - \Delta x_0$.

Die resultierenden disconnected PAM Amplituden mit $\Delta t_0 = \Delta t = 1$ sind in Bild 6.3 für die 4 SESAM Quarkmassen dargestellt. Deutlich ist der gegenüber der globalen Summation reduzierte statistische Fehler zu erkennen. Vollkommen analoge Signale ergeben sich für D_s ($\kappa_{sea} = \kappa_{loop} = 0.15608$). Zusätzlich ist in Bild 6.4 das Signal für die disconnected Amplitude bei $\kappa_{sea} = 0.1575$ auf den SESAM Konfigurationen im Vergleich zu den $T\chi L$ Gittern eingezeichnet. Auf den größeren Gittern ist das Signal stärker ausgeprägt und erstreckt sich über mehr Zeitschichten als bei den SESAM Gittern.

Alle Ergebnisse für D_q und D_s sind in Tabelle 6.2 aufgelistet und stimmen innerhalb der statistischen Fehler mit den Werten der Summationsmethode überein. Bei $\kappa_{sea} = 0.1575$ stimmen die Fit-Ergebnisse für D_q von SESAM und $T\chi L$ ebenfalls innerhalb der Fehler überein. Obwohl das Signal bei $T\chi L$ stärker ist, bleibt der jackknife-Fehler der Amplitude nahezu gleich (s. Tabelle 6.2).

Auch bei der PAM Methode wächst D_q bzw. D_s mit verschwindender Quarkmasse an. Die flavor-Symmetrie $D_s = D_q$ ist innerhalb der statistischen Fehler realisiert.

Bei der Plateau-Akkumulations Methode muß die disconnected Amplitude unabhängig von dem verwendeten Summationsbereich Δt sein. Dieser Test wurde auf den SESAM Eichfeldkonfigurationen in dem Bereich $1 \leq \Delta t \leq 6$ durchgeführt, und die entsprechenden Parameter aus den linearen Fits sind in Bild 6.5 dargestellt. Eine Abhängigkeit der disconnected Amplitude D_q von Δt ist innerhalb der Fehler bei keiner Quarkmasse ersichtlich.

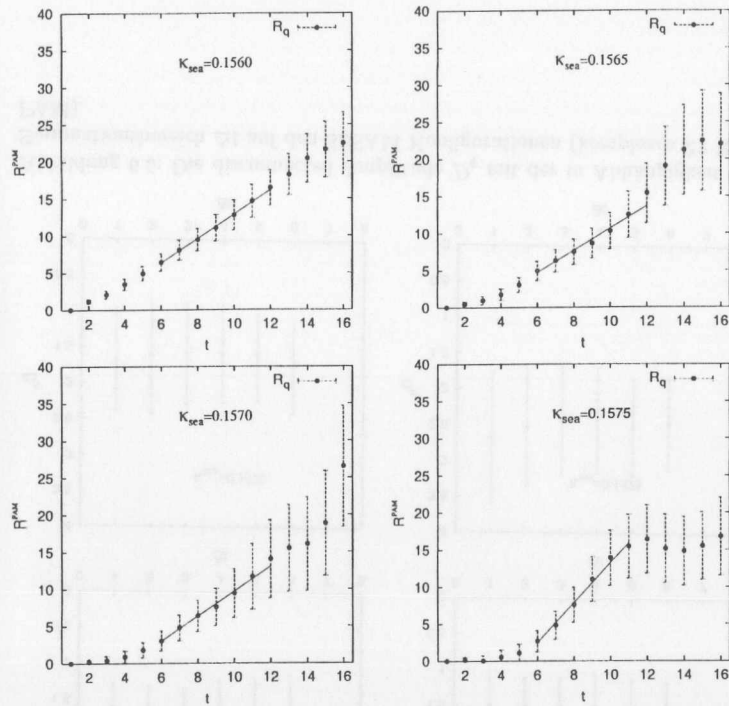


Abbildung 6.3: $R_q^{PAM}(t)$ mit $\Delta t_0 = \Delta t = 1$ für die 4 SESAM Quarkmassen ($\kappa_{sea} = \kappa_{loop}$, komplexes Z2 Rauschen, PAM). Die disconnected Amplitude D_q folgt aus dem linearen Fit (durchgezogene Linie).

κ_{sea}	$D_q (\kappa_{loop} = \kappa_{sea})$	$D_s (\kappa_{loop} = 0.15608)$
0.1560	1.63(37)	1.52(35)
0.1565	1.49(45)	1.52(44)
0.1570	1.67(71)	1.64(68)
0.1575(SESAM)	2.68(93)	2.49(86)
0.1575($T\chi L$)	2.77(81)	

Tabelle 6.2: Disconnected Amplituden D_q und D_s für die 4 SESAM Quarkmassen (komplexes Z2 Rauschen, PAM) und für $\kappa_{sea} = 0.1575 T\chi L$.

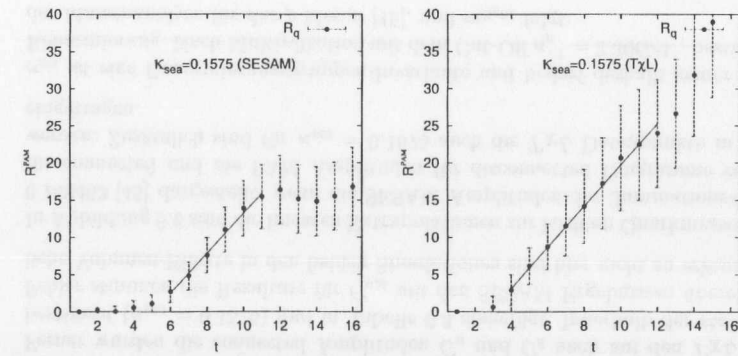


Abbildung 6.4: $R_q^{PAM}(t)$ bei $\kappa_{sea} = \kappa_{loop} = 0.1575$ für die SESAM (links) und $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen (rechts) (komplexes Z2 Rauschen, PAM). Die durchgezogenen Linien entsprechen den linearen Fits für D_q .

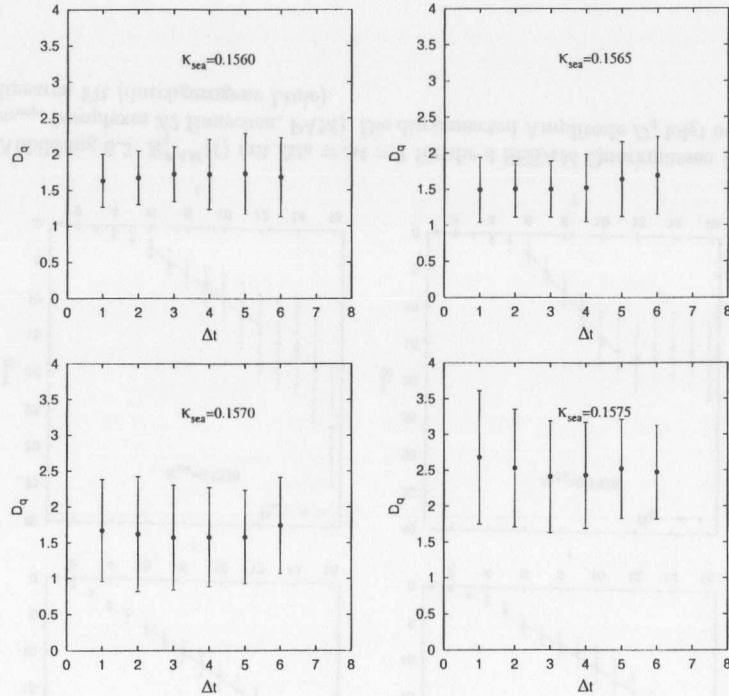


Abbildung 6.5: Die disconnected Amplitude D_q mit der in Abhängigkeit von dem Summationsbereich Δt auf den SESAM Konfigurationen (komplexes Z2 Rauschen, PAM).

6.5 Connected Diagramme und die chirale Extrapolation für $\sigma_{\pi N}$

Für die Beiträge zu $\sigma_{\pi N}$ von den connected Diagrammen ($\kappa_{val} = \kappa_{sea}$),

$$C_q = \langle P(\kappa_{sea}) | \bar{q}q(\kappa_{sea}) | P(\kappa_{sea}) \rangle_{conn}, \quad (6.37)$$

wurde sowohl die globale Summation als auch die Plateau-Methode und die Insertion-Technik verwendet. Die zugehörigen Signale finden sich in [38] und die Ergebnisse der linearen Fits sind in Tabelle 6.3 aufgelistet. Innerhalb der statistischen Fehler stimmen die Resultate beider Methoden überein, wenngleich die globale Summation kleinere statistische Fehler impliziert.

Ferner wurden die connected Amplituden C_u und C_d auch auf den $T\chi L$ Gittern bestimmt ($\kappa_{sea} = 0.1575$) und in Tabelle 6.3 eingefügt. Innerhalb der statistischen Fehler stimmen die Resultate für $C_{u,d}$ mit den SESAM Ergebnissen überein. Mögliche Volumen-Effekte in den beiden Simulationen sind hier nicht zu erkennen.

In Abbildung 6.6 sind die linearen Extrapolationen zur leichten Quarkmasse $m_{light} = 0.158462$ [45] dargestellt, wenn die SESAM Amplituden der Summations-Methode für connected und die PAM Amplituden für disconnected Diagramme verwendet werden. Zusätzlich sind für $\kappa_{sea} = 0.1575$ auch die $T\chi L$ Datenpunkte in Bild 6.6 eingetragen.

