JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN

Thermodynamik im Zwei-Flavour Quark-Meson-Modell

(Thermodynamics of a 2-flavour quark-meson model)

Bachelorthesis im Fach Physik
eingereicht von

Christopher Busch

8. September 2017

Betreuer:	PD Dr. Bernd-Jochen Schaefer
Zweitgutachter:	Prof. Dr. Lorenz von Smekal

Justus-Liebig-Universität Gießen

Fachbereich 07

Institut für Theoretische Physik

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **4**

2 Phasenübergänge **5**

2.1 Landau-Theorie & kritische Exponenten 6

2.2 Phasenübergang in der QCD 8

3 Funktionale Renormierungsgruppen **10**

3.1 Effektive gemittelte Wirkung 10

3.2 Proper-Time RG 11

4 Großkanonisches Potential **13**

4.1 Die Flussgleichung 14

4.2 Bedingungen und Ziele in der Thesis 14

4.3 Analytische Lösung der vereinfachten Flussgleichung 15

5 Parameter des mesonischen Potentials **17**

5.1 Bestimmung der Startwerte 17

5.2 Startwerte bei Variation von Λ 20

6 Thermodyn. Eigenschaften im IR-Bereich **22**

6.1 Temperaturabhängigkeit des Drucks 22

6.2 Entropiedichte 24

6.3 Quark-Dichte 25

6.4 Energiedichte 26

6.5 Phasendiagramm 26

6.6 Vergleich mit der sMFA 30

7 Fazit **33**

A Differential Evolution **35**

B Runge-Kutta-Verfahren **37**

B.1 Numerisches Lösen von Differentialgleichungen 37

B.2 Runge-Kutta 38

C Verwendete Genauigkeiten **41**

C.1 Runge-Kutta 41

C.2 Schrittweiten bei Variation der Parameter 41

1 Einleitung

Bei der Erforschung der fundamentalen Wechselwirkungen stellt die Formulierung der Quantenfeldtheorien eine wichtige Aufgabe der theoretischen Physik dar. Für die elektromagnetische und die starke Wechselwirkung existieren solche Theorien bereits, eine Verbindung mit der allgemeinen Relativitätstheorie zur Quantengravitation ist jedoch bisher noch nicht gelungen. Die genaue Beschreibung von Vorgängen in der QCD, der QFT der starken Wechselwirkung, ist ein aktuelles Forschungsgebiet.

Wichtig für das Verständnis eines Systems ist die Beschreibung seines Verhaltens unter unterschiedlichen Bedingungen. In der QCD kann unterschieden werden zwischen der hadronischen Phase, in der durch das Confinement nur farbneutrale Zuständen auftreten, und dem Quark-Gluon-Plasma. Da der Übergang erst bei extremen Bedingungen stattfindet (Temperaturen in der Größenordnung 100 MeV, also 10^{12} K) ist das Verhalten experimentell nur sehr schwer erfassbar.
Analytische Lösungen, die nur auf den grundlegenden Eigenschaften der Quarks und ihrer Wechselwirkungen beruhen, sind nicht möglich (zumindest nach aktuellem Stand der Forschung). Somit werden theoretische Modelle benötigt, mit denen sich das Verhalten der Materie vorhersagen lässt. Zudem kann durch diese ein tieferes Verständnis der thermodynamischen Eigenschaften von Kernmaterie bei extremen Bedingungen erlangt werden.

Im Folgenden wird ein solches Modell vorgestellt, welches auf dem linearen Sigma-Modell beruht. Dabei werden nur Quarks der ersten Generation betrachtet, also up- und down-Quarks. Diese Näherung ist möglich solange die betrachteten Energien klein genug gegenüber der Masse der deutlich schwereren Quarks der zweiten und dritten Generation sind. Es sei angemerkt, dass die Masse des strange-Quarks diese Bedingung nur gerade so erfüllt. Will man dieses mit einbeziehen, so muss man auf andere Modelle zurück greifen. Die zugehörigen Mesonen, die im Zwei-Flavour Modell auftreten, sind die Pionen und das σ-Meson.

Um mit dem Umstand umzugehen, dass man eine sehr kurzreichweitige Wechselwirkung auf einem im Vergleich dazu großen Längen-Maßstab betrachtet, wird auf das Konzept der Renormierungsgruppen (RG) zurückgegriffen, was zu einer Differentialgleichung, der RG-Flussgleichung führt. Vereinfacht wird diese durch herausstreichen der bosonischen Terme (extended mean-field approximation, eMFA). Durch numerisches Lösen der dabei erhaltenen Gleichung wird in dieser Arbeit nun zum einen ein Phasendiagramm erstellt, zum anderen wird das Verhalten verschiedener physikalische Größen, wie Druck und Entropie, unter verschiedenen externen Bedingungen betrachtet. Ein besonderer Augenmerk liegt dabei auf dem Einfluss, den der sogenannte UV-Cutoff auf die Thermodynamik hat. Dieser ist aufgrund eines divergenten Terms in der Flussgleichung, des Vakuumterms, nötig. Die Ergebnisse werden zudem verglichen mit denen der Standard Mean-Field Näherung (sMFA), in der der Vakuumterm vollständig ignoriert wird.

2 Phasenübergänge

Die grundlegenden Gesetze der Physik unterliegen gewissen Symmetrien, die jedoch in den realisierten Zuständen makroskopischer Systeme nur noch eingeschränkt vorzufinden sind, da die Symmetrie durch verschiedene Einflüsse gestört wird. Daher kann ein Material in verschiedenen Phasen auftreten, je nachdem welche äußeren Gegebenheiten herrschen und welche Symmetrien dadurch gebrochen sind. Wechselt das System durch Variation eines Parameters von einer Phase in eine andere, so spricht man von einem Phasenübergang.

Phasenübergänge sind von besonderer Bedeutung, wenn man die Eigenschaften eines thermodynamischen Systems unter verschiedenen Bedingungen betrachten will, insbesondere bei Variation von Zustandsgrößen, wie z.B. Temperatur und Druck. Wohl bekanntestes Beispiel ist der Übergang zwischen den verschiedenen Aggregatzuständen eines Stoffes. Es gibt jedoch noch viele weitere Arten von Phasenübergängen, wie den Wechsel zwischen verschiedenen Kristallstrukturen oder das abrupte Verschwinden des Widerstands bei Unterschreitung der Sprungtemperatur in einem Supraleiter. Zwischen diesen scheint es zunächst einmal wenig Zusammenhang zu geben. Es zeigt sich jedoch, dass, zumindest in der Nähe von kritischen Punkten, statistische Schwankungen ein universelles Verhalten aufweisen. Diese Fluktuationen korrelieren trotz kurzreichweitiger Wechselwirkung auch über längere Distanzen und unterhalb von z.B. einer kritischen Temperatur T_C kommt es zu langreichweitiger Ordnung. Die Ursachen dieses Verhaltens sind für das Verständnis von Materie von großer Wichtigkeit.
Die Gemeinsamkeiten zwischen verschiedenen Phasenübergängen spiegeln sich auch im nachfolgenden Unterabschnitt wieder, in dem zwar die Eigenschaften eines beispielhaften Übergangs betrachtet werden, jedoch ohne dabei Annahmen zu machen, welche sich nicht auch auf andere Beispiele verallgemeinern lassen.

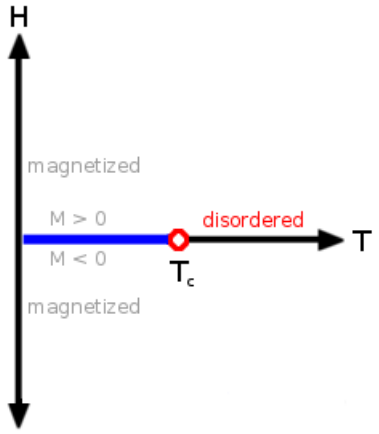
Man unterscheidet zwischen Phasenübergängen 1.Ordnung und kontinuierlichen Phasenübergängen (2. Ordnung und höher nach Ehrenfest). Ein Phasenübergang erster Ordnung ist dadurch charakterisiert, dass sich eine thermodynamische Größe, der sogenannte Ordnungsparameter, an dieser Stelle diskontinuierlich verändert: Eine minimale Veränderung der Zustandsgrößen des Systems führt zu einem Sprung des Parameters. Dadurch sind zwei unterschiedliche Phasen gekennzeichnet, welche sich nur am Phasenübergang im Gleichgewicht befinden.
Bei Betrachtung eines Ordnungsparameters ρ als Funktion mehrerer Parameter lassen sich diese häufig so verändern, dass die Größe des Sprungs entlang des Phasenübergangs abnimmt. Ab dem sogenannten kritischen Punkt (CP) ist der Verlauf von ρ dann kontinuierlich und die beiden Phasen werden identisch (überkritische Phase) bzw. ab dort findet ein Phasenübergang zweiter Ordnung statt, in dem die Phasen kontinuierlich ineinander übergehen.

Die genannten Aspekte finden sich auch bei Betrachtung von stark wechselwirkender Materie bei extremen Temperaturren und chemischen Potentialen wieder. Die Symmetrie des zugehörigen Potentials bzgl. des mesonischen Feldes ϕ ist für niedrige Temperaturen und bei geringem quark-chemischen Potential gebrochen. Mit Erhöhung von Temperatur und Potential wird die Symmetrie wieder hergestellt. Dies kennzeichnet den Übergang zum Quark-Gluon-Plasma. Eine genauere Beschreibung hierzu ist in 2.2 zu finden.

2.1 Landau-Theorie & kritische Exponenten

Die Landau-Theorie stellt eine einfache Möglichkeit dar das Verhalten eines Systems an einem Phasenübergang zu beschreiben und zu untersuchen. Zudem sind die hier betrachteten Symmetrieeigenschaften des Potentials aufgrund der Entwicklung bis zur vierten Ordnung vergleichbar mit denen des rein mesonischen Potential im später verwendeten Modell.

Um die nachfolgende Theorie zu veranschaulichen betrachte man das Beispiel eines Ferromagneten, dessen Spins sich entlang der z-Achse ausrichten (Ising-Modell). Je nach äußerem magnetischen Feld H kann dies parallel oder antiparallel zur Achse geschehen. Für $H = 0$ können bei niedrigen Temperaturen zwei verschiedene Spinpolarisationen auftreten, es bleibt jedoch aufgrund der Spin-Kopplung eine Ordnung bestehen.
Als Ordnungsparameter dient die Gesamtmagnetisierung M, welche sich für niedrigen Temperaturen bei $H = 0$ sprunghaft ändert (Phasenübergang 1. Ordnung), da sich auch bei minimalem Feld (fast) alle Spins simultan in diesem ausrichten. Für höhere Temperatur T ist die Ausrichtung aufgrund thermischer Fluktuationen gestört und die Magnetisierung nimmt ab. Ab einer kritischen Temperatur T_c tritt bei $H = 0$ keine Magnetisierung mehr auf, der Übergang 1.Ordnung endet und beide Phasen koexistieren, zumindest für kleine H (kontinuierlicher Phasenübergang). Das zugehörige Phasendiagramm ist in Abb.1 zu sehen.



[https://inspirehep.net/record/913557/files/IsingPhaseDiagram.png; 06.09.2017]

Abbildung 1: Phasendiagramm im Ising-Modell

Nach Landau kann das Verhalten des Magneten um T_c mit Hilfe der Gibbs-Energie G (auch freie Enthalpie) beschrieben werden (i.A. wird in der Landau-Theorie meist die freie Energie F betrachtet, die Formulierung hier richtet sich nach [PS95]). Für die Gibbs-Energie gilt der Zusammenhang

$$(\partial_M G)_T = H \tag{1}$$

Da in der Nähe des kritischen Punktes die Magnetisierung klein ist kann hier G für $H = 0$ in einer Taylorreihe nach M entwickelt werden:

$$G(H = 0) = A(T) + B(T) \cdot M^2 + C(T) \cdot M^4 + ... \tag{2}$$

Für allgemeines H muss zu $G(H=0)$ noch ein Term hinzugefügt werden:

$$G = G(H=0) - H \cdot M \tag{3}$$

Die Koeffizienten der Taylorentwicklung werden nun so gewählt, dass das Ergebnis den Beobachtungen entspricht: $C(T) = c$ und $B(T) = b(T - T_c)$ mit $b, c > 0$. Damit erhält man für festes H, T qualitativ einen Verlauf von $G(M)$, wie er in Abb.2 dargestellt ist. Die Bedingung (1) ist dann am Minimum erfüllt. Für $T < T_c$ und $H = 0$ gibt es zwei gleichwertige Minima, zwei mögliche Zustände mit $M \neq 0$ in denen sich das System befinden kann. Für $T > T_c$ ist ohne äußeres Magnetfeld nur noch der Zustand ohne Magnetisierung realisiert, entsprechend liegt hier das einzige Minimum bei $M = 0$. Bei $H \neq 0$ verschieben sich die Minima, so dass es unabhängig von der Temperatur jeweils ein globales Minimum gibt, was der in diesem Fall realisierten Magnetisierung entspricht.

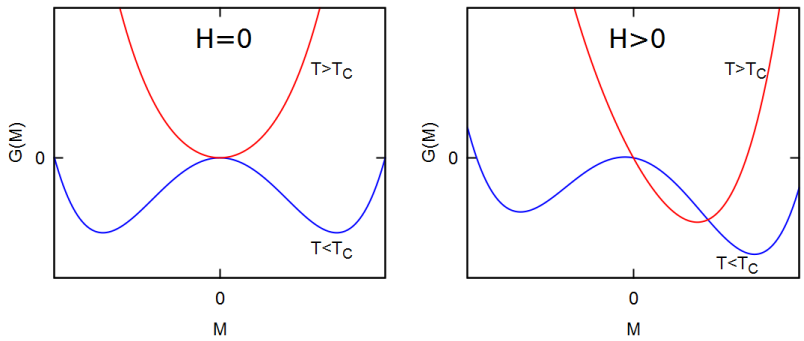


Abbildung 2: Gibbs-Energie

Eine weitere Verallgemeinerung kann durch Betrachtung von M als Integral einer lokalen Spindichte $s(\mathbf{x})$ erreicht werden:

$$M = \int d^3x\, s(\mathbf{x}) \tag{4}$$

Für $T > T_c$ ist $s(\mathbf{x})$ klein (für kleine ext. Felder) und man erhält aus (3) wegen $s^3 \approx 0$ den Ausdruck

$$G = \int d^3x \left[\frac{1}{2}(\nabla s)^2 + b(T - T_c)s^2 - H(\mathbf{x}) \cdot s \right] \tag{5}$$

Dabei wurde nun auch das zuvor konstante magnetische Feld ersetzt durch ein Ortsabhängiges Feld $H(\mathbf{x})$. Dies ermöglicht es das Verhalten aller Spins bei punktueller Störung durch ein Magnetfeld zu betrachten. Der Term $\frac{1}{2}(\nabla s)^2$ ist eine vereinfachte Möglichkeit darzustellen, dass die Gleichausrichtung benachbarter Spins energetisch vorteilhaft ist. Das Erreichen des Vorfaktors $\frac{1}{2}$ an dieser Stelle ist durch geeignete Skalierung von $s(x)$ möglich.

