JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN

Anwendung von pseudospektralen Methoden in der QCD

Application of pseudo-spectral methods in QCD

Bachelorthesis

zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science (B.Sc.)

Eingereicht von

Julian Bernhardt

am 16. September 2016

Betreut von

PD Dr. Bernd-Jochen Schaefer

Institut für Theoretische Physik
Fachbereich 07:
Mathematik und Informatik, Physik, Geographie
Justus-Liebig-Universität Giessen

Gutachter

Erstgutachter:

PD Dr. Bernd-Jochen Schaefer
Institut für Theoretische Physik
Justus-Liebig-Universität Gießen

Zweitgutachter:

Dr. Gernot Eichmann
Institut für Theoretische Physik
Justus-Liebig-Universität Gießen

Zusammenfassung

In dieser Thesis werden wir eine pseudospektrale Methode benutzen, um die Flussgleichung des zwei Flavour Quark-Meson-Modells aus der Quantenchromodynamik (QCD) zu lösen. Die verwendete pseudospektrale Methode stellt dabei eine Kombination aus einer Kollokationsmethode und einem Runge-Kutta-Verfahren dar.

Zunächst leiten wir die Wetterich-Gleichung mithilfe der Theorie zu funktionalen Renormierungsgruppen her und erläutern dann kurz die dimensionbehaftete und die dimensionslose Flussgleichung. Danach besprechen wir die Grundlagen und Eigenschaften von auf Tschebyschow-Polynomen basierenden pseudospektralen Methoden und geben zwei Anwendungsbeispiele. Abschließend werden wir mithilfe der vorgestellten pseudospektralen Methode die dimensionsbehaftete Flussgleichung im Vakuum und bei endlichen Temperaturen lösen. Auf letzterer Lösung basierend werden wir noch einige Eigenschaften der Physik am kritischen Punkt erläutern.

Abstract

In this thesis, we will use a pseudo-spectral method to solve the flow equation of the two-flavour quark-meson model in quantum chromodynamics (QCD). The used pseudo-spectral method is a combination of a collocation method and a Runge-Kutta method.

At first, we deduce the Wetterich equation from the theory of functional renormalization groups, and then we will shortly elucidate both the dimensioned and the dimensionless flow equation. Thereafter, we will discuss the principles and properties of pseudo-spectral methods based on Chebyshev polynomials, and we will provide two application examples. Eventually, we will use the introduced pseudo-spectral method to solve the dimensioned flow equation in vacuum and at finite temperatures. Based on the latter, we will discuss some properties of physics at the critical temperature.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung **1**

2. Theoretische Grundlagen **2**
2.1. Herleitung der Wetterich-Gleichung 2
2.2. Dimensionsbehaftete Flussgleichung 6
2.3. Dimensionslose Flussgleichung 7

3. Pseudospektrale Methoden **9**
3.1. Allgemeine Vorgehensweise 9
3.2. Tschebyschow-Polynome als Basisfunktionen 11
3.2.1. Eigenschaften der Tschebyschow-Polynome erster Art 11
3.2.2. Entwicklung nach Tschebyschow-Polynomen 12
3.2.3. Fehlerbetrachtung 13
3.3. Tschebyschow-Differentiationsmatrix 14
3.4. Koordinatentransformation 15
3.5. Zeitunabhängiges Beispiel: Quantenmechanischer harmonischer Oszillator . . 17
3.6. Zeitabhängiges Beispiel: Wärmeleitungsgleichung 18

4. Lösung der Flussgleichung **20**
4.1. Dimensionsbehaftete Flussgleichung im Vakuum 20
4.1.1. Numerische Ergebnisse 21
4.2. Fluss bei endlichen Temperaturen 24
4.3. Ausblick: Kritischer Punkt 26
4.3.1. Dimensionale Reduktion 26
4.3.2. Skalierungslösung am kritischen Punkt 28

5. Fazit und Ausblick **29**

A. Weitere numerische Methoden **I**
A.1. Runge-Kutta-Verfahren I
A.1.1. Beispiel: Gedämpfter harmonischer Oszillator II
A.2. Finite-Differenzen-Methode II
A.2.1. Beispiel: Wärmeleitungsgleichung IV

B. Literatur **V**

1. Einleitung

Als theoretischer Physiker ist man stets bestrebt, die beobachteten Phänomene der Natur in ein möglichst einfaches mathematisches Modell zu fassen. In der Vergangenheit ist es häufig gelungen, vielfältige Erscheinungen durch vergleichsweise einfache Gleichungen auszudrücken. So lassen sich große Teile der klassischen Mechanik mithilfe der *Hamiltonschen Bewegungsgleichungen* beschreiben, die klassische Elektrodynamik und damit auch die Optik basieren auf den *Maxwell-Gleichungen* und die nichtrelativistische Quantenmechanik wird durch die *Schrödingergleichung* bestimmt.

Allen diesen mathematischen Modellen ist gemein, dass es sich um (Systeme von) Differentialgleichungen handelt, und alle lassen sich nur in den einfachsten Fällen analytisch lösen. Daher ist es zur tatsächlichen Beschreibung der Natur essentiell, die Theorien mithilfe von geeigneten Verfahren der numerischen Mathematik so zu nähern, dass die Lösungen einfach zu berechnen sind und gleichzeitig nicht zu stark von der eigentlichen Theorie und damit der physikalischen Realität abweichen.

In der Vergangenheit haben sich Methoden wie beispielsweise „finite Differenzen“ bewährt, die einen lokalen Approximationsansatz verfolgen und die auftretenden Ableitungen durch Diskretisierung zu lösen versuchen. Daneben gibt es auch Methoden, die die Annäherung einer Lösungsfunktion auf einem großen Intervall zum Ziel haben und somit einen globalen Lösungsansatz bieten. Eine Klasse solcher Methoden sind die *pseudospektralen Methoden* (PSM), welche in dieser Thesis vorgestellt werden sollen. Diese sind noch vergleichsweise neu und daher als Untersuchungsgegenstand besonders interessant.

Um die PSM zu testen, versuchen wir, die Flussgleichung eines zwei Flavour Quark-Meson-Modells zu lösen. Die Quantenchromodynamik (QCD), die dieser Gleichung zugrunde liegt, beschreibt die starke Wechselwirkung, also die Kraft, die die Quarks aneinander bindet und somit für die Bildung von Protonen und Neutronen, den Grundbausteinen der Atome, verantwortlich ist. Da die QCD den Austausch der Kraft durch das Gluon verwirklicht, das Feld also quantisiert ist, handelt es sich bei ihr um eine Quantenfeldtheorie.

Als solche profitiert sie vom Konzept der funktionalen Renormierungsgruppen (FRG), das es erlaubt, mithilfe einer Skala zwischen mikroskopischen Wechselwirkungen, wie den Kräften zwischen den Quarks, und makroskopischen Phänomenen, wie den thermodynamischen Eigenschaften eines Systems von vielen Quarks und Mesonen, zu variieren. Der Fluss, also die Entwicklung, von mikroskopischen zu makroskopischen Skalen wird dabei durch die Wetterich-Gleichung beschrieben, die auf ein System von Quarks und Mesonen angewendet die Flussgleichung ergibt.

Wir wollen daher in dieser Thesis zunächst die theoretischen Grundlagen der Flussgleichung klären, indem wir die Wetterich-Gleichung mithilfe der FRG herleiten und sowohl eine dimensionsbehaftete als auch eine dimensionslose Flussgleichung vorstellen. Im Anschluss besprechen wir Hintergründe und Einzelheiten der von uns verwendeten pseudospektralen Methode. Zuletzt wollen wir diese zur Lösung der dimensionsbehafteten Flussgleichung verwenden, um damit noch einen Ausblick auf die kritische Physik der QCD zu geben.

2. Theoretische Grundlagen

Zu Beginn wollen wir uns die Theorie, die der zu lösenden Flussgleichung zugrunde liegt, näher ansehen. Diese basiert auf der funktionalen Renormierungsgruppe (FRG), einem Konzept, welches die Renormierungsgruppenidee von *Kenneth Wilson* mit der Quantenfeldtheorie kombiniert.

Die FRG kann direkt für kontinuierliche Felder formuliert werden, ist a priori nicht-perturbativ und wurde bereits in vielen Bereichen der theoretischen Physik angewendet, beispielsweise zur Beschreibung von Supraleitung oder eben in der Quantenchromodynamik zur Beschreibung der starken Wechselwirkung.

Das Konzept beruht darauf, dass mithilfe der Skala k die skalenabhängige effektive Wirkung Γ_k zwischen der quantenfeldtheoretischen Wirkung bei $k = \Lambda$ und der makroskopischen bei $k = 0$ variiert wird. Ähnlich wie bei einem Mikroskop kann man mit k die „Vergrößerung“ der Theorie verändern, je nachdem welchen Bereich man untersuchen möchte. Dabei kann man sich k als Impulsgröße vorstellen und analog zum Photon bedeuten kleine k damit große Wellenlängen, also ein großer von der Theorie abgedeckter Bereich. Ebenso wie bei Photonen ergeben sich damit die Begriffe „Infrarot“ für kleine k und „Ultraviolett“ für große. Der Fluss der effektiven Wirkung wird dabei durch die *Wetterich-Gleichung* beschrieben, deren Herleitung basierend auf [1] im Folgenden kurz dargelegt werden soll.

2.1. Herleitung der Wetterich-Gleichung

Zunächst betrachten wir uns die euklidischen n-Punkt-Korrelationsfunktionen. Die Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion wird auch *Propagator* genannt und stellt vereinfacht gesagt die Wahrscheinlichkeit dar, ein Teilchen vom Ort x_1 zum Ort x_2 zu bewegen (vgl. [2]). Das erzeugende Funktional der n-Punkt-Korrelationsfunktionen lautet

$$Z[j] = \int \mathcal{D}\phi \; e^{-S[\phi]+\langle j,\phi\rangle} \; . \tag{2.1}$$

Dabei bezeichnet ϕ das Feld, j eine externe Quelle und $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das $\mathcal{L}^2$-Skalarprodukt zwischen zwei Funktionen

$$\langle j, \phi \rangle = \int \mathrm{d}^d x \; j(x)\phi(x) \; . \tag{2.2}$$

Das Schwinger-Funktional ist dann durch den Logarithmus von (2.1) gegeben

$$W[j] = \ln Z[j] \; . \tag{2.3}$$

Mit diesem Funktional ist es uns möglich, die effektive Wirkung des Systems zu bestimmen. Dazu müssen wir eine Legendre-Transformation des Schwinger-Funktionals durchführen:

$$\Gamma[\varphi] = \langle j, \varphi \rangle - W[j] \text{ mit } \varphi(x) = \frac{\delta W[j]}{\delta j(x)} \; . \tag{2.4}$$

Ähnlich wie beim Wirkungsprinzip aus der klassischen Mechanik, enthält die so erhaltene Wirkung Γ alle Eigenschaften der zugrundeliegenden Quantenfeldtheorie in einer sehr kompakten Schreibweise.

Da obige Gleichungen noch keine Skalenabhängigkeit besitzen, ergänzen wir in Gleichung (2.1) zur Wirkung S den Infrarot-Cutoff-Term ΔS_k, der dafür sorgt, dass die Wirkung für kleine k reguliert wird. Das daraus folgende skalenabhängige Funktional,

$$Z_k[j] = \int \mathcal{D}\phi \; e^{-S[\phi]+\langle j,\phi\rangle-\Delta S_k[\phi]} \; , \tag{2.5}$$

liefert uns darüber hinaus wieder das Schwinger-Funktional, welches diesmal auch skalenabhängig ist

$$W_k[j] = \ln Z_k[j] \; . \tag{2.6}$$

Die Abhängigkeit von der Skala k wird dabei durch den Index angezeigt. Als Regulator-Term wird ein Funktional verwendet, das quadratisch vom komplexen Skalarfeld ϕ abhängt und eine impulsabhängige Masse besitzt,

$$\Delta S_k[\phi] = \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d} \; \phi^*(p) R_k(p) \phi(p) \equiv \frac{1}{2}\int_p \phi^*(p) R_k \phi(p) \; . \tag{2.7}$$

An die Cutoff-Funktion $R_k(p)$ werden dabei durch die Physik folgende Ansprüche gestellt:

- Bei festgehaltenem Impuls p sollte sich für verschwindende Skalen die makroskopische Wirkung ergeben. Daher muss

$$\lim_{k\to 0} R_k(p) = 0 \quad \text{für } p = \text{const.} \tag{2.8}$$

  erfüllt sein.

- Analog müssen wir am Ultraviolett-Cutoff $k = \Lambda$ die quantenfeldtheoretische Wirkung erhalten. Mithilfe der Sattelpunktsnäherung kann man zeigen, dass die skalenabhängige effektive Wirkung $\Gamma_{k\to\Lambda}$ genau dann zur quantenfeldtheoretischen Wirkung strebt, wenn

$$\lim_{k\to\Lambda} R_k(p) \to \infty \; . \tag{2.9}$$

- Weiterhin muss die Cutoff-Funktion die Theorie im Infraroten regularisieren, was der Fall ist, wenn

$$\lim_{p\to 0} R_k(p) > 0 \; . \tag{2.10}$$

Meist wird dafür der Cutoff Λ ins Unendliche verschoben und gefordert, dass $R_k(p) \to k^2$ für kleine p. Ähnlich wie in (2.4) führen wir für die Legendre-Transformation ein durchschnittliches Feld φ ein, das von der externen Quelle j erzeugt wird,

$$\varphi(x) = \frac{\delta W_k[j]}{\delta j(x)} \; . \tag{2.11}$$

Hierbei sei angemerkt, dass für eine feste Quelle das durchschnittliche Feld von der Cutoff-Funktion abhängt und umgekehrt. Als Nächstes führen wir eine modifizierte Legendre-Transformation durch, um die *skalenabhängige effektive Wirkung* zu definieren:

$$\Gamma_k[\varphi] = \langle j, \varphi \rangle - W_k[j] - \Delta S_k[\varphi] \ . \tag{2.12}$$

Wegen des zusätzlichen Terms ΔS_k handelt es sich bei (2.12) nur um eine modifizierte Legendre-Transformation von $W_k[j]$, weswegen die Wirkung $\Gamma_k[\varphi]$ auch nicht notwendigerweise für alle Skalen konvex sein muss, was bei einer konventionellen Legendre-Transformation sonst gefordert wird. Allerdings verschwindet dieser Term für $k \to 0$ und so wird $\Gamma_{k\to 0}$ wieder konvex.