$\sigma_{\pi\pi}$ ist eine Renormierungsgruppen-Invariante und bedarf deshalb keiner weiteren Renormierung. Nach Multiplikation mit dem Cut-Off $a_\rho^{-1} = 2.30 GeV$, bestimmt aus der Massenanalyse für das ρ Meson [45], und m_{light} folgt:

$$\sigma_{\pi N} = a_\rho^{-1} m_{light} \langle P | \bar{u}u + \bar{d}d | P \rangle = 18(5) MeV. \quad (6.38)$$

Die Fehler entsprechen einer vollständigen jackknife-Analyse, die auch die statistischen Fehler in a_ρ^{-1} und m_{light} einschließt. Im Vergleich zum experimentellen Wert $\sigma_{\pi N} \simeq 45 MeV$ ergibt die Gitterbestimmung auf den SESAM Konfigurationen einen kleineren Wert. Ohne Skalenanalyse, die mit einem Gitterabstand a für die SESAM/ $T\chi L$ Simulationen nicht möglich ist, können systematische Fehler wie z.B. die Cut-Off Abhängigkeit, nicht abgeschätzt werden.

Das Verhältnis der connected zu disconnected Amplituden

$$R_{d/c} = \frac{\langle P | \bar{u}u + \bar{d}d | P \rangle_{disc}}{\langle P | \bar{u}u + \bar{d}d | P \rangle_{con}} = \frac{2D_q}{C_u + C_d} = 1.26(57) \quad (6.39)$$

ist wesentlich kleiner als in der quenched Simulation [24], $R_{d/c}^{quenched} = 2.23(52)$. Dieses Ergebnis deutet auf *unquenching* Effekte hin.

Methode	κ_{sea}	C_u	C_d	C_{u+d}
SUM	0.1560	2.08(4)	1.13(2)	3.21(5)
	0.1565	2.13(6)	1.18(4)	3.31(9)
	0.1570	2.26(11)	1.34(6)	3.60(17)
	0.1575 (SESAM)	2.40(16)	1.46(13)	3.86(28)
	0.1575 ($T\chi L$)	2.52(6)	1.47(4)	3.99(10)
PLATEAU	0.1560	1.92(5)	1.05(4)	2.98(8)
	0.1565	1.99(8)	1.15(5)	3.15(13)
	0.1570	2.08(13)	1.27(11)	3.35(24)
	0.1575	2.26(14)	1.33(11)	3.59(23)

Tabelle 6.3: Connected Amplituden C_q für $\sigma_{\pi N}$ mit globaler Summation und Plateau-Methode (Insertion-Technik). Zum Vergleich sind für $\kappa_{sea} = 0.1575$ die Werte von SESAM und $T\chi L$ (SUM) aufgelistet.

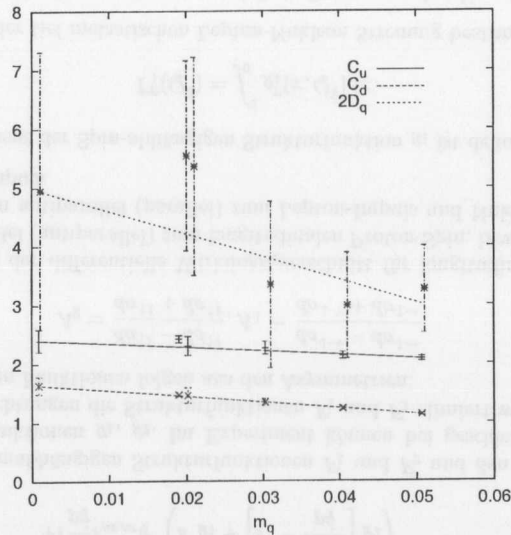


Abbildung 6.6: Lineare Extrapolationen der connected und disconnected Amplituden $C_{u,d}$ bzw. $2D_q$ zur leichten Quarkmasse m_{light} . Bei $m_q \simeq 0.02$ ($\kappa_{sea} = 0.1575$) ist zusätzlich der $T\chi L$ Datenpunkt eingetragen (links versetzt).

Kapitel 7

Der Proton-Spin und die axiale flavor-singlet Kopplung G_A^1

Die axiale flavor-singlet Kopplung des Protons ist definiert als das Matrixelement des axialen flavor-singlet Stroms A_μ^0 zwischen zwei Protonenzuständen:

$$s_\mu G_A^1 = \langle p, s | A_\mu^0(q) | p, s \rangle_{q^2=0} \quad (7.1)$$

mit dem Proton-Spin s_μ und

$$A_\mu^0 = Z_A^S \sum_{u,d,s} \bar{q} \gamma_\mu \gamma_5 q. \quad (7.2)$$

Z_A^S ist die Renormierungskonstante des axialen Stroms im Kontinuum. In diesem Kapitel wird G_A^1 in einer Gitterrechnung mit den SESAM/ $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen bestimmt. Wie in der $\sigma_{\pi N}$ Analyse werden die Beiträge von connected und disconnected Diagrammen, welche beide gleichermaßen zu G_A^1 beitragen, einzeln ausgewertet.

7.1 Experimentelle Bestimmung von G_A^1

Im Laborsystem kann der differentielle Wirkungsquerschnitt der polarisierten Lepton-Nukleon Streuung folgendermaßen parametrisiert werden:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{1}{2M} \frac{\alpha^2 E'}{q^4 E} L_{\mu\nu} W^{\mu\nu} \quad (7.3)$$

mit dem leptonischen bzw. hadronischen Tensor $L_{\mu\nu}$, $W^{\mu\nu}$, der Energie des einlaufenden (auslaufenden) Leptons E (E') und der Nukleonmasse M . Eine allgemeine Parametrisierung von $W_{\mu\nu}$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
W_{\mu\nu} &= W_{\mu\nu}^S + iW_{\mu\nu}^A \\
&= F_1 \left(-g_{\mu\nu} + \frac{q_\mu q_\nu}{q^2} \right) + F_2 \left(p_\mu - \frac{p q q_\mu}{q^2} \right) \left(p_\nu - \frac{p q q_\nu}{q^2} \right) (p q) \\
&\quad + i \frac{M}{p q} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} q^\rho \left(s^\sigma g_1 + \left[s^\sigma - \frac{s q p^\sigma}{p q} \right] g_2 \right) \quad (7.4)
\end{aligned}$$

mit den Spin-unabhängigen Strukturfunktionen F_1 und F_2 und den Spin-abhängigen Strukturfunktionen g_1 , g_2 . Im Experiment können bei geschickter Wahl der Polarisationsrichtungen die Strukturfunktionen F_1 und F_2 eliminiert werden, und die Spin-abhängigen Funktionen folgen aus den Asymmetrien:

$$A_{\parallel} = \frac{d\sigma^{\uparrow\downarrow} - d\sigma^{\uparrow\uparrow}}{d\sigma^{\uparrow\downarrow} + d\sigma^{\uparrow\uparrow}}, A_{\perp} = \frac{d\sigma^{\downarrow\rightarrow} - d\sigma^{\uparrow\rightarrow}}{d\sigma^{\downarrow\rightarrow} + d\sigma^{\uparrow\rightarrow}} \quad (7.5)$$

$d\sigma^{\uparrow\downarrow}$ ($d\sigma^{\uparrow\uparrow}$) ist der differentielle Wirkungsquerschnitt für longitudinal polarisierte Leptonen parallel (antiparallel) zum longitudinalen Proton-Spin, bzw. $d\sigma^{\downarrow\rightarrow}$ ($d\sigma^{\uparrow\rightarrow}$) für Lepton-Spin antiparallel (parallel) zum Lepton-Impuls und Nukleon-Spin quer zum Lepton-Impuls.

Das erste Moment der Spin-abhängigen Strukturfunktion g_1 ist definiert als

$$\Gamma_1^p(Q^2) = \int_0^1 g_1^p(x, Q^2) dx \quad (7.6)$$

und kann aus der tief inelastischen Lepton-Nukleon Streuung bestimmt werden.

Im Parton-Modell geht man davon aus, daß ein Proton aus drei Konstituenten (Partonen) aufgebaut ist. Innerhalb dieses Modells kann $\Gamma_1^p(Q^2)$ mit dem Spin einzelner Quarks in Verbindung gebracht werden [27]:

$$\Gamma_1^p = \frac{1}{2} \sum_{q=u,d,s} e_q^2 \Delta q(Q^2) = -\frac{1}{2} \sum_q e_q^2 \langle p | \bar{q} \gamma_\mu \gamma_5 q | p \rangle s^\mu \quad (7.7)$$

mit der Helizität des Quark-flavors q in Richtung des Proton-Spins:

$$\Delta q = \int_0^1 \Delta q(x) dx = \int_0^1 [q^\uparrow(x) + \bar{q}^\uparrow(x) - q^\downarrow(x) - \bar{q}^\downarrow(x)] dx. \quad (7.8)$$

Bei Energien von $Q^2 = 10.7 \text{ GeV}^2$ tragen drei Quark-flavors bei:

$$\Gamma_1^p(Q^2) = \frac{1}{2} \left(\frac{4}{9} \Delta u(Q^2) + \frac{1}{9} \Delta d(Q^2) + \frac{1}{9} \Delta s(Q^2) \right). \quad (7.9)$$

Aus den aktuellen experimentellen Ergebnissen der Proton-, Neutron-, und Deuteron-Streuung [78, 81, 79, 80, 75], folgen die Werte für Δq und

$$G_A^1 = \sum_{q=u,d,s} \Delta q \quad (7.10)$$

(Tabelle 7.1).

