

Lösen von nichtperturbativen Flussgleichungen mit (pseudo-) spektralen Methoden

Solving non-perturbative flow equations with (pseudo-) spectral methods

Bachelor-Thesis

eingereicht von

Henrik Hess

am 13.09.2016

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:

Prof. Dr. Dr. Wolfgang Cassing Institut für Theoretische Physik Justus-Liebig-Universität Giessen

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung						
2	Grundlagen						
	2.1	Flussgleichung des Quark-Meson-Modells					
		2.1.1	Wetterich-Fluss	7			
		2.1.2	Die Flussgleichung als partielle Differentialgleichung	9			
		2.1.3	Die Flussgleichung als dimensionslose partielle Differentialgleichung	12			
		2.1.4	Vakuumfluss	13			
	2.2	Nume	rische Verfahren	13			
		2.2.1	Klassisches Runge-Kutta-Verfahren	13			
		2.2.2	Kollokationsmethode	15			
		2.2.3	Lösungsmethoden für partielle Differentialgleichungen $\ . \ . \ . \ .$	24			
3	Lösung des dimensionsbehafteten Flusses 3!						
	3.1 Lösung des Vakuumflusses						
	3.2	Variation der Temperatur					
	3.3	.3 Variation des chemischen Potentials					
	3.4	Vergle	eich: Lösung des Vakuumflusses mit der FD-Methode	42			
4	Fazit und Ausblick						

Abstract

In this work we construct a method for solving partial differential equations in two dimensions, called (pseudo-) spectral method (PSM). The PSM is based on Runge-Kutta methods and collocation methods. This constructed PSM has its appearance in solving a non-perturbative flow equation.

The flow equation is representing the equation of state of quarks and mesons with two flavours at different scales k of the linear σ model in the chiral limit. We will investigate the performance of the PSM for small-sized scales k and different parameters of the initial potential of the flow equation so one can find a local minimum which is representing the pion decay constant.

1 Einleitung

In dieser Arbeit soll es um die Konstruktion einer (pseudo-) spektralen Methode auf Basis des Runge-Kutta-Verfahrens und der Kollokationsmethode gehen, um partielle Differentialgleichungen in zwei Dimensionen zu lösen. Diese Konstruktion soll dann zur Lösung einer nichtperturbativen Flussgleichung angewandt werden, wobei sie vorab an einfachen Problemen ausgiebig erläutert wird.

Nichtperturbativ heißt in diesem Zusammenhang, dass die behandelte Flussgleichung ohne Näherungsverfahren, wie beispielsweise der quantenmechanischen Störungsrechnung, aufgestellt wird. In einer Zeit vor Hochleistungsrechnern, die heute praktisch für jeden zugänglich sind, waren perturbative Ansätze der einzige Weg komplexere Probleme, wie z.B. der Quantenmechanik oder Festkörperphysik, zu lösen. Das Konzept der Flussgleichung an sich ist ein relativ neuer Ansatz der modernen Physik, welches erst mit der Quantenfeldtheorie und insbesondere mit der Renormierungsgruppentheorie entwickelt werden konnte.

Zunächst ist die Idee der Renormierungsgruppentheorie, dass von einem bestimmten Anfangszustand bei einer bestimmten Längenskala auf einen Endzustand bei einer anderen Längenskala geschlossen werden kann. Unter anderem ist es damit möglich, von einer Anfangsbedingung mit mikroskopischer Längenskala auf einen Endzustand mit makroskopischer Längenskala zu schließen. Das heißt es ist möglich, von einem mikroskopischen System, in welchem alle physikalischen Gesetze bekannt sein sollen, auf ein anderes System mit größeren Skalen zu schließen, in welchem zwangsläufig die physikalischen Gesetzmäßigkeiten zunehmend verschwimmen (*Kenneth Willsons* Konzept der Renormalisierungsgruppe). Zu nennen wäre dabei beispielsweise der Schluss von einem Atom auf einen ganzen Festkörper.

Flussgleichungen finden darüber hinaus unter anderem in der Allgemeinen Relativitätstheorie oder in der Astrophysik ihren Einsatz, um nur einige Anwendungsgebiete zu nennen.

In dieser Arbeit wird jedoch die (Pseudo-) Spektralmethode Anwendung auf eine Flussgleichung der Quantenchromodynamik finden.

Es wird versucht eine Flussgleichung des Quark-Meson-Modells mit zwei Flavours im linearen σ -Modell im chiralen Limes, die nachfolgend das thermodynamische Potential des Systems bei unterschiedlichen Skalen beschreibt, mit den aufgestellten Methoden zu lösen.

In den Grundlagen wird es zuerst darum gehen, das Konzept der Flussgleichungen über den sog. *Wetterich*-Fluss weiter zu erläutern. Danach wird die Flussgleichung des Quark-Meson-Modells vorgestellt und analysiert.

Danach wird die Numerik zur Implementierung der genannten (Pseudo-) Spektralmethode vorgestellt.

Den Abschluss bildet die Anwendung der gefundenen Methodik zur Lösung der Flussgleichung.

2 Grundlagen

2.1 Flussgleichung des Quark-Meson-Modells

Zu Beginn dieses Kapitels wird das Konzept des Wetterich-Flusses erläutert, welches grundlegend auf [1] beruhend, vollzogen wird. Danach wird die zur Verfügung gestellte Flussgleichung des Quark-Meson-Modells [2][3], auf dessen Herleitung über den Wetterich-Fluss verzichtet wird, als partielle Differentialgleichung umgeschrieben [4][5]. Daraufhin wird eine Grenzfallbetrachtung für kleine Temperaturen und keinem chemischen Potential getätigt.

2.1.1 Wetterich-Fluss

Um einen Zugang zum Wetterich-Fluss zu bekommen, kann man den in der Einleitung erwähnten Schluss von kleinen Skalen zu großen Skalen über das Konzept der klassischen Wirkung ansetzen. So ist das Ziel, dass man beispielsweise von der bekannten echten Wirkung S eines mikroskopischen Systems über die effektive Wirkung bei anderen Längenskalen Γ_k auf die effektive Wirkung Γ eines gesamten makroskopischen Systems schließen kann. Der Übergang von der echten Wirkung zur effektiven Wirkung

$$S = \Gamma_{k=\Lambda} \to \Gamma_{k=0} = \Gamma \tag{2.1}$$

kann als Fluss im jeweiligen Theorieraum bezeichnet werden. Λ bezeichnet nachfolgend den sog. UV-Cutoff, hier also die kleinstmögliche Längenskala.

Die Kombination der Renormalisierungsgruppentheorie mit der funktionalen Quantenfeldtheorie (funktionale Renormierungsgruppentheorie, kurz fRG) führt zum Ansatz der Herleitung des Wetterich-Flusses, also der Herleitung der effektiven Wirkung Γ_k .

Am Beginn steht die Wirkung, wie sie auch schon in der klassischen Mechanik definiert worden ist, über den implizit zeitabhängigen Lagrangian

$$S[\phi] = \int dt \ L(\phi, \partial_{\mu}\phi)$$
(2.2)

mit dem Unterschied, dass hier der Lagrangian nicht mehr von generalisierten Koordinaten und deren zeitlichen Ableitungen abhängt, sondern, wie es die QFT verlangt, einem Skalarfeld ϕ und dessen Ableitung $\partial_{\mu}\phi$. Entsprechend im 4-dim. Minkowski-Raum über die Lagrange-Dichte mit

$$S[\phi] = \int d^4x \, \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi) \,. \tag{2.3}$$

Es wird aber zunächst der allgemeinene Fall in d Dimensionen betrachtet, sodass sich

$$S[\phi] = \int \mathrm{d}^d x \,\mathcal{L} \tag{2.4}$$

ergibt.

Die Wirkung mit einer äußeren Quelle j ergibt sich durch

$$S[\phi, j] = S[\phi] + \int d^d x \ j \cdot \phi = S[\phi] + (j, \phi) \ , \tag{2.5}$$

sodass sich die *n*-Punkte-Korrelationsfunktion (ähnlich der Zustandssumme aus der statistischen Physik/Thermodynamik [6])

$$Z[j] = \int \mathscr{D}\phi \ e^{S[\phi] + (j,\phi)}$$
(2.6)

ergibt. Durch das logarithmieren von Z[j] wird das Schwinger-Funktional

$$W[j] = \log Z[j] \tag{2.7}$$

erzeugt (ähnlich zur freien Energie oder dem großkanonischen Potential [6]). Eine Legendre-Transformation liefert dann die effektive Wirkung

$$\Gamma = j \cdot \frac{\delta W[j]}{\delta j(x)} - W[j]$$

$$\Gamma[\varphi] = (j, \varphi) - W[j]$$
(2.8)

mit der Funktionalableitung $\varphi = \frac{\delta W[j]}{\delta j(x)}$.

Um nun die Skalenabhängigkeit ins Spiel zu bringen, wird ein IR-Cutoff Term $\Delta S_k[\phi]$ eingeführt, der die Wirkung weiter modifiziert, sodass sich eine skalenabhängige Korrelationsfunktion

$$Z_k[j] = \int \mathscr{D}\phi \ e^{S[\phi] + (j,\phi) + \Delta S_k[\phi]}$$
(2.9)

ergibt.

Der IR-Cutoff Term wird dabei über eine impulsabhängige Masse definiert, zusammen mit einer von System zu System unterschiedlich zu wählenden Regulatorfunktion $R_k(p)$

$$\Delta S_k[\phi] = \frac{1}{2} \int \frac{\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d} \,\phi^*(p) R_k(p) \phi(p) \,, \qquad (2.10)$$

welches eine Fourier-Transformation in den Impulsraum darstellt. Die Regulatorfunktion $R_k(p)$ erfüllt dabei folgende Eigenschaften:

- $R_k(p) \to 0$ wenn p fix und $k \to 0$ also $\Gamma_{k\to 0} = \Gamma$
- $R_k(p) \to \infty$ wenn $k \to \Lambda$ also $\Gamma_{k \to \Lambda} = S$
- $R_k(p) > 0$ wenn $p \to 0$ für die IR-Regularisierung

Die neue effektive Wirkung ergibt sich dann über das modifizierte Schwinger-Funktional

$$W_k[j] = \log Z_k[j] \tag{2.11}$$

über eine abgewandelte Art von Legendre-Transformation durch

$$\Gamma_k[\phi] = (j,\varphi) - W_k[j] - \Delta S_k[\varphi] . \qquad (2.12)$$

Dabei muss für $k \to 0$ über die Regulatorfunktion der letzte Term verschwinden, sodass am Ende wieder (2.8) steht.

Nun wird die effektive Wirkung nach der Skalenabhängigkeit differenziert, sodass sich

$$\partial_k \Gamma_k = \partial_k ((j, \varphi) - W_k[j] - \Delta S_k[\varphi])$$
(2.13)

ergibt.

Ausgeschrieben, unter Beachtung der speziellen Legendre-Transformation, also

$$\partial_k \Gamma_k = \int \mathrm{d}^d x \, \partial_k j(x) \varphi(x) - \partial_k W_k[j] - \int \frac{\partial W[j(x)]}{\partial j(x)} \partial_k j(x) - \partial_k \Delta S_k[\varphi] \,. \tag{2.14}$$

Dabei wirkt die Parameterableitung nach k im zweiten Term direkt auf den Ausdruck $W_k[j]$ sowie im dritten Term auf das Argument, was sich durch die Kettenregel verdeutlicht, sodass sich im weiteren Sinne wieder ein Skalarprodukt ergibt. Mit (2.8) streichen sich der erste und dritte Term weg, sodass am Ende

$$\partial_k \Gamma_k = -\partial_k W_k[j] - \partial_k \Delta S_k[\varphi]$$

$$\partial_k \Gamma_k = -\partial_k W_k[j] - \frac{1}{2} \int d^d x \, d^d y \, \phi(x) \partial_k R_k(x, y) \phi(y)$$
(2.15)

verbleibt. Hierbei wird die Regulatorfunktion in den Ortsraum Fourier-rücktransformiert. Für das skalenabhängige abgeleitete *Schwinger*-Funktional folgt am Ende über (2.9)

$$\partial_k W_k[j] = \partial_k \log Z_k[j] = \frac{1}{Z_k[j]} \int \mathscr{D}\phi \ \left(-\partial_k \Delta S_k[\phi]\right) \cdot e^{S[\phi] + (j,\phi) + \Delta S_k[\phi]}$$
$$= \frac{1}{Z_k[j]} \int \mathscr{D}\phi \ \left(-\frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \ \mathrm{d}^d y \ \phi(x) \partial_k R_k(x,y) \phi(y)\right) \cdot e^{S[\phi] + (j,\phi) + \Delta S_k[\phi]} \ . \tag{2.16}$$

Eine erste Integration zusammen mit der e-Funktion liefert wieder $Z_k[j]$, sodass lediglich eine Integration über den Cutoff-Term mit

$$\partial_k W_k[j] = -\frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \, \partial_k R_k(x, y) \int \mathscr{D}\phi \, \phi(x)\phi(y) \cdot e^{S[\phi] + (j,\phi) + \Delta S_k[\phi]}$$
$$= -\frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \, \partial_k R_k(x, y)(\phi(x), \phi(y))_k \tag{2.17}$$

verbleibt.