Um nun die Bewegungsgleichung der effektiven Wirkung für das durchschnittliche Feld zu erhalten, variieren wir Γ_k hinsichtlich φ:

$$\frac{\delta \Gamma_k}{\delta \varphi(x)} = \int \frac{\delta j(y)}{\delta \varphi(x)} \varphi(y) \, \mathrm{d}^d y + j(x) - \int \frac{\delta W_k[j]}{\delta j(y)} \frac{\delta j(y)}{\delta \varphi(x)} \, \mathrm{d}^d y - \frac{\delta \Delta S_k[\varphi]}{\delta \varphi(x)} \ . \tag{2.13}$$

Dabei entstehen die ersten beiden Terme durch Anwendung der Produktregel auf die Variation des Skalarproduktes und der dritte Term durch Anwendung der Kettenregel. Aus (2.11) ist ersichtlich, dass sich der erste und der dritte Term gegenseitig aufheben, womit folgt

$$\frac{\delta \Gamma_k}{\delta \varphi(x)} = j(x) - \frac{\delta}{\delta \varphi(x)} \Delta S_k[\varphi] = j(x) - \langle R_k(x,y), \varphi(y) \rangle \ . \tag{2.14}$$

Nun wollen wir die Flussgleichung für die skalenabhängige effektive Wirkung ableiten. Es handelt sich dabei um die Gleichung, die die Entwicklung, also den Fluss, der Wirkung nach der Skala beschreibt. Wir tun dies analog zu den Bewegungsgleichungen des Feldes, indem wir diesmal φ fixieren und (2.12) nach k differenzieren:

$$\partial_k \Gamma_k = \int \partial_k j(x) \varphi(x) \, \mathrm{d}^d x - \partial_k W_k[j] - \int \frac{\partial W_k[j]}{\partial j(x)} \partial_k j(x) \, \mathrm{d}^d x - \partial_k \Delta S_k[\varphi] \ . \tag{2.15}$$

Sowohl der zweite als auch der dritte Term bezeichnen Ableitungen von W_k nach k, jedoch wirkt die Ableitung im zweiten Term direkt auf die k-Abhängigkeit von W_k und im dritten Term auf die des Argumentes j. Wie in (2.14) heben sich auch hier wieder der erste und der dritte Term auf, sodass

$$\begin{aligned} \partial_k \Gamma_k &= -\partial_k W_k[j] - \partial_k \Delta S_k[\varphi] \\ &= -\partial_k W_k[j] - \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \ \varphi(x) \partial_k R_k(x,y) \varphi(y) \ . \end{aligned} \tag{2.16}$$

Hier wurde ΔS_k durch eine inverse Fourier-Transformation vom Impuls- in den Ortsraum transformiert. Des Weiteren ist $\partial_k W_k$ nach (2.5) bis (2.7) gegeben durch

$$\partial_k W_k[j] = -\frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \ \partial_k \int_p \phi^*(p) R_k \phi(p) =: -\frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \ \langle \phi(x) \partial_k R_k \phi(y) \rangle_k \ . \tag{2.17}$$

Mit der zusammenhängenden Zwei-Punkt-Funktion, die sich aus der zweiten Funktionalableitung des skalenabhängigen Schwingerfunktionals ergibt,

$$G_k^{(2)}(x,y) \equiv \frac{\delta^2 W_k[j]}{\delta j(x)\,\delta j(y)} = \langle \phi(x)\phi(y)\rangle_k - \varphi(x)\varphi(y) \ , \tag{2.18}$$

folgt

$$\begin{aligned} \partial_k W_k[j] &= -\frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d x\ \mathrm{d}^d y\ \partial_k R_k(x,y) G_k^{(2)}(y,x) - \partial_k \Delta S_k[\varphi] \\ &= -\frac{1}{2}\ \mathrm{Tr}\left(\partial_k R_k G_k^{(2)}\right) - \partial_k \Delta S_k[\varphi] \ . \end{aligned} \tag{2.19}$$

Wir setzen dieses Resultat nun in die Flussgleichung (2.16) ein und erhalten

$$\partial_k \Gamma_k = \frac{1}{2}\int \mathrm{d}^d x\ \mathrm{d}^d y\ \partial_k R_k(x,y) G^{(2)}(y,x) \ . \tag{2.20}$$

Es ist bekannt, dass die zweiten Funktionalableitungen eines konvexen Funktionals und seiner Legendre-Transformierten zwei Operatoren definieren, die ihre gegenseitigen Inversen darstellen (vgl. [1]). Da aber wie bereits erläutert Γ_k nur eine modifizierte Legendre-Transformierte von W_k ist, müssen zunächst die Korrekturen zur konventionellen Legendre-Transformation angegeben werden. Mit

$$\varphi(x) = \frac{\delta W_k[j]}{\delta j(x)} \quad \text{und} \quad j(x) = \frac{\delta \Gamma_k}{\delta \varphi(x)} + \int \mathrm{d}^d y\ R_k(x,y)\varphi(y) \text{ aus (2.14)} \tag{2.21}$$

finden wir die folgende Relation zwischen den zweiten Ableitungen:

$$\int \mathrm{d}^d z\ \frac{\delta\varphi(x)}{\delta\varphi(y)} = \int \mathrm{d}^d z\ \frac{\delta\varphi(x)}{\delta j(z)}\frac{\delta j(z)}{\delta\varphi(y)} = \int \mathrm{d}^d z\ G_k^{(2)}(x,z)\left\{\Gamma_k^{(2)} + R_k\right\}(z,y) = \delta(x-y) \ . \tag{2.22}$$

In der geschweiften Klammer taucht die zweite Funktionalableitung von Γ_k auf,

$$\Gamma_k^{(2)}(x,y) = \frac{\delta^2 \Gamma_k}{\delta\varphi(x)\,\delta\varphi(y)} \ , \tag{2.23}$$

wodurch wir mithilfe von Gleichung (2.22) direkt schließen können, dass für $G_k^{(2)}$ gelten muss

$$G_k^{(2)} = \frac{1}{\Gamma_k^{(2)} + R_k} \ . \tag{2.24}$$

Wenn wir schließlich diesen Zusammenhang in (2.20) einsetzen, erhalten wir die Flussgleichung für die skalenabhängige effektive Wirkung, die *Wetterich-Gleichung*,

$$\partial_k \Gamma_k[\varphi] = \frac{1}{2}\ \mathrm{Tr}\left(\frac{\partial_k R_k}{\Gamma_k^{(2)}[\varphi] + R_k}\right) \ . \tag{2.25}$$

2.2. Dimensionsbehaftete Flussgleichung

Wie in der Herleitung bereits zu erkennen ist, erhält man die Spur Tr in (2.25) durch Integration über kontinuierliche Größen. Unter Berücksichtigung etwaiger diskreter Größen und auftretender Vorzeichen (durch Fermionen) können wir die Spur zur Superspur STr erweitern. Ersetzt man darüber hinaus noch die Skala k durch die dimensionslose Größe

$$t = \ln\left(\frac{k}{\Lambda}\right) \ , \tag{2.26}$$

erhält man eine allgemeinere Wetterich-Gleichung (vgl. [3])

$$\partial_t \Gamma_k[\varphi] = \frac{1}{2}\,\mathrm{STr}\left(\frac{\partial_t R_k}{\Gamma_k^{(2)}[\varphi] + R_k}\right) \ . \tag{2.27}$$

Wendet man diese nun auf ein Quark-Meson-Modell an, erhält man die Gleichung, die den Fluss für das großkanonische Potential Ω eines Systems von Quarks und Mesonen beschreibt. Da sowohl Ω als auch die Größen, von denen es abhängt, mit Energiedimensionen behaftet sind, sprechen wir in diesem Unterabschnitt von der dimensionsbehafteten Flussgleichung. Eine Herleitung soll an dieser Stelle nicht stattfinden, jedoch ist eine solche in [4] zu finden. Die dimensionsbehaftete Flussgleichung ergibt sich damit zu

$$\begin{aligned}\partial_t \Omega_k(\sigma^2) = \frac{k^5}{12\pi^2}\Bigg[&\frac{3}{E_\pi(\sigma^2)}\coth\left(\frac{E_\pi(\sigma^2)}{2T}\right) + \frac{1}{E_\sigma(\sigma^2)}\coth\left(\frac{E_\sigma(\sigma^2)}{2T}\right)\\ &-\frac{2\nu_q}{E_q(\sigma^2)}\{1 - n_q(\sigma^2) - n_{\bar{q}}(\sigma^2)\}\Bigg] \ .\end{aligned} \tag{2.28}$$

Mit dieser Flussgleichung befinden wir uns im linearen σ-Modell. Dieses Modell der Niederenergie-QCD weist eine $O(4)$-Symmetrie auf, bei der das pseudoskalare Pion einen chiralen Partner, das σ-Meson, erhält. Wir betrachten somit eine vierdimensionale Theorie. Das in der Flussgleichung auftretende σ steht also für das Skalarfeld dieses Mesons (vgl. [5]).

In der Flussgleichung bezeichnet T die Temperatur des Systems und ν_q den Entartungsgrad der Quarks. Da wir ein System aus Teilchen mit zwei Flavours, drei Colours sowie deren Antiteilchen betrachten, ergibt sich $\nu_q = 12$. Die Spinentartung der Quarks wird durch den Faktor 2 vor ν_q berücksichtigt. n_q und $n_{\bar{q}}$ bezeichnen die fermionischen Besetzungszahlen für Quarks beziehungsweise Antiquarks. Wir finden für diese Besetzungszahlen die Relation

$$\frac{1}{2} - n_q = \frac{1}{2} - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_q - \mu_+}{T}\right) + 1} = \frac{1}{2}\tanh\left(\frac{E_q - \mu_+}{2T}\right) \ , \tag{2.29}$$

mit dem chemischen Potential μ_+ für Quarks. Für Antiteilchen ergibt sich die gleiche Relation nur mit dem chemischen Potential μ_-. Es sei hierzu angemerkt, dass die Summe der chemischen Potentiale von Quarks und Antiquarks verschwindet. Daher setzen wir

$$\mu := \mu_+ = -\mu_- \ . \tag{2.30}$$

Die Energien E_i der verschiedenen Teilchen erhalten wir aus der relativistischen Energie-Impuls-Relation $E_i = \sqrt{k^2 + m_i^2}$, wobei uns hier die Skala k als Impuls dient. Die Flussgleichung wird nun zur Differentialgleichung, indem die Teilchenmassen m_i wiederum von σ^2 und $\Omega_k(\sigma^2)$ abhängen. Es gilt für diese (vgl. [4])

$$m_\pi^2 = 2\Omega_k'(\sigma^2) \ ; \quad m_\sigma^2 = 2\Omega_k'(\sigma^2) + 4\sigma^2\Omega_k''(\sigma^2) \ ; \quad m_q^2 = g^2\sigma^2 \ . \tag{2.31}$$

g stellt dabei eine reelle Konstante und Ω_k' die Ableitung von Ω_k nach σ^2 dar. Somit erhalten wir aus der dimensionsbehafteten Flussgleichung die Differentialgleichung

$$\begin{aligned}\partial_t\Omega_k(\sigma^2) = \frac{k^5}{12\pi^2}\Bigg[&\frac{3}{\sqrt{k^2+2\Omega_k'(\sigma^2)}}\coth\left(\frac{\sqrt{k^2+2\Omega_k'(\sigma^2)}}{2T}\right)\\ &+\frac{1}{\sqrt{k^2+2\Omega_k'(\sigma^2)+4\sigma^2\Omega_k''(\sigma^2)}}\coth\left(\frac{\sqrt{k^2+2\Omega_k'(\sigma^2)+4\sigma^2\Omega_k''(\sigma^2)}}{2T}\right)\\ &-\frac{12}{\sqrt{k^2+g^2\sigma^2}}\left\{\tanh\left(\frac{\sqrt{k^2+g^2\sigma^2}-\mu}{2T}\right)+\tanh\left(\frac{\sqrt{k^2+g^2\sigma^2}+\mu}{2T}\right)\right\}\Bigg] \ .\end{aligned} \tag{2.32}$$

2.3. Dimensionslose Flussgleichung

Die dimensionsbehaftete Flussgleichung eignet sich aufgrund der mit Einheiten behafteten Größen gut dazu, mit konkreten Werten zu rechnen und so für ein bestimmtes System explizite Ergebnisse zu erhalten. Will man nun jedoch kritische Phänomene untersuchen, ist dies hinderlich, da man beispielsweise die genauen kritischen Parameter (Temperatur, Druck, etc.) kennen müsste und die Flussgleichung darüber hinaus noch von der RG-Skala k abhängt.

Damit die Skala k nicht mehr explizit in der Flusslgeichung auftaucht, bietet es sich an, zu dimensionslosen (reskalierten) Größen überzugehen. Besonders nützlich ist dabei die Eigenschaft, dass diese reskalierten Größen ein Skalenverhalten in der Nähe von Phasenübergängen zeigen, das nur von universellen Größen, den kritischen Exponenten, abhängt (vgl. [5]). Daher eignen sich gerade die dimensionslosen Flussgleichungen zur Beschreibung von kritischen Phänomenen.

Wir wollen die dimensionsbehaftete Flussgleichung also so umformen, dass sie nicht mehr von den mit Energiedimensionen behafteten Größen σ^2 und $\Omega_k(\sigma^2)$ abhängt, sondern stattdessen von den dimensionslosen Größen $\tilde{\sigma}^2$ und $u_k(\tilde{\sigma}^2)$. Zwischen diesen Größen gilt der Zusammenhang (vgl. [5])

$$\sigma^2 = k^{d-2}\tilde{\sigma}^2 \ ; \quad \Omega_k(\sigma^2) = k^d u_k(\tilde{\sigma}^2) \ . \tag{2.33}$$

Für k selbst kennen wir bereits die Relation (2.26). Daraus können wir $\partial_t = k\partial_k$ folgern und die linke Seite der dimensionsbehafteten Flussgleichung mithilfe der Produkt- und Kettenregel

umformen zu

$$\begin{aligned}\partial_t \Omega_k(\sigma^2) &= \partial_t \left[k^d u_k(\tilde{\sigma}^2)\right] = dk^d u_k(\tilde{\sigma}^2) + k^d \partial_t \left(u_k(\tilde{\sigma}^2)\right) \\ &= dk^d u_k(\tilde{\sigma}^2) + k^d \partial_t u_k(\tilde{\sigma}^2) + k^d u_k'(\tilde{\sigma}^2)\partial_t \tilde{\sigma}^2 \ . \end{aligned} \tag{2.34}$$

Da nach Gleichung (2.33) der Zusammenhang $\partial_t \tilde{\sigma}^2 = -(d-2)\tilde{\sigma}^2$ gilt, folgt

$$\partial_t u_k(\tilde{\sigma}^2) = -du_k(\tilde{\sigma}^2) + (d-2)\tilde{\sigma}^2 u_k'(\tilde{\sigma}^2) + \frac{\partial_t \Omega_k(\sigma^2)}{k^d} \ . \tag{2.35}$$