Weitere Informationen über die Polarisierungen der Quarks sind in den nicht-flavor-singlet axialen Kopplungskonstanten

$$G_A^3(Q^2) = \Delta u(Q^2) - \Delta d(Q^2), \quad G_A^8(Q^2) = \Delta u(Q^2) + \Delta d(Q^2) - 2\Delta s(Q^2) \quad (7.11)$$

enthalten. G_A^3 und G_A^8 haben als flavor-triplet bzw. flavor-octet Größen keine axiale Anomalie und können aus dem Neutron- und Hyperon Beta-Zerfall bei $q^2 = 0$ bestimmt werden. Unter der Annahme $\Delta s = 0$ folgt dann die Ellis-Jaffe QCD Summenregel [74]

$$\Gamma_1^p(Q^2) = \frac{1}{12} G_A^3 + \frac{5}{36} G_A^8, \quad (7.12)$$

und es ergibt sich folgender Wert für $\Gamma_1^p(Q^2)$ (ohne QCD Korrekturen):

$$\Gamma_1^p(Q^2) = 0.185(3) \quad (7.13)$$

bzw. $\Gamma_1^p(Q^2) = 0.171(6)$ ($G_A^1 \simeq 0.58$) mit Korrekturtermen der 1. Ordnung (bei $Q^2 = 10 \text{ GeV}^2$).¹

Im Parton-Modell entspricht die axiale flavor-singlet Kopplung des Protons G_A^1 dem Teil des Proton-Spins, der von den Konstituenten getragen wird. Daß $G_{A,exp}^1 \simeq 0.29$ im Experiment kleiner ist als die Vorhersage der Ellis-Jaffe Summenregel ($G_{A,SUM}^1 = 0.58$) zeigt die Grenzen des Parton-Modells auf: die Quarks unterliegen auch der starken Wechselwirkung (QCD) und gluonische Beiträge (disconnected Diagramme) erklären den kleineren experimentellen Wert für G_A^1 ($\Delta s \neq 0$).

Unabhängig vom Parton-Modell können in Gittersimulationen mit nicht-störungstheoretischen Methoden die connected und disconnected Beiträge zu Δq und G_A^1 getrennt bestimmt werden und mit den Experimenten bzw. den QCD Summenregeln verglichen werden.

	$Q^2 [\text{GeV}^2]$	Δu	Δd	Δs	G_A^1
[76]	10	0.83(3)	-0.43(3)	-0.10(3)	0.31(7)
[77]	3	0.82(3)	-0.44(3)	-0.11(3)	0.27(4)

Tabelle 7.1: Beiträge Δq zum Proton-Spin und die axiale Kopplung G_A^1 aus zwei unterschiedlichen Analysen, basierend auf neueren experimentellen Daten.

¹Frühere Experimente ermittelten aus der Proton-Lepton Streuung $\Gamma_1^p = 0.126 \pm 0.018$ [73] ($G_A^1 = 0.12(17)$). Diese Diskrepanz zu der Vorhersage aus der Ellis-Jaffe QCD Summenregel löste die sogenannte Proton-Spin Krise aus. Eine ausführliche Darstellung der Proton-Spin Krise findet sich in [27].

7.2 Bestimmung von G_A^1 in Gittersimulationen

In Kapitel 5 wurde bereits erklärt, wie hadronische Matricelemente, die die Wechselwirkung eines Nukleons mit einem externen Strom,

$$M = \langle N | A_\mu | N \rangle, \quad (7.14)$$

charakterisieren, auf dem Gitter berechnet werden können. Auch für den axialen flavor-singlet Strom

$$A_\mu^0 = \sum_{q=u,d,s} \bar{q} \gamma_\mu \gamma_5 q \quad (7.15)$$

treten sowohl connected als auch disconnected Diagramme auf (s. Bild 5.1).

Gegenüber dem skalaren Strom beim Pion-Nukleon Sigma-Term $\sigma_{\pi N}$ ist die Dirac-Struktur nun $\Gamma = \gamma_\mu \gamma_5$. Alle weiteren Berechnungen verlaufen analog zu $\sigma_{\pi N}$ und werden in den folgenden Abschnitten besprochen.

7.2.1 Die topologische Methode

Anstatt connected und disconnected Diagramme, die beide zu G_A^1 beitragen, direkt auszurechnen, benutzt die topologische Methode die axiale Anomalie und vermeidet indirekt die aufwendige Berechnung der disconnected Diagramme. An dieser Stelle sei kurz die Methode vorgestellt. Details, weitere Probleme und Ergebnisse finden sich in [83] bzw. in [84].

Die axiale Anomalie im chiralen Limes ($m_q = 0$)

$$\partial_\mu A_\mu^0 = 2N_f q(x) \quad (7.16)$$

enthält die topologische Ladungsdichte $q(x)$ (siehe Gleichung 4.4). In das gesuchte Matricelement $\langle p', s | A_\mu^0(q) | p, s \rangle$ kann die axiale Anomalie eingesetzt werden. Nach Fouriertransformation folgt

$$iq_\mu \langle p', s | A_\mu^0(q) | p, s \rangle = 2N_f \frac{\alpha_s}{4\pi} \langle p', s | q(x) | p, s \rangle \quad (7.17)$$

mit N_f Fermionen, der starken Kopplungskonstante α_s , und den Proton-Impulsen p und p' . Im Ruhesystem des Protons, wenn p in Richtung des Impulsübertrags q polarisiert ist, gilt im Limes $q \rightarrow 0$:

$$G_A^1 = s_\mu \langle p, s | A_\mu^0 | p, s \rangle = \lim_{\vec{q} \rightarrow 0} 2N_f \frac{\alpha_s}{4\pi} \frac{-i|\vec{s}|^2}{\vec{q} \cdot \vec{s}} \langle p', s | q(x) | p, s \rangle. \quad (7.18)$$

In einer Gittersimulation mit der topologischen Methode muß also zusätzlich zum chiralen Limes noch die Extrapolation zum Impulsübertrag $q = 0$ durchgeführt werden. Ferner wird für die rechte Seite von Gleichung 7.18 die Korrelation von impulsbehafteten Protonen mit der topologischen Ladungsdichte $q(x)$ benötigt – eine auf

dem Gitter problematische Berechnung aufgrund großer statistischer Fluktuationen beider Größen.

G_A^1 kann prinzipiell über Gleichung 7.18 bestimmt werden und umgeht unter Ausnutzung der axialen Anomalie die direkte Berechnung der disconnected Diagramme, wenngleich statt dessen neue Unsicherheiten und Fehlerquellen in die Methode Einzug finden, z.B. unterschiedliche Definitionen der topologischen Ladung, die in Kapitel 4 bereits diskutiert wurden. In dieser Arbeit wird die topologische Methode nicht weiter betrachtet.

7.2.2 Bisherige Gittersimulationen

Die flavor-octet bzw. flavor-triplet Kopplungskonstanten des Protons, G_A^3 bzw. G_A^8 , die keine Beiträge von disconnected Diagrammen haben, wurde bereits vor mehreren Jahren mit verhältnismäßig kleiner Statistik in der quenched Näherung bestimmt [85, 86, 87].

Eine genauere quenched-Analyse präsentierte die QCDSF Kollaboration mit einer $\mathcal{O}(a)$ verbesserten Wirkung und großer Statistik ($\mathcal{O}(100) - \mathcal{O}(500)$ Eichfeldkonfigurationen) [88]. Eine nicht-störungstheoretische Renormierungskonstante Z_A^{NS} wurde benutzt [89]. Mit drei unterschiedlichen Kopplungskonstanten β konnte der Kontinuums-limes $a \rightarrow 0$ betrachtet werden. Innerhalb der Fehler stimmt der Wert für G_A^3 mit dem Experiment überein [88].

Bisherige Gittersimulationen für die axiale flavor-singlet Kopplung des Protons G_A^1 , die sowohl connected als auch disconnected Diagramme mitberücksichtigen, sind von Liu et al. [25] und Fukugita et al. [26] ebenfalls nur in quenched Näherung mit Wilson-Fermionen durchgeführt worden. Liu et al. benutzte ein $16^3 \times 24$ Gitter bei $\beta = 6.0$ und 25 Eichfeldkonfigurationen bei drei unterschiedlichen Quarkmassen. Für die disconnected Diagramme wurden stochastische Matrixinversionen mit komplexem Z_4 Rauschen verwendet, während die connected Diagramme mit der Insertion-Technik und der globalen Summationsmethode [20] berechnet wurden. Die Ergebnisse sind in Tabelle 7.2 zusammengefaßt. Fukugita et al. ($16^3 \times 20$ Gitter, $\beta = 5.7$) analysierte G_A^1 auf 300 Eichfeldkonfigurationen und benutzte für die disconnected Diagramme die Volume-Source Methode [24]. Die Ergebnisse sind ebenfalls in Tabelle 7.2 aufgeführt. In beiden Fällen wurde eine tadpole-verbesserte Renormierungskonstante [90]

$$Z_A^S = Z_A^{NS} \quad (7.19)$$

verwendet.