Führt man nun den zusammenhängenden Zweipunkte-Propagator

$$G_k^{(2)}(x,y) = (\phi(x),\phi(y))_k - (\phi(x)\phi(y)) = \frac{1}{\Gamma_k^{(2)} - R_k}$$
(2.18)

ein so führt dies durch Einsetzen in (2.15) zu

$$\partial_k \Gamma_k = \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \, \partial_k R_k(x, y) (\phi(x), \phi(y))_k - \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \, \phi(x) \partial_k R_k(x, y) \phi(y)$$
$$= \frac{1}{2} \int \mathrm{d}^d x \, \mathrm{d}^d y \, G_k^{(2)}(x, y) \partial_k R_k(x, y) \,. \tag{2.19}$$

Es bleibt am Ende mit (2.18) der Wetterich-Fluss

$$\partial_k \Gamma_k = \frac{1}{2} \operatorname{STr} \left(\frac{\partial_k R_k}{\Gamma_k^{(2)} - R_k} \right) .$$
 (2.20)

Die Superspur STr sagt aus, dass sowohl über kontinuierliche Variablen integriert als auch über diskrete Variablen summiert wird.

Der Wetterich-Fluss ist damit eine Funktional-Integro-Differentialgleichung.

Ein Resultat aus dem O(N)-Modell in d Dimensionen für das Quark-Meson-Modell liefert über den Wetterich-Fluss unter anderem das Ergebnis, welches auch in Kap. (2.1.3) aufgeführt wird.

2.1.2 Die Flussgleichung als partielle Differentialgleichung

Nun wird die zur Verfügung gestellte Flussgleichung des Quark-Meson-Modells vorgestellt und umgeformt, sodass am Ende eine partielle Differentialgleichung verbleibt. Dann wird das Hauptaugenmerk auf die numerischen Methoden geworfen, welches das Hauptziel ist. Die Flussgleichung ist durch

$$\partial_t \Omega(\sigma^2) = \frac{k^5}{12\pi^2} \left[\frac{3}{E_\pi(\sigma^2)} \coth\left(\frac{E_\pi(\sigma^2)}{2T}\right) + \frac{1}{E_\sigma(\sigma^2)} \coth\left(\frac{E_\sigma(\sigma^2)}{2T}\right) - \frac{2\nu_q}{E_q(\sigma^2)} \left\{ 1 - n_q(\sigma^2) - n_{\bar{q}}(\sigma^2) \right\} \right]$$
(2.21)

gegeben [2] mit $t = \log\left(\frac{k}{\Lambda}\right)$ und $\partial_t = k\partial_k$, wobei E_i durch die Energie-Impuls-Beziehung des zum linearen σ -Modell passenden skalaren, spinlosen σ -Mesons mit gerader Parität und des pseudoskalaren, spinlosen Pions mit ungerader Parität gegeben ist.

T stellt die Temperatur dar und n_i die jeweiligen mittleren fermionischen Besetzungszahlen der Quarks und Antiquarks.

 ν_q ist ein dimensions
loser Entartungsgrad, da sich die Quarks durch Colour, Flavour und Teilchen oder Antite
ilchen unterscheiden.

Wir nehmen ein 2-Flavour-3-Colour-Modell der leichtesten Quarks (up, down) an, sodass $\nu_q = 2N_f N_c = 12.$

g ist eine dimensionslose Konstante, hier mit g = 4.2.

Die Flussgleichung ermöglicht es von Quarks bei kleinen Skalen $(k = \Lambda)$ auf Mesonen bei größeren Skalen $(k \ll \Lambda)$ schließen zu können.

Beim späteren Lösen der Flussgleichung bei verschiedenen Skalen k wird dies zunächst im chiralen Limes getan (gerades Anfangspotential) [2][3]. Bei kleinen Skalen wird dann die gelöste Flussgleichung (IR-Potential) mit einer expliziten Symmetriebrechung c versehen [3], sodass z.B. das Potential im Vakuum (siehe: Kap. 3.1: Lösung des Vakuumflusses) ein Minimum bei der Masse des Pions aufweisen sollte [2][3][7].

Weiteres Umformen mit diesen Informationen macht aus (2.21)

$$\partial_{t}\Omega(\sigma^{2}) = \frac{k^{5}}{12\pi^{2}} \left[\frac{3}{E_{\pi}(\sigma^{2})} \coth\left(\frac{E_{\pi}(\sigma^{2})}{2T}\right) + \frac{1}{E_{\sigma}(\sigma^{2})} \coth\left(\frac{E_{\sigma}(\sigma^{2})}{2T}\right) - \frac{2\nu_{q}}{E_{q}(\sigma^{2})} \left\{ 1 - n_{q}(\sigma^{2}) - n_{\bar{q}}(\sigma^{2}) \right\} \right]$$

$$= \frac{k^{5}}{12\pi^{2}} \left[\frac{3}{E_{\pi}(\sigma^{2})} \coth\left(\frac{E_{\pi}(\sigma^{2})}{2T}\right) + \frac{1}{E_{\sigma}(\sigma^{2})} \coth\left(\frac{E_{\sigma}(\sigma^{2})}{2T}\right) - \frac{24}{E_{q}(\sigma^{2})} \left\{ 1 - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{q}(\sigma^{2}) - \mu_{-}}{T}\right) + 1} - \frac{1}{\exp\left(\frac{E_{q}(\sigma^{2}) - \mu_{+}}{T}\right) + 1} \right\} \right], \qquad (2.22)$$

wobei die geschweifte Klammer durch geschicktes Umformen den Ausdruck

$$1 - \frac{1}{\exp(x) + 1} - \frac{1}{\exp(y) + 1} = \frac{1}{2} \left(\tanh\left(\frac{x}{2}\right) + \tanh\left(\frac{y}{2}\right) \right)$$

annimmt.

Es gilt zu erwähnen, dass für die Dimension d (Potenz in Energie
einheiten) der jeweiligen vorkommenden Größen gilt

- $\left[\partial_t \Omega(\sigma^2)\right] = d = 4$
- $[\sigma^2] = d 2 = 2$
- $[k] = [E_i] = [T] = [\mu_i] = d 3 = 1$

Nun ersetzen wir in einem ersten Schritt die Energien durch die jeweiligen Ausdrücke in Abhängigkeit von $\sigma^2,$ also

$$\partial_{t}\Omega(\sigma^{2}) = \frac{k^{5}}{12\pi^{2}} \left[\frac{3}{\sqrt{k^{2} + 2\Omega'(\sigma^{2})}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^{2} + 2\Omega'(\sigma^{2})}}{2T}\right) + \frac{1}{\sqrt{k^{2} + 2\Omega'(\sigma^{2}) + 4\sigma^{2}\Omega''(\sigma^{2})}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^{2} + 2\Omega'(\sigma^{2}) + 4\sigma^{2}\Omega''(\sigma^{2})}}{2T}\right) - \frac{12}{\sqrt{k^{2} + g^{2}\sigma^{2}}} \left\{ \tanh\left(\frac{\sqrt{k^{2} + g^{2}\sigma^{2}} - \mu_{-}}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\sqrt{k^{2} + g^{2}\sigma^{2}} - \mu_{+}}{2T}\right) \right\} \right]$$
(2.23)

 mit

•
$$E_{\pi} = \sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2)}$$

•
$$E_{\sigma} = \sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2) + 4\sigma^2 \Omega''(\sigma^2)}$$

•
$$E_q = \sqrt{k^2 + g^2 \sigma^2}$$

Um das Problem auf ein chemisches Potential μ zurückzuführen, wird die Tatsache verwendet, dass bei unserem Modell die Gesamtteilchenzahl der Quarks erhalten sein muss [6]. Demnach gilt für das gesamte chemische Potential der Quarks und Antiquarks

$$0 = \mu_{+} + \mu_{-}$$

also

$$\mu = \mu_{-} = -\mu_{+} . \tag{2.24}$$

Der Ausdruck, mit welchem wir arbeiten wollen, sieht demnach so aus:

$$\partial_{t}\Omega(\sigma^{2}) = \frac{k^{5}}{12\pi^{2}} \left[\frac{3}{\sqrt{k^{2} + 2\Omega'(\sigma^{2})}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^{2} + 2\Omega'(\sigma^{2})}}{2T}\right) + \frac{1}{\sqrt{k^{2} + 2\Omega'(\sigma^{2}) + 4\sigma^{2}\Omega''(\sigma^{2})}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^{2} + 2\Omega'(\sigma^{2}) + 4\sigma^{2}\Omega''(\sigma^{2})}}{2T}\right) - \frac{12}{\sqrt{k^{2} + g^{2}\sigma^{2}}} \left\{ \tanh\left(\frac{\sqrt{k^{2} + g^{2}\sigma^{2}} - \mu}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\sqrt{k^{2} + g^{2}\sigma^{2}} + \mu}{2T}\right) \right\} \right]$$
(2.25)

Insbesondere mit $\partial_t = k \cdot \partial_k$ über $t = \log\left(\frac{k}{\Lambda}\right)$ folgt

$$\partial_k \Omega_k(\sigma^2) = \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2)}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2)}}{2T}\right) + \frac{1}{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2) + 4\sigma^2 \Omega''(\sigma^2)}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2) + 4\sigma^2 \Omega''(\sigma^2)}}{2T}\right) - \frac{12}{\sqrt{k^2 + g^2 \sigma^2}} \left\{ \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2 + g^2 \sigma^2} - \mu}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2 + g^2 \sigma^2} + \mu}{2T}\right) \right\} \right]. \quad (2.26)$$

2.1.3 Die Flussgleichung als dimensionslose partielle Differentialgleichung

Als nächstes wird die dimensionsbehaftete Flussgleichung aus (2.25) als dimensionslose umgeschrieben. Obwohl in dieser Arbeit ausschließlich mit der dimensionsbehafteten Flussgleichung gearbeitet wird, lohnt es sich auch dies zu betrachten.

Dimensions
los heißt, dass die Flussgleichung selbst von einer dimensions
losen Größe $\tilde{\sigma}$ abhängen soll mit

$$\sigma^2 = k^{d-2} \tilde{\sigma}^2 \tag{2.27}$$

mitd=4 also

$$\sigma^2 = k^2 \tilde{\sigma}^2 \,. \tag{2.28}$$

Des Weiteren werden die Ableitungen von $\Omega(\sigma^2)$ durch

$$\Omega'(\sigma^2) = k^2 u'(\tilde{\sigma}^2) \tag{2.29}$$

und

$$\Omega''(\sigma^2) = u''(\tilde{\sigma}^2) \tag{2.30}$$

ersetzt durch

$$\Omega(\sigma^2) = k^4 u(\tilde{\sigma}^2) \; ,$$

wobe
i \boldsymbol{u} demnach dimensions
los ist.

Damit nimmt (2.25) die Form

$$\begin{split} \partial_t \left[k^4 u(\tilde{\sigma}) \right] &= \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{1+2u'}} \coth\left(\frac{k}{2T}\sqrt{1+2u'}\right) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{1+2u'+4\tilde{\sigma}^2 u''}} \coth\left(\frac{k}{2T}\sqrt{1+2u'+4\tilde{\sigma}^2 u''}\right) \\ &- \frac{\nu_q}{\sqrt{1+g^2 \tilde{\sigma}^2}} \left\{ \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2+g^2 k^2 \tilde{\sigma}^2}-\mu}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2+g^2 k^2 \tilde{\sigma}^2}+\mu}{2T}\right) \right\} \right] \quad (2.31) \end{split}$$

an.