Für die rechte Seite der Flussgleichung gilt es noch, die Ableitungen $\Omega_k'(\sigma^2) = \partial_{\sigma^2}\Omega_k(\sigma^2)$ und $\Omega_k''(\sigma^2)$ auf $u_k(\tilde{\sigma}^2)$ und dessen Ableitungen, $u_k'(\tilde{\sigma}^2) = \partial_{\sigma^2} u_k(\tilde{\sigma}^2)$, zurückzuführen. Unter Ausnutzung der Kettenregel erhalten wir

$$\Omega_k'(\sigma^2) = \frac{\partial \left(k^d u_k(\tilde{\sigma}^2)\right)}{\partial \sigma^2} = k^d \frac{\partial \tilde{\sigma}^2}{\partial \sigma^2} \frac{\partial u_k(\tilde{\sigma}^2)}{\partial \tilde{\sigma}^2} = k^d \cdot k^{2-d} u_k'(\tilde{\sigma}^2) = k^2 u_k'(\tilde{\sigma}^2) \tag{2.36}$$

und in analoger Weise

$$\Omega_k''(\sigma^2) = \frac{\partial \Omega_k'(\sigma^2)}{\partial \sigma^2} = \frac{\partial \left(k^2 u_k'(\tilde{\sigma}^2)\right)}{\partial \sigma^2} = k^2 \cdot k^{2-d} u_k''(\tilde{\sigma}^2) = k^{4-d} u_k''(\tilde{\sigma}^2) \ . \tag{2.37}$$

Wie bereits erwähnt, befinden wir uns in einem System mit Dimension $d = 4$. Setzen wir die oben erhaltenen Resultate nun mit $d = 4$ in die dimensionsbehaftete Flussgleichung ein und überführen darüber hinaus auch Temperatur $T = k\tilde{T}$ und chemisches Potential $\mu = k\tilde{\mu}$ in dimensionlose Größen, erhalten wir die dimensionslose Flussgleichung

$$\begin{aligned}\partial_t u_k(\tilde{\sigma}^2) = -4u_k(\tilde{\sigma}^2) + 2\tilde{\sigma}^2 u_k'(\tilde{\sigma}^2) + \frac{1}{12\pi^2} \Bigg[&\frac{3}{\sqrt{1+2u_k'(\tilde{\sigma}^2)}} \coth\left(\frac{1}{2\tilde{T}}\sqrt{1+2u_k'(\tilde{\sigma}^2)}\right) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{1+2u_k'(\sigma^2)+4\tilde{\sigma}^2 u_k''(\tilde{\sigma}^2)}} \coth\left(\frac{1}{2\tilde{T}}\sqrt{1+2u_k'(\sigma^2)+4\tilde{\sigma}^2 u_k''(\tilde{\sigma}^2)}\right) \\ &- \frac{12}{\sqrt{1+g^2\tilde{\sigma}^2}} \left\{\tanh\left(\frac{\sqrt{1+g^2\tilde{\sigma}^2}-\tilde{\mu}}{2\tilde{T}}\right) + \tanh\left(\frac{\sqrt{1+g^2\tilde{\sigma}^2}+\tilde{\mu}}{2\tilde{T}}\right)\right\}\Bigg] \ . \end{aligned} \tag{2.38}$$

3. Pseudospektrale Methoden

Bei pseudospektralen Methoden (PSM) handelt es sich um numerische Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen. Sie sind eng mit den *spektralen Methoden* verwandt. Bei beiden dient eine Entwicklung nach Basisfunktionen als Ansatz der Lösungsfunktion. Dabei wird vorzugsweise auf orthogonale Funktionen zurückgegriffen, deren Ableitungen sehr leicht mit großer Genauigkeit berechnet werden können. Je nach Problem bieten sich etwa *Fourierreihen* für periodische Randbedingungen oder ganz allgemein *Tschebyschow-Polynome* an, deren Eigenschaften später noch näher beleuchtet werden.

Im Gegensatz zu spektralen Methoden werden bei PSM die Basisfunktionen nur an bestimmten diskreten Punkten ausgewertet, die durch eine Quadraturformel vorgegeben werden. Dies erlaubt eine vergleichsweise kurze Berechnungszeit. Während beispielsweise bei der Finite-Differenzen-Methode die Lösungen lokal approximiert werden, stellen die PSM einen globalen Ansatz dar, der eine gute Konvergenz bei relativ wenigen Auswertungspunkten erlaubt. (vgl. [6])

3.1. Allgemeine Vorgehensweise

Zu Beginn soll kurz die allgemeine Vorgehensweise zur Lösung von zeitabhängigen (vgl. [7]) und stationären Problemen erläutert werden.

Als Beispiel diene ein Differentialgleichung der Art

$$\partial_t f(x,t) = \mathcal{L} f(x,t) + S(x) \ , \quad x \in [a,b] \ . \tag{3.1}$$

Dabei bezeichne $\mathcal{L}$ einen beliebigen (nicht notwendigerweise linearen) Differential-Operator in x und $S(x)$ eine beliebige Funktion von x. Ferner seien Anfangsbedingungen, zum Beispiel $f(x,0) = g(x)$, oder gegebenenfalls Randbedingungen gegeben, beispielsweise $f(a,t) = f(b,t) = 0$.

Wir entwickeln nun die Funktion $f(x,t)$ nach einem Satz von orthogonalen Funktionen $P_n(x)$. Die N-te Approximation ergibt sich aus

$$f(x,t) \approx f_N(x,t) = \sum_{n=0}^{N} c_n(t) P_n(x) \tag{3.2}$$

mit der Anfangsbedingung

$$g(x) \approx \sum_{n=0}^{N} c_n(0) P_n(x) \ . \tag{3.3}$$

Durch Einsetzen des Ansatzes in (3.1) erhalten wir

$$\sum_{n=0}^{N} \frac{\mathrm{d}c_n(t)}{\mathrm{d}t} P_n(x) = \sum_{n=0}^{N} c_n(t) \mathcal{L} P_n(x) + S(x) \ . \tag{3.4}$$

Um nun die Abweichung der Approximation von der exakten Lösung festzustellen, definieren wir die Residuumsfunktion

$$\begin{aligned} R(x,t) &= \partial_t f_N(x,t) - \mathcal{L} f_N(x,t) - S(x) \\ &= \sum_{n=0}^{N} \dot{c}_n(t) P_n(x) - \sum_{n=0}^{N} c_n(t) \mathcal{L} P_n(x) - S(x) \ . \end{aligned} \tag{3.5}$$

Für die exakte Lösung gilt trivialerweise $R(x,t) \equiv 0$, weswegen das Ziel der Methode ist, die Residuumsfunktion zu minimieren, damit die genäherte Lösung möglichst genau mit der exakten übereinstimmt. Im Allgemeinen wird versucht, die Bedingung

$$\int_a^b t(x) R(x) \, \mathrm{d}x = 0 \tag{3.6}$$

zu erfüllen. Dabei bezeichnet $t(x)$ eine Testfunktion, deren Wahl davon abhängt, welche PSM verwendet wird. Für die *Kollokationsmethode*, auf die wir uns in dieser Thesis konzentrieren wollen, ist die Testfunktion durch eine Summe Dirac'scher Deltafunktionen gegeben

$$t(x) = \sum_{n=0}^{N-1} \delta(x - x_n) \ . \tag{3.7}$$

Dies bedeutet, dass die genäherte Lösung die Differentialgleichung (3.1) nur an diskreten Punkten, den Kollokationspunkten, erfüllt. Man geht dabei davon aus, dass die Approximation zwischen diesen Punkten nicht zu stark von der exakten Lösung abweicht.

Die Wahl dieser Punkte ist im Prinzip willkürlich, sollte jedoch an das entsprechende Problem angepasst werden, um eine möglichst gute Konvergenz zu erreichen. Daher werden die Kollokationspunkte zumeist mithilfe einer Gauß-Quadraturformel bestimmt; bei Tschebyschow-Polynomen im Intervall $[-1,1]$ beispielsweise, falls die Randpunkte nicht inkludiert werden sollen, mithilfe der Gauß-Tschebyschow-Punkte,

$$x_{i,N} = \cos\left(\frac{2i+1}{2(N+1)}\pi\right) \ , \quad i = 0, \ldots, N \ , \tag{3.8}$$

oder ansonsten mithilfe der Gauß-Lobatto-Punkte,

$$x_{i,N} = \cos\left(\frac{i}{N}\pi\right) \ , \quad i = 0, \ldots, N \ . \tag{3.9}$$

Es ist zielführend, die Matrix

$$M_{ij} = P_j(x_i) \ , \quad i,j = 0, \ldots, N \tag{3.10}$$

und den Vektor

$$\vec{V}(t) \text{ mit } V_i(t) = \sum_{n=0}^{N} c_n(t) \mathcal{L} P_n(x_i) - S(x_i) \ , \quad i = 0, \ldots, N \tag{3.11}$$

einzuführen. Damit können wir (3.5) durch eine Matrix-Vektor-Schreibweise ausdrücken, womit für die Koeffizienten folgt

$$\dot{\vec{c}}(t) = M^{-1}\vec{V}(t) \ . \tag{3.12}$$

Dieses System kann nun mit einem beliebigen Integrator gelöst werden. Bei uns geschieht dies beispielsweise mit einem *Runge-Kutta-Verfahren.*

Im stationären Fall, wenn also die Differentialgleichung,

$$\mathcal{L}f(x) + S(x) = 0 \ , \tag{3.13}$$

nur von einer Variablen abhängt und m Rand- bzw. Anfangsbedingungen besitzt, muss das Vorgehen etwas angepasst werden. Es wird wieder der Ansatz aus (3.2) verwendet, diesmal jedoch mit konstanten Koeffizienten. Nun wird dieser Ansatz zunächst in die Rand- bzw. Anfangsbedingungen eingesetzt, wodurch man m Gleichungen erhält.

Um nun ein lösbares Gleichungssystem für die $N+1$ Koeffizienten zu generieren, benötigen wir $N+1$ Gleichungen. Die verbleibenden Gleichungen ergeben sich aus der Forderung, (3.13) an Kollokationspunkten zu erfüllen. Wir benötigen daher $N+1-m$ Kollokationspunkte.

Das sich ergebende Gleichungssystem kann nun mit entsprechenden numerischen Verfahren nach den Koeffizienten aufgelöst werden. Im linearen Falle einfach durch ein *Gauß-* oder im nichtlinearen Falle durch ein *Newton-Raphson-Verfahren.*

3.2. Tschebyschow-Polynome als Basisfunktionen

3.2.1. Eigenschaften der Tschebyschow-Polynome erster Art

Als Basisfunktionen werden von uns die *Tschebyschow-Polynome* (erster Art) $T_n(x)$ verwendet. Bei diesen handelt es sich um die Lösungsfunktionen der Tschebyschow-Differentialgleichung

$$(1-x^2)y''(x) - xy'(x) + n^2 y(x) = 0 \ . \tag{3.14}$$

Sie besitzen den Vorteil, dass sie sich durch eine geschlossene Formel,

$$T_n(x) = \cos\left(n \arccos(x)\right) \ , \tag{3.15}$$

oder die Rekursionsformel

$$T_n(x) = 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \ , \quad T_1(x) = x \ , \quad T_0(x) = 1 \tag{3.16}$$

darstellen lassen, was ihre Implementierung auf einem Rechner stark vereinfacht. Man erkennt bereits, dass sie nur auf dem Intervall $[-1,1]$ definiert sind. Bezüglich der Gewichtsfunktion $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ erfüllen die Tschebyschow-Polynome die Orthogonalitätsrelation

$$\langle T_i(x)|T_j(x)\rangle = \int_{-1}^{1} T_i(x)T_j(x)w(x)\,\mathrm{d}x = \begin{cases} \pi & \text{falls } i=j=0 \\ \frac{\pi}{2} & \text{falls } i=j\neq 0 \\ 0 & \text{falls } i\neq j \end{cases} \ , \tag{3.17}$$

wodurch sie sich als Basisfunktionen für pseudospektrale Methoden eignen. Wenn man die Fallunterscheidung durch Kronecker-Deltas ausdrückt, erhält man für das Skalarprodukt den Ausdruck

$$\frac{2}{\pi(1+\delta_{i0})}\langle T_i(x)|T_j(x)\rangle = \delta_{ij} \ , \tag{3.18}$$

der uns durch die Normierung später erlaubt, die Entwicklungskoeffizienten einer Funktion zu bestimmen. Darüber hinaus kann man aus (3.15) unmittelbar noch weitere Eigenschaften ablesen:

- Alle $T_n(x)$ werden nach oben durch 1 und nach unten durch -1 beschränkt, wobei alle Werte dazwischen auch, abgesehen von $T_0(x)$, stets angenommen werden.
- Ferner handelt es sich bei allen $T_n(x)$ mit geradzahligem n um gerade und bei ungeradzahligen n um ungerade Funktionen.
- Die Extremstellen von $T_n(x)$ werden durch

  $$x_i = \cos\left(\frac{i}{n}\pi\right) \ , \quad i = 0, \ldots, n \ , \quad n \neq 0 \ , \tag{3.19}$$

  die Nullstellen durch

  $$x_i = \cos\left(\frac{2i+1}{2n}\pi\right) \ , \quad i = 0, \ldots, n-1 \ , \quad n \neq 0 \tag{3.20}$$

  gegeben. Bei (3.19) handelt es sich gerade um die Gauß-Lobatto- und bei (3.20) um die Gauß-Tschebyschow-Punkte.

Diese Eigenschaften wurden aus [7] und [6] entnommen.

3.2.2. Entwicklung nach Tschebyschow-Polynomen

Möchte man nun eine beliebige stetige Funktion $f(x)$ mit $x \in [-1, 1]$ in N-ter Näherung nach Tschebyschow-Polynomen entwickeln,

$$f(x) \approx f_N(x) = \sum_{n=0}^{N} c_n T_n(x) \ , \tag{3.21}$$

gibt es mehrere Möglichkeiten, die Entwicklungskoeffizienten c_n zu bestimmen. Durch die Orthogonalität der Tschebyschow-Polynome ist es möglich, den i-ten Entwicklungskoeffizienten direkt aus dem Skalarprodukt des i-ten Polynoms mit der zu entwickelnden Funktion zu berechnen. Wenn man (3.21) anstatt $T_j(x)$ in (3.18) einsetzt, erhält man

$$c_i = \frac{2}{\pi(1+\delta_{i0})}\langle T_i(x)|f(x)\rangle \ . \tag{3.22}$$

Da das Berechnen der auftretenden Integrale mitunter sehr aufwändig sein kann, greift man bei PSM auf Quadraturen zur näherungsweisen Berechnung der Integrale zurück. Mit $N+1$

Punkten gilt für das Integral (vgl. [8])

$$\int_b^a f(x)w(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{j=0}^{N} w_j f(x_j)\ . \tag{3.23}$$

Für die Gewichtsfunktion $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ verwendet man die Gauß-Tschebyschow-Quadratur mit den Punkten (3.20) und den Gewichten

$$w_j = \frac{\pi}{N+1}\ . \tag{3.24}$$

Wenn wir diese Resultate in (3.22) einsetzen, folgt für die Koeffizienten

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{2}{\pi(1+\delta_{i0})}\frac{\pi}{N+1}\sum_{n=0}^{N} f\left(\cos\left(\frac{2i+1}{2(N+1)}\pi\right)\right) T_n\left(\cos\left(\frac{2i+1}{2(N+1)}\pi\right)\right) \\ &= \frac{2}{(N+1)(1+\delta_{i0})}\sum_{n=0}^{N} f\left(\cos\left(\frac{2i+1}{2(N+1)}\pi\right)\right)\cos\left(n\frac{2i+1}{2(N+1)}\pi\right)\ . \end{aligned} \tag{3.25}$$

Vorteil dieser Methode ist die sehr schnelle Berechnung durch einfaches Ausführen der Summe, Nachteil jedoch, dass man auf bestimmte Quadraturpunkte beschränkt ist. Möchte man einen beliebigen Satz an Kollokationspunkten verwenden, so kann man die Koeffizienten auch durch Lösen eines Gleichungssystems erhalten. In diesem Falle wertet man die zu entwickelnde Funktion (3.21) an $N+1$ Punkten aus und erhält so ein Gleichungssystem für die Koeffizienten,

$$u_i := f(x_i) = \sum_{n=0}^{N} c_n T_n(x_i)\ . \tag{3.26}$$

Verwendet man wieder (3.10), diesmal mit Tschebyschow-Polynomen, erhält man die Koeffizienten, wenn man sie als Vektor auffasst, einfach aus

$$\vec{c} = M^{-1}\vec{u}\ . \tag{3.27}$$

Die Darstellung über die Matrix M erlaubt also für beliebige Kollokationspunkte eine Transformation zwischen den Koeffizienten einer Funktion und deren Funktionswerten an den Kollokationspunkten.