Die Ergebnisse für G_A^1 sind von den statistischen Fehlern der disconnected Diagramme dominiert. Abweichungen bei G_A^3 von den experimentellen Resultaten können Aufschluß über die systematischen Fehler der Gitterrechnungen geben, z.B. die quenched Näherung oder Cut-Off Effekte. In beiden Simulationen aber sind die Beiträge von den disconnected Diagrammen statistisch signifikant und negativ. Bekräftigt

	Δu	Δd	Δs	G_A^3	G_A^1
[25]	0.79(11)	-0.42(11)	-0.12(1)	1.20(10)	0.25(12)
[26]	0.638(54)	-0.347(46)	-0.109(30)	0.985(25)	0.18(10)

Tabelle 7.2: Axiale Kopplungskonstanten und die einzelnen Beiträge zum Proton-Spin Δq in bisherigen quenched QCD Simulationen.

wird damit das Bild, demgemäß reine Quantenfluktuationen des QCD Vakuums den Wert für G_A^1 reduzieren.

7.2.3 Connected Diagramme für G_A^1

Die Berechnung der connected Diagramme aus Bild 5.1 verläuft vollauf analog zur $\sigma_{\pi N}$ Analyse mit der modifizierten Spin-Struktur:

$$\Gamma = 1 \rightarrow \Gamma = \gamma_\mu \gamma_5. \quad (7.20)$$

Die globale Summationsmethode [20] – wie in Kapitel 5 beschrieben – berechnet $R_A^{SUM}(t)$ mit der Insertion-Technik. Die gesuchte connected Amplitude

$$C_q = \langle P | \bar{q} \gamma_\mu \gamma_5 q | P \rangle_{conn} \quad (7.21)$$

folgt aus dem asymptotischen, linearen Anstieg in

$$R_A^{SUM}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} const + \langle P | \bar{q} \gamma_\mu \gamma_5 q | P \rangle_{conn} t. \quad (7.22)$$

In Bild 7.1 ist $R_A^{SUM}(t)$ für $q = u$ bzw. $q = d$ für die 4 SESAM Quarkmassen eingezeichnet. Um die statistischen Fehler zusätzlich zu minimieren, wurde über die Spin-Kombinationen

$$\Gamma = \gamma_1 \gamma_5, \gamma_2 \gamma_5, \gamma_3 \gamma_5 \quad (7.23)$$

und vorwärts- bzw. rückwärtslaufende Spin-Komponenten gemittelt. Für alle Quarkmassen ist $\kappa_{val} = \kappa_{sea}$.

Die Parameter der linearen Fits für C_q sind in Tabelle 7.3 zusammengefasst. Zum Vergleich sind bei $\kappa_{sea} = 0.1575$ auch die Fit-Ergebnisse von den $T\chi L$ Gittern angegeben, um die Volumen-Effekte beider Simulationen abzuschätzen. Innerhalb der statistischen Fehler stimmen die Werte für C_d überein. Die Abweichungen bei C_u sind kleiner als 7%.

Statistische Fehler wurden mit der jackknife-Analyse bestimmt (Blockgröße: 5 Konfigurationen). Die Abhängigkeit der connected Amplituden von der Quarkmasse ist gering.

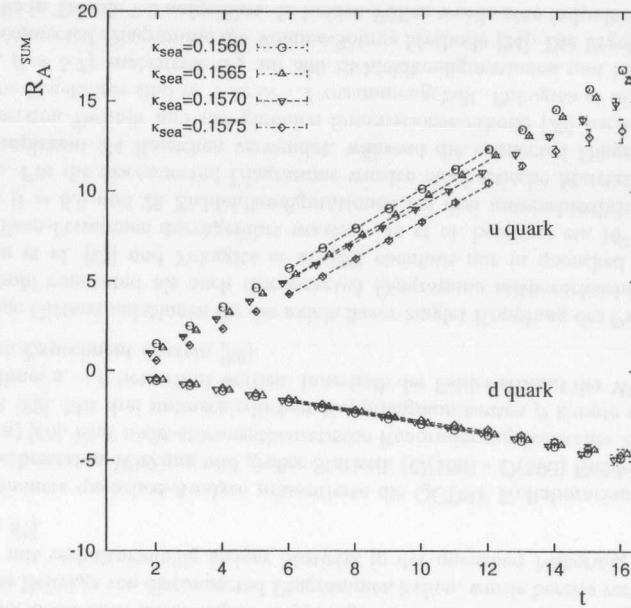


Abbildung 7.1: Connected Beiträge zu G_A^1 auf den SESAM Konfigurationen: $R_A^{SUM}(t)$ für $q = u$ und $q = d$ mit globaler Summation. Die durchgezogenen Linien entsprechen den linearen Fits für $C_{u,d}$.

$\kappa_{sea} = \kappa_{val}$	C_u	C_d
0.1560	1.100(8)	-0.307(3)
0.1565	1.102(11)	-0.308(4)
0.1570	1.025(12)	-0.297(8)
0.1575(SESAM)	1.018(24)	-0.295(10)
0.1575($T\chi L$)	1.086(11)	-0.310(6)

Tabelle 7.3: Die axialen connected Amplituden C_u und C_d mit globaler Summation auf den SESAM Konfigurationen. Zusätzlich ist der Wert auf den $T\chi L$ Gittern bei $\kappa_{sea} = 0.1575$ angegeben.

7.2.4 Disconnected Diagramme für G_A^1

Bei der Analyse der disconnected Diagramme in Bild 5.1 mit der globalen Summationsmethode wird – wie bei $\sigma_{\pi N}$ – das Verhältnis (für $\mu = 3$)² betrachtet:

$$R_A^{SUM}(t) = \frac{\langle C_P(t) \sum_y Tr(\gamma_3 \gamma_5 M_{y,y}^{-1}) \rangle}{\langle C_P(t) \rangle} - \langle \sum_y Tr(\gamma_3 \gamma_5 M_{y,y}^{-1}) \rangle$$

$$= const + \langle P | \bar{q} \gamma_3 \gamma_5 q | P \rangle_{disc} t. \quad (7.24)$$

Um die Statistik zu erhöhen wird über vorwärts und rückwärts gerichtete Spin-Komponenten gemittelt. Die disconnected Amplitude

$$D_q = \langle P(\kappa_{sea}) | \bar{q} \gamma_3 \gamma_5 q(\kappa_{loop}) | P(\kappa_{sea}) \rangle_{disc} \quad (7.25)$$

folgt aus dem asymptotischen linearen Anstieg in $R_A^{SUM}(t)$.

Im Unterschied zu der $\sigma_{\pi N}$ Analyse liefert die globale Summation keinen statistisch signifikanten linearen Anstieg in R_A^{SUM} , weil das Rauschen in den Daten zu groß ist.

²Die Spin-Kombinationen $\mu = 1$ und $\mu = 2$, also $\Gamma = \gamma_1 \gamma_5$ und $\Gamma = \gamma_2 \gamma_5$, haben eine nicht-diagonale Struktur im Spin-Unterraum und können auch mit verbesserten stochastischen Matrixinversionen nicht ausreichend genau geschätzt werden (siehe Kapitel 3), d.h. in diesen Kanälen ist kein Signal für R_A^{SUM} oder R_A^{PAM} zu beobachten.

Erst mit der Plateau-Akkumulations Methode (PAM), die statistische Fehler in disconnected Diagrammen reduziert, werden Signale sichtbar. In Bild 7.2 ist $R_A^{PAM}(t)$ für die 4 SESAM Quarkmassen eingezeichnet, wobei

$$\kappa_{val} = \kappa_{sea}, \quad \kappa_{loop} = \kappa_{sea} \quad (7.26)$$

gewählt wurde. Eine Δt Analyse, wie sie für $\sigma_{\pi N}$ durchgeführt werden konnte, läßt die statistische Güte der Signale nicht zu. Gezeigt werden nur die Daten für $\Delta t_0 = \Delta t = 1$.

Man erwartet für $m_q \rightarrow 0$ eine Verschlechterung des Signals bei leichteren Quarkmassen und beobachtet für $\kappa_{sea} = 0.1575$ auf den SESAM Konfigurationen ein sehr schwach ausgeprägtes Signal. Für die größeren $T\chi L$ Gitter ist das Signal bei derselben leichten Quarkmasse erwartungsgemäß stärker, und für die weitere Analyse werden die $T\chi L$ Daten für $R_A^{PAM}(t)$ verwendet, weil die *finite-size* Effekte in dem großen statistischen Fehler der disconnected Amplituden nicht aufgelöst werden können. Durch diese Ersetzung liegen Signale für $R_A^{PAM}(t)$ von vergleichbarer statistischer Qualität für alle Quarkmassen vor.

Bild 7.4 zeigt $R_A^{PAM}(t)$ für das Matrixelement

$$D_s = \langle P(\kappa_{sea}) | \bar{s} \gamma_3 \gamma_5 s(\kappa_{loop}) | P(\kappa_{sea}) \rangle_{disc} \quad (7.27)$$

mit $\kappa_{loop} = \kappa_s$ auf der schwersten und leichtesten SESAM Quarkmasse, $\kappa_{sea} = 0.156$ bzw. $\kappa_{sea} = 0.1575$. Die Masse des s Quark-Loops entspricht

$$\kappa_s = 0.15608. \quad (7.28)$$

In Tabelle 7.4 sind die Ergebnisse der linearen Fits für D_q bzw. D_s zusammengetragen. Innerhalb der großen statistischen Fehler ist die Abhängigkeit der Amplituden D_q bzw. D_s von der Quarkmasse m_q klein. Die Daten sind verträglich mit der flavor-Symmetrie des QCD Vakuums, also $D_q \simeq D_s$.