Die linke Seite liefert mit $\partial_t = k\partial_k$ $\partial_t \left[k^4 u(\tilde{\sigma}) \right] = k\partial_k \left[k^4 u(\tilde{\sigma}) \right] = 4k^4 u(\tilde{\sigma}^2) + k^4 \partial_t u_k(\tilde{\sigma}^2)$ $= 4k^4 u(\tilde{\sigma}^2) + k^4 \partial_t u_k + k^4 u'(\tilde{\sigma}^2) \cdot \partial_t \tilde{\sigma}^2$ $= 4k^4 u(\tilde{\sigma}^2) + k^4 \partial_t u_k + k^4 u'(\tilde{\sigma}^2) \cdot k\partial_k k^{-2} \sigma^2$ $= 4k^4 u(\tilde{\sigma}^2) + k^4 \partial_t u_k - 2k^4 u'(\tilde{\sigma}^2) \cdot \tilde{\sigma}^2$ (2.32)

Umformen von (2.32) nach $\partial_t u_k$ und einsetzen von (2.31) liefert

$$\partial_{t}u_{k} = -4u + 2\tilde{\sigma}^{2}u' + \frac{1}{12\pi^{2}} \left[\frac{3}{\sqrt{1+2u'}} \coth\left(\frac{k}{2T}\sqrt{1+2u'}\right) + \frac{1}{\sqrt{1+2u'+4\tilde{\sigma}^{2}u''}} \coth\left(\frac{k}{2T}\sqrt{1+2u'+4\tilde{\sigma}^{2}u''}\right) - \frac{\nu_{q}}{\sqrt{1+g^{2}\tilde{\sigma}^{2}}} \left\{ \tanh\left(\frac{\sqrt{k^{2}+g^{2}k^{2}\tilde{\sigma}^{2}}-\mu}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\sqrt{k^{2}+g^{2}k^{2}\tilde{\sigma}^{2}}+\mu}{2T}\right) \right\} \right], \quad (2.33)$$

welches, wie erwähnt, die Bestätigung des Wetterich-Flusses im O(N)-Modell ist, hier mit N = 4.

2.1.4 Vakuumfluss

Von besonderem Interesse soll der Vakuumfluss sein, sprich die Lösung der Flussgleichung ohne chemisches Potential und bei kleinen Temperaturen.

Betrachtet man die Flussgleichung genauer so fällt auf, dass die Temperatur T nur in den Argumenten des coth und tanh in der Flussgleichung vorkommt und da insbesondere im Nenner.

Sowohl coth als auch tanh weisen für große Argumente asymptotisches Grenzverhalten auf mit

$$\lim_{x \to \infty} \coth(x) = 1$$

und

$$\lim_{x \to \infty} \tanh(x) = 1$$

sodass für den Fluss mit (2.26) folgt

$$\begin{aligned} \partial_k \Omega_k(\sigma^2) \Big|_{T=0} &= \lim_{T \to 0} \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2)}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2)}}{2T}\right) + \right. \\ &\left. \frac{1}{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2) + 4\sigma^2 \Omega''(\sigma^2)}} \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2) + 4\sigma^2 \Omega''(\sigma^2)}}{2T}\right) \right. \\ &\left. - \frac{12}{\sqrt{k^2 + g^2 \sigma^2}} \cdot 2 \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2 + g^2 \sigma^2}}{2T}\right) \right] \\ &= \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2)}} + \frac{1}{\sqrt{k^2 + 2\Omega'(\sigma^2) + 4\sigma^2 \Omega''(\sigma^2)}} - \frac{24}{\sqrt{k^2 + g^2 \sigma^2}} \right]. \end{aligned}$$
(2.34)

Damit bildet (2.34) einen Spezialfall, der später mit den aufgestellten numerischen Methoden untersucht wird.

2.2 Numerische Verfahren

In diesem Abschnitt werden die zur numerischen Lösung der Flussgleichung verwendeten Verfahren genauer betrachtet.

Dazu zählen neben dem Runge-Kutta-Verfahren (hier 4. Ordnung) [8], welches nur kurz überflogen wird, auch spektrale Methoden. Hierbei liegt der Fokus speziell auf der Kollokationsmethode [9][10]. Dabei wird das Hauptaugenmerk darauf liegen, das Verfahren genau zu erläutern und eigenständige Herleitungen zu tätigen. Am Ende wird das Runge-Kutta-Verfahren mit der Kollokationsmethode kombiniert, um partielle Differentialgleichungen, insbesondere die vorgestellte Flussgleichung, zu lösen. Den Abschluss bildet die FD-Methode [11], die zum Vergleich dienen soll.

2.2.1 Klassisches Runge-Kutta-Verfahren

Zunächst wird mit dem Runge-Kutta-Verfahren begonnen, welches es ermöglicht Differentialgleichungen 1. Ordnung (Anfangswertprobleme) der Form

$$\begin{cases} \dot{y}(t) &= f(t, y(t)) \\ y(t_0) &= y_0 \end{cases}$$
(2.35)

zu lösen.

Runge-Kutta-Verfahren, im Allgemeinen, nähern Differentialquotienten (Ableitungen) durch makroskopische Differenzenquotienten und berechnen dadurch die Lösung der Differentialgleichung an diskreten Punkten. Auf die die explizite Herleitung des Verfahrens wird hier nicht weiter eingegangen.

Das klassische Runge-Kutta-Verfahren (RK4) nähert die Lösung der DGL zu gegebener Schrittweite h an diskreten Punkten durch

$$u_{i+1} \approx y(t_{i+1}) \tag{2.36}$$

 mit

$$u_0 = y(t_0) , (2.37)$$

wobei die Funktion u_{i+1} mit der Verfahrensfunktion

$$\Phi(u_i, t_i, h, f) = \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4$$
(2.38)

 mit

$$k_{1} = f(t_{i}, u_{i})$$

$$k_{2} = f(t_{i} + \frac{h}{2}, u_{i} + \frac{h}{2}k_{1})$$

$$k_{3} = f(t_{i} + \frac{h}{2}, u_{i} + \frac{h}{2}k_{2})$$

$$k_{4} = f(t_{i} + h, u_{i} + hk_{3})$$

rekursiv durch

$$u_{i+1} = u_i + h \cdot \Phi(u_i, t_i, h, f)$$
(2.39)

berechnet wird.

Auch Differentialgleichungen n-ter Ordnung lassen sich damit numerisch lösen, indem man diese in ein DGL-System 1. Ordnung umschreibt.

Als Beispiel sei eine DGL n-ter Ordnung in der allgemeinsten Form gegeben

$$f(t, y(t), \dot{y}(t), \dots, y^{(n)}(t)) = 0, \qquad (2.40)$$

dann lässt sich (2.40) mit $y_1(t) = y(t), y_2(t) = \dot{y}(t), \dots, y_n(t) = y^{(n-1)}(t)$ in ein System von nDifferentialgleichungen 1. Ordnung umschreiben:

$$\begin{cases} \dot{y}_1(t) = f_1(t, y_1(t), \dots, y_n(t)) \\ \dot{y}_2(t) = f_2(t, y_1(t), \dots, y_n(t)) \\ \vdots \\ \dot{y}_n(t) = f_n(t, y_1(t), \dots, y_n(t)) \end{cases}$$
(2.41)

Es ist anzumerken, dass die Ordnung der DGL auch die Anzahl der benötigten Anfangsbedingungen angibt.

Beispiel:

Im folgenden Abschnitt wird das klassische Runge-Kutta-Verfahren an einem expliziten Beispiel angewendet, um dessen Mächtigkeit zu zeigen: hier der quantenmechanische harmonische Oszillator, dessen Basissystem durch die Hermite-Polynome gegeben ist und die analytische Lösung der Wellenfunktion zu verschiedenen Energieeigenwerten bekannt ist. Siehe dazu [12].

Die Schrödingergleichung des harmonischen Oszillators ist durch

$$\psi(x)E_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x)$$
(2.42)

gegeben.

Es ist also das Differentialgleichungssystem

$$\begin{cases} \psi_1'(x) &= \psi_2(x) \\ \psi_2'(x) &= \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{m\omega^2}{2} x^2 - E_n \right) \psi_1(x) \end{cases}$$
(2.43)

mit den zu E_n zu wählenden Anfangsbedingungen für $\psi_1(x), \psi_2(x)$ zu lösen.



Abbildung 2.1: Die linke Abbildung zeigt die Wellenfunktion für n = 0, rechts für n = 2. Bei der Auswertung wurden $\hbar = \omega = m = 1$ gesetzt. Man erkennt, dass numerische und analytische Lösung perfekt übereinstimmen. Für das Runge-Kutta-Verfahren wurde dabei eine Schrittweite von $h = 10^{-6}$ gewählt.

2.2.2 Kollokationsmethode

Das nächste vorzustellende Verfahren ist die Kollokationsmethode. Dieses Verfahren stellt eine (weitere) Möglichkeit dar Differentialgleichungen der Form

$$R(x) = \mathcal{L}\left[f(x)\right] = 0 \tag{2.44}$$

zu lösen, wobei \mathcal{L} ein beliebiger Operator ist.

Die Idee hinter dem Verfahren ist, dass man die Lösung der gesuchten Funkion als Entwicklung in (evtl. bzgl. einer Gewichtsfunktion orthogonalen) Funktionen $P_n(x)$ darstellt,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n P_n(x)$$
 (2.45)

sodass es lediglich die Koeffizienten a_n zu bestimmen gilt.

Als Näherung lässt man die Reihe bei einem beliebigen Wert N abbrechen, sodass gilt

$$f(x) \approx \sum_{n=0}^{N} a_n P_n(x) , \qquad (2.46)$$

wobei ein größeres N natürlich auch eine größere Approximationsgenauigkeit ermöglicht.

Durch die Reihenentwicklung der Funktion fällt die Kollokationsmethode in eine Unterrubrik der *(pseudo-) spektralen Methoden*, da die Zerlegung der Funktion in ein endliches Set von spektralen Basisfunktionen bzw. -polynomen erfolgt.

Ist N die Ordnung der Entwicklung (2.46), so hat die spektral zerlegte Funktion die Form

$$f(x) =: f(x, a_0, a_1, \dots a_N) \tag{2.47}$$

und es gilt N + 1 Koeffizienten a_n mit n = 0, 1, ..., N zu bestimmen. Damit wird zwangsläufig auch aus (2.44)

$$R(x) =: R(x, a_0, a_1, \dots a_N) = 0.$$
(2.48)

Es ist also dementsprechend ein Gleichungssystem mit N + 1 Gleichungen aufzustellen und zu lösen unter Verwendung von (2.47) und (2.48).

Hat man nun z.B. k Anfangs- bzw. Randbedingungen für die Funktion an den Punkten x_k , so ergeben sich die ersten k der N + 1 Gleichungen durch eben diese Bedingungen. Die anderen verbleibenden Gleichungen sind durch die Auswertung von (2.48) an (den namensgebenden) N - k + 1 Kollokationspunkten \tilde{x}_i gegeben.

Das Gleichungssystem hat dann die Form

$$f(x_1, a_0, a_1, \dots a_N) = f_1$$

$$\vdots$$

$$f(x_k, a_0, a_1, \dots a_N) = f_k$$

$$R(\tilde{x}_1, a_0, a_1, \dots a_N) = 0$$

$$\vdots$$

$$R(\tilde{x}_{N-k+1}, a_0, a_1, \dots a_N) = 0$$
(2.49)

und kann gelöst werden.

Darstellung von Funktionen und Ableitungen durch Tschebyscheff-Polynome

Will man nun eine Funktion f(x) spektral zerlegen, so kann dazu erstmal jede Art von Basispolynom gewählt werden und es gibt zu gewissen Problemen auch das Basissystem mit den größten Vorteilen (man denke z.B. an die Lösung des Radialteils der Wellenfunktion des Wasserstoffatoms, wobei dort Laguerre-Polynome das geeignete Basissystem dartsellen [12]).

Meistens jedoch ist nicht ersichtlich welche Polynome am besten geeignet sind, sodass man insbesondere die Polynome wählt, die im Allgemeinen große Vorteile bieten.

Tschebyscheff-Polynome

In diesem Fall sind dies die Tschebyscheff-Polynome erster Art ${\cal T}_n(x)$

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)), \quad x \in [-1, 1] ,$$
 (2.50)

welche die Tschebyscheff-Differentialgleichung erster Art

$$(1 - x^2)y''(x) - xy'(x) + n^2y(x) = 0, \quad n \in \mathbb{N}_0$$
(2.51)

lösen.