Die Bedingung (1) führt zum Variationsproblem $\delta G[s(\mathbf{x})] = 0$, welche sich in eine DGL umschreiben lässt:

$$D(T)[s(\mathbf{x})] = \left\{ -\nabla^2 + 2b(T - T_c) \right\} \cdot s(\mathbf{x}) = H(\mathbf{x}) \tag{6}$$

Zur Untersuchung der Spin-Korrelationen sei nun $H(\mathbf{x}) = H_0\delta^3(\mathbf{x})$. Dann entspricht $s(\mathbf{x})$ der Green'schen Funktion $g(\mathbf{x})$ des Differentialoperators $D(T)$, welche proportional zur Korrelationsfunktion $\langle s(\mathbf{x})s(0)\rangle$ ist.
Über Fouriertransformationen findet sich schließlich die Lösung

$$s(\mathbf{x}) = \frac{H_0}{4\pi r} exp(-\frac{r}{\xi}) \tag{7}$$

mit $r = |\mathbf{x}|$ und der Korrelationslänge $\xi = \frac{1}{\sqrt{2b(T-T_c)}}$. Wie man sieht divergiert ξ für $T \to T_c$, in der Nähe der kritischen Temperatur finden also langreichweitige Korrelationen der Spins statt.

In der Nähe des kritischen Punktes kann das Verhalten eines Stoffes mit Hilfe der sogenannten kritischen Exponenten beschrieben werden. Der kritische Exponent ε ist für eine physikalische Größe $G = f(T - T_C)$ definiert durch

$$\varepsilon := \lim_{T \to T_C} \frac{d\, log\, f(T - T_c)}{d\, log\, (T - T_c)} \tag{8}$$

Neben dem kritischen Exponenten β des Ordnungsparameters definiert man drei weitere: γ für die isotherme Suszeptibilität, δ für die kritische Isotherme und α für die spezifische Wärme.

Da die Eigenschaft der divergenten Korrelationslänge nicht auf Spins beschränkt ist und größtenteils unabhängig von der grundlegenden Wechselwirkung ist, finden sich auch bei teilweise sehr unterschiedlichen Phasenübergängen gleiche kritische Exponenten. Diese Eigenschaft wird als Universalität bezeichnet. Sie macht es möglich unterschiedlichen Phasenübergänge in sogenannte Universalitätsklassen einzuteilen.

2.2 Phasenübergang in der QCD

Um den chiralen Phasenübergang zu beschreiben muss zunächst die zugrunde liegende Symmetrie betrachtet werden. Der fermionische Teil der Lagrange-Dichte der QCD für $N_f = 2$ ist

$$\mathscr{L} = \bar{u} i \not{D} u + \bar{d} i \not{D} d - m_u \bar{u} u - m_d \bar{d} d \tag{9}$$

Der dabei in Feynman-Slash-Notation[1] auftretende Dirac-Operator D ist durch die Eigenschaft

$$D^2 = \Delta$$

definiert. Nimmt man die Quarks als masselos an, also $m_u = m_d = 0$, so entfallen die letzten beiden Summanden.

Rechts- und linkshändige Quarks sind durch

$$Q_L := \frac{1 - \gamma^5}{2} \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \tag{10}$$

[1] $\not{D} := \gamma^\mu D_\mu$ mit Gamma-Matrizen $\gamma^0 - \gamma^3$

$$Q_R := \frac{1+\gamma^5}{2}\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \tag{11}$$

gegeben, womit $Q = \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} = Q_L + Q_R$ gilt. Für den Operator γ^5 sei auf die sogenannten Gamma-Matrizen verwiesen. Genaueres hierzu ist an dieser Stelle nicht nötig.
Da der Lagrangian keine Kopplung zwischen rechts- und linkshändigen Quarks beinhaltet ist er symmetrisch unter den unitären Transformationen

$$Q_L \to U_L \cdot Q_L,\ Q_R \to U_R \cdot Q_R \tag{12}$$

Da die Transformationen unabhängig voneinander durchgeführt werden können ist die zugehörige Symmetriegruppe $SU(2)_L \times SU(2)_R$. Diese Symmetrie wird als chirale Symmetrie bezeichnet.

Die chirale Symmetrie ist jedoch auf zwei Arten gebrochen:
Da die Quarks nicht ganz masselos sind ($m_u \approx 2,2\,\text{MeV},\ m_d \approx 4,7\,\text{MeV}$[PDG]) kommt es zur expliziten Symmetriebrechung.
Zusätzlich dazu ist die Symmetrie spontan gebrochen, da das Vakuum nicht die selben Symmetrien beinhaltet wie die restlichen Zustände. Dies lässt sich wie folgt erklären: Da die Massen der Quarks aus der 1.Generation sehr klein sind ist der Energieaufwand zu Bildung eines (sich stark anziehenden) Quark-Antiquark-Paares sehr gering. Daher ist anzunehmen, dass der Vakuumzustand $|0\rangle$ ein Kondensat aus solchen Paaren enthält. Dabei wird jeweils ein rechtshändiges Quark und ein linkshändiges Antiquark erzeugt (oder umgekehrt). Für die Quarks erhält man mit

$$\left\langle 0 \left| \overline{Q}Q \right| 0 \right\rangle = \left\langle 0 \left| \overline{Q_L}Q_R + Q_L\overline{Q_R} \right| 0 \right\rangle \neq 0 \tag{13}$$

einen nicht verschwindenden Vakuum-Erwartungswert. Wie man sieht verändert sich dieser Operator jedoch im Allgemeinen unter Transformationen mit $U_L \neq U_R$. Dies führt dazu, dass das Vakuum nur unter Transformationen mit $U_L = U_R$ symmetrisch ist (Symmetriegruppe $SU(2)_V$).
Nach dem Goldstonetheorem sind aufgrund der spontanen Symmetriebrechung masselose Goldstone-Bosonen zu erwarten, welche mit den Pionen identifiziert werden können. Aufgrund der expliziten Symmetriebrechung ist die Massenlosigkeit der Pionen jedoch nur als Näherung gegeben.

Die Phase in der die chirale Symmetrie gebrochen ist entspricht im Phasendiagramm der QCD den hadronischen Zuständen. Es treten nur gebundene farbneutrale Zustände auf, aufgrund des Confinements kommen keine einzelnen Quarks vor. Es zeigt sich jedoch, dass unter anderem hohe Temperaturen zu einer Wiederherstellung der ursprünglichen Symmetrie führen. Die Form der Materie geht dann ins sogenannte Quark-Gluon-Plasma über (Deconfinement). Die genaue Untersuchung des Übergangs zwischen diesen beiden Phasen ist eines der Ziele in der aktuellen Forschung.

3 Funktionale Renormierungsgruppen

Funktionale Renormierungsgruppen (FRG) bilden eine Theorie, mit der Skalenwechsel und deren Einfluss auf die Physik beschrieben werden können. Betrachtet man ein System in einem im Vergleich zur zugrunde liegenden Wechselwirkung großen Längen-Maßstab, daher kleinem Impuls, so müssen alle Fluktuationen mit dazwischen liegenden Impulsen beachtet werden. Dazu werden entsprechend Wilson's Philosophie immer nur Änderungen bei Hinzunahme von Moden in einer infinitesimalen Impulsschale betrachtet, was zu Differentialgleichungen, den sogenannten RG-Flussgleichungen (RG flows) führt.

3.1 Effektive gemittelte Wirkung

Ein Konzept, mit dem solche Flussgleichungen hergeleitet werden können ist das der effektiven gemittelte Wirkung (effektive average action) Γ_k.
Als Ausgangspunkt dient die „gewöhnliche" effektive Wirkung Γ, die durch einen IR-Cutoff k modifiziert wird. Dadurch werden für Γ_k jeweils nur Fluktuationen mit Impuls $q^2 \geq k^2$ einbezogen, was einer Betrachtung des Systems bei einer Längenskala $\sim \frac{1}{k}$ entspricht.

Bei Berechnungen von verschiedenen physikalischer Größen in der QFT kann es vorkommen, dass Impulsintegrale für $q \to \infty$ divergieren. Dies deutet im Allgemeinen auf eine Abhängigkeit dieser Größe von sehr großen Impulsen hin, man spricht von sogenannten UV-Divergenzen. In diesem Fall ist es nötig zusätzlich einen UV-Cutoff Λ einzuführen, sodass Impulse $q^2 > \Lambda^2$ außen vor gelassen werden. Ein weiterer Vorteil ist, dass man mit diesem UV-Cutoff einen Startpunkt hat, an dem Γ_k bekannt ist (s.u.) und von dem aus in Richtung des IR-Bereichs entwickelt werden kann.
Γ_k muss dabei folgende Randbedingungen erfüllen:

1. $\lim\limits_{k\to 0}\Gamma_k = \Gamma$: Für $k = 0$ ist der IR-Cutoff aufgehoben und daher alle Fluktuationen enthalten, weshalb Γ_k der vollen effektiven Wirkung Γ entsprechen muss.

2. $\lim\limits_{k\to \Lambda}\Gamma_k = S_\Lambda$: Im Ultravioletten muss Γ_k einer Wirkung S_Λ entsprechen, die nicht von den Fluktuationen beeinflusst ist („bare action"). S_Λ muss für explizite Berechnungen bekannt sein, da von hier aus hin zu kleineren k entwickelt wird.

Sei nun Γ_k Funktional eines, zunächst einmal nicht genauer festgelegten, Feldes ϕ. Mit Einführung von

$$t := \ln(\frac{k}{\Lambda}) \tag{14}$$

lässt sich die Abhängigkeit der Wirkung von k als Flussgleichung beschreiben:

$$\partial_t \Gamma_k [\phi] = \frac{1}{2} Tr \left(\frac{\partial R_k}{\Gamma_k^{(2)} [\phi] + R_k} \right) \tag{15}$$

Diese Gleichung wird auch mit ERG (exact RG) bezeichnet, da sie aus Grundprinzipien hergeleitet werden kann, ohne dabei Näherungen zu machen. Die Spur meint dabei eine Integration über alle Impulse sowie Summation über mögliche Indizes. $\Gamma_k^{(2)}$ bezeichnet die zweite

Ableitung von Γ_k nach ϕ.
R_k ist die regulierende Funktion, die sowohl den IR-Cutoff, als auch die Regulierung im UV beinhaltet. Da es unterschiedliche Möglichkeiten gibt R_k zu wählen ist auch Γ_k nicht eindeutig, mit Ausnahme vom Startpunkt S_Λ im UV und Endpunkt Γ im IR. Für verschiedene R_k erhält man also mit den zugehörigen Γ_K verschiedene Trajektorien im Wahrscheinlichkeitsraum. Aufgrund der Randbedingungen für Γ_k muss R_k für $k \to 0$ verschwinden und für $k \to \Lambda$ divergieren. Der Regulator R_k kann daher als so etwas wie eine effektive Masse betrachtet werden.

3.2 Proper-Time RG

Eine direkte Lösung der ERG ist so im Allgemeinen nicht möglich. Daher ist eine Trunkierung, also eine Näherung an das eigentliche Problem, nötig. Eine Möglichkeit der Approximation bieten die sogenannten PTRG-Flussgleichungen (Proper-Time RG flows). Diese sind zunächst einmal nicht exakt, es kann jedoch durch den sogenannten Background-Field-Formalismus Exaktheit erreicht werden.
Eine Gruppe von PTRG-Flussgleichungen („standard-PTRG-flow“) lässt sich wie folgt herleiten:
Ausgangspunkt ist die effektive Wirkung von Loop-Ordnung 1 :

$$\Gamma = \Gamma_\Lambda^{1-loop}[\phi] = S_{kl}[\phi] + \frac{1}{2} Tr\left(\ln S_{kl}^{(2)}[\phi]\right) \tag{16}$$

mit der klassischen Wirkung S_{kl} und $S_{kl}^{(2)}[\phi] = \frac{\partial^2 S_{kl}[\phi]}{\partial\phi(x)\partial\phi(y)}$. Die Spur steht hier wieder für die Integration über alle Impulse.
Der Logarithmus wird nun in die sogenannte Schwinger Eigenzeit-Darstellung überführt, wobei die für elliptische Differentialoperatoren $\hat{A}$ gültige Relation

$$\hat{A}^{-1} = \int_{1/\Lambda^2}^{\infty} d\tau \exp(-\tau\hat{A}) \tag{17}$$

ausgenutzt wird (vgl.$\frac{1}{a} = \int_0^\infty dx\, exp(-ax)$). Der Cutoff der unteren Integralgrenze ist nötig, da das Integral sonst nicht definiert wäre. Integration beider Seiten und Spurbildung liefert

$$Tr\left(\ln\left(\hat{A}\right) - \ln\left(\hat{A}_0\right)\right) = -\int_{1/\Lambda^2}^{\infty} \frac{d\tau}{\tau} \cdot Tr\left(e^{-\tau\hat{A}} - e^{-\tau\hat{A}_0}\right) \tag{18}$$

Durch Einsetzen in (16) erhält man

$$\Gamma_\Lambda^{1-loop}[\phi] = S_{kl}[\phi] - \frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{d\tau}{\tau} f_k(\tau)\, Tr\left(\exp\left(-\tau S_{kl}^{(2)}[\phi]\right)\right) \tag{19}$$

wobei die Regulierungsfunktion $f_k(\tau)$ eingefügt wurde. Dies macht es möglich die untere Integralgrenze bis auf 0 zu erweitern.

Die hier verwendete Funktion ist von der Form $f_k(\tau) = g(x)$ mit $x = \tau k^2$ (vgl.(22)). Sie stellt zum einen durch die Eigenschaft $\lim\limits_{\tau\to 0} f_{k\neq 0}(\tau) = 0$ sicher, dass das Integral für kleine τ endlich bleibt. Zum anderen dient sie der UV- und IR-Regulierung und muss damit folgende Bedingungen erfüllen:

$$\lim_{x\to 0} f(x) = 1;\ \lim_{x\to\infty} f(x) = 0 \tag{20}$$

Die erste Bedingung stellt sicher, dass für $k \to 0$ die volle effektive Wirkung Γ erreicht wird. Die Zweite verwirklicht den IR-Cutoff, da große τ mit kleinen Impulsen korrespondieren. Für festes k sind damit kleine Impulse unterdrückt und man erhält im Grenzwert $\tau \to \infty$ die klassische Wirkung.
Durch Differenzieren nach k (bzw. t) erhält man, da die klassische Wirkung skalenunabhängig ist, die Flussgleichung

$$\partial_t \Gamma_k[\phi] = -\frac{1}{2}\int\limits_0^\infty \frac{d\tau}{\tau}\,\partial_t f_k(\tau)\,Tr\left(\exp\left(-\tau\Gamma_k^{(2)}[\phi]\right)\right) \tag{21}$$

Die klassische Wirkung im Integral wurde hier durch Γ_k ersetzt („RG improvement“).
Nun werden Funktionen $\partial_t f_k$ benötigt, für die f_k die gewünschten Eigenschaften erfüllt. Eine mögliche Wahl sind die Funktionen

$$\partial_t f_k(\tau) = -2\frac{\left(\tau k^2\right)^{n+1}}{\Gamma(n+1)}\cdot\exp\left(-\tau k^2\right) \tag{22}$$

Wobei $\Gamma(n+1)$ hier die Gammafunktion bezeichnet und nicht mit der effektiven Wirkung $\Gamma[\phi]$ zu verwechseln ist.
Für diese f_k kann die τ-Integration ausgeführt werden und man erhält schließlich

$$\partial_t \Gamma_k[\phi] = Tr\left(\frac{k^2}{\Gamma_k^{(2)}[\phi] + k^2}\right)^{n+1},\ \ n \geq 0 \tag{23}$$

Die Flussgleichung ist zwar für kein $n \geq 0$ exakt, erste Studien zeigen jedoch, dass die bei der Näherung weggefallenen Terme, zumindest in der Nähe von kritischen Punkten und in drei Dimensionen, nur geringen Einfluss haben.
Die im nächsten Kapitel auftretende Flussgleichung (27) kann bei Anwendung auf die QCD aus der obigen Standard-PTRG-Flussgleichung (23) für $n = \frac{3}{2}$ hergeleitet werden.