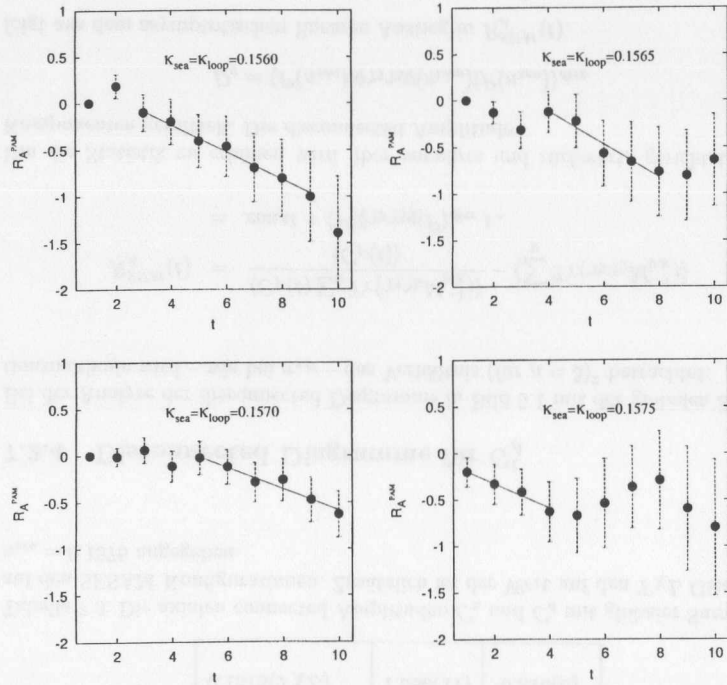


Abbildung 7.2: $R_A^{PAM}(t)$ auf den SESAM Konfigurationen mit $\Delta t_0 = \Delta t = 1$ (komplexes Z2 Rauschen, PAM). Die Geraden entsprechen den linearen Fits für die disconnected Amplitude D_q .

κ_{sea}	D_q	D_s
0.1560	-0.146(60)	-0.163(58)
0.1565	-0.177(97)	-0.125(74)
0.1570	-0.119(62)	-0.129(82)
0.1575	-0.124(62)	-0.184(76)

Tabelle 7.4: Resultate der linearen Fits für die disconnected Amplituden D_q und D_s bei $\kappa_{loop} = \kappa_{sea}$, bzw. $\kappa_{loop} = \kappa_s = 0.15608$ (komplexes Z2 Rauschen, PAM). Bei $\kappa_{sea} = 0.1575$ wurde für D_q der $T\chi L$ Datenpunkt verwendet.

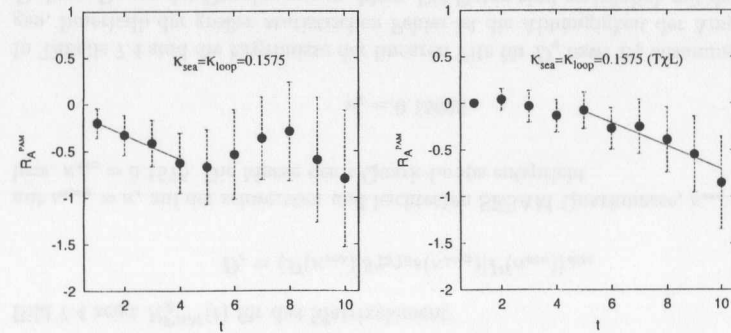


Abbildung 7.3: $R_A^{PAM}(t)$ für die leichteste SESAM Quarkmasse $\kappa_{sea} = 0.1575$ (links) im Vergleich zu den $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen ($\Delta t_0 = \Delta t = 1$, komplexes Z2 Rauschen, PAM). Der lineare Fit entspricht der disconnected Amplitude D_q .

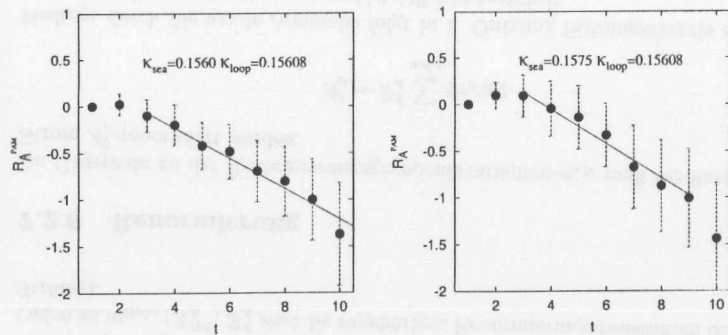


Abbildung 7.4: $R_A^{PAM}(t)$ für $\kappa_{loop} = \kappa_s = 0.15608$ auf der schwersten (links) und leichtesten SESAM Quarkmasse ($\Delta t_0 = \Delta t = 1$, komplexes Z2 Rauschen, PAM).

7.2.5 Extrapolation zum chiralen Limes

Basierend auf den Daten aus Tabelle 7.3 und 7.4 zeigt Bild 7.5 die linearen Extrapolationen der nicht-renormierten axialen Amplituden $C_{u,d}$, D_q und D_s zur leichten Quarkmasse m_{light} . Innerhalb der großen statistischen Fehler der disconnected Amplituden stimmt der Wert bei m_{light} für D_q und D_s überein, sodaß für die flavor-singlet und flavor-octet Kopplungen des Protons Beiträge der disconnected Diagramme vernachlässigt werden können. Die unrenormierten Gittergrößen sind in Tabelle 7.5 zusammengetragen.

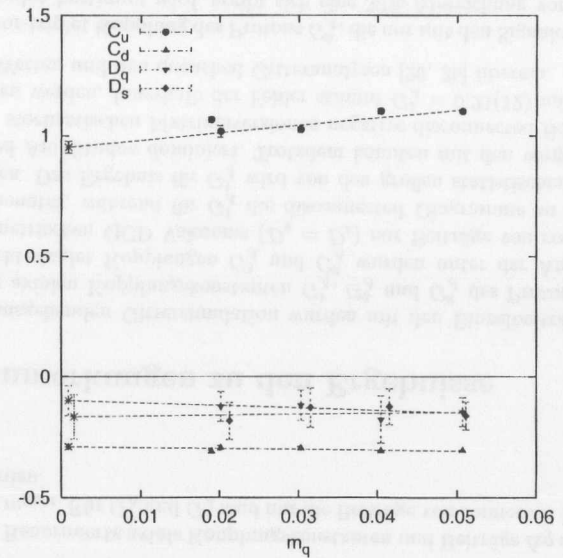


Abbildung 7.5: Chirale Extrapolationen der unrenormierten axialen Gitter-Amplituden $C_{u,d}$ und $D_{q,s}$ zu m_{light} mit den zugehörigen linearen Fits. Für C_u und C_d bei $m_q \simeq 0.02$ ($\kappa_{sea} = 0.1575$) sind zusätzlich die $T\chi L$ Datenpunkte eingetragen (links versetzt).

$\Delta u = C_u + D_q$	$\Delta d = C_d + D_q$	$\Delta s = D_s$
0.85(10)	-0.389(92)	-0.166(91)
$G_A^1/Z_A^S = C_u + C_d + 2D_q + D_s$	$G_A^3/Z_A^{NS} = C_u - C_d$	$G_A^8/Z_A^{NS} = C_u + C_d$
0.30(17)	1.243(28)	0.663(25)

Tabelle 7.5: Unrenormierte axiale Kopplungskonstanten und die Beiträge zum Proton-Spin Δq nach chiraler Extrapolation der connected und disconnected Amplituden zu m_{light} (Z_A^{NS} , Z_A^S sind die zugehörigen Renormierungskonstanten der axialen Ströme).

7.2.6 Renormierung

Im Gegensatz zu der Renormierungsgruppeninvarianten $\sigma_{\pi N}$ muß der flavor-singlet Strom A_μ^0 renormiert werden:

$$A_\mu^0 = Z_A^S \sum_{u,d,s} \bar{q} \gamma_\mu \gamma_5 q. \quad (7.29)$$

Bedingt durch die axiale Anomalie folgt in 2. Ordnung Störungstheorie eine logarithmische Divergenz, die zu einer Cut-Off Abhängigkeit

$$G_A^1 = G_A^1(\mu^2) \quad (7.30)$$

der flavor-singlet Kopplung des Protons führt und bis zur 3-Loop Näherung im Kontinuum gerechnet wurde [91]. Die Skalenabhängigkeit erwies sich dabei als gering [75].

Auf dem Gitter dagegen (Wilson-Fermionen) müssen auch bereits die im Kontinuum erhaltenen Ströme A_μ^3 und A_μ^8 renormiert werden [92]. Der Renormierungsfaktor für die nicht-singlet Ströme ist in 1. Ordnung bekannt, wo er mit Z_A^S übereinstimmt (tadpole-verbessert) [90, 93]:

$$Z_A^{NS} = \frac{1}{2\kappa} \left(1 - \frac{3\kappa}{4\kappa_c} \right) \left(1 - 0.31\alpha_{\overline{MS}} \left(\frac{1}{a} \right) \right) \quad (7.31)$$

mit dem Gitterabstand a und der Kopplungskonstante α im \overline{MS} Renormierungsschema. Für die vorliegende Gittersimulation sind weder die höheren Ordnungen noch das Skalenverhalten von $G_A^1(\mu^2)$ bekannt. Hier wird vorausgesetzt, daß die höheren Ordnungen klein sind und die μ^2 Abhängigkeit, ähnlich wie im Kontinuum,

gering ausfällt. Unumgänglich ist in diesem Zusammenhang die nicht-störungstheoretische Bestimmung von Z_A^{NS} – wie sie bereits für quenched Rechnungen durchgeführt wurde [94, 95] – in der vollen QCD mit dynamischen (Wilson) Fermionen. Die gemäß Gleichung 7.31 renormierten Resultate für die axiale Kopplungskonstanten des Protons sind in Tabelle 7.6 zusammengetragen.