Die wichtigsten Eigenschaften der Tschebyscheff-Polynome sind:

• Orthogonalität (bzgl. der Gewichtsfunktion $g(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$) über

$$\langle T_n, T_m \rangle = \int_{-1}^{1} T_n(x) T_m(x) g(x) \, \mathrm{d}x = \begin{cases} \pi, & n = m = 0\\ \frac{\pi}{2}, & n = m \neq 0\\ 0, & n \neq m \end{cases}$$

oder diskret

$$\langle T_n, T_m \rangle = \sum_{i=0}^{N} T_n(x_i) T_m(x_i) = \begin{cases} N+1, & n=m=0\\ \frac{N+1}{2}, & n=m\neq 0\\ 0, & n\neq m \end{cases}$$
(2.52)

• Rekursionsformel mit

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$
(2.53)

(Ordnung n entspricht höchster vorkommender Ordnung von x)

• Nullstellen bei

$$x_i = \cos\left(\frac{2i-1}{2N}\pi\right), \quad i = 1, ..., N$$
 (2.54)

• Extremstellen bei

$$x_i = \cos\left(\frac{i}{N}\pi\right), \quad i = 0, ..., N$$
 (2.55)

• Symmetrie mit

$$T_n(-x) = \begin{cases} T_n(x), & n \text{ gerade} \\ -T_n(x), & n \text{ ungerade} \end{cases}$$
(2.56)

Tschebyscheff-Polynome werden deshalb verwendet, da

- eine Entwicklung in diesen für analytische (glatte) Funktionen exponentiell konvergiert.
- die Rekursionsformel Auswertungen an den Interpolationspunkten vereinfacht.
- der höchste vorkommenden Koeffizient gleichzeitig in der Größenordnung des Entwicklungsfehlers liegt.

Sofern die Kollkationsmethode angewendet werden soll, so geschieht dies nun immer mit Tschebyscheff-Polynomen. Das heißt Funktionen haben nun die Form

$$f(x) \approx \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x)$$
 (2.57)

Koeffiziententransformation

Speziell in den Anfangsbedingungen, sowie auch allgemein in der Residuumsfunktion (2.44) bzw. (2.48), kommen auch Ableitungen von f vor und damit Ableitungen der Tschebyscheff-Polynome T_n , wobei letzteres tunlichst umgangen werden soll.

Durch Ableiten wird die Ordnung der Entwicklung reduziert, sodass die Ableitung von f(x) zunächst im Vergleich zu (2.57) die Form

$$f'(x) \approx \sum_{n=0}^{N-1} b_n T_n(x)$$
 (2.58)

annimmt.

Eine Entwicklung bis N ist demnach ebenfalls legitim mit der Voraussetzung, dass $b_N = 0$, also

$$f'(x) \approx \sum_{n=0}^{N-1} b_n T_n(x) = \sum_{n=0}^{N} b_n T_n(x), \quad b_N = 0.$$
(2.59)

Im weiteren Verlauf wird (2.59) als Untermauerung der nächsten Schritte behilflich sein.

Das Ziel ist es nun die Koeffizienten a_n und b_n in Zusammenhang zu bringen.

Dies hat den Vorteil, dass man bei der späteren Implementierung von Ableitungen in einem Quell-Code keine Differentialquotienten bzw. numerische Differenzenquotienten verwenden muss. Die hat laufzeitliche und fehlerminimierende Vorteile bei der Lösung von Problemen und speziell unserer Flussgleichung.

Zunächst werden ein paar Überlegungen aufgestellt: Allgemein kann man eine Funktion wie (2.57)

$$f(x) \approx \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x)$$

als gegeben voraussetzen und mit (2.59) auch wieder

$$f'(x) \approx \sum_{n=0}^{N} b_n T_n(x)$$

Weiterführend lohnt es sich nun eine lineare Abbildung D zu finden, die die Koeffizienten a_n mit den Koeffizienten b_n in Zusammenhang setzt, also z.B.

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = D \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

im Folgenden weiter abgekürzt durch

$$\vec{b} = D\vec{a}, \quad \vec{a}, \vec{b} \in \mathbb{R}^{N+1} , \qquad (2.60)$$

da die Tschebyscheff-Polynome in f und f' sich nicht unterscheiden können, folgt (2.60) durch einfachen Koeffizientenvergleich. Dank (2.59) ist $D \in \mathbb{R}^{N+1 \times N+1}$ eine quadratische Matrix, was später einige Vorteile bietet. Weiterhin sollte der N + 1-te Zeilenvektor 0 sein, denn dann ist $b_N = 0$. Jetzt werden die Einträge von D hergeleitet: Mit der Orthogonalität folgt, dass

$$\sum_{m=0} \langle T_m(x), f'(x) \rangle = \sum_{m,n=0} b_n \int_{-1}^{1} \frac{T_m(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} \, \mathrm{d}x = \sum_{m,n=0} b_n \cdot \begin{cases} \pi, & n=m=0\\ \frac{\pi}{2}, & n=m\neq 0\\ 0, & n\neq m \end{cases}$$
$$= \sum_{m=0} b_m \cdot \begin{cases} \pi, & m=0\\ \frac{\pi}{2}, & m\neq 0 \end{cases}$$
(2.61)

Es ist aber auch nach (2.57)

$$\sum_{m=0} \langle T_m(x), f'(x) \rangle = \sum_{m,n=0} b_n \int_{-1}^{1} \frac{T_m(x)T_n(x)}{\sqrt{1-x^2}} \, \mathrm{d}x = \sum_{m,k=0} a_k \int_{-1}^{1} \frac{T_m(x)T'_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} \, \mathrm{d}x \,. \tag{2.62}$$

Mit geschickten Substitutionen folgt für das Integral dabei

$$\langle T_m(x), T'_k(x) \rangle = \int_{-1}^{1} \frac{T_m(x)T'_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} \, \mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} \frac{\cos(m \arccos(x)) \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\cos(k \arccos(x))\right]}{\sqrt{1-x^2}} \, \mathrm{d}x$$

$$= -\int_{-1}^{1} \frac{\cos(m \arccos(x)) \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\arccos(x)}\cos(k \arccos(x))\right]}{1-x^2} \, \mathrm{d}x$$

$$= -\int_{0}^{\pi} \frac{\cos(mu) \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\cos(ku)\right]}{\sin(u)} \, \mathrm{d}u$$

$$= k \int_{0}^{\pi} \frac{\cos(mu) \sin(ku)}{\sin(u)} \, \mathrm{d}u =: I_{mk} \,.$$

$$(2.63)$$

Hier kann man durch Auswertungen des nicht ganz trivialen Integrals schon einmal folgenden Einschränkungen einfordern:

- $I_{mk} = k \cdot \pi$, wenn m + k ungerade und k > m
- $I_{mk} = 0$, sonst

mit m, k = 0, 1, ...N

Daraus folgt

$$\sum_{m=0} b_m \cdot \begin{cases} \pi, & m=0\\ \frac{\pi}{2}, & m\neq 0 \end{cases} = \sum_{m,k=0} a_k \cdot \begin{cases} k\pi, & m+k \mod 2 \neq 0 & \land \quad k > m\\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$
(2.64)

Also

$$b_m \cdot \begin{cases} \pi, & m = 0 \\ \frac{\pi}{2}, & m \neq 0 \end{cases} = \sum_{k=0} a_k \cdot \begin{cases} k\pi, & m+k \mod 2 \neq 0 & \land \quad k > m \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$
(2.65)

Z.B. für m = 0:

$$b_0 \cdot \pi = a_0 \cdot 0 + a_1 \cdot 1 \cdot \pi + a_2 \cdot 0 + a_3 \cdot 3 \cdot \pi + \dots$$

und wenn man noch durch π teilt

$$b_0 = a_0 \cdot 0 + a_1 \cdot 1 + a_2 \cdot 0 + a_3 \cdot 3 + \dots$$

Es liegt also mit der Bedingung für die Matrixelement
e d_{mk} von Düber

$$d_{mk} = \begin{cases} k, & m+k \mod 2 \neq 0 & \land & k > m & \land & m = 0\\ 2k, & m+k \mod 2 \neq 0 & \land & k > m & \land & m \neq 0\\ 0, & & \text{sonst} \end{cases}$$
(2.66)

eine obere Dreiecksmatrix für $D \in \mathbb{R}^{N+1 \times N+1}$ vor.

Als Beispiel wird der Fall N=6 betrachtet, so
dass $D\in \mathbb{R}^{7\times 7}$ mit

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 8 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$
(2.67)

vorliegt und damit wurde (2.59) bestätigt; die letzte Zeile ist $\mathbf{0}.$ Damit ist

/

$$\begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \\ b_5 \\ b_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 3 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 8 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \end{pmatrix}$$
(2.68)

Offensichtlich kann man die Koeffizienten von höheren Ableitungen, welche ebenfalls in Tschebyscheff-Polynomen entwickelt worden sind, durch mehrfaches anwenden von D ebenfalls auf die Koeffizienten a_n der ursprünglichen Funktion zurückführen. Sei z.B.

$$f''(x) \approx \sum_{n=0}^{N-2} c_n T_n(x) = \sum_{n=0}^{N} c_n T_n(x), \quad c_{N-1} = c_N = 0$$
(2.69)

 $\operatorname{dann}\,\operatorname{ist}$

 $\vec{c} = D\vec{b} \tag{2.70}$

und mit (2.60)

$$\vec{c} = D^2 \vec{a} \tag{2.71}$$

wobei für N = 6 folgt, dass

und es lässt sich erkennen, dass jetzt die letzten beiden Zeilen immer 0 sind, sodass damit die Bedingung in (2.69) erfüllt wird.

Als Beispiel, dass die Ableitungsmatrizen funktionieren, wird eine Funktion angenommen, die schon in Tschebyscheff-Polynomen entwickelt wurde (siehe dazu Kap. 2.2.3),

$$f(x) = \log(2+x) \approx \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x)$$
 (2.73)

 $a_0, ..., a_N$ sollen also bekannt sein.

Demnach ist dann durch Anwendung der Ableitungsmatrizen

$$f'(x) = \frac{1}{2+x} \approx \sum_{n=0}^{N} (D \cdot \vec{a})_n T_n(x)$$
(2.74)

und

$$f''(x) = -\frac{1}{(2+x)^2} \approx \sum_{n=0}^{N} (D^2 \cdot \vec{a})_n T_n(x)$$
(2.75)

Eine Auswertung bis N = 6 unter Anwendung von (2.67) und (2.72) liefert auf $x \in [-1, 1]$ folgende Ergebnisse:



Abbildung 2.2: Zu sehen ist die gegebene Funktion log(x + 2) zusammen mit der, über die Ableitungsmatrizen berechneten, ersten und zweiten Ableitung.

In Abbildung (2.2) wurden 21 Interpolationspunkte zur Auswertung gewählt.

Es ist zu erkennen, dass die Reduzierung der Entwicklungsordnung zumindest für die zweite Ableitung am Rand leichte numerische Ungenauigkeiten erzeugt. Ist Ordnung N = 6 für die Funktion an sich und Ordnung N = 5 für die Ableitung selbiger noch ausreichend, so ist die Entwicklungsordnung N = 4 für die zweite Ableitung schon recht klein. Man erkennt aber auch, dass trotz alledem eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung gegeben ist. Es bestätigen sich also die Aussagen, dass a) höhere Entwicklungsordnungen bessere Genauigkeiten liefern, sowie b) dass eine Entwicklung in Tschebyscheff-Polynomen sehr schnell konvergiert.

Wahl der Kollokationspunkte

Um die Grundlagen der Kollokationsmethode zu vervollständigen, bleibt die Wahl der Kollokationspunkte.

Genau wie die Wahl des Basissystems unterliegt die Wahl dieser Punkte zunächst keinen Einschränkungen.

Schaut man sich jedoch die Struktur der Tschebyscheff-Polynome an, so bewährt sich die Gauß-Lobatto- bzw. Tschebyscheff-Lobatto-Quadratur, wobei dort die Kollokationspunkte $\tilde{x}_i \in [-1, 1]$ durch

$$\tilde{x}_i = \cos\left(\frac{i}{N}\pi\right), \quad i = 0, ..., N_i$$
(2.76)

gegeben sind. Dies entspricht den Extremstellen der Tschebyscheff-Polynome. Einsetzen in (2.50) liefert dann nämlich

$$T_n(\tilde{x}_i) = \cos\left(\frac{ni}{N}\pi\right), \quad n = 0, ..., N, \ i = 0, ..., N_i.$$
 (2.77)

(Anmerkung: N und N_i sind nicht immer gleich. Im folgenden Beispiel müssen zwei Kollokationspunkte durch Anfangsbedingungen ersetzt werden.)



Abbildung 2.3: Kollokationspunkteverteilung der Gauß-Lobatto-Quadratur. Dabei bewährt sich die Zunahme von Stützstellen am Rand für die numerische Auswertung. Die Gaus-Lobatto-Quadratur wurde dabei mit $N_i = 20$ erzeugt, es sind also 21 Kollokationpunkte zu erkennen.

Beispiel:

Abschließend werden alle Grundlagen zusammengeführt. Dazu wird die Kollokationsmethode am gedämpften harmonischen Oszillator exerziert.