3.2.3. Fehlerbetrachtung

Da pseudospektrale Methoden darauf basieren, die Lösung nur bis zu einer bestimmen Ordnung zu approximieren, ist jede so ermittelte Lösung naturgemäß fehlerbehaftet. Wenn wir davon ausgehen, dass sich jede beliebige Funktion durch eine unendliche Reihenentwicklung nach Tschebyschow-Polynomen exakt darstellen lässt, können wir den Trunkierungsfehler E_T in Abhängigkeit von der Ordnung durch

$$E_T(N) = |f(x) - f_N(x)| = \left|\sum_{n=N+1}^{\infty} c_n T_n(x)\right| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |c_n||T_n(x)| \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |c_n| \tag{3.28}$$

abschätzen.

Diese Abschätzung ist nicht sehr hilfreich, da sie von den nicht berechneten Koeffizienten der Entwicklung abhängt. Unter Verwendung der Eigenschaft, dass eine Entwicklung von Lipschitz-stetigen Funktionen nach Tschebyschow-Polynomen stets eine exponentielle Konvergenz besitzt (vgl. [9] und [6]), dass also

$$|c_n| \in \mathcal{O}\left(\exp\left(-\mu n\right)\right) \text{ mit } 0 < \mu = \text{const.} \tag{3.29}$$

gilt, können wir die Fehlerabschätzung verbessern. Es folgt mithilfe der geometrischen Reihe

$$\begin{aligned}\sum_{n=N+1}^{\infty} |c_n| &\approx \sum_{n=N+1}^{\infty} e^{-\mu n} = e^{-\mu(N+1)} \sum_{n=N+1}^{\infty} e^{-\mu(n-N-1)} = e^{-\mu(N+1)} \sum_{m=0}^{\infty} \left(e^{-\mu}\right)^m \\ &= e^{-\mu(N+1)} \frac{1}{1-e^{-\mu}} = e^{-\mu N} \frac{1}{e^{\mu}-1} \in \mathcal{O}\left(e^{-\mu N}\right) = \mathcal{O}\left(|c_N|\right) \ . \end{aligned} \tag{3.30}$$

Dies bedeutet also, dass wir den Fehler der Entwicklung für differenzierbare Funktionen über den Koeffizienten des höchsten Tschebyschow-Polynoms der Entwicklung abschätzen können.

3.3. Tschebyschow-Differentiationsmatrix

Da beim Lösen von Differentialgleichungen im Allgemeinen auch immer Ableitungen auftreten, ist es essentiell, nicht nur Funktionen nach Tschebyschow-Polynomen entwickeln zu können, sondern auch deren Ableitungen.

Man kann sich leicht vor Augen führen, dass die Ableitungen der Tschebyschow-Polynome deren positive Eigenschaften im Allgemeinen nicht erben werden, weswegen wir den Ansatz verfolgen, beim Differenzieren einer Funktion deren die Entwicklungskoeffizienten zu transformieren, anstatt mit den Ableitungen der Tschebyschow-Polynome zu rechnen.

Wir fordern also, dass für die Ableitung einer Funktion gelten muss

$$f'(x) = \sum_{j=0}^{N} c_j T_j'(x) \overset{!}{=} \sum_{j=0}^{N} c_j' T_j(x) \ . \tag{3.31}$$

Unter Ausnutzung der Orthogonalität lässt sich nun sehr leicht eine Transformationsforschrift finden. Wir bilden auf beiden Seiten von (3.31) das Skalarprodukt mit $T_i(x)$, sodass wir eine Gleichung für jeden der neuen Koeffizienten c_i' erhalten. Es folgt (mit $T_0'(x) \equiv 0$)

$$c_i' = \sum_{j=1}^{N} c_j \frac{2}{\pi(1+\delta_{i0})} \langle T_i(x) | T_j'(x) \rangle \ . \tag{3.32}$$

Wenn wir die Gesamtheit der Koeffizienten einer Funktion nun als Vektor $\vec{c}$ auffassen, erhalten wir für die Koeffizienten der Ableitung $\vec{c}'$ die Matrix-Gleichung

$$\vec{c}' = \left(\frac{2}{\pi(1+\delta_{i0})} \langle T_i(x) | T_j'(x) \rangle \right)_{i,j} \vec{c} =: D\vec{c} \tag{3.33}$$

Damit können wir die Differentiation einer nach Tschebyschow-Polynomen entwickelten Funktion ganz einfach durch eine Transformation der Koeffizienten mit der Differentiationsmatrix D durchführen.

Die Einträge der Differentiationsmatrix sind gegeben durch

$$D_{ij} = \begin{cases} j & \text{falls } i = 0 \text{ und } i + j \text{ ungerade und } i < j \\ 2j & \text{falls } i > 0 \text{ und } i + j \text{ ungerade und } i < j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \tag{3.34}$$

Als Matrix aufgeschrieben, besitzt D also die Form

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & 0 & \dots \\ & 0 & 4 & 0 & 8 & \dots \\ & & 0 & 6 & 0 & \dots \\ & & & 0 & 8 & \dots \\ & & & & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} . \tag{3.35}$$

Höhere Ableitungen kann man entsprechend aus mehrfachem Anwenden der Transformation erhalten, was sich rechnerisch in einer Potenzierung der Differentiationsmatrix ausdrückt.

Dazu sei gesagt, dass dieses Vorgehen nicht beliebig oft angewendet werden kann. Wie man in Gleichung (3.32) erkennen kann, geht bei jeder Ableitung ein Koeffizient verloren, sodass die Entwicklungsordnung der Ableitung jeweils um eins niedriger ist als die der Ausgangsfunktion, was bei niedriger Entwicklungsordnung schnell zu Ungenauigkeiten führt.

3.4. Koordinatentransformation

Da die Tschebyschow-Polynome nur auf dem Intervall $[-1, 1]$ definiert sind, ist es für die meisten Probleme notwendig, eine Koordinatentransformation durchzuführen, um pseudospektrale Methoden mit Tschebyschow-Polynomen anwenden zu können. Dabei muss natürlich auch die Differentiationsmatrix mittransformiert werden.

Betrachten wir uns als Beispiel die Transformation

$$q = q_{\max} \sqrt{\frac{\rho + 1}{2}} \ , \quad q \in [0, q_{\max}] \tag{3.36}$$

mit der Umkehrtransformation

$$\rho = 2 \left(\frac{q}{q_{\max}} \right)^2 - 1 \ , \quad \rho \in [-1, 1] \ . \tag{3.37}$$

Da $\rho \in [-1, 1]$, dient ρ als Variable der Tschebyschow-Polynome, womit die Differentiationsmatrix nach ρ bekannt ist. Wir wollen also die Ableitung nach q durch die bekannten

Ableitungen nach ρ ausdrücken. Analog zur Substitutionsregel berechnen wir

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}\rho} = \frac{q_{\max}}{2}\sqrt{\frac{1}{2(\rho+1)}} \Rightarrow \mathrm{d}q = \frac{q_{\max}}{4}\sqrt{\frac{2}{\rho+1}}\mathrm{d}\rho \tag{3.38}$$

und erhalten entsprechend

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} = \frac{4}{q_{\max}}\sqrt{\frac{\rho+1}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} \ . \tag{3.39}$$

Wenn wir diese Vorschrift nun auf eine Funktion anwenden und diese an den Kollokationspunkten auswerten, lässt sich damit eine Matrixgleichung formulieren:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}f(q_i) = \frac{4}{q_{\max}}\sum_{n=0}^{N}\sqrt{\frac{\rho_i+1}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}c_nT_n(\rho_i) = \frac{4}{q_{\max}}\sum_{n=0}^{N}\sqrt{\frac{\rho_i+1}{2}}c_n'T_n(\rho_i) \tag{3.40}$$

$$= \frac{4}{q_{\max}}\sqrt{\frac{\rho_i+1}{2}}\left(M\vec{c}'\right)_i = \frac{4}{q_{\max}}\sqrt{\frac{\rho_i+1}{2}}\left(MD_\rho\vec{c}\right)_i . \tag{3.41}$$

Analog zum Schritt von (3.40) zu (3.41), können wir auch auf der linken Seite die Relation

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}f(q_i) = \sum_{n=0}^{N}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}c_nT_n(q(\rho_i)) = \left(MD_q\vec{c}\right)_i \tag{3.42}$$

finden. Zudem lässt sich der Faktor $\sqrt{\frac{\rho_i+1}{2}}$ auf der rechten Seite durch eine Diagonalmatrix darstellen, da der i-te Faktor nur auf die i-te Komponente des Vektors wirkt. Damit vereinfacht sich die Transformation zu

$$MD_q\vec{c} = \frac{4}{q_{\max}}\mathrm{diag}\left(\left\{\sqrt{\frac{\rho_i+1}{2}}\right\}\right)MD_\rho\vec{c} \ . \tag{3.43}$$

Hierbei wurde mit $\{\rho_i\}$ die Menge der Kollokationspunkte bezeichnet (mit $i = 0, \ldots, N$).

Sollen höhere Ableitungen berechnet werden, so erhalten wir diese durch mehrmalige Anwendung der ersten Ableitung. Für die zweite Ableitung unserer Transformation folgt also

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2} &= \frac{4}{q_{\max}}\sqrt{\frac{\rho+1}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\frac{4}{q_{\max}}\sqrt{\frac{\rho+1}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)\\ &= \frac{16}{q_{\max}^2}\left(\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\rho+1}{2}}\sqrt{\frac{2}{\rho+1}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \sqrt{\frac{\rho+1}{2}}\sqrt{\frac{\rho+1}{2}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\right)\\ &= \frac{4}{q_{\max}^2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + 2(\rho+1)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\right) \ .\end{aligned} \tag{3.44}$$

Auch diesen Zusammenhang können wir wieder durch eine Matrixgleichung darstellen. Analog zur obigen Herleitung ergibt sich

$$MD_q^2\vec{c} = \frac{4}{q_{\max}^2}\left(MD_\rho\vec{c} + 2\ \mathrm{diag}\left(\{\rho_i+1\}\right)MD_\rho^2\vec{c}\right) \ . \tag{3.45}$$

3.5. Zeitunabhängiges Beispiel: Quantenmechanischer harmonischer Oszillator

Da wir nun alle Grundlagen erläutert haben, können wir uns an einem einfachen Beispiel die Funktionsweise der PSM mit Tschebyschow-Polynomen näher ansehen.

Für ein stationäres Problem bietet sich der quantenmechanische harmonische Oszillator an, da dessen Lösungsfunktionen bekannt und analytisch sind. Dessen Schrödingergleichung lautet

$$E_n\psi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\psi(x) \ . \tag{3.46}$$

Zur Vereinfachung setzen wir $\hbar = m = \omega = 1$, womit sich die Differentialgleichung

$$\left(\partial_x^2 + 2E_n - x^2\right)\psi(x) = 0 \tag{3.47}$$

ergibt. Wir wollen im Folgenden die Wellenfunktion für den Energieeigenwert $E_n = \frac{9}{2}$ näherungsweise berechnen. Da es sich bei (3.47) um eine Differentialgleichung zweiter Ordnung handelt, benötigen wir zwei Anfangsbedingungen, um eine eindeutige Lösung zu erhalten. Es ist bekannt, dass die Wellenfunktion bei $x = 0$ ein Extremum besitzt, daher wählen wir o.B.d.A. $\psi(0) = 1$ und $\psi'(0) = 0$. Wir führen die Entwicklung im Intervall von $a = -4$ bis $b = 4$ aus, da in diesem Intervall der polynomiale Anteil der Wellenfunktion dominiert. Daher müssen wir eine Koordinatentransformation von $[-1, 1]$ auf $[-4, 4]$ durchführen:

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\rho \ \in [a, b] \quad \Leftrightarrow \quad \rho = 2\frac{x-a}{b-a} - 1 \ \in [-1, 1] \tag{3.48}$$

Wir wählen also den Ansatz

$$\psi(x) \approx \sum_{n=0}^{N} c_n T_n\left(\rho(x)\right) = \sum_{n=0}^{N} c_n T_n\left(\frac{x}{4}\right) \ . \tag{3.49}$$

Die Entwicklung für $N = 3$ soll an dieser Stelle exemplarisch ausgeführt werden. Zwei Gleichungen des Gleichungssystems erhalten wir, wenn wir (3.49) in die Anfangsbedingungen $\psi(0) = 1$ und $\psi'(0) = 0$ einsetzen. Die anderen beiden ergeben sich durch Einsetzen von (3.49) in (3.47) an zwei Kollokationspunkten. Wir wählen die Gauß-Tschebyschow-Punkte (mit (3.48))

$$x_{0,3-2} = 4 \cdot \cos\left(\frac{1}{4}\pi\right) \text{ und } x_{1,3-2} = 4 \cdot \cos\left(\frac{3}{4}\pi\right) \ . \tag{3.50}$$

Damit ergibt sich für die Entwicklungskoeffizienten das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & -\frac{3}{4} \\ 1 & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{4} & \frac{\sqrt{2}}{4} \\ 1 & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{4} & -\frac{\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \ , \tag{3.51}$$

welches die Lösung $c_0 = \frac{1}{5},\ c_1 = 0,\ c_2 = -\frac{4}{5},\ c_3 = 0$ besitzt. Die Lösungsfunktionen für verschiedene Ordnungen sind in Abbildung 1 dargestellt.

Wie man sieht, verschwinden aufgrund der Symmetrie alle ungeraden Koeffizienten. Daher hätte man bei bekannter Symmetrie die Entwicklung auch für das Intervall $[0, b]$ durchführen und die Ergebnisse dann auf $[0, -b]$ spiegeln können, sodass man effektiv für gleiche Konvergenz nur die Hälfte an Koeffizienten braucht.