4 Großkanonisches Potential

Betrachtet man nun ein Systems aus Quarks und Mesonen, so sind besonders 3 Impulswerte von großer Bedeutung:

1. k_ϕ(„compositeness scale“): Ab dieser Größenordnung bilden sich mesonische gebundene Zustände aufgrund der starken Wechselwirkung. Sie liegt bei etwas unter 1 GeV.

2. k_χ(„chiral symmetry breaking scale“): Ab etwa 500 MeV bildet sich ein Kondensat an chiralen Quarks, was zur spontanen Symmetriebrechung führt.

3. Λ_{QCD}: Ab hier setzt das Confinement ein, Quarks kommen nur noch in gebundene Zuständen vor. Λ_{QCD} liegt etwa bei 200 MeV.

Für ein $N_f = 2$ Quark-Meson-Modell ergibt sich für $k = k_\phi$ die folgende effektive Wirkung:

$$\Gamma_{k=k_\phi} = \int d^4x \left\{ \overline{q} \left(i\partial + g\left(\sigma + i\gamma_5 \overrightarrow{\tau}\,\overrightarrow{\pi}\right) q + \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \sigma\right)^2 + \left(\partial_\mu \overrightarrow{\pi}\right)^2 - U\left(\sigma, \overrightarrow{\pi}\right) \right) \right\} \tag{24}$$

Mittels fRG lässt sich für dieses Quark-Meson-Modell ein großkanonisches Potential Ω_k ermitteln, welches sich aus einem rein mesonischen Anteil U_{Meson} und einem skalenabhängigen Anteil U_k zusammen setzt:

$$\Omega_k = U_{Meson} + U_k \tag{25}$$

Der mesonische Anteil U_{Meson} hat die Form

$$U_{Meson} = \frac{\lambda}{4}\left(\phi^2 - v^2\right)^2 - c\sigma = \frac{\lambda}{4}\left(\sigma^2 + \vec{\pi}^2 - v^2\right)^2 - c\sigma \tag{26}$$

wobei die Felder des Sigma-Mesons und des Pions zusammengefasst sind zu $\phi := \begin{pmatrix} \vec{\pi} \\ \sigma \end{pmatrix}$.
Durch v^2 ist eine spontane Symmetriebrechung realisiert. Der explizit symmetriebrechende Parameter c ist durch die Masse und die Zerfallskonstante des Pions festgelegt: $c = f_\pi m_\pi^2$. Der Wert $f_\pi = 93\,MeV$ kann aus der Zerfallsrate des Pions durch schwache Wechselwirkung hergeleitet werden.

Die Bestimmung der beiden verbleibenden Parameter λ und v^2 ist im nächsten Kapitel ausführlich beschrieben. Somit ist $U_{Meson}(\vec{\pi}, \sigma)$ nur von den mesonischen Feldern abhängig. Alle weiteren Abhängigkeiten sind damit im skalenabhängigen Teil U_k enthalten.
Betrachtet man den Verlauf für $\lambda > 0$ wird der Zusammenhang zur Landau-Theorie deutlich. Zudem kann man im Fall $c = 0$ die Form des „Sombrero-Potentials“ (engl.: Mexican hat) erkennen, der für spontane Symmetriebrechung charakteristisch ist. Dessen Rotationssymmetrie ist bei expliziter Symmetriebrechung gestört.

4.1 Die Flussgleichung

Der skalenabhängige Teil des Potentials hat die Form einer PTRG-Flussgleichung die aus der effektiven Wirkung (24) hergeleitet werden kann.

$$\partial_t U_k(T,\mu) = \frac{k^5}{12\pi^2}\left[\frac{3}{E_\pi}\cdot\coth\left(\frac{E_\pi}{2T}\right)+\frac{1}{E_\sigma}\cdot\coth\left(\frac{E_\sigma}{2T}\right)\right.$$
$$\left.-\frac{2N_f N_c}{E_q}\cdot\left\{\tanh\left(\frac{E_q-\mu_q}{2T}\right)+\tanh\left(\frac{E_q+\mu_q}{2T}\right)\right\}\right] \tag{27}$$

Dabei bezeichnet N_f den Entartungsgrad aufgrund der vorkommenden Flavour und $N_c = 3$ die Anzahl der Farbladungen. Die Ableitung erfolgt nach der logarithmischen Variable (14). Λ bezeichnet den UV-Cutoff, der als Startpunkt der Berechnungen dient: Ausgehend von der Startbedingung $U_{k=\Lambda} = 0$, also

$$\Omega_{k=\Lambda} = U_{Meson} \tag{28}$$

kann das Potential durch lösen der Flussgleichung in Richtung kleinerer k entwickelt werden. Der Cutoff ist nötig, da in der Flussgleichung ein divergenter Term, der sogenannte Vakuumterm (vgl.4.3) auftaucht. Der Einfluss, den eine Variation des UV-Cutoffs auf die Thermodynamik hat ist in 5.2 und mehren Unterkapiteln von 6 beschrieben.
Die auftretenden effektiven Energien $E_i = \sqrt{k^2+m_i^2}$ (mit der jeweiligen effektiven Masse m_i) sind dabei skalenabhängig. Wie man sieht setzt sich die Flussgleichung additiv aus einem mesonischen Anteil und einem Quark-Anteil zusammen.
Die Auswertung des Potentials erfolgt am globalen Minimum von Ω_k bzgl. ϕ^2. Wegen $\langle\vec{\pi}^2\rangle$ ist dieses identisch mit dem Minimum des Potentials bzgl. σ, ϕ ist also auf einen (von T und μ_q abhängigen) Wert $\phi_0 \equiv \sigma_0$ fixiert, der durch die Bedingung

$$\partial_\sigma \Omega_k|_{\sigma=\sigma_0} = 0 \tag{29}$$

festgelegt wird. Es ist zu beachten, dass Ω_k als Funktion von σ auch mehrere lokale Minima aufweisen kann, je nach Wert der Parameter T und μ_q.

In den Energien der Quarks $E_q = \sqrt{k^2+g^2\phi^2}$ tritt zusätzlich zum Feld ϕ der Yukawa-Kopplungsparameter g auf, welcher in diesem Modell als konstant angesehen wird. Damit ist die Fermimasse $M_q = g\phi_0$(dyn. generierte Quarkmasse) proportional zu σ_0.

Gluonen werden in diesem Modell nicht explizit als Teilchen berücksichtigt. Es ist jedoch auch keines der Ziele der Thesis das Verhalten der Austauschteilchen genauer zu betrachten. Zur Beschreibung der Thermodynamik werden sie nicht explizit benötigt.

4.2 Bedingungen und Ziele in der Thesis

In dieser Arbeit dient als zentrale Differentialgleichung nur der aus den Quark- und Antiquark-Besetzungszahlen stammenden Anteil der Flussgleichung . Der mesonische Teil der Flussgleichung, daher die coth()-Terme, werden im Folgenden außen vor gelassen.Dies entspricht,

zusammen mit den anderen genannten Einschränkungen, der erweiterten Mean-Field Näherung (eMFA). Es ist insofern eine deutliche Vereinfachung des Problems, da sich die Massen der Mesonen aus Ableitungen des Potentials nach σ^2 berechnen:

$$m_{\pi,k}^2 = 2\Omega_k^{\prime};\ m_{\sigma,k}^2 = 2\Omega_k^{\prime} + 4\sigma_0^2 \cdot \Omega_k^{\prime\prime} \tag{30}$$

mit $\Omega_k^{\prime} := \frac{\partial \Omega_k}{\partial_{\sigma^2}}|_{\sigma=\sigma_0}$, $\Omega_k^{\prime\prime} := \frac{\partial^2 \Omega_k}{\partial_{\sigma^2}^2}|_{\sigma=\sigma_0}$.
Der Flavour-Entartungsgrad ist wie bereits erwähnt auf $N_f = 2$ festgelegt, der Yukawa--Kopplungsparameter erhält den Wert $g = 3,2$. Als UV-Cutoff dient sofern nicht anders angegeben $\Lambda = 1\,GeV$. Da jedoch der Einfluss des Cutoffs auf die Thermodynamik von Interesse ist wird Λauch an einigen Stellen variiert.
Für die weiteren Berechnungen wechselt man zunächst auf eine Differentiation nach k. Dazu ergibt sich nach (14) der Zusammenhang $k = \Lambda \exp(t)$ und somit:

$$\partial_t = \frac{dk}{dt}\partial_k = k \cdot \partial_k \tag{31}$$

Die hier betrachtete vereinfachte Flussgleichung lautet damit nach Einsetzen der Werte N_f und N_c

$$\partial_k U_k(T,\mu) = -\frac{k^4}{\pi^2 E_q} \cdot \left[\tanh\left(\frac{E_q - \mu}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{E_q + \mu}{2T}\right)\right] \tag{32}$$

Da das chemische Potential der Quarks das einzige auftretende ist wurde $\mu_q = \mu$ gesetzt.
Da der Einfluss der Pionen auf das Potential nicht beachtet wird, entfällt auch deren Anteil im mesonischen Potential:

$$U_{Meson} = \frac{\lambda}{4}\left(\sigma^2 - v^2\right)^2 - c\sigma \tag{33}$$

Ziel ist nun die Entwicklung des großkanonischen Potentials hin zu kleineren Werten von k, ausgehend von der Startbedingung (28). Daraus können dann verschiedene physikalische Größen, wie z.B. Druck und Entropiedichte, berechnet und deren Verhalten bei verschiedenen Temperaturen und chem. Quark-Potentialen analysiert werden.
Eines der großen Ziele in der QCD ist zudem das Erstellen eines vollständigen Phasendiagramms von Kernmaterie. Für das hier betrachteten vereinfachten Quark-Meson-Modell ist dies in 6.5 durchgeführt.

4.3 Analytische Lösung der vereinfachten Flussgleichung

Der hier betrachtete Teil der Flussgleichung (32) lässt sich bis zu einem gewissen Grad analytisch lösen. Dazu geht man einen Schritt zurück zu den Quark-Besetzungszahlen n_q und $n_{\overline{q}}$, von denen sich die tanh(.)-Terme ableiten: Quarks haben einen Spin von $s_q = \frac{1}{2}$ und sind somit Fermionen. Daher folgen die Besetzungszahlen der Fermi-Statistik $\langle n_j \rangle = \frac{1}{exp\left(\frac{\varepsilon_j - \mu}{T}\right)+1}$ (ε_j Energie zum j-ten Eigenzustand) bzw. da die effektive Energie E_q der Quarks betrachtet wird

$$\langle n_q \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_q - \mu}{T}\right) + 1} \tag{34}$$

Hierzu findet sich der Zusammenhang

$$\frac{1}{2}-\langle n_q\rangle=\frac{\exp\left(\frac{E_q-\mu}{T}\right)+1-2}{2\left(\exp\left(\frac{E_q-\mu}{T}\right)+1\right)}=\frac{1}{2}\cdot\frac{\exp\left(\frac{E_q-\mu}{T}\right)-1}{\exp\left(\frac{E_q-\mu}{T}\right)+1}$$

$$=\frac{1}{2}\cdot\frac{\exp\left(\frac{E_q-\mu}{2T}\right)-\exp\left(\frac{E_q-\mu}{2T}\right)}{\exp\left(\frac{E_q-\mu}{2T}\right)+\exp\left(\frac{E_q-\mu}{2T}\right)}=\frac{1}{2}\cdot\frac{\sinh\left(\frac{E_q-\mu}{2T}\right)}{\cosh\left(\frac{E_q-\mu}{2T}\right)}$$

$$=\tanh\left(\frac{E_q-\mu}{2T}\right)$$

Da sich die chemischen Potentiale für Antiteilchen und Teilchen aufheben müssen ändert sich bzgl. für $\mu_{\overline{q}}$ im Vergleich zu μ_q nur das Vorzeichen , also $\mu_{\overline{q}}=-\mu$. Daher gilt für die Besetzungszahlen der Antiteilchen

$$\frac{1}{2}-\langle n_{\overline{q}}\rangle=\tanh\left(\frac{E_q+\mu_q}{2T}\right)$$

Dabei wurde beachtet, dass bei der Berechnung der effektiven Energien (vgl.4.1) keine Unterscheidung zwischen Teilchen und Antiteilchen getroffen wird.
Insgesamt folgt damit

$$\tanh\left(\frac{E_q-\mu}{2T}\right)+\tanh\left(\frac{E_q+\mu}{2T}\right)=1-\langle n_q\rangle-\langle n_{\overline{q}}\rangle \tag{35}$$

Die Flussgleichung lässt sich damit in die Integralgleichung

$$U_{k=0}=\int_0^\Lambda dk\,\frac{k^4}{\pi^2E_q}\left(1-n_q-n_{\overline{q}}\right)$$

$$=U_{vac}+U_q+U_{\overline{q}} \tag{36}$$

umschreiben (schreibe kurz n_q für $\langle n_q\rangle$). Wie man sieht divergiert der Vakuumterm U_{vac} für $\Lambda\to\infty$. Aus diesem Grund ist es überhaupt erst nötig in der eMFA einen UV-Cutoff einzuführen.
Für weitere Umformungen der Summanden U_q und $U_{\overline{q}}$ sei auf [KG06] (Appendix 1.3) verwiesen. Man kann z.B. zeigen, dass der Zusammenhang

$$U_{q/\overline{q}}\sim -T\cdot\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,ln\left(1+e^{-\beta\left(E_q\mp\mu\right)}\right) \tag{37}$$

gilt. Da das Integral auf der rechten Seite gerade der fermionischen Zustandssumme pro Volumen entspricht ist damit die Rückführung auf den für großkanonische Potentialdichten Ω allgemein gültigen Zusammenhang

$$\Omega\left(T,\mu\right)=-\frac{T\cdot ln\left(Z\right)}{V}$$

gelungen.

5 Parameter des mesonischen Potentials

5.1 Bestimmung der Startwerte

Für ein rein mesonisches Potential, daher ohne Beachtung der Skalenabhängigkeiten, kann eine Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen durch die Parameter

$$\lambda = 16,3866,\ v^2 = 7486,83\,\mathrm{MeV}^2 \tag{38}$$

erreicht werden: Mit diesen Parametern entsprechen die aus dem Potential U_{Meson} berechneten Werte für die Massen von Pion und σ-Meson den in Experimenten beobachteten. Zudem entspricht das Minimum σ_0 des Potentials dem Wert der Zerfallskonstanten $f_\pi = 93\,\mathrm{MeV}$ (vgl. Abb.3).