Die gesuchte Lösung y(x) wird in Tschebyscheff-Polynomen entwickelt

$$y(x) \approx \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x) \tag{2.78}$$

und der Operator \mathcal{L} des gedämpften harmonischen Oszillators ist z.B. durch

$$\mathcal{L} = m \cdot \partial_{xx} + 2\gamma \cdot \partial_x + k \tag{2.79}$$

gegeben.

Dabei gilt m = k = 1 und $2\gamma = 0.3$ Damit ergibt sich als Residuumsfunktion

$$R(x) = y''(x) + 0.3 \cdot y'(x) + y(x) . \qquad (2.80)$$

Alle in der Residuumsfunktion vorkommenden Funktionen werden in Tschebyscheff-Polynomen entwickelt, sodass gilt

$$\sum_{n=0}^{N} A_n T_n(x) = \sum_{n=0}^{N} c_n T_n(x) + 0.3 \cdot \sum_{n=0}^{N} b_n T_n(x) + \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x) , \qquad (2.81)$$

wobei zur Lösung der DGL eine Vorschrift für y(x) gefunden werden soll und damit primär die Koeffizienten $a_0, ..., a_N$ bestimmt werden müssen. Für die Koeffizienten gilt

$$\vec{A} = \vec{c} + \vec{b} + \vec{a} \tag{2.82}$$

und mit unseren gefunden Koeffiziententransformation D

$$\vec{A} = (D^2 + 0.3 \cdot D^1 + D^0) \cdot \vec{a} \tag{2.83}$$

Nun werden die Anfangsbedingungen angewandt, also z.B.

$$y(0) = 10$$

 $y'(0) = 0$, (2.84)

sodass gilt

$$\left(T_0(0), \ldots, T_N(0)\right) \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = 1$$
 (2.85)

oder besser

$$\begin{pmatrix} 1, & \dots & , 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = 1$$
 (2.86)

und für die Ableitung

$$\begin{pmatrix} 1, & \dots, & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_0 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} = 0$$
 (2.87)

und damit

$$(1, \ldots, 1) \cdot D \cdot \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = 0.$$
 (2.88)

Damit sind 2 Gleichungen gefunden um N + 1 Koeffizienten zu bestimmen.

Nun wird die Kollokationsmethode angewendet. Diese sagt dann aus, dass an N-1 Kollokationspunkten \tilde{x}_i die Residuumsfunktion $R(\tilde{x}_i) = 0$ sein soll. Ausgeschrieben also

$$\begin{pmatrix} T_0(\tilde{x}_1) & \dots & T_N(\tilde{x}_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ T_0(\tilde{x}_{N-1}) & \dots & T_N(\tilde{x}_{N-1}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_0 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} = K_{N-1 \times N+1} \cdot \begin{pmatrix} A_0 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} = 0 , \quad (2.89)$$

wobei hier der Kollokationsmatrix jetzt der NameKgegeben wird. Daraus folgt dann auch, dass

$$K \cdot (D^2 + 0.3 \cdot D^1 + D^0) \begin{pmatrix} a_0 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} = 0.$$
 (2.90)

Somit sind alle N + 1 Gleichungen zu Bestimmung der Koeffizienten $a_0, ..., a_N$ gefunden und das System kann nun gelöst werden.



Abbildung 2.4: Harmonischer gedämpfter Oszillator mit $m = \omega = 1$ und einer Dämpfungskonstanten $2\gamma = 0.3$. Dabei wurde ein N = 20 als Entwicklungsordnung von (2.78) gewählt und die Funktion an 101 Interpolationspunkten ausgewertet.

2.2.3 Lösungsmethoden für partielle Differentialgleichungen

Im nächsten Schritt wird das Runge-Kutta-Verfahren mit der Kollokationsmethode kombiniert, um partielle Differentialgleichungen der Form

$$\mathcal{L}[f(x,t)] = 0 \tag{2.91}$$

mit gegebener Anfangsbedingung

$$f(x, t_0) =: g(x) ,$$
 (2.92)

also partielle Differentialgleichungen in t (im Folgenden Skalenabhängigkeit genannt) und in x, zu lösen, wobei \mathcal{L} hier nun ein beliebiger nichtlinearer Operator sein kann.

Kollokationsmethode im Ort mit Skalenabhängigkeit

Die Methode, welche nun aufgestellt wird, wird später auch verwendet um die gegebene Flussgleichung zu $\Omega_k(\sigma^2)$ zu lösen. Denn diese weist die geforderte Struktur von (2.91) auf, wobei dort die Skalenabhängigkeit durch k gegeben ist und der "Ort" x durch σ^2 . Jedoch gilt es auch hier wieder Voraussetzungen zu schaffen.

Die gesuchte Lösung von (2.91) wird ebenso wie im Vorgängerkapitel spektral zerlegt. Zu beachten ist dabei die Abhängigkeit vom Paramter t, die wir bei unserer Methode in die Entwicklungskoeffizienten stecken. Demnach hat die approximierte Lösung f(x, t) die Form

$$f(x,t) \approx \sum_{n=0}^{N} a_n(t) T_n(x)$$
 (2.93)

Entwicklung der Anfangsfunktion g(x) in Tschebyscheff-Polynomen

Simples Einsetzen von (2.93) in (2.91) macht deutlich, dass eine erste Ableitung von t und damit Ableitungen der Entwicklungskoeffizienten $a_n(t)$ vorkommen werden, wobei zur Lösung des Problems das Runge-Kutta-Verfahren bemüht wird.

Zunächst gilt es die Anfangsfunktion g(x) in Tschebyscheff-Polynomen zu entwicklen. Also

$$g(x) = f(x, t_0) \approx \sum_{n=0}^{N} a_n(t_0) T_n(x)$$
 (2.94)

Diese Entwicklung liefert dann zum Anfangswert t_0 einen Anfangskoeffizienten $a_n(t_0)$. Diese Koeffizienten werden dabei als Anfangsbedingungen für das Runge-Kutta-Verfahren genutzt.

Als Entwicklungskoeffizienten erhält man dann

$$a_n(t_0) \approx \frac{2 - \delta_{0n}}{N+1} \sum_{i=0}^N g(\tilde{x}_i) T_n(\tilde{x}_i) ,$$
 (2.95)

wobei \tilde{x}_i wieder unsere Kollokationspunkte darstellen. Diese Auswertung stellt allgemein eine gute Näherung dar, da diese über die diskrete Orthogonalität arbeitet und damit nicht mit Integralen, was bei manchen Funktion g(x) durchaus Probleme bereiten würde. Die Herleitung erfolgt damit über das diskrete Skalarprodukt, also

$$\sum_{m=0}^{N} \langle T_m(x), g(x) \rangle = \sum_{m,n,i=0}^{N} a_n(t_0) T_n(\tilde{x}_i) T_m(\tilde{x}_i) = \sum_{m,i=0}^{N} g(\tilde{x}_i) T_m(\tilde{x}_i)$$
(2.96)

und weiter

$$\sum_{m,n=0}^{N} a_n(t_0) \cdot \begin{cases} N+1, & n=m=0\\ \frac{N+1}{2}, & n=m\neq 0 = \sum_{m,i=0}^{N} g(\tilde{x}_i) T_m(\tilde{x}_i) ,\\ 0, & n\neq m \end{cases}$$
(2.97)

wobei die Bedingungen für n und m dann zulassen, dass

$$\sum_{n=0}^{N} a_n(t_0) \cdot \begin{cases} N+1, & n=0\\ \frac{N+1}{2}, & n\neq 0 \end{cases} = \sum_{n,i=0}^{N} g(\tilde{x}_i) T_n(\tilde{x}_i)$$
(2.98)

und damit

$$a_n(t_0) \cdot \begin{cases} N+1, & n=0\\ \frac{N+1}{2}, & n\neq 0 \end{cases} = \sum_{i=0}^N g(\tilde{x}_i) T_n(\tilde{x}_i)$$
(2.99)

$$a_n(t_0) \cdot \frac{N+1}{2-\delta_{0n}} = \sum_{i=0}^N g(\tilde{x}_i) T_n(\tilde{x}_i) . \qquad (2.100)$$

Eine letzte Umformung liefert dann (2.95)

$$a_n(t_0) \approx \frac{2 - \delta_{0n}}{N+1} \sum_{i=0}^N g(\tilde{x}_i) T_n(\tilde{x}_i) \;.$$

Interessanterweise lässt sich auf diese Summation verzichten. Schaut man sich (2.94) an, so ergibt sich für die Funktionswerte an den Kollokationspunkten

$$\begin{pmatrix} g(\tilde{x}_0)\\ \vdots\\ g(\tilde{x}_N) \end{pmatrix} = K_{N+1 \times N+1} \cdot \begin{pmatrix} a_0(t_0)\\ \vdots\\ a_N(t_0) \end{pmatrix} , \qquad (2.101)$$

wobei K die bekannte Kollokationsmatrix aus (2.89) ist und diese hier nun quadratisch vorliegt, da sie an N + 1 statt N - 1 Kollokationspunkten ausgewertet wird. Damit ist sie invertierbar, da hier die Diagonalelemente nicht verschwinden bzw. nicht alle 0 sind. Da man an den unbekannten Entwicklungskoeffizienten $a_n(t_0)$ interessiert ist, würde es sich lohnen die inverse Matrix K^{-1} zu berechnen, was numerisch geschieht. D.h.

$$\begin{pmatrix} a_0(t_0) \\ \vdots \\ a_N(t_0) \end{pmatrix} = K_{N+1 \times N+1}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} g(\tilde{x}_0) \\ \vdots \\ g(\tilde{x}_N) \end{pmatrix} .$$
(2.102)

Intervalltransformation unter Symmetrieausnutzung

Das Anfangspotential der Flussgleichung $\Omega_{k=\Lambda}(\sigma^2)$ beim UV-Cutoff Λ weist eine gerade Symmetrie auf und auch die Lösung bei anderen Skalen im chiralen Limes bleibt gerade.

Würde man nun die Anfangsfunktion auf einem symmetrischen Intervall entwickeln (z.B. [-1, 1], auf dem unsere Tschebyscheff-Polynome definiert sind), so würde jeder ungerade Entwicklungskoeffizient berechnet werden. Dabei wird aber immer 0 herauskommen, da sonst die entwickelte Funktion nicht mehr gerade wäre.

Das sind bei einer Implementierung in Quell-Codes gravierende Nachteile, da sowohl Rechenzeit als auch Speicher verloren gehen.

Deswegen wird nun das symmetrische Intervall [-1, 1] auf ein Intervall $[0, \sigma_{max}^2]$ transformiert. Dabei folgt dann als Transformationsvorschrift

$$\sigma_{max}^2 \cdot \frac{x+1}{2} = \sigma^2 \in \left[0, \sigma_{max}^2\right] \quad \rightleftharpoons \quad \frac{2\sigma^2}{\sigma_{max}^2} - 1 = x \in \left[-1, 1\right] \,. \tag{2.103}$$

Da in (2.91) auch Ableitungen nach x vorkommen, gilt es diese ebenfalls zu tranformieren.

Dabei folgt dann z.B.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = \frac{\sigma_{max}^2}{2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma^2} \tag{2.104}$$

bzw.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = \frac{\sigma_{max}}{4} \sqrt{\frac{2}{x+1}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} = \frac{\sigma_{max}^2}{4\sigma} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} , \qquad (2.105)$$

je nachdem, ob man auf $[0, \sigma_{max}^2]$ oder $[0, \sigma_{max}]$ arbeiten will. Und die Rücktranformation durch einfaches Umformen mit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma^2} = \frac{2}{\sigma_{max}^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{2.106}$$

bzw.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} = \frac{4}{\sigma_{max}} \sqrt{\frac{x+1}{2}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \,. \tag{2.107}$$

Für die zweiten Ableitungstransformationen folgt dann

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\sigma_{max}^4}{4} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}(\sigma^2)^2} \quad \text{bzw.} \quad \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\sigma_{max}^4}{16\sigma^2} \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2} - \frac{1}{\sigma}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\right) \tag{2.108}$$

und

$$\frac{d^2}{d(\sigma^2)^2} = \frac{4}{\sigma_{max}^4} \frac{d^2}{dx^2} \quad \text{bzw.} \quad \frac{d^2}{d\sigma^2} = \frac{4}{\sigma_{max}^2} \left(\frac{d}{dx} + 2(x+1)\frac{d^2}{dx^2}\right) \,. \tag{2.109}$$

Es sei dabei erwähnt, dass manche Probleme statt einem geschlossenem Intervall, wie es z.B. bei der Flussgleichung vorliegt, ein halboffenes Intervall $\gamma \in [0, \infty)$ verlangen oder sogar $\eta \in (-\infty, \infty)$, sodass man trotz gerader Anfangsbedingung die Symmetrie an sich nicht ausnutzen kann.