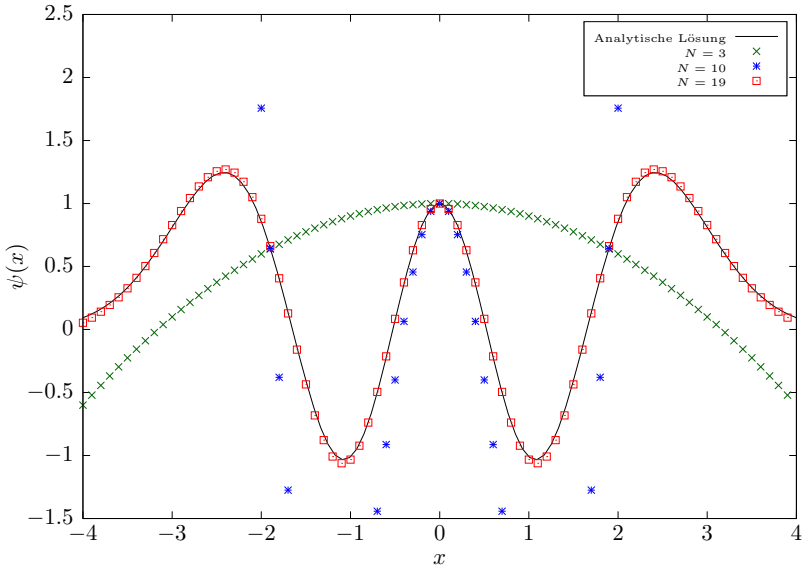

Abbildung 1: Numerische Lösung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators für verschiedene Entwicklungsordnungen mit analytischer Lösung zum Vergleich.

3.6. Zeitabhängiges Beispiel: Wärmeleitungsgleichung

Da es sich bei der Flussgleichung auch um eine zeitabhängige Differentialgleichung handelt, wollen wir uns schließlich noch ein Problem ansehen, das ebenfalls von Ort und Zeit abhängt.

Wir wählen hierzu die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung

$$\partial_t u(x,t) = \partial_x^2 u(x,t) \tag{3.52}$$

mit der Fundamentallösung

$$f(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right) . \tag{3.53}$$

Damit sei die Anfangsfunktion unserer Entwicklung zur Zeit $t_0 = 1$ gegeben durch

$$u_N(x,1) = \sum_{n=0}^{N} c(1) T_n\left(\rho(x)\right) \approx \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{4}\right) . \tag{3.54}$$

Um sonst auftretende Probleme mit dem Rand zu umgehen, müssen wir eine Transformation auf das Intervall $(-\infty, \infty)$ durchführen. Wir wählen die Transformation

$$x = \frac{\rho}{\sqrt{1-\rho^2}} \in (-\infty, \infty) \quad \Leftrightarrow \quad \rho = \frac{x}{\sqrt{1+x^2}} \in [-1, 1] \tag{3.55}$$

mit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = \sqrt{1-\rho^2}^3 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} \quad \text{und} \quad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} = -3\rho\left(1-\rho^2\right)^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + \left(1-\rho^2\right)^3 \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} \ . \tag{3.56}$$

Wenn wir (3.56) nun analog zu (3.45) in eine Matrixgleichung umformulieren und in (3.52) einsetzen, folgt für die Koeffizienten

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\vec{c}(t) = M^{-1}\left(-\operatorname{diag}\left(\left\{3\rho_i\left(1-\rho_i^2\right)^2\right\}\right)MD + \operatorname{diag}\left(\left\{\left(1-\rho_i^2\right)^3\right\}\right)MD^2\right)\vec{c}(t) \ . \tag{3.57}$$

Zusammen mit den Koeffizienten zur Zeit $t = t_0$ aus (3.54) lässt sich dieses System von Differentialgleichungen nun eindeutig lösen. Wir verwenden dafür ein achtstufiges *Runge-Kutta-Verfahren* mit adaptiver Schrittweite (genauere Erläuterungen zu diesem in Appendix A.1). Numerische Lösungen zu verschiedenen Zeiten sind in Abbildung 2 dargestellt.

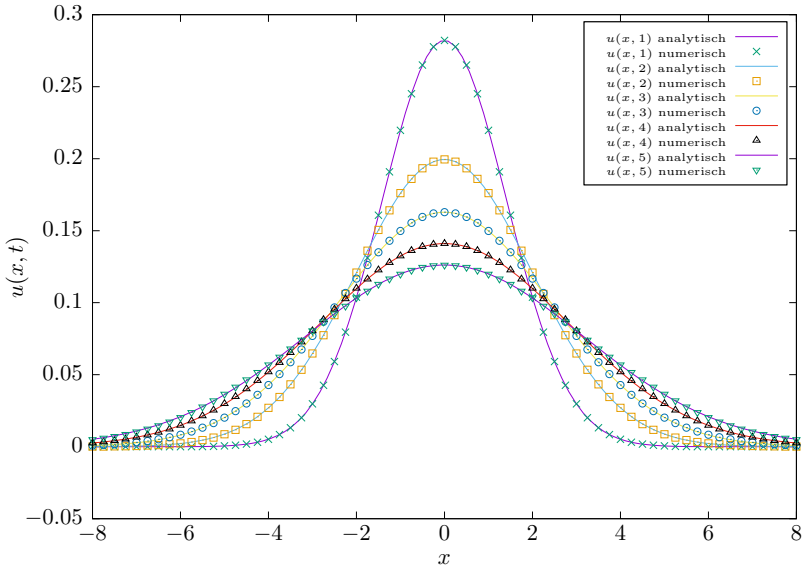

Abbildung 2: Numerische Lösungen der Wärmeleitungsgleichung zu den Zeiten $t = 1$ bis $t = 5$ und die analytischen Lösungen zum Vergleich. Es wurden die Entwicklungsordnung $N = 50$ verwendet.

4. Lösung der Flussgleichung

Als letzten Schritt wollen wir nun noch die in Abschnitt 2.2 aufgestellte Flussgleichung mit pseudospektralen Methoden lösen. Bevor wir dies tun, wollen wir jedoch noch knapp einige Hintergründe erläutern, um die Parameter der Entwicklung richtig wählen und die Ergebnisse richtig interpretieren zu können. Die folgenden Ausführungen basieren dabei auf [5].

Da es sich bei der Flussgleichung um eine Differentialgleichung in t und σ handelt, benötigen wir für eine eindeutige Lösung der Evolution nach t ein von σ abhängiges Anfangspotential. Wir wählen hierfür

$$\Omega_{k=\Lambda}(\sigma) = V(\sigma) = \frac{\lambda}{4}\left(\sigma^2 - \phi_0^2\right)^2 - \frac{\lambda}{4}\phi_0^4 \ , \tag{4.1}$$

wobei es sich bei λ und $\phi_0^2 < 0$ um Parameter der Entwicklung handelt. Damit stellt (4.1) die Wigner-Weyl-Realisierung der $O(N)$-Symmetrie dar, deren einziges Minimum sich bei $\sigma_0 = 0$ befindet. Der Summand $-\frac{\lambda}{4}\phi_0^4$ spielt für den Fluss des dimensionsbehafteten Potentials keine Rolle, da das nicht-differenzierte Potential in der Flussgleichung nicht vorkommt, und dient lediglich der Normierung des Minimums auf $V(0) = 0$.

Im Laufe der Entwicklung wird sich die Position des Minimums des Potentials zu einem Wert ungleich 0 entwickeln, den wir als Zerfallskonstante des Pions f_π identifizieren können. Dieses Potential hat dann, wenn man es nicht nur in σ sondern auch in $\vec{\pi}$ betrachtet,

$$\sigma^2 \longrightarrow \vec{\Phi}^2 = (\sigma^2 + \vec{\pi}^2) \ , \tag{4.2}$$

die Form eines Sombreros (*Mexican hat potential*), bei dem der unendlich entartete Grundzustand in einem Kreis, dem chiralen Kreis, um den Ursprung herum liegt. Dieses Potential entspricht dann der Goldstone-Realisierung der $O(N)$-Symmetrie. Wählt man nun einen Punkt auf diesem Kreis als „wahren“ Grundzustand aus, wird die Symmetrie des Systems gebrochen, weswegen man hier von *chiraler Symmetriebrechung* spricht.

Für (4.1), also mit $\sigma = 0$, gilt daher am Ort des Minimums $\vec{\pi}^2 = \phi_0^2$, weshalb es für die Entwicklung sinnvoll ist, $|\phi_0|$ etwa so groß zu wählen wie die Pionmasse.

4.1. Dimensionsbehaftete Flussgleichung im Vakuum

Als numerische Vereinfachung betrachten wir uns zunächst die dimensionsbehaftete Flussgleichung im Vakuum, also bei Temperatur $T = 0$ und chemischem Potential $\mu = 0$. Da in der Flussgleichung stets nur der Kehrwert der Temperatur auftaucht, müssen wir vor der Implementierung zunächst den analytischen Grenzwert bilden.

Da die Temperatur nur in *Tangens-* und *Kotangens Hyperbolicus* auftritt, betrachten wir uns deren Grenzwerte für $T \to 0$. Es gilt

$$\lim_{T\to 0} \tanh\left(\frac{C}{T}\right) = 1 = \lim_{T\to 0} \coth\left(\frac{C}{T}\right) \quad \text{für } C \neq C(T) \ . \tag{4.3}$$

Darüber hinaus wurde in 2.2 die Flussgleichung als Differentialgleichung in σ^2 formuliert. Um jedoch die Eigenschaften des entwickelten Potentials, wie beispielsweise die Konvexität für kleine k oder die Position des Minimums, besser abbilden zu können, ist es angebracht, die Flussgleichung in lineare Abhängigkeit von σ zu bringen.

Dazu können wir, analog zur Koordinatentransformation in 3.4, die Ableitung nach σ^2 durch Ableitungen nach σ ausdrücken:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma^2} = \frac{1}{2\sigma}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} \ . \tag{4.4}$$

Durch Anwendung dieser Ableitung auf sich selbst erhalten wir auch die zweite Ableitung

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma^2}\right)^2 = -\frac{1}{4\sigma^3}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} + \frac{1}{4\sigma^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2} \ . \tag{4.5}$$

Zum Schluss ersetzen wir noch die Differentiation nach t durch $\partial_t = k\partial_k$, sodass nun im Code keine Umrechnung mehr zwischen t und k stattfinden muss und wir direkt mit k als Variable arbeiten können. Dies führt zur Differentialgleichung

$$\partial_k \Omega_k(\sigma) = \frac{k^4}{12\pi^2}\left[\frac{3}{\sqrt{k^2+\sigma^{-1}\Omega_k'(\sigma)}} + \frac{1}{\sqrt{k^2+\Omega_k''(\sigma)}} - \frac{24}{\sqrt{k^2+g^2\sigma^2}}\right] \ , \tag{4.6}$$

die wir nun mit pseudospektralen Methoden lösen wollen.

4.1.1. Numerische Ergebnisse

In diesem Unterabschnitt wurde die Flussgleichung sowohl mit der pseudospektralen Kollokationsmethode als auch mit der Finiten-Differenzen-Methode (FD) gelöst. Damit ist es möglich, beide Methoden zu vergleichen. Für die k-Entwicklung wurde bei beiden Methoden ein Runge-Kutta-Verfahren mit adaptiver Schrittweite und einer relativen Genauigkeit von 10^{-7} verwendet (vgl. Appendix A.2).

Als Parameter der Entwicklung wurde folgende implementiert: Ein UV-Cutoff von $\Lambda = 800$ MeV und ein IR-Cutoff von $k = 60$; $g = 4{,}2$; $\phi_0^2 = -(140\ \mathrm{MeV})^2$, sodass $|\phi_0|$ etwa so groß ist wie die Pionmasse; $\lambda = 12$, sodass das Minimum für $N = 5$ und $k = 60$ MeV bei etwa $f_\pi \approx 93$ MeV liegt.

Für die PSM-Entwicklung wählen wir ein Entwicklungsintervall von $[0, 140]$ MeV mit der aus Abschnitt 3.4 bekannten Koordinatentransformation. Zunächst entwickeln wir mit Ordnung $N = 5$, später noch mit $N = 7$ und $N = 11$. Dabei werden als Kollokationspunkte stets die Gauß-Lobatto-Punkte verwendet.

Für FD entwickeln wir ebenfalls auf dem Intervall $[0, 140]$ MeV. Wir wählen $N = 60$ Diskretisierungspunkte und eine Genauigkeit von $\mathcal{O}(h^2)$ (vgl. Appendix A.2).

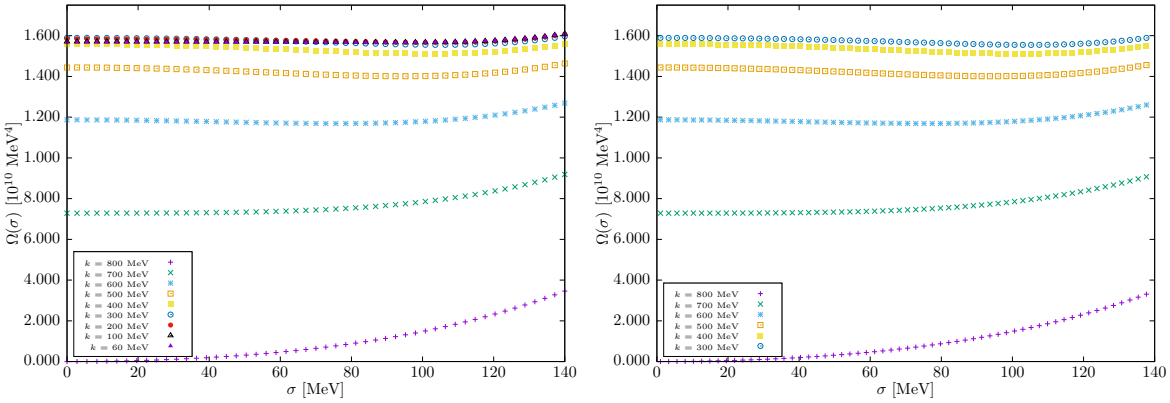

Abbildung 3: Numerische Lösungen des dimensionsbehafteten Vakuumflusses von $k = 800$ MeV bis $k = 60$ MeV. Links: Lösung mit der pseudospektralen Methode. Rechts: Lösung mit finiten Differenzen.

In Abbildung 3 sind die Lösungen der Flussgleichung für diese Parameter dargestellt. Zunächst sei gesagt, dass sich das System mit FD nur bis knapp über $k = 300$ MeV entwickeln lies, bevor die Numerik zusammenbrach, während die PSM-Entwicklung problemlos bis $k = 60$ MeV durchgeführt werden konnte. Ansonsten lassen sich bei der Auflösung von Abbildung 3 keine Unterschiede ausmachen.