Δu	Δd	Δs	G_A^1	G_A^3	G_A^8
0.62(7)	-0.28(6)	-0.12(7)	0.21(12)	0.907(20)	0.484(18)

Tabelle 7.6: Renormierte axiale Kopplungskonstanten und Beiträge Δq zum Spin des Protons bei m_{light} . Für G_A^3 und G_A^8 sind nur die Beiträge von connected Diagrammen benutzt worden.

7.3 Anmerkungen zu den Ergebnisse

In der vorausgehenden Gittersimulation wurden mit den Einzelbeiträgen Δu , Δd und Δs die axialen Kopplungskonstanten G_A^1 , G_A^3 und G_A^8 des Protons bestimmt. Für die nicht-singlet Kopplungen G_A^3 und G_A^8 wurden unter der Annahme eines flavor-symmetrischen QCD Vakuums ($D_q = D_s$) nur Beiträge von connected Diagrammen benutzt, während für G_A^1 die disconnected Diagramme zu Δu , Δd und Δs beitragen. Das Ergebnis für G_A^1 wird von den großen statistischen Fehlern der disconnected Amplituden dominiert. Trotzdem konnten mit den vorgestellten Methoden der stochastischen Matrixinversionen negative disconnected Beiträge zu G_A^1 nachgewiesen werden. Innerhalb der Fehler stimmt $G_A^1 = 0.21(12)$ mit den experimentellen Werten und den quenched Gitteranalysen [26, 25] überein.

Für die flavor-triplet Kopplung des Protons G_A^3 , die nur mit den Signalen der connected Amplituden bestimmt wird, ergibt sich eine 30% Abweichung vom experimentellen Wert

$$G_A^{3,exp} = 1.2670(35). \quad (7.32)$$

Um die systematischen Fehler der Gitteranalyse abschätzen zu können, bedarf es einerseits einer Skalenanalyse mit mehreren Gitterabständen a und andererseits der nicht-störungstheoretischen Bestimmung der Renormierungskonstanten Z_A^{NS} bzw. Z_A^S .

Kapitel 8

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden die Techniken vorgestellt und angewandt, mit denen flavor-singlet Matrixelemente in Gittersimulationen der vollen QCD bestimmt werden können. Grundlage bildeten dabei die Eichfeldkonfigurationen der SESAM und $T\chi L$ Kollaboration mit zwei entarteten dynamischen Wilson-Fermionen. Der Schwerpunkt lag auf der Berechnung von disconnected Diagrammen, die in flavor-singlet Prozessen als reine QCD Quantenfluktuationen zu physikalischen Observablen beitragen.

Die zugrundeliegende Technik für die Berechnung von disconnected Diagrammen umfaßt stochastische Inversionen der Wilson-Fermionenmatrix M . Es konnten, ausgehend von den Standard-Techniken mit komplexem Z2 Rauschen, zwei verbesserte Methoden entwickelt werden, die spin-explizite Methode und das Rauschsubtraktionsverfahren. Bei nicht-diagonalen Elementen von M^{-1} konnte der statistische Fehler – abhängig von der jeweiligen Quarkmasse und der verwendeten Methode – um bis zu 50% reduziert werden. In einem Großcomputerexperiment wurden daraufhin alle SESAM und die $T\chi L$ Eichfeldkonfigurationen bei $\kappa_{sea} = 0.1575$ mit verbesserten stochastischen Matrixinversionen analysiert und die Größen $Tr(\Gamma M^{-1})$, wie sie für disconnected Diagramme benötigt werden, bestimmt.

Topologische Anregungen des Vakuums sind für die axiale Anomalie und das $U_A(1)$ Problem der QCD relevant, weil eine nicht-triviale Topologie die zugrundeliegenden Symmetrien explizit bricht. In diesem Zusammenhang wurde die topologische Ladung Q_L der SESAM Eichfeldkonfigurationen mit einer neuen fermionischen Methode, basierend auf dem Atiyah-Singer Index-Theorem und stochastischen Matrixinversionen, bestimmt und mit den Resultaten aus der feldtheoretischen Definition auf gekühlten Konfigurationen verglichen. Es zeigte sich eine sehr starke Korrelation der Daten aus beiden Methoden, und es bestätigte sich die Annahme, daß auch auf dem Gitter der fermionische und gluonische Sektor der Theorie über das Index-Theorem verbunden sind. Für eine Bestimmung der topologischen Suszeptibilität χ und der Masse des η' Mesons sollten in weiterführenden Gitterrechnungen die additive und multiplikative Renormierungskonstante in Q_L ebenfalls mit nicht-störungstheoretischen Methoden ermittelt werden.

Es konnte also mit zwei vollkommen unabhängigen Methoden nachgewiesen werden, daß in den SESAM Simulationen mit dem verwendeten Hybrid Monte-Carlo Algorithmus – innerhalb des verwendeten Parameterbereiches – alle topologischen Sektoren repräsentiert werden. Nur unter dieser Voraussetzung konnte die Gitteranalyse der axialen flavor-singlet Kopplung des Protons erfolgen.

Für den Pion-Nukleon σ -Term $\sigma_{\pi N}$, der die explizite chirale Symmetriebrechung der QCD indiziert, sind die Beiträge von disconnected Diagrammen in derselben Größenordnung wie für die connected Amplituden. Für die disconnected Amplituden konnte mit komplexem Z2 Rauschen und der Plateau-Akkumulations Methode der statistische Fehler bis auf ca. 30% gesenkt werden. Innerhalb dieser statistischen Fehler ergibt sich auf den SESAM Konfigurationen $\sigma_{\pi N} = 18(5) MeV$. Da nur ein einziger Gitterabstand a zur Verfügung steht, kann keine Skalenanalyse für $\sigma_{\pi N}$ durchgeführt werden. Für das Verhältnis der disconnected zur connected Amplitude $R_{d/c}$ für $\sigma_{\pi N}$ findet sich ein deutlich kleinerer Wert als in bisherigen quenched Analysen, was als Effekt der dynamischen Fermionen interpretiert werden kann.

Die axiale flavor-singlet Kopplung G_A^1 des Protons, die im naiven Parton-Modell mit dem Spin des Protons identifiziert werden kann, ist mit denselben Methoden in Gittersimulationen zugänglich wie $\sigma_{\pi N}$. Auf den SESAM/ $T\chi L$ Konfigurationen ergibt sich innerhalb der statistischen Fehler ein Wert von $G_A^1 = 0.21(12)$, der mit dem Experiment und bisherigen quenched Simulationen übereinstimmt. Für die leichteste SESAM Quarkmasse wurde das sehr schwach ausgeprägte Signal für die disconnected Amplitude durch die Daten der $T\chi L$ Gitter ersetzt. Disconnected Beiträge zu G_A^1 reduzieren mit negativem Vorzeichen die aufsummierten connected Beiträge und bestätigen damit das Bild, demgemäß Quantenfluktuationen des QCD Vakuums G_A^1 reduzieren. Dies erklärt den großen Wert für G_A^1 aus QCD Summenregeln (ohne Vakuum-Polarisationen) im Gegensatz zu den experimentellen Daten, die mit einer sehr kleinen axialen Kopplung die Proton-Spin Krise auslösten.

Als Hauptfehlerquelle in der G_A^1 Analyse erwiesen sich erwartungsgemäß die Amplituden der disconnected Diagramme. Grund dafür ist die Spin-Struktur des zugrundeliegenden axialen Stromes A_μ^0 . Während für die nicht-diagonalen Beiträge $\mu = 1$ und $\mu = 2$ trotz verbesserter stochastischer Matrixinversionen kein Signal nachgewiesen werden konnte, impliziert die Differenzbildung bei $\mu = 3$ größere statistische Fluktuationen als bei $\sigma_{\pi N}$. Zukünftige Analysen der disconnected Amplituden in G_A^1 sollten unter Ausnutzung der Spin-Symmetrien in der Wilson-Fermionenmatrix das komplexe Z2 Rauschen durch ein rein reelles bzw. rein imaginäres, korreliertes Rauschen ersetzen. Erste Untersuchungen in dieser Arbeit zeigten allerdings, daß trotz korrelierten Rauschens die benötigte Anzahl an Inversionen die Kapazitäten derzeitiger Supercomputer deutlich übersteigt, wenn die gleiche Signalgüte wie bei $\sigma_{\pi N}$ erreicht werden soll.

Unter Berücksichtigung allein der connected Amplituden für die axiale Kopplungskonstante G_A^3 ergab sich ein Wert, der um 20% – 30% von den experimentellen Daten abweicht und systematische Fehlerquellen der Gitterrechnung aufzeigt. Cut-Off Effekte und Unsicherheiten in den Renormierungskonstanten tragen dazu gleicher-

maßen bei. Für eine sorgfältige Kontrolle der Cut-Off Effekte ist eine Skalenanalyse mit unterschiedlichen Gittergrößen unerlässlich. Neue SESAM Gittersimulationen bei $\beta = 5.5$ und $\beta = 5.7$ stellen in Zukunft zwei weitere Gitterabstände a zur Verfügung. Ferner wurde für G_A^3 die nur in erster Ordnung (tadpole-verbessert) bekannte Renormierungskonstante Z_A^{NS} verwendet. Für eine Präzisionsbestimmung der nicht-singlet Kopplungskonstanten des Protons ist eine Bestimmung von Z_A^{NS} mit nicht-störungstheoretischen Methoden in der vollen QCD nötig und sollte in zukünftigen Simulationen realisiert werden.