Dabei ist folgendes festgestellt worden:

• Liegt eine partielle Differentialgleichung vor, deren Anfangsbedingung zu $t = t_0$ und Lösung zu $t \neq t_0$ gerade ist mit

$$\lim_{x \to \pm \infty} f(x, t_0) = \lim_{x \to \pm \infty} f(x, t) = 0 , \qquad (2.110)$$

so ist eine Entwicklung auf $[0, \sigma_{max}]$ als auch auf $[0, \infty)$ nicht möglich gewesen, jedoch auf $(-\infty, \infty)$ (Beispiel: Wärmeleitungsgleichung), da die Funktionswerte am Rand zu groß werden und damit der systematische Fehler durch wiederholtes Aufrufen des Runge-Kutta-Verfahrens.

• Liegt eine partielle Differential
gleichung vor, deren Anfangsbedingung zu $t=t_0$ ungerade ist mit

$$\lim_{x \to \pm \infty} f(x, t_0) = \lim_{x \to \pm \infty} f(x, t) = 0 , \qquad (2.111)$$

so ist eine Entwicklung auf $[0, \sigma_{max}]$ nicht möglich, jedoch auf $[0, \infty)$, falls der Funktionswert $f(0, t_0) \approx 0$.

(Beispiel: Transportgleichung mit Anfangsbedingung $g(\gamma) = \exp(-(\gamma - a)^2)$ mit $a \gg 0$)

• Liegt eine partielle Differential
gleichung vor, deren Anfangsbedingung zu $t=t_0$ gerade ist
, mit

$$\lim_{x \to \pm \infty} f(x, t_0) \to +\infty \quad \lor \quad \lim_{x \to \pm \infty} f(x, t_0) \to -\infty , \qquad (2.112)$$

so ist eine Entwicklung auf $[0, \sigma_{max}]$ möglich. (Beispiel: Transportgleichung mit Anfangsbedingung $g(\sigma) = \sigma^2$ oder auch die Flussgleichung)

Generell scheint es bei den ersten beiden Beispielen so zu sein, dass die Kombination von Runge-Kutta-Verfahren und Kollokation nur dann stabil numerische Ergebnisse liefert, wenn der Funktionswert an der unteren Intervallgrenze 0 ist oder nahe bei 0 liegt.

Ist also $x \in [-1, 1]$, so folgt die Transformation auf $\gamma \in [0, \infty)$ z.B. mit

$$\gamma = \frac{1+x}{1-x} \,, \tag{2.113}$$

sodass

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\gamma} = \frac{(1-x)^2}{2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{2.114}$$

und

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\gamma^2} = \frac{(1-x)^3}{4} \left((1-x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right)$$
(2.115)

und ist $x \in [-1, 1]$ so folgt die Transformation auf $\eta \in (-\infty, \infty)$ z.B. mit

$$\eta = \frac{x}{\sqrt{1 - x^2}} , \qquad (2.116)$$

 sodass

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta} = \sqrt{1 - x^2}^3 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \tag{2.117}$$

und

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2} = (1 - x^2)^2 \left((1 - x^2) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 3x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right) \ . \tag{2.118}$$

Beispiele:

Die Wärmeleitungsgleichung soll durch

$$\dot{u}(\eta, t) = u''(\eta, t)$$
 (2.119)

gegeben sein und mit

$$u(\eta, t) \approx \sum_{n=0}^{N} a_n(t) T_n\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right)$$
(2.120)

 $\eta \in (-\infty,\infty)$ entwickelt werden. Weiterhin soll die Anfangsbedingung zum Zeitpunkt $t_0=1$ durch

$$g(\eta) = u(\eta, 1) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{\eta^2}{4}\right) \approx \sum_{n=0}^N a_n(1)T_n\left(\frac{\eta}{\sqrt{1+\eta^2}}\right)$$
(2.121)

gegeben sein.

Für die Zeitableitung und die Anfangsbedingungen kann man $\eta \to x$ direkt vollziehen, sodass die Entwicklung nach (2.102)

$$\vec{a}(1) = K_{N+1 \times N+1}^{-1} \cdot \vec{g}(\tilde{x}) \tag{2.122}$$

ergibt, wobe
i $\vec{g}(\tilde{x})$ die Funktionswerte an den transformierten Kollokationspunkten von
 gdarstellen, also

$$g_{i} = g(\tilde{x}_{i}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{4} \left[\frac{\tilde{x}_{i}}{\sqrt{1-\tilde{x}_{i}^{2}}}\right]^{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{4} \cdot \frac{\tilde{x}_{i}^{2}}{1-\tilde{x}_{i}^{2}}\right) .$$
(2.123)

Für die zweite Ableitung nach dem Ort folgt weiterhin durch die Intervalltransformation, dass

$$u''(\eta,t) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2} u(\eta,t) = (1-x^2)^2 \left((1-x^2) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 3x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right) u(x,t) .$$
 (2.124)

Über (2.67 und folgend) folgt damit, dass

$$u''(\eta,t) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2} u(\eta,t) = (1-x^2)^3 \sum_{n=0}^N (D^2 \cdot \vec{a}(t))_n T_n(x) - 3x(1-x^2)^2 \sum_{n=0}^N (D \cdot \vec{a}(t))_n T_n(x) .$$
(2.125)

Damit bleibt zum Schluss

$$\dot{u}(\eta,t) = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2} u(\eta,t) = (1-x^2)^3 \sum_{n=0}^N (D^2 \cdot \vec{a}(t))_n T_n(x) - 3x(1-x^2)^2 \sum_{n=0}^N (D \cdot \vec{a}(t))_n T_n(x)$$
(2.126)

und damit an den Kollokationspunkten über (2.101)unter der Tatsache, dass die Vorfaktoren zu Diagonalmatrizen werden

$$K \cdot \dot{\vec{a}} = \operatorname{diag}\left((1 - \left\{ \tilde{x}_i^2 \right\})^3 \right) \cdot K \cdot D^2 \cdot \vec{a}(t) + \operatorname{diag}\left(-3 \cdot \left\{ \tilde{x}_i \right\} \cdot (1 - \left\{ \tilde{x}_i^2 \right\})^2 \right) \cdot K \cdot D \cdot \vec{a}(t) .$$
(2.127)

Damit ist durch Invertieren von Kam Ende ein System gefunden, was man mit dem Runge-Kutta-Verfahren lösen kann.

Die analytische Lösung ist bekannt mit

$$u(\eta, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \exp\left(-\frac{\eta^2}{4t}\right) . \qquad (2.128)$$



Abbildung 2.5: Numerische Lösung der Wärmeleitungsgleichung mit analytischer Lösung (schwarz) durch Runge-Kutta-Verfahren und Kollokation (vgl. (2.110)). Dabei waren die Parameter unter anderem die Entwicklungsordnung N = 20, es wurde an 31 Interpolationspunkten ausgewertet und die Schrittweite des Runge-Kutta-Verfahrens war $h = 10^{-4}$.

Ein anderes Beispiel soll die Transportgleichung sein, mit

$$\dot{u}(\gamma, t) = u'(\gamma, t) \tag{2.129}$$

bzw.

$$\dot{u}(\sigma,t) = -u'(\sigma,t) \tag{2.130}$$

und den Anfangsbedingungen

$$u(\gamma, 0) = g(\gamma) = \exp(-(\gamma - a)^2), \quad \text{mit } a = 10$$
 (2.131)

auf $\gamma \in [0,\infty)$ und

$$u(\sigma, 0) = g(\sigma) = \sigma^2 \tag{2.132}$$

auf $\sigma \in [0, \sigma_{max}]$.

Die analytische Lösung ist durch

$$u(\gamma, t) = g(\gamma + t) \tag{2.133}$$

bzw.

$$u(\sigma, t) = g(\sigma - t) \tag{2.134}$$

gegeben.



Abbildung 2.6: Links: Transportgleichung mit Gaußglocke als Anfangsbedingung (vgl. (2.111)), Ordnung N = 100, 101 Interpolationspunkte, $h = 10^{-8}$. Rechts: Transportgleichung mit Parabel als Anfangsbedingung (vgl. (2.112)) mit Tiefpunkt in $[0, \sigma_{max}]$, Ordnung N = 20, 101 Interpolationspunkte, $h = 10^{-8}$. Unten: Analog mit Tiefpunkt nicht in $[0, \sigma_{max}]$, Ordnung N = 200, 101 Interpolationspunkte, $h = 10^{-8}$.

Es ist festzuhalten, dass bei entsprechend einfachen Anfangsbedingungen auf abgeschlossen Intervallen eine geringe Entwicklungsordnung ausreicht um bei anderen Lösungen gute Konvergenzen zu erreichen. Auch auf symmetrischen Intervallen, wie bei der Wärmeleitungsgleichung, reichen verhältnismäßig geringe Ordnungen wie N = 20 aus, obwohl damit in allen ungeraden Entwicklungskoeffizienten der Anfangsbedingung keine Informationen stecken. Dabei zeigt sich dann die Stärke der Transformation von symmetrischen Intervallen auf ein Intervall $[0, \sigma_{max}]$, denn bei geraden Anfangsfunktionen werden damit künstlich Informationen in die ungeraden Entwicklungskoeffizienten gesteckt. Das heißt auch, dass man im Vergleich zur symmetrischen Entwicklung mit der Hälfte an Entwicklungskoeffizienten auskommt. Das sind die erwähnten laufzeitlichen als auch speichertechnischen Vorteile.

Fehlerbetrachtung

Nun, da alle Grundlagen vorhanden sind, sollte eine kleine Betrachtung der Fehlerquellen folgen, die bei der Interpolation einer Funktion durch das Runge-Kutta-Verfahren in Kombination mit der Kollokationsmethode vorkommen können.

Durch die Kollokationsmethode kommt durch das Approximieren der Funktion bis zu einer gewissen Ordnung N ein Fehler in der Größe des höchsten vorkommenden Koeffizienten a_N , also $\mathcal{O}(|a_N|)$, in Betracht.

Da exponentielle Konvergenz vorliegt, kann man alle vernachlässigten Koeffizienten nach dem

Abbruch bei der Ordnung N durch eine geometrische Reihe nähern, mit

$$|a_n| \propto \exp(-qn), \quad q = const. > 0, \qquad (2.135)$$

sodass

$$\sum_{n=N+1}^{\infty} a_n \underbrace{T_n(x)}_{\leq 1} \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} a_n \leq \sum_{n=N+1}^{\infty} |a_n|$$
(2.136)

und weiter

$$\sum_{n=N+1}^{\infty} |a_n| = \sum_{n=N+1}^{\infty} \exp(-qn) = \exp(-q(N+1)) \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-qn) = \exp(-qN) \frac{\exp(-q)}{1 - \exp(-q)}$$
$$= \exp(-qN) \underbrace{\frac{1}{\exp(q) - 1}}_{=const.} = \mathcal{O}(\exp(-qN)) = \mathcal{O}(|a_N|)$$
(2.137)

Weiterhin weicht die exakte Lösung immer etwas von der numerischen Lösung ab, sodass diese Differenz an allen Punkten ebenfalls eine Fehlerquelle darstellt.

Als letztes wird die Funktion an beliebig vielen Punkten (möglichst ungleich den Kollokationspunkten) interpoliert, sodass dies ebenfalls eine Fehlerquelle darstellt.

Es bleibt das Runge-Kutta-Verfahren, welches einen Fehler in der nächsthöheren Stufe des Runge-Kutta-Verfahrens einbringt.

Wird z.B. mit RK4 (4-stufiges Runge-Kutta-Verfahren) gearbeitet, was auf der Taylor-Entwicklung einer Funktion bis zur Ordnung 4 basiert, so ist der Fehler in Größenordnung der Schrittweite potenziert mit 5, also $\mathcal{O}(h^5)$.

Auswertung an äquidistanten Kollokationspunkten (FD-Methode)

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, dass man die Funktion (2.91) an äquidistanten Kollokationspunkten auswertet. Dabei ist vorteilhaft, dass man die in der PDE vorkommenden Ableitungen nach x als numerischen Differenzenquotienten darstellen kann (Finite-Differenzen-Methode, kurz FD-Methode).

Im Kapitel zur Lösung der Flussgleichung wird die aufgestellte (Pseudo-) Spektralmethode mit der FD-Methode an einem kleinen Beispiel verglichen, um die Vorteile von ersterem aufzuzeigen.