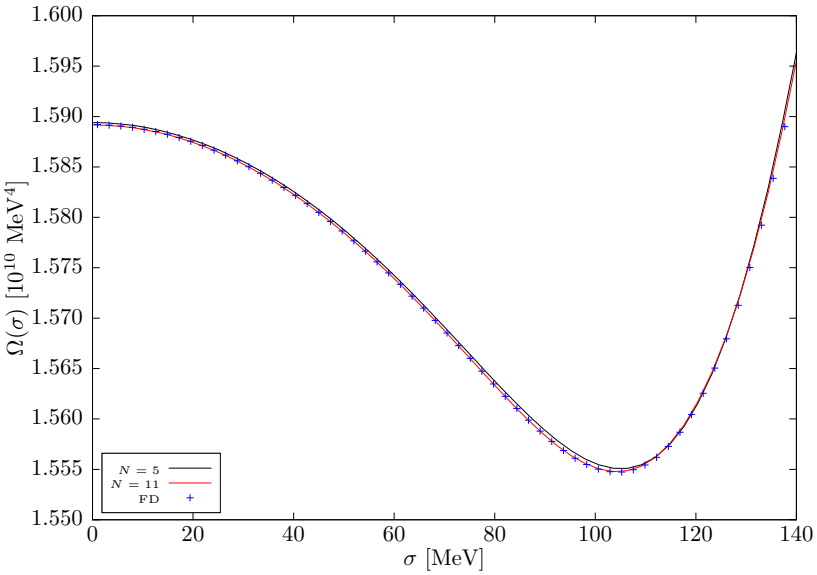

Abbildung 4: Vergleich des Potentials bei $k = 300$ MeV von PSM bei $N = 5$ und $N = 11$ und FD. Zur besseren Unterscheidbarkeit wurden die Kurven der PSM hier mit Linien dargestellt.

Um nun etwaige Abweichungen festzustellen, wurden in Abbildung 4 die Lösungen der Finite-Differenzen-Methode und der pseudospektralen Methode für $N = 5$ und $N = 11$ gegeneinander aufgetragen. Dort ist erkennbar, dass $N = 5$ in der Tat minimal von FD abweicht, dass $N = 11$ jedoch bis zum Minimum mit FD übereinstimmt und sich erst danach sehr leicht davon entfernt.

Die Laufzeit der FD-Entwicklung bis $k = 300$ MeV betrug etwa 1 Sekunde, im Vergleich zu etwa 0,01 Sekunden für $N = 5$ und etwa 3 Sekunden für $N = 11$. Damit ist der FD-Code etwa hundertmal langsamer als ein PSM-Code, der sehr ähnliche, und nur etwa dreimal so schnell wie ein PSM-Code, der nahezu die gleichen Ergebnisse produziert.

Um die erhaltenen Ergebnisse nun besser beschreiben und interpretieren zu können, wollen wir zunächst den Bereich der k-Entwicklung etwas genauer darstellen, in dem die größte Veränderung stattfindet.

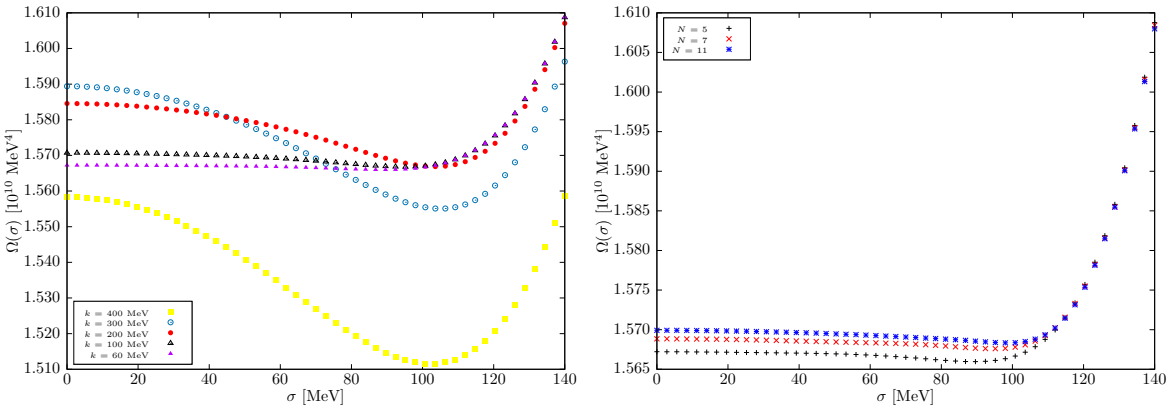

Abbildung 5: Links: Ausschnitt auf den Vakuumfluss von $k = 400$ MeV bis $k = 60$ MeV für $N = 5$. Rechts: Potential bei $k = 60$ MeV für $N = 5$, $N = 7$ und $N = 11$.

In Abbildung 5 ist links der Vakuumfluss des Potentials von $k = 400$ MeV bis $k = 60$ MeV für $N = 5$ dargestellt. Man erkennt hier sehr deutlich die von der Theorie vorhergesagte, zunehmende Konvexität des Potentials. Bei einer Entwicklung bis $k = 0$ MeV, die mit der hier implementierten PSM leider nicht möglich war, sollte der Bereich für $\sigma < \sigma_0$ zu einer waagrechten Geraden, also vollständig konvex, werden, was sich durch den Verlauf bei $k = 60$ MeV bereits erahnen lässt. Weiterhin ist anzumerken, dass die Position der Minima σ_0 für kleinere k zunächst ansteigt, dann ab circa $k = 300$ MeV jedoch wieder leicht abfällt.

In Abbildung 4 ist bereits zu erkennen, dass die Lösung auch je nach Entwicklungsordnung N variiert. Um nun diesen Einfluss auf die Lösung der Flussgleichung zu untersuchen, wurde in Abbildung 5 rechts das Potential bei $k = 60$ MeV für $N = 5$, $N = 7$ und $N = 11$ gegeneinander aufgetragen. Dort ist zu erkennen, dass die Kurve von $N = 7$ näher an der von $N = 11$ liegt als an der von $N = 5$. Dies kann durch das exponentielle Konvergenzverhalten von Tschebyschow-Entwicklungen erklärt werden. Darüber hinaus ist zu erkennen, dass sich das Minimum mit zunehmender Entwicklungsordnung zu höheren σ verschiebt. Für eine

genaue Berechnung von beispielsweise f_π ist Ordnung $N = 5$ also nicht ausreichend, jedoch sind die Charakteristika des Flusses bereits zu erkennen, und auch bei großen k ist eine niedrige Entwicklungsordnung für eine gute Genauigkeit ausreichend, wie Abbildung 4 zeigt.

Basierend auf den Ausführungen in Abschnitt 3.2.3, wollen wir noch kurz den Trunkierungsfehler der Lösungen bei $k = 60$ MeV und verschiedenen Ordnungen durch den N-ten Koeffizienten abschätzen.

N	$\lvert a_0 \rvert$	$\lvert a_N \rvert$	$\lvert \frac{a_N}{a_0} \rvert$
5	$1{,}577 \cdot 10^{10}$	$1{,}995 \cdot 10^{6}$	$1{,}265 \cdot 10^{-4}$
7	$1{,}578 \cdot 10^{10}$	$3{,}819 \cdot 10^{5}$	$2{,}420 \cdot 10^{-5}$
11	$1{,}578 \cdot 10^{10}$	$2{,}202 \cdot 10^{4}$	$1{,}395 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 1: Vergleich von $|a_0|$, $|a_N|$ und $|\frac{a_N}{a_0}|$ für $k = 60$ MeV bei unterschiedlichen N.

Wie man Tabelle 1 entnehmen kann, sorgt eine Verdopplung der Entwicklungsordnung für eine Verkleinerung des Trunkierungsfehlers um etwa 2 Größenordnungen. Damit ist der Exponent des Fehlers jedoch nicht zu proportional zu N, da der auf den nullten Koeffizienten normierte Trunkierungsfehler für $N = 5$ in $\mathcal{O}(10^{-4})$, der für $N = 11$ jedoch nur in $\mathcal{O}(10^{-6})$ liegt. Außerdem verringert sowohl bei Erhöhung der Ordnung von $N = 5$ auf $N = 7$ als auch von $N = 7$ auf $N = 11$ der Fehler jeweils nur um eine Größenordnung. Dies weicht von der theoretischen Vorhersage der exponentiellen Konvergenz von Tschebyschow-Polynomen ab.

Eine mögliche Fehlerquelle könnte hier das Runge-Kutta-Verfahren sein, das durch die wiederholte Auswertung der Koeffizienten eventuell Fehler produziert, die sich aufaddieren und bei langen Entwicklungen, wie etwa bis $k = 60$ MeV, für größere Abweichungen sorgen. Dafür spricht zum einen, dass die Entwicklungen für $N = 5$ und $N = 11$ bei $k = 300$ MeV noch sehr dicht beieinander liegen (Abbildung 4) während bei $k = 60$ MeV die Unterschiede größer sind (Abbildung 5 rechts), und zum anderen, dass das Runge-Kutta-Verfahren nur bis Ordnung $N = 11$ durchgeführt werden konnte, bevor es keine Daten mehr produziert hat.

4.2. Fluss bei endlichen Temperaturen

Nachdem wir nun den Vakuumfluss studiert haben, wollen wir uns noch die Auswirkung der Temperatur auf die Flussgleichung ansehen.

Wir verwenden hierfür wieder die Flussgleichung (4.3), nur diesmal ohne Grenzwert. Es gelte aber für das chemische Potential weiterhin $\mu = 0$. Wir erhalten damit die Differentialgleichung

$$\partial_k \Omega_k(\sigma) = \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{k^2 + \sigma^{-1}\Omega_k'(\sigma)}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + \sigma^{-1}\Omega_k'(\sigma)}}{2T} \right) + \frac{1}{\sqrt{k^2 + \Omega_k''(\sigma)}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + \Omega_k''(\sigma)}}{2T} \right) - \frac{24}{\sqrt{k^2 + g^2\sigma^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2 + g^2\sigma^2}}{2T} \right) \right] . \quad (4.7)$$

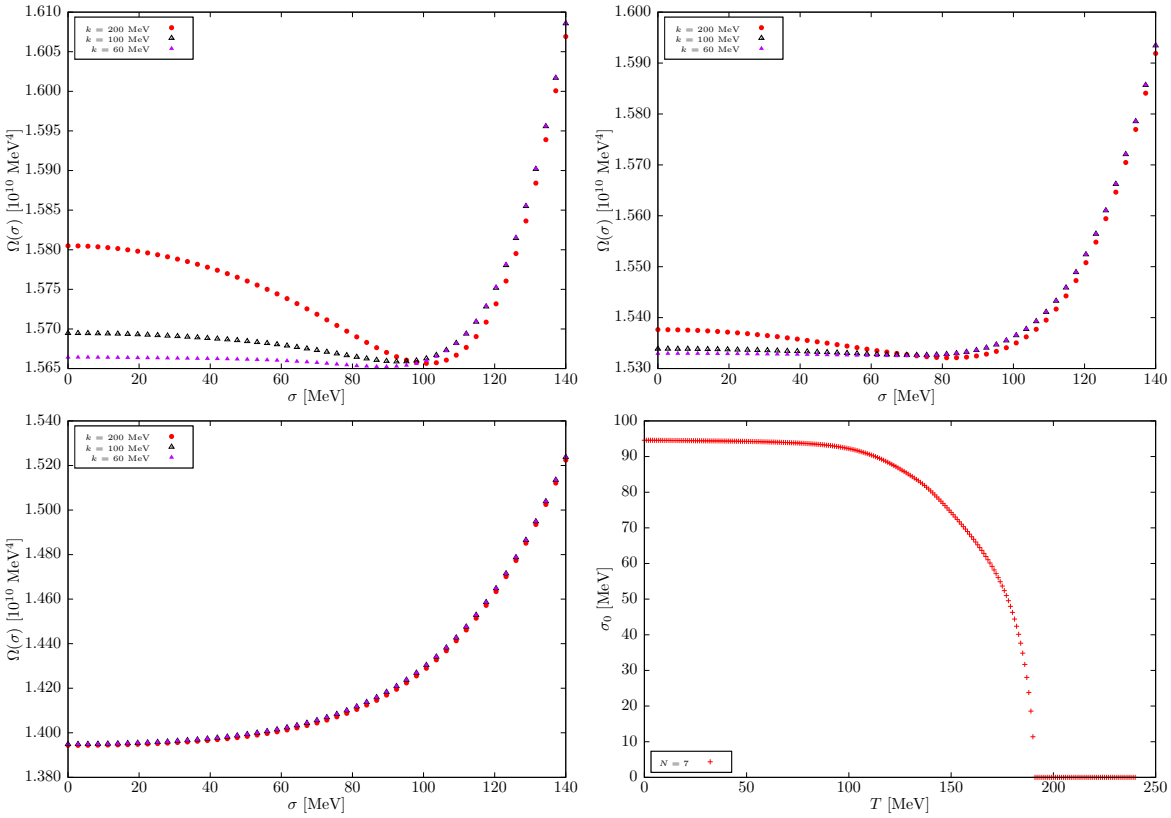

Abbildung 6: Fluss der Potentiale bei $T = 80$ MeV (oben links), bei $T = 160$ MeV (oben rechts) und $T = 240$ MeV (unten links) für $k = 200$ MeV bis $k = 60$ MeV. Unten rechts: Abhängigkeit des Minimums von der Temperatur bei $k = 60$ MeV für $N = 7$.

In Abbildung 6 ist der Fluss des Potentials bei kleinen Skalen ($k = 200$ MeV bis $k = 60$ MeV) dargestellt. Dabei fällt erstens auf, dass die Positionen der Minima für größer werdende Temperaturen immer kleiner werden. Während für $T = 80$ MeV das Minimum wie im Vakuum noch etwa bei $\sigma_0 = 90$ MeV liegt, ist es bei $T = 160$ MeV schon auf etwa $\sigma_0 = 70$ MeV abgesunken und bei $T = 240$ MeV ist es gänzlich verschwunden. Zweitens werden Potentiale immer konvexer und unterscheiden sich immer weniger voneinander. Bei $T = 80$ MeV entsprechen die Verläufe noch größtenteils denen aus dem Vakuum, bei $T = 160$ MeV sind die Kurven schon deutlich konvexer und unterscheiden sich nur noch wenig und bei $T = 240$ MeV sind sie vollständig konvex und liegen beinahe gänzlich aufeinander.

Zusammen mit der Kurve der Minima in Abhängigkeit von der Temperatur (unten rechts) lässt sich also sagen, dass eine kritische Temperatur, für unsere Parameter etwa $T_{\text{crit}} = 190$ MeV, existiert, ab der die Symmetrie des Anfangspotentials (4.1) wiederhergestellt wird. Da oberhalb dieser Temperatur für die Pion-Zerfallskonstante $f_\pi = 0$ gilt, liegt die Interpretation nahe, dass ab der kritischen Temperatur keine Pionen mehr existieren, also ein

Phasenübergang vorliegt.

Des Weiteren konnte festgestellt werden, dass kleine Temperaturen $T < 90$ MeV so gut wie keinen Einfluss auf den Fluss des Systems haben.

4.3. Ausblick: Kritischer Punkt

Im Hinblick auf die Ergebnisse, die wir bei endlichen Temperaturen erhalten haben, erinnern wir uns an die dimensionslose Flussgleichung aus 2.3 zurück, die sich für die Betrachtung von Phasenübergängen und kritischen Phänomenen besser eignet als die dimensionsbehaftete. Wenn wir uns noch einmal die Theorie hinter der Flussgleichung ansehen, können wir uns mithilfe der dimensionslosen Flussgleichung dem kritischen Punkt nähern, was in diesem letzten Unterabschnitt noch kurz skizziert werden soll.