Anhang A

Konventionen

A.1 Pauli Matrizen

Die Pauli Matrizen

$$\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \quad (\text{A.1})$$

sind definiert als

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

und genügen den Vertauschungsrelationen

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon^{ijk}\sigma_k \quad (\text{A.3})$$

und

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \quad (\text{A.4})$$

mit dem total antisymmetrischen Tensor ϵ^{ijk} ($\epsilon^{123} = 1$). Ferner gilt

$$\text{Tr}(\sigma_i\sigma_j) = 2\delta_{ij}. \quad (\text{A.5})$$

A.2 Dirac Matrizen

Für die Dirac Matrizen in Minkowsky-Metrik muß gelten:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu} \quad (\text{A.6})$$

mit dem metrischen Tensor

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

Außerdem wird definiert:

$$\gamma^5 = \gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3. \quad (\text{A.8})$$

Nach Wick-Rotation zur euklidischen Zeit folgt für die Dirac Matrizen:

$$\gamma_4^E = \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

$$\vec{\gamma}^E = -i\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & -i\vec{\sigma} \\ i\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

und

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Literaturverzeichnis

- [1] S. Güsken, "Flavor Singlet Phenomena in Lattice QCD", Habilitationsschrift WUB 99-02, hep-lat/9906034.
- [2] H. Fritzsch, M. Gell-Mann, H. Leutwyler, Phys.Lett. **B47** (1973) 365.
- [3] S. Weinberg, Phys.Rev.Lett. **19** (1967) 1264; A. Salam, J.C. Ward, Phys.Lett. **13** (1964) 168; A. Salam, "Elementary Particle Physics", N. Svartholm (Ed.), Stockholm, 1968.
- [4] G. 'tHooft, Nucl.Phys. **B33** (1971) 173; Nucl.Phys. **B35** (1971) 167.
- [5] G.G. Ross, "Grand Unified Theories", Benjamin/Cummings Publishing Company, 1985; P.H. Frampton (Hrsg.), "Last Workshop on Grand Unification", World Scientific, Singapore, 1989.
- [6] G.S. LaRue, J.D. Phillips, W.M. Fairbanks, Phys.Rev.Lett. **46** (1981) 967.
- [7] S. Coleman, D.J. Gross, Phys.Rev.Lett. **31** (1973) 851.
- [8] D. Gross, F. Wilczek, Phys.Rev. **D8** (1973) 3633.
- [9] H.D. Politzer, Phys.Rev.Lett. **30** (1973) 1346.
- [10] K.G. Wilson, Phys.Rev. **D10** (1974) 2445; Phys.Rev. **B4** (1971) 3174; Phys.Rev. **B4** (1971) 3184.
- [11] R.P. Feynman, A.R. Hibbs, "Quantum Mechanics and Pathintegrals", McGraw Hill Book Company, 1965; G. Roepsdorff, "Pfadintegrale in der Quantenphysik", Vieweg Verlag, Braunschweig, 1991.
- [12] M. Creutz, "Quarks, Gluons and Lattices", Cambridge University Press, Cambridge, 1983.
- [13] H. Hamber, G. Parisi, Phys.Rev.Lett. **47** (1981) 1792; E. Marinari, G. Parisi, C. Rebbi, Phys.Rev.Lett. **47** (1981) 1795.
- [14] D. Weingarten, Phys.Lett. **B109** (1982) 57.
- [15] M. Aguilar-Benitez et al., Phys.Rev. **D45** (1992) 1.

- [16] E.V. Shuryak, Phys. Reports **115** (1984) 151; E.V. Shuryak, *A review for the book "Quark-Gluon Plasma"*, hep-ph/9503427.
- [17] T.P. Cheng, L.F. Li, *"Gauge Theory of Elementary Particle Physics"*, Oxford University Press, Oxford, 1984.
- [18] R. Koch, Z.Phys. **15** (1982) 116.
- [19] B. Borasoy, U.G. Meissner, Phys.Lett. **B365** (1996) 285; V. Bernard, N. Kaiser, U.G. Meissner, Phys.Lett. **B389** (1996) 144.
- [20] L. Maiani, G. Martinelli, M.L. Paciello, B. Taglienti, Nucl.Phys. **B293** (1987) 420.
- [21] G. Martinelli, C.T. Sachrajda, Nucl.Phys. **B316** (1989) 355.
- [22] S. Güsken, K. Schilling, R. Sommer, K.H. Mütter, A. Patel, Phys.Lett. **B212** (1989) 216.
- [23] S.J. Deng, J.F. Lagaë, K.F. Liu, Phys.Rev. **D54** (1996) 5496; S.J. Dong, K.F. Liu, Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B42** (1995) 322.
- [24] M. Fukugita, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, Phys.Rev. **D51** (1995) 5319.
- [25] S.J. Dong, J.F. Lagaë, K.F. Liu, Phys.Rev.Lett. **75** (1995) 2096.
- [26] M. Fukugita, Y. Kuramashi, M. Okawa, A. Ukawa, Phys.Rev.Lett. **75** (1995) 2092.
- [27] H.Y. Cheng, *"Status of the Proton Spin Problem"*, Xth Spring School on Particles and Fields, National Cheng-Kung University, Taiwan, 1996, hep-ph/9607254.
- [28] O. Nachtmann, *"Phänomene und Konzepte der Elementarteilchenphysik"*, Vieweg Verlag, Braunschweig, 1986.
- [29] F. Halzen, A.D. Martin, *"Quarks and Leptons"*, Wiley Verlag, New York, 1983.
- [30] E. Witten, Nucl.Phys. **B156** (1979) 269.
- [31] G. Veneziano, Nucl.Phys. **B159** (1979) 213.
- [32] M. Atiyah, I. Singer, Ann.Math. **87** (1968) 484.
- [33] B. Alles, M. D'Elia, A. DiGiacomo, R. Kirchner, Phys.Rev. **D58** (1998) 114506.
- [34] B. Alles, M. D'Elia, A. DiGiacomo, Nucl.Phys. **B494** (1997) 281.
- [35] J. Viehoff, Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B63** (1998) 269.
- [36] J. Viehoff, Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B73** (1999) 856.
- [37] N. Eicker, U. Glässner, S. Güsken, H. Hoerber, T. Lippert, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, G. Siegert, A. Spitz, P. Ueberholz, J. Viehoff, Phys.Lett. **B389** (1996) 720.
- [38] S. Güsken, P. Ueberholz, J. Viehoff, N. Eicker, P. Lacock, T. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, T. Struckmann, Phys.Rev. **D59** (1999) 054504.
- [39] S. Güsken, P. Ueberholz, J. Viehoff, N. Eicker, T. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, T. Struckmann, hep-lat/9901009, erscheint in Phys.Rev. **D**.
- [40] $T\chi L$ Kollaboration, T. Lippert et al., Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B63** (1998) 946.
- [41] B. Alles, G. Bali, M. D'Elia, A. DiGiacomo, N. Eicker, S. Güsken, H. Hoerber, T. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, T. Struckmann, P. Ueberholz, J. Viehoff, Phys.Rev. **D58** (1998) 071503.
- [42] U. Glässner, S. Güsken, H. Hoerber, T. Lippert, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, G. Siegert, A. Spitz, A. Wachter, Phys.Lett. **B383** (1996) 98.
- [43] N. Eicker, U. Glässner, S. Güsken, H. Hoerber, P. Lacock, T. Lippert, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, G. Siegert, A. Spitz, P. Ueberholz, J. Viehoff, Phys.Lett. **B407** (1997) 290.
- [44] N. Eicker, J. Fingberg, S. Güsken, H. Hoerber, T. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, J. Viehoff, Phys.Rev. **D57** (1998) 4080.
- [45] N. Eicker, U. Glässner, S. Güsken, H. Hoerber, P. Lacock, T. Lippert, K. Schilling, A. Spitz, T. Struckmann, P. Ueberholz, J. Viehoff, Phys.Rev. **D59** (1999) 014509.
- [46] H.J. Rothe, *"Lattice Gauge Theory - An Introduction"*, World Scientific Publishing, Singapore, 1992.
- [47] I. Montvay, G. Münster, *"Quantum Fields on a Lattice"*, Cambridge University Press, Cambridge, 1994.
- [48] J.D. Bjorken, S.D. Drell, *"Relativistische Quantenmechanik"*, BI Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1966.
- [49] M. Lüscher, S. Sint, R. Sommer, P. Weisz, U. Wolff, Nucl.Phys. **B491** (1997) 323.
- [50] T. DeGrand, A. Hasenfratz, P. Hasenfratz, F. Niedermayer, Nucl.Phys. **B454** (1995) 587; W. Bietenholz, U.J. Wiese, Nucl.Phys. **B464** (1996) 319.
- [51] J.B. Kogut, L. Susskind, Phys.Rev. **D11** (1975) 395.
- [52] S. Duane, A.D. Kennedy, B.J. Pendleton, D. Roweth, Phys.Lett. **B195** (1975) 216.