Es wird hier als Beispiel für die FD-Methode wieder ein Problem der Art

$$\partial_t y(x,t) = f(x,t,y'(x,t),y''(x,t),...)$$
(2.138)

betrachtet.

Der Operator \mathcal{L} aus (2.91) soll also nur eine Ableitung nach t beinhalten.

Nun wird die Funktion an x_i i = 0, ..., N äquidistanten Kollokationspunkten ausgewertet, sodass an diesen Punkten die Funktion unabhängig von x ist, also

$$y(x_i, t) =: y_i(t)$$
. (2.139)

Dadurch ist es auch möglich die vorkommenden Ableitungen nach x umzuschreiben, denn z.B. ist an diesen Punkten

$$y'(x_i, t) \approx \frac{y(x_{i+1}, t) - y(x_{i-1}, t)}{x_{i+1} - x_{i-1}}$$
(2.140)

und da der Abstand zwischen zwei Kollokationspunkten konstant sein soll (Δx) folgt daraus

$$y'(x_i, t) \approx \frac{y(x_{i+1}, t) - y(x_{i-1}, t)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$
 (2.141)

Also

$$y'_{i}(t) \approx \frac{y_{i+1}(t) - y_{i-1}(t)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^{2})$$
 (2.142)

oder auch für die zweite Ableitung nach \boldsymbol{x}

$$y_i''(t) \approx \frac{y_{i+1}(t) - 2y_i(t) + y_{i-1}(t)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$
 (2.143)

Beide Ableitungen weisen quadratische Genauigkeit auf, wobei auf den (signifikanten) Unterschied in der Genauigkeit später an einem Beispiel kurz eingegangen wird.

Zu beachten ist, dass diese Ableitungen den symmetrischen Fall darstellen.

Die erste und zweite Ableitung verlangen, dass sowohl ein Funktionswert $y_{i+1}(t)$ als auch ein Funktionswert $y_{i-1}(t)$ existiert.

Deshalb nimmt man an den Rändern die links- und rechtsseitigen Ableitungen, da links von x_0 logischerweise kein Punkt x_{-1} existiert und ebenso rechts von x_N kein Punkt x_{N+1}

Diese werden ebenfalls in quadratischer Genauigkeit gewählt; an den Randpunkten also mit den rechtsseitigen Ableitungen

$$y_0'(t) = \frac{-\frac{3}{2}y_0(t) + 2y_1(t) - \frac{1}{2}y_2(t)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$
(2.144)

$$y_0''(t) = \frac{2y_0(t) - 5y_1(t) + 4y_2(t) - y_3(t)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$
(2.145)

und den linksseitigen Ableitungen

$$y'_{N}(t) = \frac{\frac{3}{2}y_{N}(t) - 2y_{N-1}(t) + \frac{1}{2}y_{N-2}(t)}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^{2})$$
(2.146)

$$y_N''(t) = \frac{2y_N(t) - 5y_{N-1}(t) + 4y_{N-2}(t) - y_{N-3}(t)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) .$$
 (2.147)

Abschließend gilt also

$$\partial_t y_i(t) = f_i(t, y_0(t), y_1(t), \dots, y_N(t)) .$$
(2.148)

Das Problem ist nun auf eine Form gebracht worden, welches mit dem Runge-Kutta-Verfahren gelöst werden kann.

Beispiel:

Die Transportgleichung ist hier durch

$$\partial_t u(x,t) = -\partial_x u(x,t) \tag{2.149}$$

definiert mit $u : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, wobei die Anfangsbedingung zum Zeitpunkt $t_0 = 1$ durch deine Parabel gegeben sein soll, mit

$$u(x,0) = g(x) = x^2 . (2.150)$$

Mit dem Runge-Kutta-Verfahren ist also

$$\partial_t u_i(t) \approx \frac{u_{i+1}(t) - u_{i-1}(t)}{2\Delta x} \tag{2.151}$$

an ${\cal N}-1$ Kollokationspunkten zu lösen, die Vorgänger- und Nachfolgepunkt besitzen. An den Randpunkten ist

$$\partial_t u_0(t) \approx \frac{-\frac{3}{2}u_0(t) + 2u_1(t) - \frac{1}{2}u_2(t)}{\Delta x}$$
(2.152)

und

$$\partial_t u_N(t) \approx \frac{\frac{3}{2}u_N(t) - 2u_{N-1}(t) + \frac{1}{2}u_{N-2}(t)}{\Delta x}$$
(2.153)

aufzustellen.

Es ergibt sich also ein DGL-System mit ${\cal N}+1$ Gleichungen.





Rechts hingegen wurde mit linearer Genauigkeit gearbeitet und man erkennt am Rand deutliche Abweichungen von der analytischen Lösung.

Dabei wurde mit 101 äquidistanten Kollokationspunkten gearbeitet. Die Schrittweite des Runge-Kutta-Verfahrens war dabei $h = 10^{-6}$.

3 Lösung des dimensionsbehafteten Flusses

3.1 Lösung des Vakuumflusses

Die Arbeitsumgebung soll zur Lösung des Vakuumflusses $\sigma \in [0, \sigma_{max}]$ sein. Demnach gilt es die vorkommenden Ableitungen im Vakuumfluss mit

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma^2} = \frac{1}{2\sigma} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} \tag{3.1}$$

und

$$\frac{\mathrm{d}}{d(\sigma^2)^2} = -\frac{1}{4\sigma^3} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} + \frac{1}{4\sigma^2} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2}$$
(3.2)

zu transformieren. Einsetzen liefert

$$\partial_k \Omega_k(\sigma) = \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{k^2 + \sigma^{-1} \Omega'(\sigma)}} + \frac{1}{\sqrt{k^2 + \Omega''(\sigma)}} - \frac{24}{\sqrt{k^2 + g^2 \sigma^2}} \right] .$$
(3.3)

Mit $\sigma_{max}\sqrt{\frac{x+1}{2}} = \sigma \in [0, \sigma_{max}]$ und den dazugehörigen Ableitungstransformationen folgt damit am *n*-ten Kollokationspunkt \tilde{x}_n , dass

$$(K \cdot \partial_k \vec{a}_k)_n = \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{k^2 + \frac{4}{\sigma_{max}^2} (K \cdot D \cdot \vec{a}_k)_n}} + \frac{1}{\sqrt{k^2 + \frac{4}{\sigma_{max}^2} (K \cdot D \cdot \vec{a}_k + 2 \cdot \operatorname{diag}(\tilde{x}_i + 1) \cdot K \cdot D^2 \cdot \vec{a}_k)_n}} - \frac{24}{\sqrt{k^2 + g^2 \sigma_{max}^2 \frac{\tilde{x}_n + 1}{2}}} \right] =: R(\tilde{x}_n) .$$
(3.4)

Das Gleichungssystem

$$\partial_k \vec{a}_k = K^{-1} \vec{R}(\tilde{x}) \tag{3.5}$$

gilt es nun mit dem zum Quark-Meson-Modell passenden Anfangspotential im chiralen Limes

$$\Omega_{k=\Lambda}(\sigma^2) = \frac{\lambda}{4} \left(\sigma^2 - \varphi^2\right)^2 \tag{3.6}$$

zu lösen. Mit der Normierung, dass das Potential bei $\sigma=0$ verschwindet, folgt

$$\tilde{\Omega}_{k=\Lambda}(\sigma^2) = \frac{\lambda}{4} \left(\sigma^2 - \varphi^2\right)^2 - \frac{\lambda}{4}\varphi^4 .$$
(3.7)

Diese Realisierung des Anfangspotentials nennt man auch *Wigner-Weyl*-Realisierung [3][7]. Diese Normierung ist legitim, da durch Ableiten die Konstante immer verschwindet.



Abbildung 3.1: Hier ein Beispiel für das Anfangspotential beim UV-Cutoff $\Lambda = 1000$ MeV mit $\lambda = 1$ und $\varphi^2 = -(168.038 \text{ MeV})^2$.

Das Anfangspotential weist einen biquadratischen Charakter auf. Das Potential ist, wie zu der Arbeitsumgebung $\sigma \in [0, \sigma_{max}]$ gefordert, also immer gerade.

Die Lösung des Vakuumflusses mit Kollokation und Runge-Kutta-Verfahren unter dieser Anfangsbedingung sieht wie folgt aus:



Abbildung 3.2: Lösung des Vakuumflusses mit $\lambda = 1$ und $\varphi^2 = -(168.038 \text{ MeV})^2$ für das Anfangspotential. Dabei wurde das Anfangspotential bis zur Ordnung N = 5 entwickelt und das Runge-Kutta-Verfahren hatte eine Schrittweite von $h = 10^{-8}$. Es wurde an 61 Interpolationspunkten ausgewertet und auf $\sigma \in [0, 600]$ entwickelt. Der UV-Cutoff war $\Lambda = 1000$ MeV. Rechts wurde das gesamte Potential durch Spiegelung erstellt.

Charakteristisch für die Lösung der Flussgleichung ist, dass sich ab einem gewissen k für große σ der Fluss nicht mehr ändert (Abb. (3.2)). Weiterhin ist erkennbar, dass beim Herunterfahren von k zunächst der Fluss ansteigt und konkav wird, im Gegensatz zur konvexen Anfangsbedingung. Wird k jedoch weiter verringert, so wird die Lösung der Flussgleichung wieder zunehmend konvex, bis sie ab einem $k \to 0$ wieder ganz konvex ist. Bei der Variation der UV-Skala k befindet sich das System also in der Phase spontaner Symmetriebrechung, was an dem typischen Mexican Hat-Potential erkennbar ist. Eine physikalisch sinnvolle Interpretation dieser Ergebnisse sei hier im Hinblick auf die Parameter der Anfangsbedingung dahingestellt.

Sowohl λ als auch $-\varphi^2$ sind für die Position des Minimums verantwortlich. Eine Variation beider ermöglicht das Selektieren nach bestimmten Fluss-Minima, die beim Vakuumfluss praktisch

immer vorhanden sein müssen.



Abbildung 3.3: Lösung des Vakuumflusses im chiralen Limes mit $\lambda = 11$ und $\varphi^2 = -(135 \text{ MeV})^2$ für das Anfangspotential. Dabei wurde das Anfangspotential bis zur Ordnung N = 5 entwickelt und das Runge-Kutta-Verfahren hatte eine Schrittweite von $h = 10^{-8}$. Es wurde an 101 Interpolationspunkten ausgewertet und auf $\sigma \in [0, 140]$ entwickelt. Der UV-Cutoff war dabei $\Lambda = 800$ MeV.

In Abbildung (3.3) wurden die Parameter so variiert, dass im chiralen Limes für den IR-Cutoff k = 30 MeV ein Tiefpunkt bei ca. 90 MeV zu sehen ist. Da über die aufgestellten Methoden die Entwicklungskoeffizienten bestimmt worden sind, kann man mit diesen auch eine genäherte Funktionsvorschrift für $\Omega_{k=30}(\sigma^2)$ aufstellen. Die Entwicklungskoeffizienten sind auf $\sigma \in [0, 140]$ durch

$a_0 =$	$1.53559 \cdot 10^{10}$	$a_3 =$	$2.64333 \cdot 10^{7}$
$a_1 =$	$1.01564 \cdot 10^8$	$a_4 =$	$5.74885 \cdot 10^{6}$
$a_2 =$	$6.46885 \cdot 10^7$	$a_5 =$	274460

gegeben und damit lautet die Vorschrift im chiralen Limes

$$\Omega_{k=30}(\sigma^2) \approx \sum_{n=0}^{5} a_n \cdot T_n \left(2 \cdot \left[\frac{\sigma}{140} \right]^2 - 1 \right) .$$

$$(3.8)$$

Eine Auswertung mit *Wolfram Mathematica* ergibt ein Minimum bei $f_{\pi} = 87.799$ MeV was ungefähr der Pionzerfallskonstanten entspricht.

Eine explizite Symmetriebrechung des IR-Potentials mit

$$\Omega_c = \Omega_{k=30}(\sigma^2) - c \cdot \sigma \tag{3.9}$$

mit $c = 17500000 \text{ MeV}^3$ ergibt ein Minimum bei $\sigma = 138.026 \text{ MeV}$, welches ungefähr bei der Pionmasse liegt.



Abbildung 3.4: Symmetriegebrochener Vakuumfluss

Es sei erwähnt, dass die Wahl der Parameter willkürlich getroffen worden ist. Die Ergebnisse lassen sich womöglich durch andere Parameter reproduzieren. Deswegen wird hier und auch nachfolgend keine explizite Fehlerbetrachtung getätigt.