4.3.1. Dimensionale Reduktion

Zunächst wollen wir ein Phänomen beschreiben, das bereits bei der Lösung der dimensionsbehafteten Flussgleichung bei endlichen Temperaturen zu erkennen war. So sieht dort das Potential bei hohen Temperaturen und kleinen Skalen genau so aus, wie beim UV-Cutoff $k = \Lambda$. In der Tat ist es so, dass sich das d-dimensionale Verhalten des Systems bei großen Temperaturen auf ein $(d-1)$-dimensionales Verhalten reduziert (vgl. [5]). Dieses Phänomen ist daher als dimensionale Reduktion bekannt.

Anstatt bei der Herleitung der Flussgleichung die Spur in der effektiven Wirkung Γ über eine d-dimensionale Impulsintegration durchzuführen, ist es auch möglich, die Temperatur explizit als Dimension miteinzubeziehen. Dafür diskretisiert man eine Impulsdimension durch die Einführung der Matsubara-Frequenzen (vgl. [10])

$$\omega_n = 2n\pi T \text{ für Bosonen und } \nu_n = (2n+1)\pi T \text{ für Fermionen, mit } n \in \mathbb{Z} \ . \tag{4.8}$$

Die Integration geht dann in eine Summation über diese Frequenzen über. So ergibt sich für Bosonen beispielsweise (vgl. [5])

$$\int \frac{\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d} f(p^2) \longrightarrow T \sum_{n\in\mathbb{Z}} \int \frac{\mathrm{d}^{d-1} p}{(2\pi)^{d-1}} f(\vec{p}^2 + \omega_n^2) \ . \tag{4.9}$$

Die Funktion f stellt dabei die Regulatorfunktion der FRG dar. Wir verwenden eine der *Heat-Kernel-Funktionen*,

$$\partial_t f_k^{(n)}(\tau) = -2 \frac{(\tau k^2)^{(n+1)}}{\Gamma(n+1)} e^{-\tau k^2} \ , \tag{4.10}$$

wobei hier Γ die Γ-Funktion, die verallgemeinerte Fakultät, bezeichnet. Für die Herleitung unserer Flussgleichung wurde die Heat-Kernel-Funktion mit $n = \frac{3}{2}$ benutzt (vgl. [4]). Um die

dimensionale Reduktion besser zu demonstrieren, verwenden wir hier jedoch $n = 1$. Damit erhalten wir für eine rein bosonische dimensionsbehaftete Flussgleichung mit $\mu = 0$ (vgl. [11])

$$\partial_t \Omega = \frac{Tk^3}{8(4\pi)} \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + \frac{\omega_n^2}{k^2} + \frac{m_\sigma^2}{k^2})^{\frac{3}{2}}} + 3 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + \frac{\omega_n^2}{k^2} + \frac{m_\pi^2}{k^2})^{\frac{3}{2}}} \right]. \tag{4.11}$$

Ein Term der Art

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + \frac{\omega_n^2}{k^2} + y^2)^{\frac{3}{2}}} \quad \text{oder} \quad \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + \frac{\nu_n^2}{k^2} + y^2)^{\frac{3}{2}}} \tag{4.12}$$

wird dabei Schwellenfunktion genannt. Diese Funktionen stellen den Einfluss der Bosonen bzw. der Fermionen auf den Fluss des Potentials dar.

Im Niedrigtemperatur-Grenzwert $\frac{T}{k} \to 0$ (vgl. [10])

$$\lim_{T/k \to 0} \frac{T}{k} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + \frac{\omega_n^2}{k^2} + y^2)^{\frac{3}{2}}} = \lim_{T/k \to 0} \frac{T}{k} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(1 + \frac{\nu_n^2}{k^2} + y^2)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{\pi} \frac{1}{1 + y^2}. \tag{4.13}$$

gehen Schwellenfunktion in eine Form über, die der aus unserer dimensionsbehafteten Flussgleichung im Grenzwert $T \to 0$ ähneln. In der Tat unterscheidet sich der bosonische Teil unserer Flussgleichung nur in einem Vorfaktor und durch die Wurzel über der Schwellenfunktion. Dies ist jedoch mit unserer Flussgleichung vereinbar, da Vorfaktoren und Potenzen der Schwellenfunktionen von der verwendeten Heat-Kernel-Funktion abhängen (vgl. [11]). Damit liegt nahe, dass dies auch für den Quark-Teil unserer Flussgleichung gilt. Wir können entsprechend auch unsere Flussgleichung durch eine Matsubara-Reihe darstellen, um deren Entwicklung für endliche Temperaturen zu erhalten.

Die dimensionale Reduktion folgt nun aus dem Hochtemperatur-Grenzwert der Schwellenfunktionen.

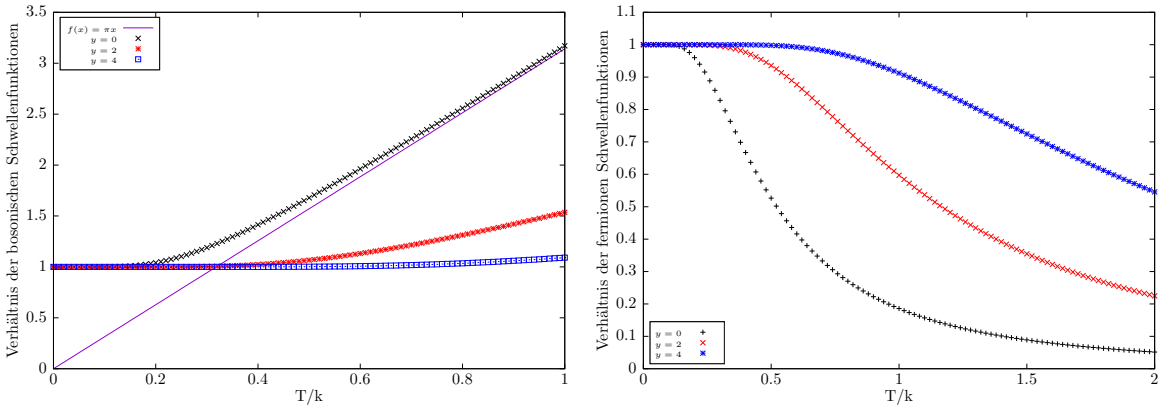

Abbildung 7: Verhältnisse der bosonischen (links) und fermionischen (rechts) Schwellenfunktionen für endliche Temperaturen zu denen für $T = 0$ in Abhängigkeit von $\frac{T}{k}$ für verschiedene Masseparameter y.

In Abbildung 7 wurden die bosonischen und fermionischen Schwellenfunktionen für endliche Temperaturen durch die jeweiligen Funktionen bei $T = 0$ geteilt und in Abhängigkeit vom Quotienten $\frac{T}{k}$ dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die bosonische Schwellenfunktion für große $\frac{T}{k}$ linear ansteigt, während die fermionische Schwellenfunktion abfällt und gegen Null geht. Für größere Masseparameter y wird dieses Verhalten zwar verlangsamt, bleibt aber qualitativ erhalten.

Zu erklären sind die Verläufe der Schwellenfunktionen damit, dass mit der Temperatur auch die Matsubara-Frequenzen ansteigen. Dies sorgt dafür, dass alle Terme der Reihe, in der nicht die bosonische Matsubara-Frequenz ω_0 vorkommt, für große $\frac{T}{k}$ vernachlässigbar klein werden. Somit reduziert sich die Matsubara-Reihe, die ja ursprünglich eine weitere Impulsintegration darstellte, bei Bosonen zum Term der nullten Frequenz und bei Fermionen verschwindet sie ganz.

Dies hat zwei Dinge zur Folge: Zum einen tragen bei hohen Temperaturen nur die bosonischen Terme zur Fluss des Potentials bei, während die fermionischen Einflüsse entkoppeln, und zum anderen verschwindet mit der Matsubara-Reihe eine Dimension des Systems, woraus die dimensionale Reduktion an der kritischen Temperatur folgt.

4.3.2. Skalierungslösung am kritischen Punkt

Mithilfe der dimensionalen Reduktion ist es uns nun möglich, das Verhalten des Systems an der kritischen Temperatur mithilfe dimensionslosen Flussgleichung mit $d = 3$ und $T = 0$ zu beschreiben (vgl. [5]). Mit (2.38) erhalten wir also

$$\begin{aligned}\partial_t u_k(\tilde{\sigma}^2) &= -3u_k(\tilde{\sigma}^2) + \tilde{\sigma}^2 u_k'(\tilde{\sigma}^2) \\ &\quad + \frac{1}{12\pi^2}\left[\frac{3}{\sqrt{1+2u_k'(\tilde{\sigma}^2)}} + \frac{1}{\sqrt{1+2u_k'(\sigma^2)+4\tilde{\sigma}^2 u_k''(\tilde{\sigma}^2)}} - \frac{24}{\sqrt{1+g^2\tilde{\sigma}^2}}\right] . \end{aligned} \tag{4.14}$$

Wenn man jetzt $\partial_t u_k(\tilde{\sigma}^2) = 0$ setzt, fordert man Skaleninvarianz des Potentials $u_k(\tilde{\sigma}^2)$. Skaleninvarianz kann man mit Selbstähnlichkeit identifizieren, sodass wir genau dann das Potential des kritischen Punktes erreicht haben, wenn dieses skaleninvariant ist. Dies erklärt sich analog zur kritischen Opaleszenz bei Fluiden, bei der ebenfalls am kritischen Punkt Selbstähnlichkeit bezüglich der flüssigen und gasförmigen Phase auftritt, sodass einfallendes Licht unendlich häufig gebrochen wird und so das Fluid am kritischen Punkt nicht durchdringen kann.

Das Potential des kritischen Punktes bestimmt man nun, indem man $u_k'(0) = 0$ fordert und den Wert $u_k(0)$ dann so justiert, dass die Lösung für alle Felder $\tilde{\sigma}$ existiert. (vgl. [12])

Trägt man so den Anfangswert $u_k(0)$ gegen den Wert des Feldes $\tilde{\sigma}$ auf, bei dem die jeweilige Lösung divergiert, also wieder von einer skaleninvarianten Lösung abweicht, erhält man ein Diagramm mit einem kontinuierlichen Verlauf und einem Delta-Peak, für den das skaleninvariante Potential für alle Felder existiet und folglich den kritischen Punkt angibt (Abbildung 5, [12]).

5. Fazit und Ausblick

In dieser Thesis wurde eine auf der Kollokationsmethode, dem Runge-Kutta-Verfahren und Tschebyschow-Polynomen basierende pseudospektrale Methode zur Lösung der dimensionsbehafteten Flussgleichung des zwei Flavour Quark-Meson-Modells angewendet.

Dabei konnten wir feststellen, dass diese Methode trotz einer sehr einfachen Implementierung dazu fähig ist, gute Ergebnisse zu erzielen. Es konnten bereits mit einer Entwicklungsordnung von $N = 5$ wichtige physikalische Eigenschaften, wie der Verlauf der Position des Minimums, die sich entwickelnde Konvexität des Potentials oder das Verhalten bei hohen Temperaturen, akkurat dargestellt werden. Für großen Skalen k war die Genauigkeit von $N = 5$ bereits mit der der Finiten-Differenzen-Methode vergleichbar, bei einer etwa hundertfach kürzeren Laufzeit. Für die Berechnung des Flusses bei kleinen Skalen konnte die Finite-Differenzen-Methode sogar gar nicht verwendet werden, während die PSM bis Ordnung $N = 11$ sehr gute Ergebnisse liefert.

Durch eine Anpassung der Koeffizienten wäre sicherlich auch eine Reproduktion beziehungsweise eine gute Annäherung an die Literaturwerte für die Pion-Zerfallskonstante f_π oder die kritische Temperatur T_c möglich gewesen. Darüber hinaus war es möglich, von der Lösung unserer Flussgleichung bereits auf das weiterführende Feld der Physik im Bereich der kritischen Temperatur zu schließen.

Abschließend lässt sich sagen, dass es sich bei pseudospektralen Methoden um ein mächtiges Werkzeug der numerischen Mathematik handelt, die fähig sind, komplizierte Differentialgleichungen in kurzer Zeit und mit nur wenig Speicherbedarf (kleine Entwicklungsordnungen) bei gleichzeitig hoher Genauigkeit zu lösen.

Die von uns implementierte pseudospektrale Methode bietet darüber hinaus sogar noch Verbesserungspotential, da sie zunächst nur in einer sehr einfachen Form implementiert wurde. So bietet es sich an, die spektrale Entwicklung nicht nur in einer Dimension sondern in allen durchzuführen. Eine Funktion in Ort und Zeit würde dann beispielsweise durch den Ansatz

$$f(x,t) \approx \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_t} a_{ij} T_i(x) T_j(t) \tag{5.1}$$

entwickelt werden, was sicherlich bei entsprechend gewählten Entwicklungsordnungen durch die exponentielle Konvergenz zu besseren Ergebnissen führt als das Runge-Kutta-Verfahren, das beim Lösen der Flussgleichungen für höhere Ordnungen bereits versagt hat. Darüber hinaus kann man noch weiter Rechenzeit und Speicherplatz sparen, indem man die Funktion nicht in einem Durchgang auf dem gesamten Intervall entwickelt, sondern sukzessive in „Streifen“. Man löst also das Problem in Ort- und Zeit auf einem kleineren x und/oder t Intervall mit kleinerer Ordnung und übergibt dann die erhaltenen Funktionswerte am Rand als Randbedingungen an die anliegenden Intervalle.

Diese verbesserten Methode kann man weiterführend dann auch auf weitere Fragestellungen aus der QCD anwenden, wie beispielsweise die Beschreibung von Neutronensternen, vom Quark-Gluon-Plasma oder eben auch, auf diese Thesis aufbauend, auf die kritische Physik.

A. Weitere numerische Methoden

Neben den pseudospektralen Methoden wurden in dieser Thesis auch zwei numerische Standardverfahren verwendet. Das *Runge-Kutta-Verfahren* diente uns als Zeitintegrator für die Koeffizienten der Tschebyschow-Entwicklung und die *Finite-Differenzen-Methode* wurde als bewährtes Mittel zur Lösung von Flussgleichungen als Referenz für die PSM verwendet. An dieser Stelle soll eine kurze Ausführung der Eigenschaften der beiden Verfahren stattfinden.

A.1. Runge-Kutta-Verfahren

Das Runge-Kutta-Verfahren (RK) ist eine numerische Methode zur Lösung eines Systems von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung mit gegebenen Anfangswerten,

$$\dot{\vec{x}}(t) = \vec{f}\,(\vec{x}(t), t) \ , \quad \vec{x}(t_0) = \vec{x}_0 \ . \tag{A.1}$$

Die Anwendung ist jedoch nicht auf Systeme erster Ordnung beschränkt, da sich jede gewöhnliche Differentialgleichung höherer Ordnung auf ein System aus Gleichungen erster Ordnung zurückführen lässt.