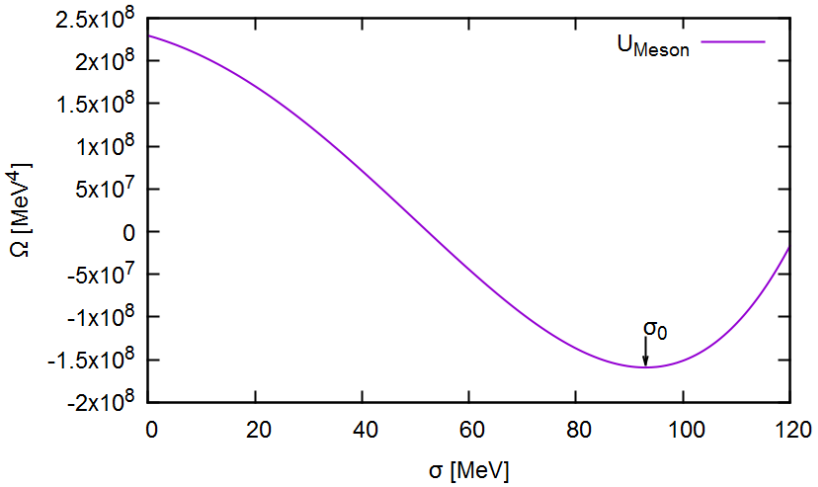


Abbildung 3: mesonisches Potential

Damit diese Massen im IR-Bereich bei Hinzunahme der Flussgleichung auch weiterhin den experimentellen Ergebnissen entsprechen müssen die Parameter des mesonischen Potentials U_{Meson} angepasst werden. Dabei kam das Minimierungsverfahren Differential Evolution (A) zum Einsatz .
Die Massen der Mesonen berechnen sich jeweils im chiralen Limes $c = 0$ bei $T = \mu = 0\,\mathrm{MeV}$ aus dem Gesamtpotential Ω durch (30).

Die experimentellen Werte sind $m_\pi^{exp} = 138\,\mathrm{MeV}$ und $m_\sigma^{exp} = 400 - 800\,\mathrm{MeV}$. Genauer ergibt sich mit den gegebenen Werten

$$\lambda = 16,3866 \tag{39}$$

und

$$v^2 = 7486,83\,\mathrm{MeV}^2 \tag{40}$$

die Sigma-Masse zu $m_\sigma^{exp} \approx 567\,\mathrm{MeV}$.

Da sich das Potential aus $\Omega_k = U_k + U_{Meson}$ zusammen setzt berechnen sich die Massen(-quadrate) auch jeweils aus einem mesonischen Anteil m_M^2 und einem skalenabhängigen Anteil m_q^2. Bevor nun DE angewendet werden kann muss zunächst der Massenanteil durch das

Potentials U_k ermittelt werden. Dazu werden zunächst die ersten beiden Ableitungen der Flussgleichungen nach σ^2 benötigt:

$$\frac{\partial}{\partial_{\sigma^2}}\left(\partial_k U_k\left(T=\mu=0\right)\right)=\frac{\partial}{\partial_{\sigma^2}}\left(-\frac{2}{\pi^2}\cdot\frac{k^4}{\sqrt{k^2+g^2\sigma^2}}\right)$$
$$=\frac{1}{\pi^2}\cdot\frac{g^2k^4}{(k^2+g^2\sigma^2)^{\frac{3}{2}}}=\frac{1}{\pi^2}\cdot\frac{g^2k^4}{E_q^3}$$
$$\frac{\partial^2}{\partial^2_{\sigma^2}}\left(\partial_k U_k\left(T=\mu=0\right)\right)=-\frac{3}{2\pi^2}\cdot\frac{g^4k^4}{E_q^5}$$

Nach Vertauschen der Ableitungen erhält man so die beiden Differentialgleichungen

$$\partial_k\left(\frac{\partial}{\partial_{\sigma^2}}U_k\left(T=\mu=0\right)\right)=\frac{1}{\pi^2}\cdot\frac{g^2k^4}{E_q^3} \tag{41}$$

$$\partial_k\left(\frac{\partial^2}{\partial^2_{\sigma^2}}U_k\left(T=\mu=0\right)\right)=-\frac{3}{2\pi^2}\cdot\frac{g^4k^4}{E_q^5} \tag{42}$$

Diese können nun analog zur eigentlichen Flussgleichungen mit Hilfe von Runge-Kutta-Verfahren gelöst werden (genaueres s.B). Die Ergebnisse für $k_0 = 1\,\mathrm{MeV}$ sind in den folgenden beiden Abbildungen zu sehen.

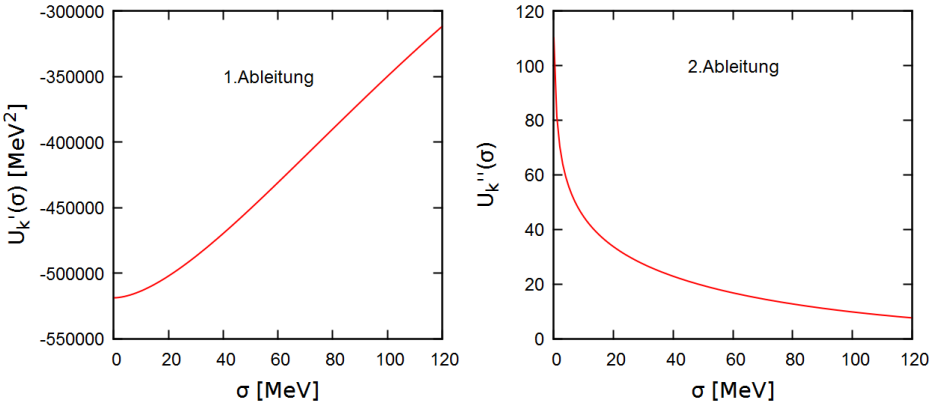


Abbildung 4: Ableitungen des Potentials U_k nach σ^2

An der Stelle $\sigma_0 = 93\,\mathrm{MeV}$ ergeben sich die Werte $U'_{k_0} = -363771\,\mathrm{MeV}^2$ und $U''_{k_0} = 10,7514$ und somit die Massen

$$m^2_{\pi,k_0} = -727.542,0\,\mathrm{MeV}$$

$$m^2_{\sigma,k_0} = -355.586,6\,\mathrm{MeV}$$

Wie man sieht sind beide Anteile zum Massenquadrat negativ, was zunächst einmal fragwürdig erscheint. Man muss jedoch bedenken, dass diese Massen für sich alleine zunächst

einmal keine Bedeutung haben. Quadriert zeigen sie einem jedoch die Differenzen zwischen den effektiven Massen im IR- und den effektiven Massen im UV-Bereich, denn für $k = \Lambda$ ist $m_{q,\pi}^2 = m_{q,\sigma}^2 = 0$. An den negativen Werten kann man also erkennen, dass die effektiven Massen der Mesonen zum UV Bereich hin zunehmen.

Die Ableitungen des mesonischen Potentials sind

$$\frac{\partial}{\partial_{\sigma^2}} U_{Meson} = \frac{\lambda}{2}\left(\sigma^2 - v^2\right) \tag{43}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial_{\sigma^2}^2} U_{Meson} = \frac{\lambda}{2} \tag{44}$$

und der Massenanteil aus dem mesonischen Potential somit

$$m_{M,\pi}^2\left(\lambda, v^2\right) = \lambda\left(\sigma_0^2 - v^2\right) \tag{45}$$

$$m_{M,\sigma}^2\left(\lambda, v^2\right) = \lambda\left(\sigma_0^2 - v^2\right) + 2\sigma_0^2\lambda \tag{46}$$

Als Kostenfunktion für DE bietet sich die quadratische Abweichung von den experimentellen Werten an:

$$C\left(\lambda, v^2\right) = \left(\Delta m_\sigma^2\right)^2 + \left(\Delta m_\pi^2\right)^2 \tag{47}$$

mit

$$\Delta m_x^2 = m_{M,x}^2\left(\lambda, v^2\right) + m_{k,x}^2 - \left(m_x^{exp}\right)^2; \;\; x = \sigma, \pi \tag{48}$$

Im gewählten Parameterraum

$$\Pi = \left\{ \begin{pmatrix} \lambda \\ v^2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2 \middle| \, |\lambda| \leq 100, \; \left|v^2\right| \leq 500\,\mathrm{Ge}V^2 \right\}$$

lieferte DE nun folgende Ergebnisse:

NP	CR	F	Gen_{max}	λ	v^2[MeV]	$C\left(\lambda, v^2\right)$
20	0,5	0,5	80	-4,017	194.521	767
20	0,5	0,5	100	-4,01838	194.442	5,13
20	0,1	0,5	100.000	-4,018406752	194.440,5453	6,83E-22
20	0,1	0,5	5.000.000	-4,018406752	194.440,5453	1,49E-22

(Ergebnisse in der letzten Generation mit kleinster Kostenfunktion)

Tabelle 1: Ergebnis DE

NP,CR und F sind Parameter des Verfahrens, die im Anhang (A) näher erklärt werden. Gen_{max} gibt die Anzahl der Iterationsschritte an.

Die Ergebnisse sind wie man sieht auch schon für relativ wenige Iterationsschritte eine gute Näherung an die gesuchten Parameter.
In den letzten beiden Zeilen ist eine Konvergenz des Verfahrens zu erkennen. Die Genauigkeit mit der man aus den Parameter die gewünschten Massen erhält ist für diesen Zweck mehr als ausreichend. Daher können diese nun für die weiteren Berechnungen verwendet werden.

Ergebnis:

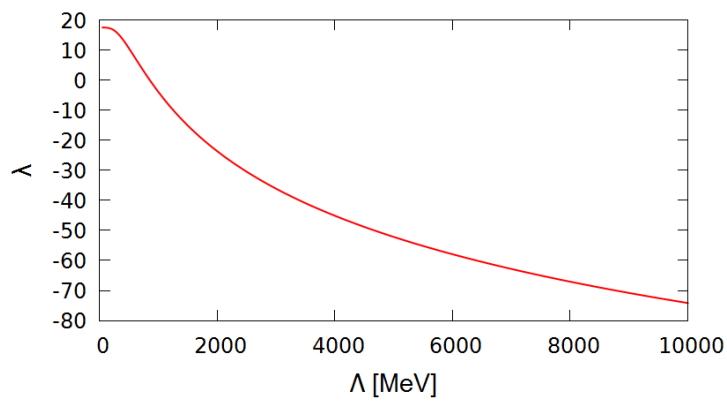
Bei Anpassung der Parameter ($\Lambda = 1\,\text{GeV}$) an die physikalischen Werte $m_\pi = 138\,\text{MeV}$ und $m_\sigma = 567\,\text{MeV}$ ergeben sich für das mesonische Potential die Werte

$$\boxed{\begin{aligned} \lambda &= -4,018406752 \\ v^2 &= 194.440,5453\,\text{MeV}^2 \end{aligned}}$$

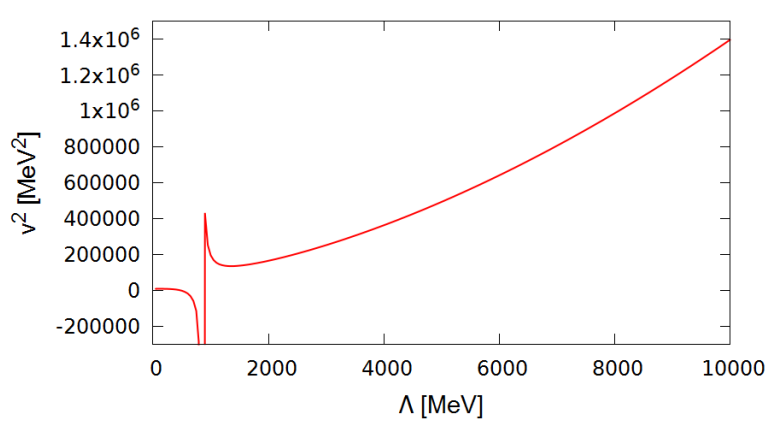
Das Minimum des Gesamtpotentials bzgl. σ liegt dann für $c = f_\pi m_\pi^2$ im Vakuum an der gewünschten Stelle $\sigma_0 = f_\pi = 93$ MeV.

5.2 Startwerte bei Variation von Λ

Variiert man den UV-Cutoff Λ, so ändert sich der Verlauf von U_{k_0}, sowie dessen Ableitungen, aus denen sich die mesonischen Massen berechnen. Folglich müssen für jeden neuen Cutoff die Parameter des mesonischen Potentials neu angepasst werden, damit die aus dem Potential berechneten Massen den experimentellen entsprechen.



5a) Cutoff-Abhängigkeit des Parameters λ



5b) Cutoff-Abhängigkeit des Parameters v^2

Abbildung 5: Startwerte in Abhängigkeit des UV-Cutoffs Λ

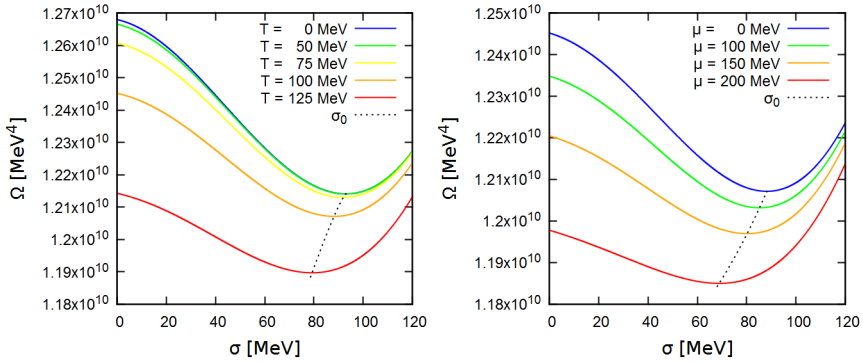
Das Verhalten von λ und v^2 wurde für UV-Cutoffs von 50 MeV bis 10 GeV berechnet. Das Vorgehen dabei war zum größten Teil analog zu 5.2: Ausgehend von (30) wurden die Massen, die sich aus dem Potential berechnen lassen, mit Hilfe der Kostenfunktion (47) an die experimentellen Werte $m_\pi = 138\,\text{MeV}$ und $m_\sigma = 567\,\text{MeV}$ angepasst. Dies wurde für die Cutoffs im genannten Bereich mit einer Schrittweite $\Delta\Lambda = 50\,\text{MeV}$ durchgeführt.
Der Abbruch der Iteration erfolgte hier nicht durch eine maximale Anzahl an Schritten, sondern durch eine vorgegebene Genauigkeit: Das Minimierungsverfahren wurde für jeden Cutoff abgebrochen nachdem der Funktionswert der Kostenfunktion eine Schranke von $C_0 = 10^{-18}$ unterschritten hatte. Auf diese Weise konnte die Rechenzeit verkürzt werden.

Das Ergebnis der Rechnungen ist in Abb.5 zu sehen. Für $\Lambda = 1\,\text{GeV}$ finden sich die im vorigen Kapitel berechneten Werte wieder. Für $\Lambda \to 0$ gehen die Werte über in die in (39) und (40) genannten für ein rein mesonisches Potential, da $U_{k_0} \to 0$ für $\Lambda \to 0$. Für große Λ ist zu beobachten, dass der Verlauf von λ zunehmend abflacht, während $v^2(\Lambda)$ immer steiler wird.

Wie man sieht können die Verläufe der Parameter, vor allem der von v^2, nicht als trivial bezeichnet werden. Die zu λ erhaltene Kurve beginnt bei positiven Werten und geht bei $\Lambda \approx 850\,\text{MeV}$ ins Negative über. An dieser Stelle hat die zu v^2 gehörende Kurve eine Singularität. Rein anschaulich ist dies Verständlich, da U_{Meson} und U_{k_0} im Vakuum immer etwa von der selben Größenordnung sein müssen. Aus $\lambda \to 0$ folgt dann $\left|v^2\right| \to \infty$ um diese Bedingung zu erfüllen. Es stellt sich jedoch die Frage nach der eigentlichen Ursache der auftretenden Singularität. Dies, und welche Bedeutung das Verhalten der Parameter an der Polstelle für die eigentliche Physik hat, ist jedoch nicht Teil dieser Arbeit und müsste daher noch einmal gesondert betrachtet werden.