- [53] G. Ritzenhöfer, "Flavor singlet operators: A first calculation of quark-loop insertions in full QCD", WUB-DIS 96-12 Dissertation, Wuppertal, 1997.
- [54] R. Gupta et al., Phys.Rev. **D40** (1989) 2072; R. Gupta et al., Phys.Rev. **D44** (1991) 3272.
- [55] W.H. Press, "Numerical Recipes in C", Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [56] S. Fischer, A. Frommer, U. Glässner, T. Lippert, G. Ritzenhöfer, K. Schilling, Comput.Phys.Comm. **98** (1996) 20.
- [57] J.E. Mandula, M.C. Oglivie, Phys.Lett. **B312** (1993) 327.
- [58] K. Bitar, A.D. Kennedy, R. Horsley, S. Meyer, P. Rossi, Nucl.Phys. **B313** (1989) 377.
- [59] C. Thron, S. J. Dong, K. F. Liu, H. P. Ying, Phys.Rev. **D57** (1998) 1642.
- [60] W. Wilcox, hep-lat/9908001, erscheint in Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B**.
- [61] S.J. Dong, K.F. Liu, Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B26** (1992) 353.
- [62] F. Fucito et al., Nucl.Phys. **B210** (1982) 407; B.L. Ioffe, Nucl.Phys. **B188** (1981) 317.
- [63] H. Hellmann, Acta Physicochimica URSS **I,6** (1935) 913 und **IV,2** (1936) 225; R.P. Feynman, Phys.Rev. **56** (1939) 340.
- [64] M.L. Goldberger, S.B. Treiman, Phys.Rev. **110** (1958) 1178.
- [65] W.I. Weisberger, Phys.Rev. **143** (1966) 1302; S.L. Adler, Phys.Rev. **B140** (1965) 736.
- [66] S. Narison, G.M. Shore, G. Veneziano, Nucl.Phys. **B546** (1999) 235.
- [67] J. Gasser, H. Leutwyler, M.E. Sainio, Phys.Lett. **B253** (1991) 252, Phys.Lett. **B253** (1991) 260.
- [68] J. Gasser, H. Leutwyler, Phys.Reports **87** (1982) 87.
- [69] J. Gasser, Ann.Phys. **136** (1981) 61.
- [70] CP-PACS Collaboration, R. Burkhalter et al., Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B73** (1999) 3.
- [71] CP-PACS Collaboration, S. Aoki et al., Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B73** (1999) 189.
- [72] T. Bhattacharya, R. Gupta, Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B63** (1998) 95.
- [73] EMC, J. Ashman et al., Nucl.Phys. **B328** (1989) 1; Phys.Lett. **B206** (1988) 364.

- [74] J. Ellis, R.L. Jaffe, Phys.Rev. **D9** (1974) 1444; Phys.Rev. **D10** (1974) 1669.
- [75] SMC, D. Adams et al., Phys.Rev. **D56** (1997) 5330.
- [76] J. Ellis, M. Karliner, Phys.Lett. **B341** (1995) 397.
- [77] J. Ellis, M. Karliner, CERN-TH/95-334, hep-ph/9601280.
- [78] SMC, B. Adeva, Phys.Lett. **B302** (1993) 533; D. Adams et al., Phys.Lett. **B329** (1994) 399; D. Adams et al., Phys.Lett. **B339** (1994) 332; D. Adams et al., Phys. Lett. **B357** (1995) 248; B. Adeva et al., Phys.Lett. **369** (1996) 93.
- [79] SLAC-E142 Collaboration, P.L. Antony et al., Phys.Rev.Lett. **71** (1993) 959.
- [80] SLAC-E143 Collaboration, K. Abe et al., Phys.Rev.Lett. **75** (1995) 25; Phys.Rev.Lett. **74** (1995) 346; Phys.Rev.Lett. **76** (1996) 587.
- [81] SMC, D. Adams et al., Phys.Rev. **D56** (1997) 5330.
- [82] G. t'Hooft, Phys.Rev.Lett. **37** (1976) 8.
- [83] B. Alles, G. Boyd, M. D'Elia, A. DiGiacomo, E. Vicari, Phys.Lett. **B389** (1996) 107.
- [84] R. Gupta, J.E. Mandula, Phys.Rev. **D50** (1994) 6931.
- [85] R. Gupta, C.F. Baillie, R.G. Brickner, G.W. Kilcup, A. Patel, S.R. Sharpe, Phys.Rev. **D44** (1991) 3272.
- [86] S. Güsken, U. Löw, K.H. Mütter, R. Sommer, A. Patel, K. Schilling, Phys.Lett. **B227** (1989) 266.
- [87] K.F. Liu, S.J. Dong, T. Draper, J.M. Wu, W. Wilcox, Phys.Rev. **D49** (1994) 4755.
- [88] S. Capitani et al., Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B73** (1999) 294.
- [89] M. Lüscher et al., Nucl. Phys. **B478** (1996) 365; M. Lüscher, P. Weisz, Nucl.Phys. **B479** (1996) 429; M. Lüscher et al., Nucl.Phys. **B491** (1997) 323.
- [90] G.P. Lepage, P.B. Mackenzie, Phys.Rev. **D48** (1993) 2250.
- [91] S.A. Larin, Phys.Lett. **B334** (1994) 192; S.A. Larin, Phys.Lett. **B303** (1993) 113; K.G. Chetyrkin, J.H. Kühn, Z.Phys. **C60** (1993) 497.
- [92] L.H. Karsten, J. Smit, Nucl.Phys. **B183** (1981) 103.
- [93] R. Groot, J. Hoek, J. Smit, Nucl.Phys. **B237** (1984) 111.
- [94] S. Capitani et al., Nucl.Phys. (Proc.Suppl) **B63** (1998) 153.

- [95] V. Gimenez, L. Giusti, F. Rapuano, M. Talevi, Nucl.Phys. **B531** (1998) 429.
- [96] S. Weinberg, Phys.Rev. **D11** (1975) 3583.
- [97] E. Witten, Nucl.Phys. **B149** (1979) 285.
- [98] G. t'Hooft, Nucl.Phys. **B72** (1974) 461.
- [99] G. Veneziano, Nucl.Phys. **B117** (1976) 519.
- [100] M. Campostrini, A. DiGiacomo, H. Panagopoulos, Phys.Lett. **B212** (1988) 206.
- [101] M. Campostrini, A. DiGiacomo, H. Panagopoulos, E. Vicari, Nucl.Phys. **B329** (1990) 683.
- [102] P. di Vecchia, K. Fabricius, G. Rossi, G. Veneziano, Nucl.Phys. **B192** (1981) 391.
- [103] C. Christou, A. DiGiacomo, H. Panagopoulos, E. Vicari, Phys.Rev. **D53** (1996) 2619.
- [104] A. DiGiacomo, E. Vicari, Phys.Lett. **B275** (1992) 429.
- [105] B. Alles, M. Campostrini, A. DiGiacomo, Y. Gündüç, E. Vicari, Phys.Rev. **D48** (1993) 2284.
- [106] M. Teper, Phys.Lett. **B171** (1986) 81.
- [107] H.D. Trottier, R.M. Woloshyn, Phys.Rev. **D50** (1994) 6939.
- [108] P. de Forcrand, M. Garcia Perez, I.O. Stamatescu, Nucl.Phys. **B499** (1997) 409.
- [109] M. Garcia Perez, A. Gonzalez-Arroyo, J. Snippe, P. van Baal, Nucl.Phys. **B413** (1994) 535.
- [110] J. Smit, J.C. Vink, Nucl.Phys. **B298** (1988) 557.
- [111] J. Smit, J.C. Vink, Nucl.Phys. **B284** (1987) 234.
- [112] T.W. Chiu, Phys.Rev. **D58** (1998) 074511.
- [113] M. Lüscher, Commun.Math.Phys. **85** (1982) 28.
- [114] A. Kronfeld, A. Laursen, G. Schierholz, U. Wiese, Nucl.Phys. **B292** (1987) 330.
- [115] G. Boyd, B. Alles, M. D'Elia, A. DiGiacomo, E. Vicari, Nucl.Phys. (Proc.Suppl.) **B53** (1997) 544.

Danksagung

Für die Realisation dieser Arbeit möchte ich mich bei Prof. Dr. Klaus Schilling bedanken, der das Projekt entwickelte und betreute. Weiterhin gilt mein Dank allen Mitgliedern der SESAM/ $T\chi L$ Kollaboration und dem gesamten Fachbereich Physik der Universität Gesamthochschule Wuppertal.

Für jegliche finanzielle Unterstützung danke ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und dem Neumann Institut für Computing (DESY), dem ehemaligen HLRZ in Jülich, ebenso dem DAAD für einen Auslandsaufenthalt unter der Obhut Adriano DiGiacomos an der Universität Pisa, ferner dem TRACS Programm für die Zeit am EPCC in Edinburgh.

Ohne die maschinennahe Betreuung durch Jochen Heitger und Andreas Hoferichter am DESY/IFH Zeuthen wären die umfangreichen Computersimulationen nur schwerlich möglich gewesen.

Mein allergrößter Dank gebührt Stephan Güsken, der mit unerschöpflicher Ruhe und Gelassenheit meine Fragen in endlosen Diskussionen beantwortete. Ihm wünsche ich für seine weitere Zukunft alles Gute.

Dank auch an die tapferen Mitstreiter in meinem Büro F.10.09, sowohl für förderliche Motivation, wie auch für unterhaltsame Ablenkung, namentlich: Carsten Merten, Thorsten Struckmann, Markus Richter, und ihre Vorgänger Armin Seyfried, Uwe Glässner und Gero Ritzenhöfer.

Schließlich möchte ich mich ganz herzlich bei meiner Lebensgefährtin Meike Nordmeyer für die große Unterstützung während der gesamten Zeit bedanken.

Jochen Viehoff

Wuppertal, September 1999