Theoretisch kann man die exakte Lösung von (A.1) dadurch erhalten, dass man das System von der Anfangszeit bis zur gewünschten End-Zeit integriert. Da dies jedoch meist nicht ohne Weiteres, beziehungsweise nur unter großem Aufwand, möglich ist, wird die Lösung approximiert. Die Approximation beruht darauf, dass die Integration für jede der Differentialgleichungen nur schrittweise in einem Intervall $[t, t+h]$ stattfindet und durch Quadraturformeln genähert wird,

$$\begin{aligned} x_n(t+h) &= x_n(t) + \int_t^{t+h} \dot{x}_n(u)\ \mathrm{d}u = x_n(t) + \int_t^{t+h} f_n\left(\vec{x}(u), u\right)\ \mathrm{d}u \\ &= x_n(t) + \sum_{i=1}^{s} w_i f_n\left(\vec{x}(u_i), u_i\right) \ , \end{aligned} \tag{A.2}$$

wobei es sich bei w_i um von der Quadratur abhängige Gewichtungsfaktoren handelt. Somit kann das System durch wiederholte Anwendung dieses Schrittes bis zu einer beliebigen Zeit evolviert werden. Je nachdem, wie viele Punkte zur Auswertung eines Schrittes benötigt werden, spricht man von einem s-stufigen Runge-Kutta-Verfahren. Am häufigsten verwendet, wird das vierstufige RK-Verfahren, wir benutzen jedoch den achtstufigen Dormand-Prince-Algorithmus (RK8PD).

Darüber hinaus verwenden wir keine feste sondern eine adaptive Schrittweite. Diese schätzt bei jedem durchgeführten Schritt die Abweichung von der exakten Lösung ab und verringert die Größe von h, wenn eine zuvor festgelegte Genauigkeit unterschritten wird. Man kann sich leicht vorstellen, dass eine kleine Schrittweite durch die höhere Anzahl an Auswertungen zwar einen positiven Einfluss auf die Genauigkeit hat, jedoch gleichzeitig auch die Rechenzeit erhöht. Die adaptive Schrittweite erlaubt also bei festgelegter Genauigkeit die schnellstmögliche

Laufzeit. Die Schrittweitensteuerung geschieht beispielsweise durch Berechnung der Abweichung, die die Lösung des nächsten Schrittes von der mit einer halbierten Schrittweite besitzt (vgl. [8]).

Die Fehlerabschätzung des von uns verwendeten Runge-Kutta-Verfahrens ergibt sich damit aus der festgelegten Genauigkeit für die adaptive Schrittweitensteuerung. In dieser Thesis wurde eine relative Genauigkeit von 10^{-7} für jeden Schritt verwendet. Da sich diese Genauigkeit jedoch nur auf jeden einzelnen Schritt bezieht, ist eine Abweichung von der exakten Lösung bei großer Schrittanzahl nicht auszuschließen.

A.1.1. Beispiel: Gedämpfter harmonischer Oszillator

Als Anwendungsbeispiel betrachten wir uns den eindimensionalen gedämpften harmonischen Oszillator

$$\ddot{x}(t) + 2\gamma\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = 0 \ . \tag{A.3}$$

Dabei handelt es sich um eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung, die wir zunächst auf ein System von DGLn erster Ordnung zurückführen müssen, bevor wir das RK-Verfahren anwenden können:

$$\dot{x}(t) = p(t) \tag{A.4}$$

$$\dot{p}(t) = -\omega_0^2 x(t) - 2\gamma p(t) \tag{A.5}$$

Mit den beispielhaften Werten $2\gamma = 2$, $\omega_0^2 = 50$, $t_0 = 0$ und $(x_0, p_0) = (1, 0)$ ergibt sich in einer Matrix-Vektor-Schreibweise

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -50 & -2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} \ , \quad \begin{pmatrix} x(0) \\ p(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \ . \tag{A.6}$$

mit der analytischen Lösung

$$x(t) = \frac{1}{7}e^{-t}\left(\sin(7t) + 7\cos(7t)\right) \ . \tag{A.7}$$

In Abbildung 8 sind die numerischen Lösungen für $x(t)$ und $p(t)$ gegen die analytischen Lösungen aufgetragen.

A.2. Finite-Differenzen-Methode

Die Finite-Differenzen-Methoden sind eine Klasse numerischer Standardverfahren zur Lösung von Differentialgleichungen, die darauf basiert, die infinitesimalen Differenzen der auftretenden Ableitungen durch endliche (finite) Differenzen zu approximieren.

Bereits aus der Herleitung der Ableitung durch den Differenzenquotienten ist die Relation

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \tag{A.8}$$

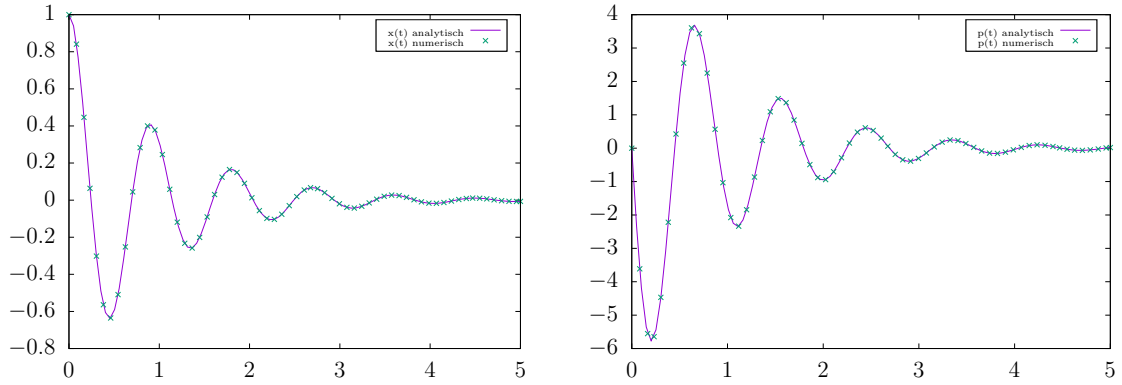

Abbildung 8: Gedämpfter harmonischer Oszillator mit Runge-Kutta: Vergleich der numerischen mit der analytischen Lösung.

bekannt. Eine bessere Abschätzung kann man durch die Taylor-Entwicklung einer Funktion erhalten. Mit

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \mathcal{O}(h^2) \text{ und } f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \mathcal{O}(h^2) \tag{A.9}$$

ergibt sich beispielsweise

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \ . \tag{A.10}$$

Durch diese Vorgehensweise kann man sich so prinzipiell jede beliebige Ableitung mit beliebiger Genauigkeit verschaffen, für die Randpunkte auch links- bzw. rechtsseitige Differenzen. Man benötigt für höhere Ableitungen und höhere Genauigkeiten jedoch immer mehr Auswertungspunkte. Für Auswahl und Gewichtung dieser Punkte existieren explizite Algorithmen (vgl. [13]). Bei äquidistanten Punkten ergibt sich Fehlerabschätzung mithilfe der Landau-Notation direkt aus der Taylor-Entwicklung zu Potenzen von h.

In dieser Thesis werden die finiten Differenzen stets dazu genutzt, Differentialgleichungen in zwei Dimensionen wie beispielsweise die Flussgleichung zu lösen. Dazu wird die Funktion in x-Richtung diskretisiert, um Ableitungen durch finite Differenzen der diskretiesierten Punkte auszudrücken, und anschließend in t-Richtung mithilfe des zuvor vorgestellten Runge-Kutta-Verfahrens gelöst. Betrachten wir uns dazu beispielsweise das Problem

$$\partial_t u(x,t) = f(u, u', u'', \ldots, t) \ , \quad x \in [a,b] \tag{A.11}$$

mit der Anfangsfunktion $g(x) := u(x, t_0)$. Die Diskretisierung an N Punkten x_i ergibt ein System von N Funktionen (mit $x_1 = a$ und $x_N = b$),

$$u_i(t) := u(x_i, t) \text{ mit } u_{i+1}(t) := u(x_i + h, t), \ i = 1, \ldots, N \ . \tag{A.12}$$

Hierauf können wir nun die symmetrischen Differenzenquotienten anwenden,

$$u'(x_i, t) \approx \frac{u_{i+1}(t) - u_{i-1}(t)}{2h} \ , \quad u''(x_i, t) \approx \frac{u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)}{h^2} \ , \quad \ldots \ , \tag{A.13}$$

wodurch die Differentialgleichung nur noch von den Punkten $u_i(t)$ abhängt. Wie bereits angesprochen müssen wir für die Randpunkte einseitige Formeln verwenden, um nicht aus dem Entwicklungsintervall der Funktion zu geraten. Wir erhalten also ein System neuer Differentialgleichungen der Form

$$\partial_t u_i(t) = f(u_1(t), \ldots, u_N(t), t) \ , \quad u_i(t_0) = g(x_i) \ , \quad i = 1, \ldots, N \ , \tag{A.14}$$

welches von unserem Runge-Kutta-Verfahren gelöst werden kann.

A.2.1. Beispiel: Wärmeleitungsgleichung

Als Beispiel diene uns hier erneut die eindimensionale Wärmeleitungslgleichung

$$\partial_t u(x,t) = \partial_x^2 u(x,t) \tag{A.15}$$

mit der Anfangsfunktion (3.54) und der bekannten analytischen Lösung (3.53). Durch Ersetzen der zweiten Ableitung durch den Differenzenquotienten mit Genauigkeit 2, also mit Fehler $\mathcal{O}(h^2)$, erhalten wir das Differentialgleichungssystem

$$\partial_t u_i(t) = \frac{u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)}{h^2} \ . \tag{A.16}$$

In Abbildung 9 ist die mit RK erstellte numerische Lösung gegen die analytischen Funktionen für verschiedene Zeiten aufgetragen.

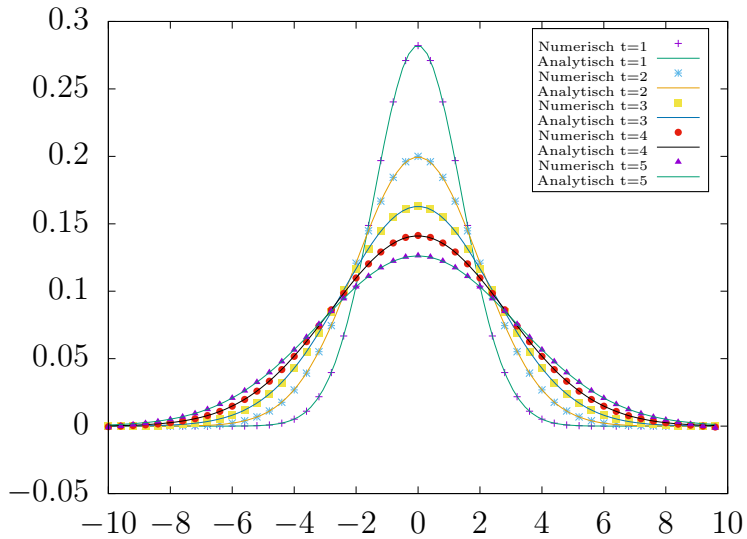

Abbildung 9: Wärmeleitungsgleichung mit finiten Differenzen: Numerische und analytische Lösung zu verschiedenen Zeiten für $N =$ Punkte auf dem Intervall $[-10, 10]$.

B. Literatur

[1] Wipf, A.: *Statistical Approach to Quantum Field Theory. An Introduction.* Springer, 2013. – 89,257–262 S.

[2] Wetterich, C.: *Quantum Field Theory I.* Version: 2006. `https://www.thphys.uni-heidelberg.de/~duo/skripten/wetteric_QFT1.pdf`. Vorlesungsskript. – 35 S.

[3] Borchardt, J. ; Knorr, B.: Solving functional flow equations with pseudo-spectral methods. In: *Phys. Rev. D 94, 025027* (2016), S. 2–3. – arXiv:1603.06726v1

[4] Schaefer, B.-J. ; Wambach, J.: Renormalization Group Approach towards the QCD Phase Diagram. In: *Phys.Part.Nucl.39:1025-1032* (2006), S. 3–10. – arXiv:hep-ph/0611191v1

[5] Bohr, O.: *Renormierungsgruppen-Flussgleichung und der chirale Phasenübergang*, Technische Universität Darmstadt, dissertation, 2001. `http://tuprints.ulb.tu-darmstadt.de/epda/000142/thesis.pdf`. – 8,10–12,36,39,52–54,67 S.

[6] Boyd, J. P.: *Chebyshev and Fourier Spectral Methods. Second Edition.* Dover Publications, 2000. – 4–5,27,47,497–498 S.

[7] Shizgal, B.: *Spectral Methods in Chemistry and Physics. Applications to Kinetic Theory and Quantum Mechanics.* Springer, 2015. – 16–17,67–68 S.

[8] Press, W. H. ; Teukolsky, S. A. ; Vetterling, W. T. ; Flannery, B. P.: *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing. Second Edition.* Cambridge University Press, 2002. – 147,156,715 S.

[9] Borchardt, J. ; Knorr, B.: Global solutions of functional fixed point equations via pseudo-spectral methods. In: *Phys. Rev. D 91, 105011* (2015), S. 2. – arXiv:1502.07511v2

[10] Schaefer, B.-J. ; Pirner, H.-J.: Renormalization Group Flow and Equation of State of Quarks and Mesons. In: *Nucl.Phys. A660 (1999)* (1999), S. 11,31. – arXiv:nucl-th/9903003v1

[11] Schaefer, B.-J. ; Bohr, O. ; Wambach, J.: Renormalization Group Flow Equations and the Phase Transition in O(N)-models. In: *Int.J.Mod.Phys. A16 (2001) 3823-3852* (2000), S. 12,28. – arXiv:hep-ph/0007098v11

[12] Schaefer, B.-J. ; Bohr, O. ; Wambach, J.: Finite-Temperature Gluon Condensate with Renormalization Group Flow Equations. In: *Phys.Rev. D65 (2002) 105008* (2002), S. 12–13. – arXiv:hep-th/0112087v2

[13] Fornberg, Bengt: Calculation of Weights in Finite Difference Formulas. In: *SIAM Rev., 40(3), 685–691* (1998)

In dieser Thesis wurde darüber hinaus folgende Software samt Dokumentation verwendet: Die *GNU Scientific Library* (GSL) für C++ zur Lösung der Differentialgleichungen, *Gnuplot* zur Erstellung der Abbildungen und *Wolfram Mathematica 11* für Bestimmung der Minima der Flussgleichung und die Berechnung der Punkte für Abbildung 7.

Danksagungen

An erster Stelle gilt mein Dank Herrn PD Dr. Bernd-Jochen Schaefer für die Betreuung durch regelmäßige Treffen, per E-Mail und per Skype, für die Bereitstellung des Themas und für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe. Darüber hinaus möchte ich Herrn Dr. Gernot Eichmann herzlich für die Übernahme der Zweitkorrektur danken.

Ein besonderes Dankeschön geht an Henrik, der mit seiner Korrespondenz diese Thesis ungemein bereichert hat. Vielen Dank auch an Tom, der immer mentalen Beistand geleistet und sich auch als Nichtphysiker getraut hat, diese Arbeit zumindest auf textliche Sicherheit Korrektur zu lesen.

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.

Gießen, den 16. September 2016 _____