6 Thermodyn. Eigenschaften im IR-Bereich

Nachdem nun die Parameter des mesonischen Potentials bestimmt wurden kann nun das großkanonische Potential im IR-Bereich untersucht werden. Zwar ist eine analytische Lösung der Flussgleichung (32) schwer bis nicht möglich, man kann jedoch numerisch Lösungen mittels Runge-Kutta-Verfahren (B) für feste Parameter σ, T und μ berechnen. Durch Variation der Parameter können dann Abhängigkeiten untersucht werden und Ω_k als Funktion von T, μ und σ dargestellt werden. Die Festlegung von σ_0 erfolgt danach anhand der Minimumsbedingung (29).
Der Startwert für die Entwicklung in den IR-Bereich bildet der UV -Cutoff Λ mit der Startbedingung $\Omega_{k=\Lambda}(\sigma) = U_{Meson}(\sigma)$. Von hier aus wird das Potential in Richtung kleinerer Impulse bis zu $k_0 = 1\,\text{MeV}$ entwickelt. Um unnötige Indizes zu vermeiden sei im Folgenden $\Omega = \Omega_{k=k_0}$.
Bei festem T und μ wird nun Ω als Funktion von σ berechnet und das globale Minimum bestimmt. Für σ wurden dazu Werte im Bereich $0-120\,\text{MeV}$ betrachtet. Ergebnisse dazu sind exemplarisch für verschiedene T und μ in Abb.(6) zu sehen. Die Verlauf des Minimums σ_0 ist jeweils mit einer gestrichelten Linie markiert. Man kann erkennen, dass σ_0 bei steigender Temperatur, bzw. mit zunehmendem chemischen Potential μ, abnimmt. Hierauf wird in 6.5 weiter eingegangen.
Das Ermitteln des Minimums erfolgte hier durch direkten Vergleich der Potentialwerte und nicht mittels Minimierungsverfahren.



6a) $\Omega(\mu = 0)\,\text{MeV}$ 6b) $\Omega(T = 100\,\text{MeV})$

Abbildung 6: Ω als Funktion von σ

6.1 Temperaturabhängigkeit des Drucks

Der Absolutdruck P im System berechnet sich aus dem Potential durch

$$P(T,\mu) = -\Omega_{\sigma=\sigma_0}(T,\mu) \tag{49}$$

Im Vakuum erhält man damit zunächst einmal den Wert $P(T = \mu = 0) \approx 1,2 \cdot 10^{10}\,\text{MeV}^4$(bei $\Lambda = 1\,\text{GeV}$). Für den eigentlichen Druck p wird dieser im Vakuum auf Null normiert, also

$$p(T,\mu) = P(T,\mu) - P(T = \mu = 0) \tag{50}$$

Für $\mu = 0$ ist der Druck als Funktion der Temperatur in Abb.7 zu sehen. Dazu wurde bei festem μ die Temperatur sukzessive erhöht und in jedem Schritt das Potential am Minimum bestimmt. Dabei wurden für den UV-Cutoff Λ verschiedene Werte betrachtet, sodass dessen Einfluss deutlich wird.
Genauer gesagt ist p/T^4 gegen T aufgetragen, sodass die auf der Ordinate aufgetragene Größe einheitenlos ist. Unabhängig vom Cutoff ist p/T^4 bis $T \approx 20\,\text{MeV}$ etwa konstant bei 0 und steigt dann exponentiell an. Für $\Lambda = 1\,GeV$ hat der Verlauf von p/T^4 ein Maximum bei $T \approx 187\,\text{MeV}$, danach fällt die Kurve wieder ab. Dieses Abfallen ist, wie die anderen Kurven zeigen, dem Cutoff geschuldet. Der Cutoff-Effekt, also das Abfallen von p/T^4 ab einer gewissen Temperatur, nimmt mit wachsendem Λ ab und verschwindet schließlich bei $\Lambda \approx 5\,\text{GeV}$ vollständig. Bei noch größeren Werten von Λ ist im hier betrachteten Temperaturbereich kein Unterschied mehr zu 5 GeV-Kurve zu erkennen.

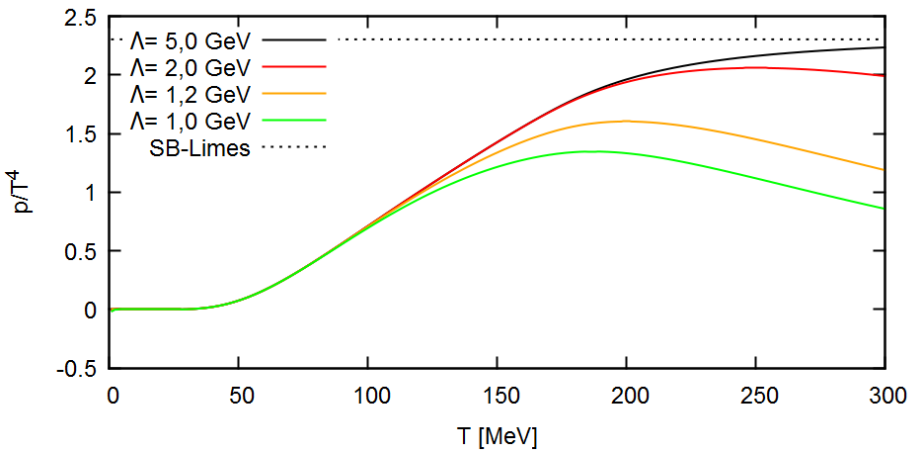


Abbildung 7: Temperaturabhängigkeit des Drucks ($\mu = 0$)

Für sehr hohe Temperaturen kann als Grenzwert des Drucks der Stefan-Boltzmann-Limes hergeleitet werden. Hierbei wird beachtet, dass σ_0 mit steigender gegen null geht, also $E_q \to k$. Für eine genaue Herleitung sei auf [Bur12] verwiesen. Als Ergebnis erhält man im betrachteten System ($N_f = 2,\ N_c = 3$)

$$p_{SB} = N_f N_c \cdot \frac{7\pi^2 T^4}{180} \approx 2,303 \cdot T^4 \tag{51}$$

Dieser Wert ist in Abb.7 am oberen Rand zu sehen. Für $\Lambda = 5\,\text{GeV}$ ist die erwartete Konvergenz gegen p_{SB} zu erkennen, was noch deutlicher wird wenn man Temperaturen bis $T = 500\,\text{MeV}$ betrachtet (Abb.8).

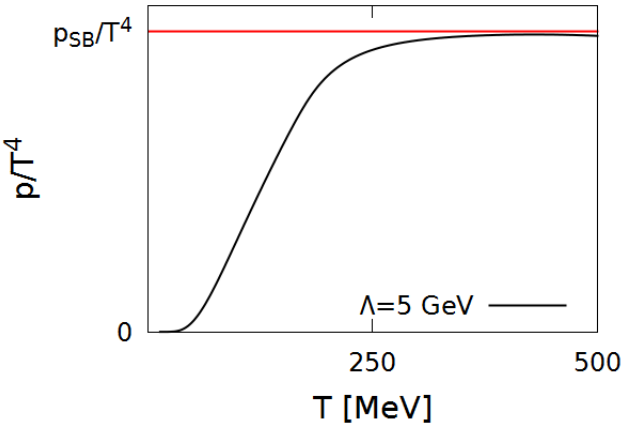


Abbildung 8: Annäherung an den SB-Limes

6.2 Entropiedichte

Die Entropiedichte errechnet sich aus dem Potential durch

$$s = -\frac{\partial}{\partial_T}\Omega_{\sigma=\sigma_0} = \frac{\partial p}{\partial_T} \tag{52}$$

Zur Ermittlung der Temperaturabhängigkeit von s wurde zunächst der Druck wie in 6.1 bestimmt. Die Ableitung erfolgte dann durch Näherung in Form von Differenzenquotienten. Den Verlauf von s/T^3 bei $\mu = 0$ zeigt Abb.9.

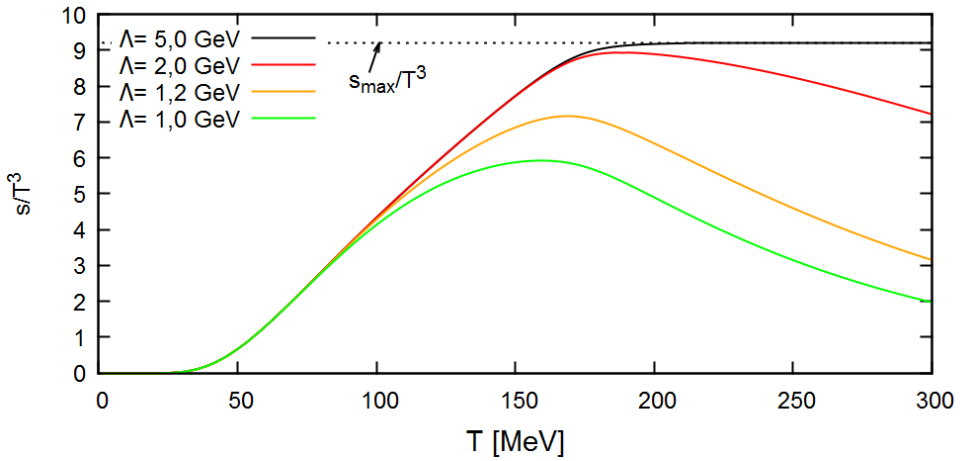


Abbildung 9: Temperaturabhängigkeit der Entropiedichte

Der Einfluss des Cutoffs ist hier ähnlich wie beim Druck. Aus dem Stefan-Boltzmann-Limes kann auch für die Entropiedichte auf einen Grenzwert bei hohen Temperaturen geschlossen werden:

$$s_{max} = \frac{\partial}{\partial_T} p_{SB} \approx 9,212 \cdot T^3 \tag{53}$$

Die Konvergenz gegen diesen Wert für $\Lambda = 5\,\text{GeV}$ ist in der Abbildung gut zu erkennen.

6.3 Quark-Dichte

Analog zur Entropiedichte erhält man die Quark-Dichte n_q (zu Unterscheiden von den Besetzungszahlen in 4.3) aus

$$n_q = -\frac{\partial}{\partial_\mu}\Omega_{\sigma=\sigma_0} = \frac{\partial p}{\partial_\mu} \tag{54}$$

Wie man in Abb.10 sieht ist hier das Abfallen im Verlauf von n_q/T^3 bei hohen Temperaturen anders als beim Druck und der Entropiedichte nicht ausschließlich auf den Cutoff zurück zu führen. Auch bei größeren Cutoffs ist nach erreichen der kritischen Temperatur T_C des Phasenübergangs ein Rückgang zu erkennen. Für Temperaturen ab ca. 200 MeV ist n_q jedoch proportional zu T^2, genauer betrachtet ist für große Cutoffs das Konvergenzverhalten

$$\frac{n_q(T)}{T^2} \to 2\,\text{MeV}$$

zu erkennen.

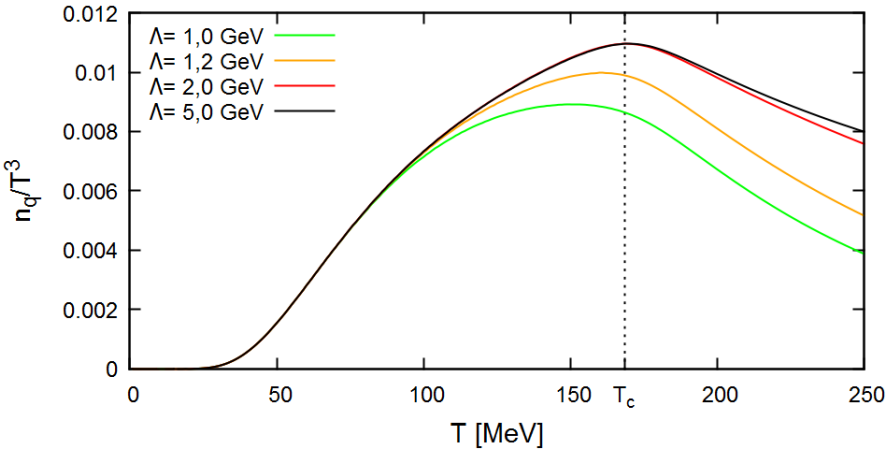


Abbildung 10: Quark-Dichte bei $\mu = 1\,MeV$

Aus dem Verhalten von n_q für $T \to 0$ kann das kritische chemische Quark-Potential μ_c abgelesen werden, an dem bei einer Temperatur von $T \approx 0$ MeV ein Phasenübergang stattfindet (vgl. Abb.11 und 6.5). Demnach ergibt sich $\mu_c \approx 317,3$ MeV. Dieser Wert liegt damit etwa 20 MeV über dem der Fermimasse ($M_q = g\phi_0 = 297,6$ MeV). Im Verhalten von $n_q(\mu)$ spiegelt sich das Silver-Blaze Phänomen wider: Für $T \approx 0$ MeV ist das großkanonische Potential und damit die daraus berechneten physikalischen Größen, bis zu einem Wert $\mu_{crit} \approx M_q$, unabhängig vom chemischen Potential.
Der auf der Abbildung zu sehende Unterschied im Verlauf der beiden Temperaturen 1 MeV 10^{-5} MeV ist im wesentlichen der verwendeten Schrittweite geschuldet. Bei Verkleinerung der Schrittweite für $T = 1$ MeVverringert sich die Differenz auf ein Minimum, das nur auf einer genaueren Ansicht wirklich zu erkennen ist. Die kritischen chemischen Potentiale für beide Temperaturen sind also fast identisch, wie es aufgrund des später ermittelten Phasendiagramms (senkrechter Verlauf des Phasenübergangs für $T \to 0$) auch zu erwarten war.

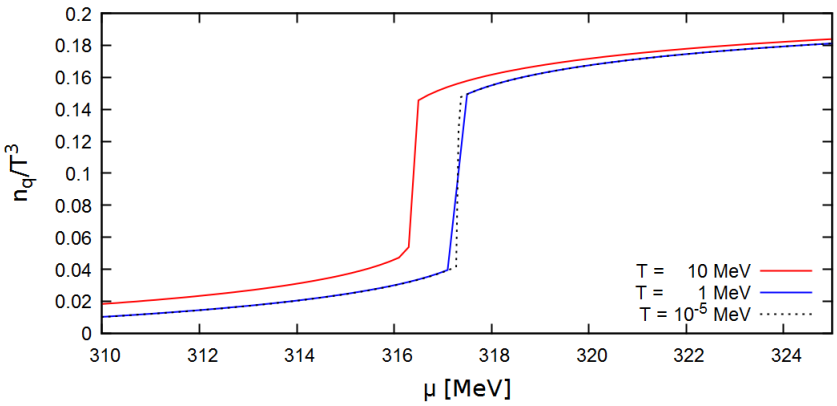


Abbildung 11: μ-Abhängigkeit von n_q für kleine Temperaturen

6.4 Energiedichte

Die Energiedichte berechnet sich aus den in 6.1-6.3 berechneten Werten zu

$$\varepsilon = -p + Ts + \mu n_q \tag{55}$$

Für $\mu = 0$ ergibt sich damit der in Abb.12 zu sehende Verlauf, erneut mit dem bereits beschriebenen Cutoff-Effekt.

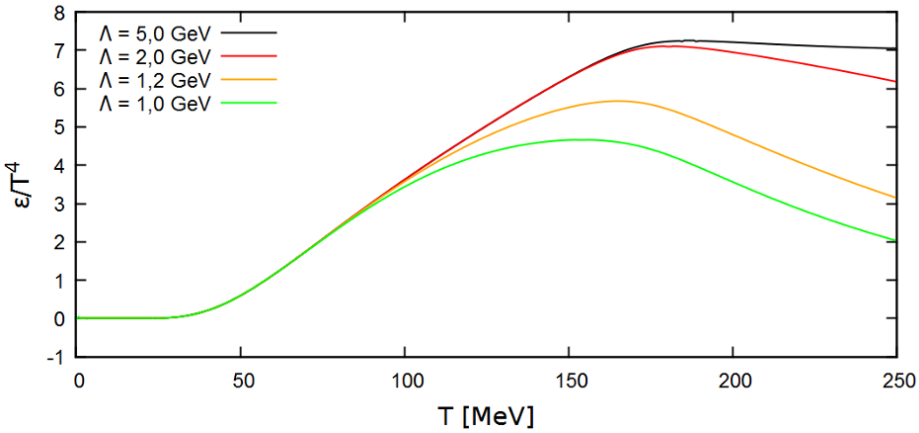


Abbildung 12: Energiedichte bei $\mu = 0$

6.5 Phasendiagramm

Bei Erhöhung der Temperatur oder des chemischen Potentials ist zu beobachten, dass der Wert σ_0 monoton abnimmt. Die im Vakuum zu findende spontane Symmetriebrechung (sowie die explizite durch den Parameter c) wird also zumindest teilweise aufgehoben. Die Wiederherstellung der chiralen Symmetrie kann als Phasenübergang von der hadronischen Phase ins Quark-Gluon-Plasma betrachtet werden: Für kleine σ_0 findet praktisch keine Beeinflussung von Ω durch das mesonische Potential mehr statt, die entscheidenden Freiheitsgrade des

Systems sind nun die Quarks. Damit hat σ_0 die Funktion eines Ordnungsparameters.
Für niedrige Temperaturen ist bei konstant gehaltenem μ ein kontinuierlicher Übergang zu beobachten, der bei Erhöhung des chemischen Potentials zunehmend schärfer wird (vgl. Abb.13). Die Temperatur $T_{cr}(\mu)$, an der der Crossover stattfindet, wird hier durch die Bedingung

$$\frac{\partial \sigma_0}{\partial_T}|_{T=T_{cr}} \stackrel{!}{=} \min \tag{56}$$

festgelegt. Andere Betrachtungsweisen, wie z.B. die Festlegung der Übergangstemperatur durch die Bedingung $\frac{\sigma_0(T_{cr})}{\sigma_0(T=0)}$ können zu leicht unterschiedlichen Ergebnissen führen.
Für $\mu = 0$ ergibt sich als kritische Temperatur T_c des Phasenübergangs der Wert

$$T_c = 168,4\,\text{MeV}$$

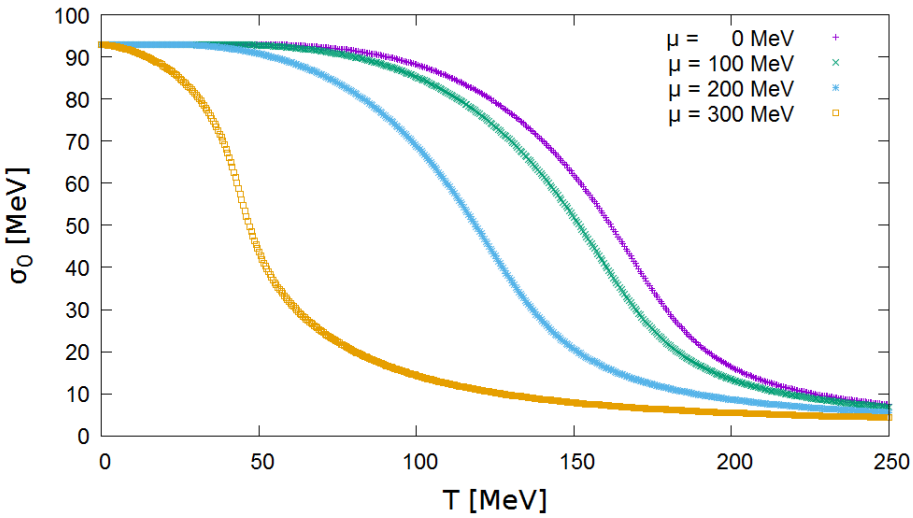


Abbildung 13: kontinuierliche Phasenübergänge

Schließlich ergibt sich am kritischen Endpunkt (CEP) ein Phasenübergang zweiter Ordnung, bei weiterer Erhöhung des chemischen Potentials geht dieser in einen Übergang erster Ordnung über (Abb. 14). Der CEP liegt in diesem Modell bei

$$T_{CEP} \approx 20,3\,\text{MeV}; \quad \mu_{CEP} \approx 313,6\,\text{MeV}$$

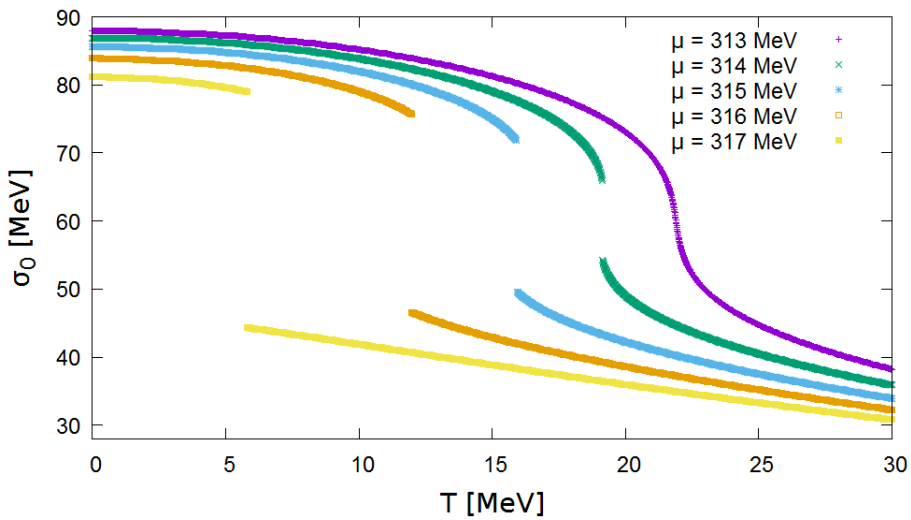


Abbildung 14: Phasenübergänge erster Ordnung und Übergang hin zu kontinuierlichen Phasenübergängen

Für die Phasenübergänge erster Ordnung wird T_{cr} als Funktion von μsehr steil und divergiert für $\mu \to \mu_{cr}(T=0)$. Um hier über (56) einen genauen Verlauf zu ermitteln müsste daher eine sehr kleine Schrittweite für μ gewählt werden. Um genauere Ergebnisse ohne längere Rechenzeiten zu erhalten wurde der Übergang erster Ordnung zusätzlich durch

$$\frac{\partial \sigma_0}{\partial_\mu}|_{\mu=\mu_{cr}} \overset{!}{=} \min \tag{57}$$

bestimmt. Anders als zuvor entspricht dies einer Betrachtung, bei der bei festem T der Phasenübergang durch Variation des chemischen Potentials erreicht wird. Bei kontinuierlichen Phasenübergängen kann dies zu einem etwas anderen Ergebnis führen, bei einem Übergang erster Ordnung erhält man bei beiden Betrachtungsweisen das selbe Ergebnis.

Das resultierende Phasendiagramm ist in Abb.15 zu sehen. Analoge Rechnungen wurden im chiralen Limes $c=0$ durchgeführt und sind ebenfalls in der Grafik abgebildet. Wie man sieht findet ohne explizite Symmetriebrechung der Phasenübergang im Allgemeinen etwas früher statt. Zur Wiederherstellung der Symmetrie werden also höhere Temperaturen benötigt, analoges gilt bzgl. der Erhöhung des chemischen Potentials. In chiralen Grenzfall ergeben sich die Werte $T_c^{c=0} \approx 163\,\text{MeV}$ und $\mu_c^{c=0} \approx 294,6\,\text{MeV}$. Der kritische Punkt liegt hier mit $T_{CEP}^{c=0} \approx 62\,\text{MeV}$ bei einer deutlich höheren Temperatur.

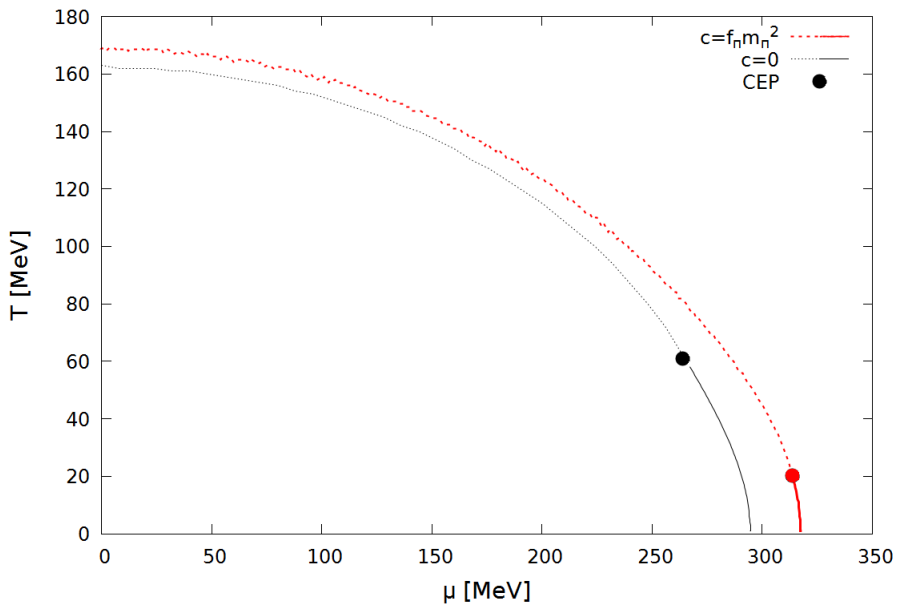


Abbildung 15: Phasendiagramm

Interessant ist für $c = 0$ noch, dass die chirale Symmetrie bei hohen Temperaturen vollständig wieder hergestellt wird: Der Ordnungsparameter σ_0 fällt hier anders als bei expliziter Symmetriebrechung am Phasenübergang ganz bis auf null ab (vgl. Abb.16). Dies gilt unabhängig von der Ordnung des Übergangs. Die geringe, im Fall $c \neq 0$ auch bei hohen Temperaturen verbleibende, Symmetriebrechung ist also auf die positive Masse der Pionen zurück zu führen.

Wie man an Abbildung16 zudem sehen kann sind die für $c = 0$ auftretenden Übergänge von zweiter Ordnung, da $\frac{\partial}{\partial T}\sigma_0$ singulär wird für $T \to T_{cr}$.

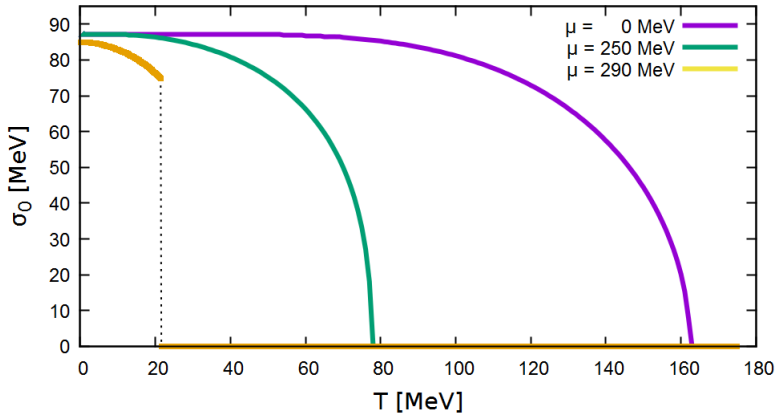


Abbildung 16: Phasenübergänge für $c = 0$

6.6 Vergleich mit der sMFA

Zum Abschluss dieses Abschnitts wird noch kurz der Einfluss des Vakuumterms U_{vac} auf die Thermodynamik betrachtet. Dazu werden die bisherigen Ergebnisse aus 6.1-55 verglichen mit Berechnungen, in denen der Vakuumterm ignoriert wird. Die zugehörige Flussgleichung lautet dann

$$\partial_k U_k^{sMFA}(T,\mu) = \frac{k^4}{\pi^2 E_q} \cdot \left[n_q + n_{\overline{q}}\right] \tag{58}$$

Als UV-Cutoff dient hier $\Lambda = 5\,GeV$. Durch den großen Cutoff wird verhindert, dass die beobachteten Unterschiede auf Cutoff-Effekte, wie sie in den vorherigen Kapiteln auftraten, hervorgerufen sind.
Wie in den Abbildungen 17 und 18 zu sehen ist, beeinflusst der Vakuumterm die thermodynamischen Größen nur in der Nähe des Phasenübergangs wesentlich. Für deutlich niedrigere oder höhere Temperaturen als T_C sind die Ergebnisse von eMFA und sMFA praktisch identisch.
Die Abweichung der sMFA gegenüber der eMFA erfolgt jeweils in Richtung höherer Werte. Insgesamt wirkt der Verlauf nach Hinzunahme des Vakuumterms deutlich abgerundeter, am stärksten fällt dies bei n_q ins Gewicht.

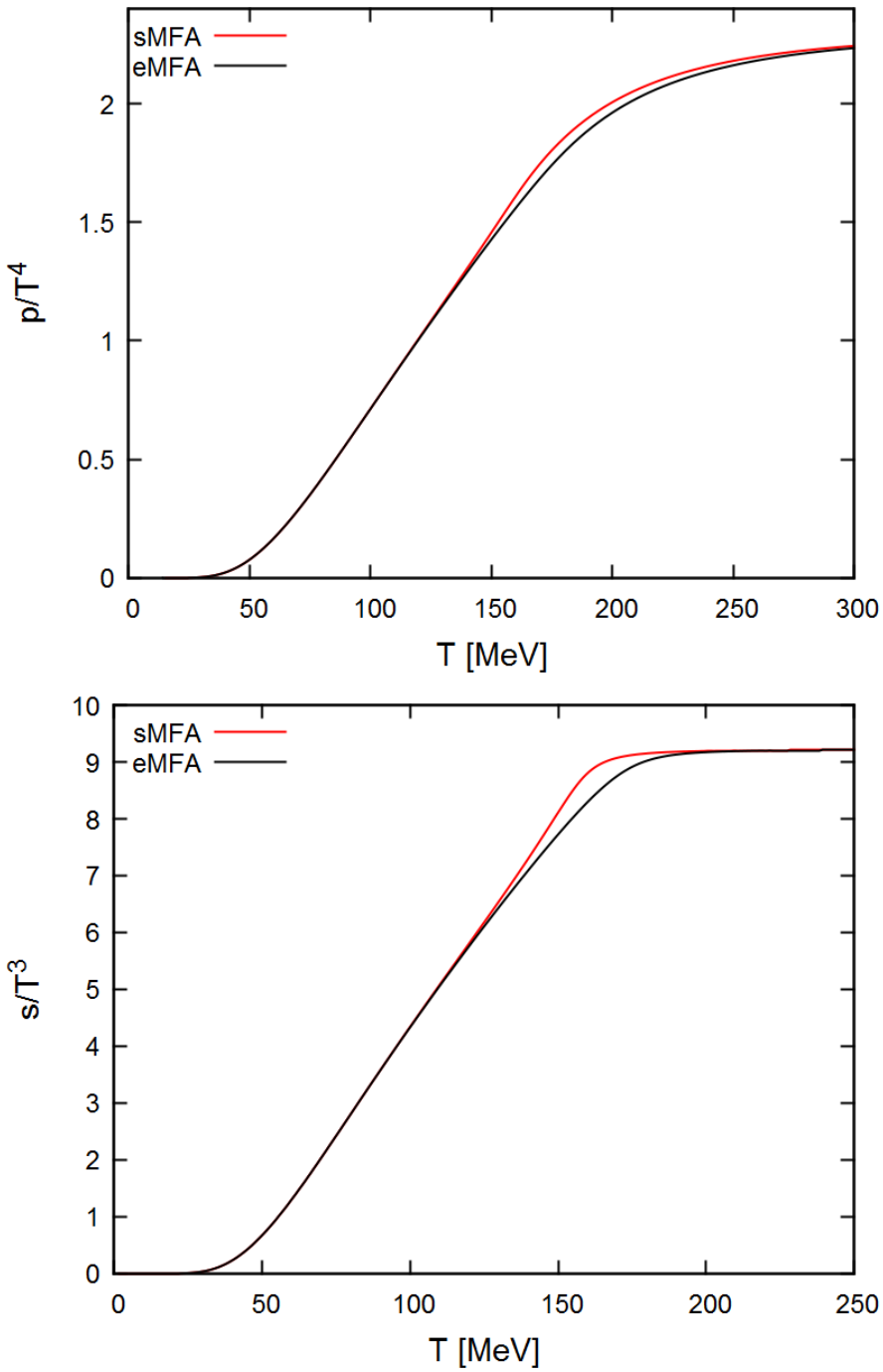


Abbildung 17: Vergleich eMFA und sMFA (1)

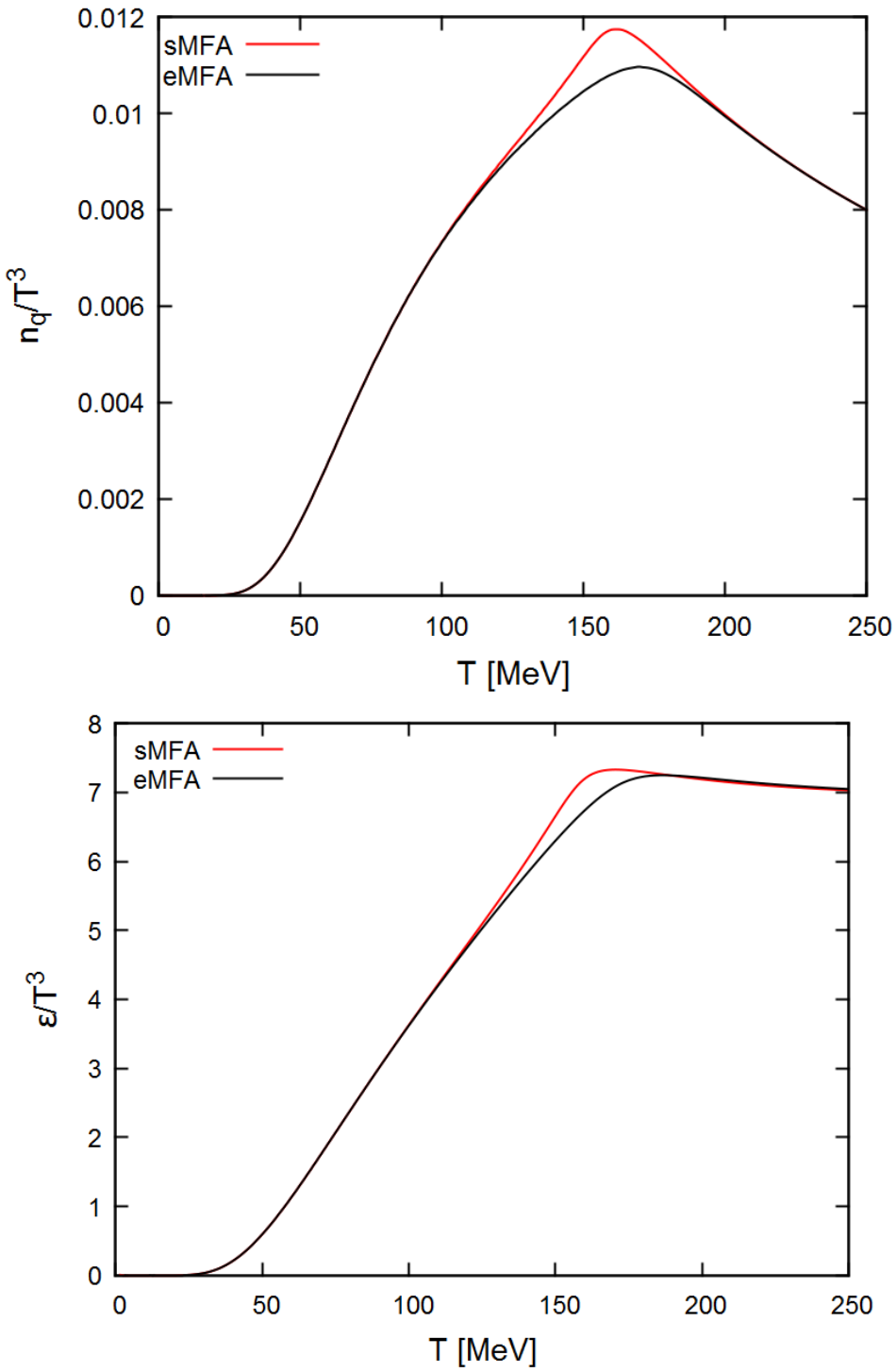


Abbildung 18: Vergleich eMFA und sMFA (2)

7 Fazit

In dieser Arbeit wurde ein Quark-Meson-Modell vorgestellt und das Konzept der funktionalen Renormierungsgruppen anhand einer PTRG-Flussgleichung verdeutlicht. Dabei lag das Hauptaugenmerk auf der erweiterten Mean-Field-Näherung (eMFA), in der die Flussgleichung durch das Weglassen bosonischer Terme vereinfacht wird.

Für die eMFA wurde das Verhalten der Parameter des mesonischen Potentials in Abhängigkeit des UV-Cutoffs Λ berechnet und dabei eine Singularität im Verlauf von v^2 entdeckt. Zudem wurde der Einfluss des Cutoffs auf die physikalischen Größen Druck, Entropiedichte, Quarkdichte und Energiedichte betrachtet. Dabei kam heraus, dass ab einem Cutoff von etwa 5 GeV kein Cutoff-Effekt mehr im betrachteten Temperaturbereich auftritt und sich Druck und Entropiedichte bei hohen Temperaturen an die nach Stefan-Boltzmann zu erwartenden Werte annähern.

Sowohl bei expliziter Symmetriebrechung als auch für masselose Pionen wurde anhand des Modells ein Phasendiagramm erstellt. Dabei wurden im ersten Fall bei niedrigen chemischen Potentialen kontinuierliche Phasenübergänge beobachtet, während im chiralen Limes hier ein Übergang zweiter Ordnung stattfand. Für große chemische Potentiale war jeweils ein Phasenübergang erster Ordnung zu erkennen.

Zuletzt wurden die Ergebnisse der eMFA mit denen der sMFA verglichen, in der der divergente Vakuumterm keine Beachtung findet. Dabei kam heraus, dass gerade in der Nähe des Phasenübergangs Unterschiede zu erkennen sind, während beide Näherungen ansonsten fast gleiche Ergebnisse liefern.

Literatur

[BD] BUHMANN, Martin ; DAVYDOV, Oleg: *Numerische Mathematik II*. – Skript Stand Juli 2015

[BSP] BRAUN, Jens ; SCHWENZER, Kai ; PIRNER, Hans-JÃŒrgen: Linking the Quark Meson Model with QCD at High Temperature. `http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.70.085016`. – DOI 10.1103/PhysRevD.70.085016

[Bur12] BURGER, Florian: *The Finite Temperature QCD Phase Transition and the Thermodynamic Equation of State*, Humboldt-UniversitÃ€t zu Berlin, Diss., 2012

[KG06] KAPUSTA, Joseph I. ; GALE, Charles: *Finite-Temperature Field Theory Principles and Applications*. Second. Cambridge University Press, 2006. – ISBN 9780521173223

[Lia] LIAO, Sen-Ben: On the Connection Between Momentum Cutoff and Operator Cutoff Regularizations. `http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevD.53.2020`. – DOI 10.1103/PhysRevD.53.2020

[PDG] `http://pdg.lbl.gov/2017/tables/rpp2017-sum-quarks.pdf`,06.09.2017

[PS95] PESKIN, Michael E. ; SCHROEDER, Daniel V.: *An Introduction To Quantum Field Theory*. Westview Press, 1995. – ISBN 9780201503975

[Sch06] SCHWABL, Franz: *Statistische Mechanik*. Springer-Verlag GmbH, 2006. – ISBN 3540310959

[SP] SCHAEFER, B. J. ; PIRNER, H. J.: Renormalization Group Flow and Equation of State of Quarks and Mesons. `http://dx.doi.org/10.1016/S0375-9474(99)00409-1`. – DOI 10.1016/S0375–9474(99)00409–1

[SP97] STORN, Rainer ; PRINCE, Kenneth: Differential Evolution - A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces. In: *Journal of Global Optimization 11* (1997)

[SW] SCHAEFER, Bernd-Jochen ; WAMBACH, Jochen: Renormalization Group Approach towards the QCD Phase Diagram. `http://dx.doi.org/10.1134/S1063779608070083`. – DOI 10.1134/S1063779608070083

Zur Erstellung der Programme in C++ wurden die Entwicklungsumgebung Code::Blocks und die Library Boost verwendet. Die Grafiken wurden mit Hilfe von Gnuplot erzeugt.

A Differential Evolution

Extremwertprobleme treten in der Physik in vielen Bereichen auf, beispielsweise bei der Suche nach Minima von Potentialen. Häufig sind diese Probleme nicht oder nur mit großem Aufwand analytisch lösbar, sodass numerische Methoden benötigt werden. Diese Verfahren sind in der Regel iterativ. Da die Anzahl der Parameter (Dimension) sehr groß werden kann, was den Rechenaufwand erheblich erhöht, ist die Konvergenzgeschwindigkeit von großer Bedeutung. Auf der Suche nach dem schnellsten Verfahren wurde eine Vielzahl von Methoden entwickelt, sowohl zur Suche von lokalen, als auch zur Suche von globalen Extrema.

Zur Ermittlung der Parameter des mesonischen Potentials im UV-Bereich wurde das Minimierungsverfahren "Differential Evolution" (DE) verwendet. Hierbei wird das globale Minimum einer sogenannten Kostenfunktion iterativ auf die im nachfolgenden Abschnitt beschriebene Weise ermittelt. DE ist ein Verfahren, welches nur auf den Funktionswerten selbst arbeitet ("direct search"), es ist insbesondere keine Differenzierbarkeit, die bei vielen anderen Verfahren (z.B. den Quasi-Newton-Verfahren) Voraussetzung ist, nötig. Obwohl das Verfahren vergleichsweise einfach ist zeigt es ein gutes Konvergenzverhalten.

Hat die Kostenfunktion $C(.)$ insgesamt D Parameter, die angepasst werden sollen, so werden diese in einem D-dimensionalen Vektor dargestellt. Bei paralleler Suche werden nun in jeder Generation (daher jedem Iterationsschritt) NP dieser Vektoren verwendet. Die parallele Suche macht es unwahrscheinlich, dass der Algorithmus in einem lokalen Minimum stecken bleibt.
Zu Beginn müssen NP (verschiedene) Startvektoren $x_{i,1}$ $(i = 1,...,NP)$ gewählt werden. Diese können zufällig gewählt werden, sollten aber über den ganzen zulässigen Parameterbereich verteilt sein.
Die Vektoren $x_{i,G}$ werden "target-Vektoren" genannt . Der Index G bezeichne dabei die Generation des Vektors.

Die Vektoren werden nun "mutiert" und zwar nach der Formel

$$m_{i,G+1} = x_{j,G} + F \cdot \left(x_{k,G} - x_{l,G}\right) \ \ (i = 1,...,NP) \tag{59}$$

Die Indizes j,k,l sind dabei zufällig gewählt. Für den Parameter F ("differential weight") ist in den meisten Fällen die Wahl $F = 0.5$ empfehlenswert.
Um eine größere Vielfalt an Vektoren zu erhalten wird noch ein sogenannter "crossover" durchgeführt. Für jedes i wird der "trial-Vektor" $\left(t_{ji}\right)_{j=1,...,D}$ dabei wie folgt gebildet:

$$t_{ji,G+1} = \begin{cases} m_{ji,G+1} & \text{falls } z_j \leq CR \wedge j \neq k \\ x_{ji,G} & \text{sonst} \end{cases} \tag{60}$$

$z_j \in [0,1]$ sind dabei per Zufallsgenerator gebildete Zahlen, k ein zufälliger Index, der sicherstellt, dass zumindest eine Komponente des Vektors $x_{ji,G}$ abgeändert wird. $CR \in [0,1]$ ist die "crossover-Wahrscheinlichkeit" die vom Nutzer gewählt wird, in der Regel ist $CR = 0,1$ eine gute Wahl.

Die Entscheidung ob $t_{i,G+1}$ target-Vektor wird wird nun per Greedy-Kriterium getroffen:

$$x_{i,G+1} = \begin{cases} t_{i,G+1} & \text{falls } C(t_{i,G+1}) < C\left(x_{i,G}\right) \\ x_{i,G} & \text{sonst} \end{cases} \tag{61}$$

In jedem Iterationsschritt wird somit die Kostenfunktion verringert oder bleibt im schlimmsten Fall gleich. Bei einer ausreichenden Anzahl von Schritten führt dies zu einer Minimierung der Kostenfunktion.
Der Abbruch kann z.B. durch Wahl einer Generation G_{max} erfolgen. Ist das Ergebnis unzureichend muss G_{max} vergrößert und ggf. die Parameter NP, F und CR verändert werden um eine bessere Näherung an das Minimum zu erhalten.
Ist der Funktionswert am Minimum bekannt kann der Abbruch auch anhand einer Fehlerschranke erfolgen, z.B. wenn die Abweichung von diesem Wert in der Nähe der Rechengenauigkeit liegt.

B Runge-Kutta-Verfahren

B.1 Numerisches Lösen von Differentialgleichungen

Differentialgleichungen, wie sie in verschiedensten physikalischen Bereichen auftreten, sind oft nur in einfachen Beispielen direkt lösbar. Werden die Zusammenhänge komplizierter müssen entweder Näherungen gemacht werden, oder man greift zu numerischen Methoden.
Das wohl einfachste Beispiel für ein solches Verfahren ist die Eulersche Methode: Gegeben ein Anfangswertproblem der Form $y' = f(t,x),\ y(t_0 = 0) = y_0$ wird die Näherung

$$y(t) = y(0) + \int_0^t d\tau\, f(\tau, y(\tau)) \approx y_0 + t \cdot f(t, y(t)) \tag{62}$$

gemacht. Damit erhält man bei Schrittweite h die folgende Iterationsvorschrift:

$$y(0) = y_0;\ y((k+1)\cdot h) \approx y_{k+1} = y_k + h \cdot f(k \cdot h, y_k) \tag{63}$$

Anhand ihrer Genauigkeit werden die verschiedenen Verfahren in Ordnungen eingeteilt. Ein Verfahren hat Ordnung p, wenn der Fehler, der in einem Schritt der Schrittweite h durch Einsetzen des genäherten Wertes in die Iteration gemacht wird (lokaler Diskretisierungsfehler, LDF), von Größenordnung $\mathscr{O}\left(h^{p+1}\right)$ ist. Da nur der Fehler in diesem Schritt gemacht betrachtet wird, wird vor diesem Gleichheit angenommen: $y(t_k) = y_k$. Ziel ist eine möglichst hohe Ordnung, ohne dass sich der Rechenaufwand in jedem Schritt extrem vergrößert. Für das Eulerverfahren erhält man mit $t_k := k \cdot h$ als Fehler

$$y(t_{k+1}) - y_{k+1} \overset{Taylor}{=} \underbrace{y(t_k) - h \cdot y'(t_k) + \mathscr{O}\left(h^2\right)}_{y(t_{k+1})} - \underbrace{y(t_k) - h \cdot y'(t_k)}_{y_{k+1}} = \mathscr{O}\left(h^2\right)$$

Somit ist die Eulersche Methode von Ordnung $p = 1$.
Zusätzlich zur Ordnung können die numerischen Verfahren wie folgt weiter unterteilt werden:

- nach Anzahl der Schritte: Das Eulerverfahren ist ein sogenanntes Einschrittverfahren. Allgemeine Mehrschrittverfahren sind definiert durch

  $$\sum_{m=0}^{s} \alpha_m y_{k+m} = h \cdot \sum_{m=0}^{s} \beta_m f(t_{k+m}, y_{k+m}) \tag{64}$$

  mit $\alpha_m = 1$.

- explizite und implizite Verfahren: Ist in (64) $\beta_s \neq 0$, so spricht man von einem impliziten Verfahren.

B.2 Runge-Kutta

Bei den Runge-Kutta-Verfahren wird das Integral in $y(t) = y(0) + \int_0^t d\tau\, f(\tau, y(\tau))$ durch eine Quadraturformel, z.B. Gaußquadratur, angenähert. Der Iterationsschritt erhält damit die Form

$$y(t_{k+1}) \approx y_{k+1} := y_k + h \cdot \sum_{j=1}^{n} \beta_j \cdot f\left(\tau_{k,j}, y\left(\tau_{k,j}\right)\right) \tag{65}$$

Die β_j sind die Gewichte aus der jeweiligen Quadraturformel, sie müssen der Bedingung $\sum_j \beta_j = 1$ genügen. Die Stützstellen im k-ten Schritt sind $\tau_{k,j} := t_k + \gamma_j h$, wobei die „Knoten" $\gamma_j \in [0,1]$ paarweise verschieden sind.
Die Werte $y\left(\tau_{k,j}\right)$ müssen wiederum approximiert werden. Dies geschieht durch

$$y\left(\tau_{k,j}\right) \approx \kappa_{k,j} := y_n + h \cdot \sum_{i=1}^{n} a_{ji} f\left(\tau_{k,i}, \kappa_i\right) \tag{66}$$

Die a_{ji} sind die Einträge der sogenannten Runge-Kutta-Matrix A. Wie an (66) zu sehen ist können Runge-Kutta-Verfahren sowohl explizit als auch implizit sein. Bei expliziten Verfahren ist $a_{i,j} = 0 \forall i \geq j$ (A strikte linke untere Dreiecksmatrix).
Zusätzlich zur Runge-Kutta-Matrix A definiert man die Vektoren $\beta = \left(\beta_j\right)_{j=1}^{n}$ und $\gamma = \left(\gamma_j\right)_{j=1}^{n}$.
Ein Verfahren ist dann durch das Butcher-Tableau

$$\begin{array}{c|c} \gamma & A \\ \hline & \beta^T \end{array}$$

vollständig definiert. Dies ist eine einfache Methode, alle Koeffizienten in einer Übersicht darzustellen. Für beliebiges n in (65) lässt sich ein implizites Runge-Kutta-Verfahren der Ordnung $2n$ finden.

Das zur Lösung der Flussgleichung verwendete Runge-Kutta-Verfahren DOPRI5 (Methode nach Dormand/Prince) ist ein explizites Verfahren mit Schrittweitensteuerung. Dabei wird jeder Schritt mit einem Verfahren 4. und einem 5. Ordnung berechnet. Anhand der Differenz der beiden Ergebnisse wird der in diesem Schritt gemachte Fehler abgeschätzt. Je nach Größe des Fehlers und gewählten Fehlerschranke ε wird dann die Schrittweite h vergrößert oder verkleinert. So erhält man zum einen die gewünschte Genauigkeit, zum anderen wird Rechenzeit gespart, da zu kleine Schritte vermieden werden.
Es ist noch zu erwähnen, dass das Verfahren zwei gesonderte Fehlerschranken für absoluten und relativen Fehler verwendet. Beide wurden hier jeweils auf den gleichen Wert gesetzt.

Um das verwendete Verfahren vorzustellen und den Einfluss der Schrittweitensteuerung, sowie der Schrittweite an sich, zu verdeutlichen, sind im Folgenden 2 Beispiele aufgeführt.

B.2.1 Beispiel A

Zunächst einmal wird eine einfache DGL 1. Ordnung betrachtet:

$$y'(t) = 4t \cdot x$$

$$y(0) = 3$$

mit der analytischen Lösung $y(t) = 3 \cdot e^{2t^2}$. Für Startschrittweite $h_0 = 1$ und die Fehlerschranken $\varepsilon = 1$ bzw. $\varepsilon = 10^{-3}$ sind die Ergebnisse bis $t = 5$ in Abb.19 zu sehen. Man erkennt auch für die größere Fehlerschranke eine relativ kleine Abweichung der numerischen Lösung vom analytischen Ergebnis. Für $\varepsilon = 10^{-3}$ ist optisch kein Unterschied zwischen analytischer und numerischer Lösung auszumachen. Die Verringerung der Schrittweite ist hier in beiden Fällen deutlich zu sehen.

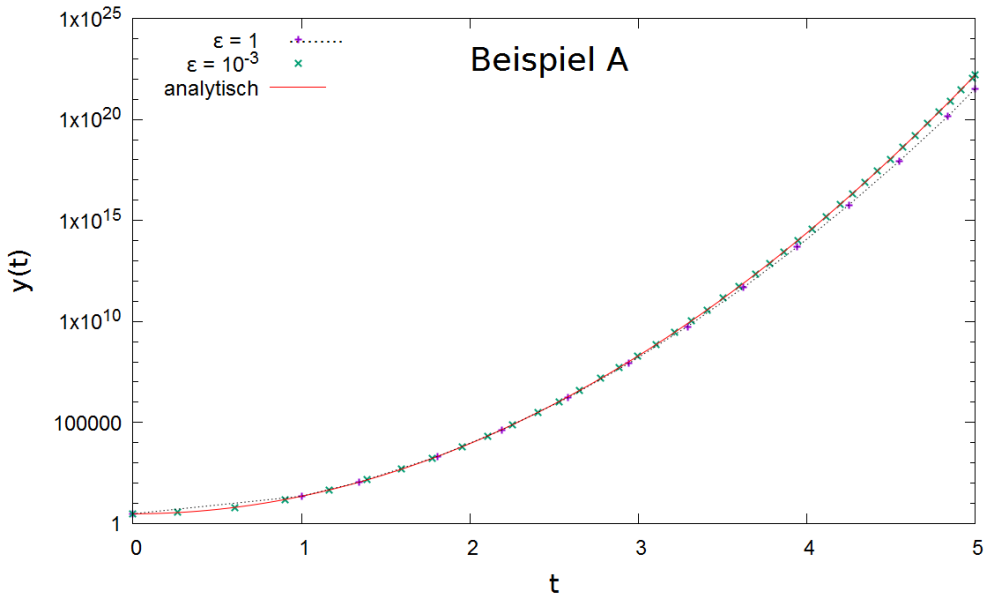


Abbildung 19: Ergebnisse zu Beispiel A

B.2.2 Beispiel B

Man betrachte das Beispiel eines gedämpften harmonischen Oszillators. Dieses wurde nun ohne Schrittweitensteuerung numerisch gelöst, sodass der Einfluss der Schrittweite auf den gemachten Fehler sichtbar wird. Die zugehörige DGL

$$y'' + 0,4y' + 25y = 0$$

$$y(0) = 0;\ y'(0) = 1$$

schreibt man dazu um in das System

$$y_1' = y_2$$

$$y_2' = -0,4y_2 - 25y_1$$

gekoppelter DGL 1.Ordnung mit Anfangswerten $y_1(0) = 0$ und $y_2(0) = 1$. Implementiert wird dies nun in Form von Vektoren: $\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$.

Die numerischen Ergebnisse für drei verschiedene Schrittweiten sind im Vergleich mit der analytischen Lösung in Abb.20 zu sehen. Für $h = 0,1$ sind analytische und numerische Lösung fast identisch, tatsächlich ist die maximale Abweichung von Größenordnung 10^{-4}.

Schon für $h = 0,25$ sieht man deutliche Abweichungen der Datenpunkte von der analytischen Lösung und für $h = 0,4$ ist nur noch zu erahnen, dass es sich um eine gedämpfte Schwingung handelt.

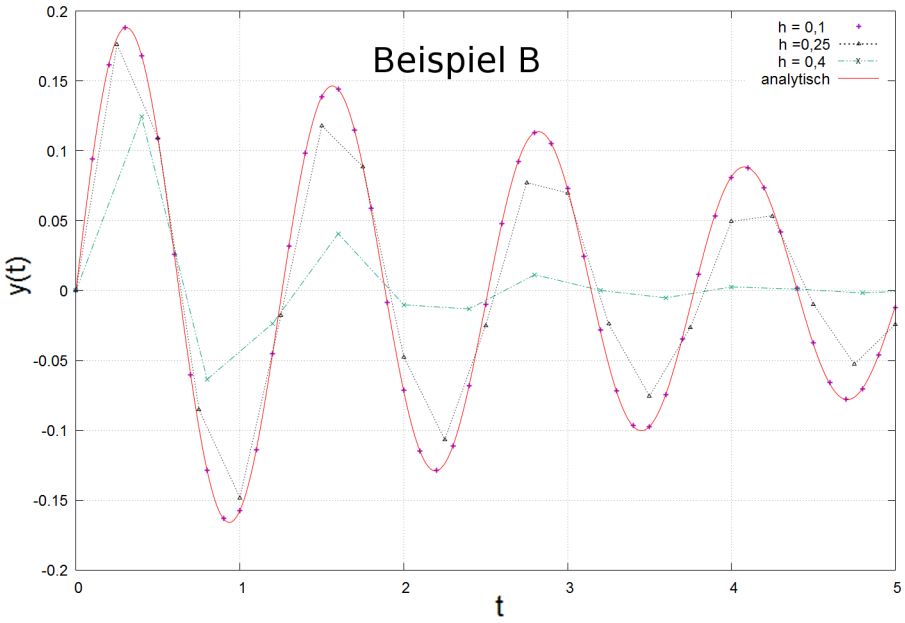


Abbildung 20: Ergebnisse zu Beispiel B

C Verwendete Genauigkeiten

Der verwendete Datentyp in den C++-Programmen ist double mit 15 Stellen Genauigkeit.

C.1 Runge-Kutta

Mit Ausnahme der in B beschriebenen Rechnungen wurde durchgehend die Startschrittweite $h_0 = 10^{-10}$ und für die Schrittweitensteuerung eine Fehlerschranke von $\varepsilon = 10^{12}$verwendet (sowohl für den absoluten, als auch für den relativen Fehler). Dies scheint zunächst einmal sehr genau, allerdings zeigten sich schon ab Fehlerschranken von etwa 10^{-8} Abweichungen in den berechneten Ergebnissen, was vermutlich mit der großen Entfernung zwischen Start- und Endpunkt der Iteration (Abstände im GeV-Bereich) zu erklären ist.

C.2 Schrittweiten bei Variation der Parameter

Zur Erstellung der Daten wurde der dort betrachtete Bereich des Parameters x (z.B. $0 - 120\,MeV$ für σ) jeweils mit einer gewissen Schrittweite Δx durchlaufen. Diese Schrittweiten sind in der nachfolgenden Tabelle aufgeführt.

Abbildung (Kurve)	Schrittweiten
4	$\Delta\sigma = 1\,MeV$
5	$\Delta\Lambda = 50\,MeV$
6 (σ_0)	$\Delta\sigma = 10\,keV$, $\Delta T/\Delta\mu = 0,5\,MeV$
6 (sonstige)	$\Delta\sigma = 10\,keV$
7,8,9	$\Delta\sigma = 0,1\,MeV$, $\Delta T = 1\,MeV$
11 ($T = 10\,MeV$, $T = 1\,MeV$)	$\Delta\sigma = 0,1\,MeV$, $\Delta\mu = 0,2\,MeV$
11 ($T = 10^{-5}\,MeV$)	$\Delta\sigma = 0,1\,MeV$, $\Delta\mu = 50\,keV$
12	$\Delta\sigma = 0,1\,MeV$, $\Delta T = 0,5\,MeV$
13	$\Delta T = 0,5\,MeV$, $\Delta\sigma = 0,1\,MeV$
14	$\Delta T = 10\,keV$, $\Delta\sigma = 0,1\,MeV$
15(Überg.1.Ordnung)	$\Delta\sigma = 0,1\,MeV$, $\Delta T = 1\,MeV$, $\Delta\mu = 0,2\,MeV$
15(kont.Überg., $c \neq 0$)	$\Delta\sigma = 10\,keV$, $\Delta T = \Delta\mu = 1\,MeV$
15(kont.Überg.,$c = 0$)	$\Delta\sigma = 10\,keV$, $\Delta T = 1\,MeV$, $\Delta\mu = 8\,MeV$
16	$\Delta T = 1\,MeV$, $\Delta\sigma = 0,1\,MeV$
16 ($\mu = 290\,MeV$)	$\Delta T = 0,2\,MeV$, $\Delta\sigma = 0,1\,MeV$

Tabelle 2: Schrittweiten der Parameter

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, die vorgelegte Thesis selbstständig und ohne unerlaubte fremde Hilfe und nur mit den Hilfen angefertigt zu haben, die ich in der Thesis angegeben habe. Alle Textstellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten Schriften entnommen sind, und alle Angaben die auf mündlichen Auskünften beruhen, sind als solche kenntlich gemacht. Bei den von mir durchgeführten und in der Thesis erwähnten Untersuchungen habe ich die Grundsätze gute wissenschaftlicher Praxis, wie sie in der ‚Satzung der Justus-Liebig-Universität zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis' niedergelegt sind, eingehalten. Gemäß § 25 Abs. 6 der Allgemeinen Bestimmungen für modularisierte Studiengänge dulde ich eine Überprüfung der Thesis mittels Anti-Plagiatssoftware.

Datum	Unterschrift