Bei den Auswertungen sind folgende Dinge erwähnenswert: bis zu einem gewissen k liegen die Laufzeiten der Implementierung im Bereich von 0.001 bis 0.2 Sekunden. Erst ab einem k < 100 MeV sind die Laufzeiten signifikant angewachsen, jedoch sind alle unter zwei Minuten geblieben. Dies ist ein Beweis für die Mächtigkeit der (pseudo-) spektralen Methoden, denn die Entwicklungsordnungen war mit N = 5 nicht hoch.

Auch die Wahl des UV-Cutoffs war insofern wichtig, als dass ein zu hoher Cutoff

(z.B. $\Lambda = 1000$ MeV) die Auswertung bei kleinen k erschwerte. Mit $\Lambda = 800$ MeV war dies hingegen möglich.

Weiterhin ist die Tatsache interessant, dass eine zu große Entwicklungsordnung (N > 15) die Numerik insofern störte, als dass sich das Anfangspotential und die Lösung bei anderen Skalen nicht unterscheidet.

3.2 Variation der Temperatur

Einschalten der Temperatur ohne chemisches Potential ergibt für die dimensionsbehaftete Flussgleichung im chiralen Limes unter der gleichen Anfangsbedingung auf $\sigma \in [0, \sigma_{max}]$ folgendes zu lösendes System:

$$\partial_k \Omega_k(\sigma) = \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{k^2 + \sigma^{-1}\Omega'(\sigma)}} \cdot \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + \sigma^{-1}\Omega'(\sigma)}}{2T}\right) + \frac{1}{\sqrt{k^2 + \Omega''(\sigma)}} \cdot \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + \Omega''(\sigma)}}{2T}\right) - \frac{24}{\sqrt{k^2 + g^2\sigma^2}} \cdot \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2 + g^2\sigma^2}}{2T}\right) \right]$$
(3.10)

Man bewegt sich im QCD-Phasendiagramm nur entlang der Temperatur-Achse. Der dimensionsbehaftete Fluss sollte mit dem Hochfahren der Temperatur sein Minimum weiter gegen 0 verschieben, sodass für höhere Temperaturen $T_{krit} > 200$ MeV gar kein Minimum mehr zu sehen ist, außer natürlich das vorhandene bei $\sigma = 0$. Es sollte also nicht mehr zur spontanen Symmetriebrechung kommen, daher sollte die Flussgleichung also gar nicht mehr konkav werden [3].



Abbildung 3.5: Lösung der Flussgleichung ohne chemisches Potential mit $\lambda = 11$ und $\varphi^2 = -(135 \text{ MeV})^2$ für das Anfangspotential. Dabei wurde das Anfangspotential bis zur Ordnung N = 5 entwickelt und das Runge-Kutta-Verfahren hatte eine Schrittweite von $h = 10^{-8}$. Es wurde an 61 Interpolationspunkten ausgewertet und auf $\sigma \in [0, 140]$ entwickelt. Links mit T = 100 MeV. Rechts mit T = 170 MeV. Unten mit T = 250 MeV.

Für T = 100 MeV ergibt sich für den IR-Cutoff k = 30 MeV ein Minimum bei

86.4636 MeV. Für T = 170 MeV ergibt sich für den selben IR-Cutoff ein Minimum bei 69.7108 MeV. Für T = 250 MeV gibt es kein Minimum mehr und der Verlauf bei verschiedenen k unterscheidet sich nicht mehr.

Die Vorhersagen wurden also bestätigt. Eine Interpretation wäre, dass bei zu hohen Temperaturen im Quark-Meson-Modell keine Bindungen aus Quarks mehr entstehen können.

3.3 Variation des chemischen Potentials

Folgendes System gilt es zu lösen:

$$\partial_k \Omega_k(\sigma) = \frac{k^4}{12\pi^2} \left[\frac{3}{\sqrt{k^2 + \sigma^{-1}\Omega'(\sigma)}} \cdot \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + \sigma^{-1}\Omega'(\sigma)}}{2T}\right) + \frac{1}{\sqrt{k^2 + \Omega''(\sigma)}} \cdot \coth\left(\frac{\sqrt{k^2 + \Omega''(\sigma)}}{2T}\right) - \frac{12}{\sqrt{k^2 + g^2\sigma^2}} \cdot \left(\tanh\left(\frac{\sqrt{k^2 + g^2\sigma^2} - \mu}{2T}\right) + \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2 + g^2\sigma^2} + \mu}{2T}\right) \right) \right]$$
(3.11)



Abbildung 3.6: Lösung der Flussgleichung mit chemischen Potential bei verschwindenden Temperaturen ($T \propto 1$ MeV) mit $\lambda = 11$ und $\varphi^2 = -(135 \text{ MeV})^2$ für das Anfangspotential. Dabei wurde das Anfangspotential bis zur Ordnung N = 5 entwickelt und das Runge-Kutta-Verfahren hatte eine Schrittweite von $h = 10^{-8}$. Es wurde an 61 Interpolationspunkten ausgewertet und auf $\sigma \in [0, 140]$ entwickelt.

In Abb. (3.6) ist mit einem chemischen Potential von $\mu = 10$ MeV ausgewertet worden. Dabei ist zum Vakuumfluss kein Unterschied auszumachen. Eine Auswertung der produzierten Funktionsvorschrift ergibt für den IR-Cutoff k = 30 MeV ein Minimum bei 87.7974 MeV, welches keine sicheren Aussagen über den Einfluss des chemischen Potentials ermöglicht, da sich die Position des Minimums des Vakuumflusses nicht wesentlich unterscheidet. Es ist auch für kleinere chemische Potentiale ausgewertet worden, welche ebenfalls die gleiche Position produzieren. Auch eine Erhöhung des chemischen Potentials verändert nicht signifikant die Position des Minimums. Bei $\mu = 300$ MeV ergibt sich ein Minimum bei 87.7432 MeV.

Erst ein $\mu \ge 400$ MeV verändert den Verlauf merklich.



Abbildung 3.7: Lösung der Flussgleichung mit chemischen Potential bei verschwindenden Temperaturen ($T \propto 1$ MeV) bei $\mu = 400$ MeV.

Der Verlauf in Abb. (3.7) bei kleinen aber unterschiedlichen Skalen k unterscheidet sich nicht, sodass nur für k = 30 MeV abgebildet worden ist. Jedoch ist zu erkennen, dass die Flussgleichung nicht mehr konkav wird und ist. Im Hinblick darauf, dass zwar der Einfluss des chemischen Potentials zunächst gering ist, die Verschiebung des Minimums dem Anschein nach für größer werdende chemische Potentiale auf der positiven Halbachse aber weiter nach links stattfindet und dann jedoch das Minimum ganz verschwindet, lässt darauf schließen, dass es nicht zu Symmetriebrechung kommt. Man kann jedoch nicht schließen, dass, ähnlich wie bei der Temperaturvariation, das die Position des Minimums für große μ gegen 0 geht. Es scheint viel mehr so, als würde das Minimum ab einem bestimmten μ verschwinden.

Dies würde auch den Verlauf erklären. Denn eigentlich sollte wie für große Temperaturen die Funktion wieder einen quadratischen bzw. biquadratischen Charakter ähnlich der des Anfangspotentials aufweisen. Es ist aber ersichtlich, dass der Verlauf im mittleren Bereich von dem einer biquadratischen Funktion abweicht.

3.4 Vergleich: Lösung des Vakuumflusses mit der FD-Methode

Den Abschluss soll ein Vergleich der Lösung des Vakuumflusses durch Kollokation und Runge-Kutta-Verfahren mit der FD-Methode bilden.



Abbildung 3.8: Lösung des Vakuumflusses für k = 300 MeV im chiralen Limes mit $\lambda = 11$ und $\varphi^2 = -(135 \text{ MeV})^2$ für das Anfangspotential mit der FD-Methode. Das Runge-Kutta-Verfahren hatte eine Schrittweite von $h = 10^{-8}$. Es wurde an 61 äquidistanten Kollokationspunkten ausgewertet und auf $\sigma \in [0, 140]$ entwickelt. Der UV-Cutoff war dabei $\Lambda = 800$ MeV. Die FD-Methode wurde mit quadratischer Genauigkeit implementiert.

Zu sehen ist ebenso die Lösung mit Runge-Kutta-Verfahren und Kollokationsmethode unter den gleichen Anfangsparametern. Dabei wurde bis zur Ordnung 5 entwickelt und an 61 Interpolationspunkten ausgewertet.

Folgendes ist festzustellen: Der Verlauf der beiden Lösungen ist nahezu identisch. Das spricht dafür, dass beide Implementierungen korrekt arbeiten.

Jedoch war eine Auswertung mit der FD-Methode für k < 300 MeV nicht möglich, sodass der noch wichtigere Vergleich beim IR-Cutoff nicht getroffen werden konnte.

Eine Erhöhung der Zahl der äquidistanten Kollokationspunkte der FD-Methode und eine Verkleinerung der Schrittweite h des Runge-Kutta-Verfahrens führen entweder zu keinem sich unterscheidendem Verlauf zu dem in Abb. (3.8) oder lassen die Numerik zusammenbrechen. Das liegt daran, da die Anzahl der äquidistanten Kollokaionspunkte automatisch die Größe des Differentialgleichungssystems angibt.

Ein höhere Rechenleistung und eine optimierte Implementierung der FD-Methode würden diesem Problem evtl. Abhilfe verschaffen und auch eine Auswertung für kleinere k ermöglichen.

4 Fazit und Ausblick

Am Ende bleibt festzuhalten, dass die Kombination von Runge-Kutta-Verfahren und Kollokationsmethode als eine mögliche Realisierung der (pseudo-) spektralen Methoden erfolgreich gute Ergebnisse geliefert hat. Das zeigt sich unter anderem an den einfachen Modellproblemen, wie der Wärmeleitungsgleichung und der Transportgleichung aber auch der nichtperturbativen Flussgleichung, welches sich explizit in den extrem kurzen Rechenzeiten offenbart hat. Diese Rechenzeiten sind durch die kleinen, aber ausreichenden, Entwicklungsordnungen zustande gekommen.

In diesem Zusammenhang muss man jedoch auch einräumen, dass die Evaluation der Flussgleichung bis zum IR-Cutoff $k \propto 30$ MeV nicht das Maß aller Dinge ist. Es werden sich für noch kleinere k noch aussagekräftigere Ergebnisse erzeugen lassen. Dies war jedoch so nicht möglich, da der relativ simple Runge-Kutta-Integrator an seine Grenzen gerät. Das offenbart sich nicht durch extrem lange Rechenzeiten, sondern durch numerisch nicht verwertbare Datensätze. Eine Erhöhung der Ordnung N hat eine Erhöhung der Kollokationspunkte als Konsequenz, was grundsätzlich immer Genauigkeitsvorteile bieten sollte. Das Runge-Kutta-Verfahren muss damit jedoch für N+1 Entwicklungskoeffizienten N+1 Differentialgleichungen lösen. Das ist für kleine Ordnungen auch durchaus möglich, jedoch wird der Fehler beim Iterieren damit immer größer. Es würde sich als vorteilhaft erweisen die Lösung der Funktion nicht nur in einer Dimension spektral zu zerlegen, sondern auch in der zweiten Dimension. Bei der Flussgleichung würde man also nebst der σ^2 -Abhängigkeit auch die Skalenabhängigkeit k spektral zerlegen [4]. Damit könnte man auf numerische Integratoren auf Basis einer Taylor-Entwicklung verzichten.

Ein Vergleich der aufgeführten (Pseudo-) Spektralmethode mit der FD-Methode weist jedoch eindeutig mehr Vorteile bei ersterem auf. Die Laufzeit der Kombination von Runge-Kutta-Verfahren und Kollokationsmethode war signifkant kleiner, als die der FD-Methode und auch die Speicherauslastung war kleiner.

Doch insbesondere die Möglichkeit mit der (Pseudo-) Spektralmethode bei der Flussgleichung für kleine Skalen k mit relativ wenig Aufwand gute Ergebnisse zu erzielen, an welchem gleichzeitig die FD-Methode schon bei viel größeren Skalen k versagt, überzeugt in Gänze. Dies sind große Vorteile, wenn man verhältnismäßig komplizierte Rechnungen auf Rechnern mit geringer Rechenleistung ausführen möchte.

Die Auseinandersetzung mit den (Pseudo-) Spektralmethoden bietet eine solide Grundlage für weitere Untersuchungen, die über den Fluss im linearen σ -Modell hinaus gehen. Überall da, wo komplizierte Modellannahmen getätigt werden müssen, kann man (Pseudo-) Spektralmethoden anwenden. Sei es bei der Untersuchung von sehr dichten Objekten wie Neutronensternen, der Analyse von Festkörpern oder der Untersuchung von neuartigen Modellen des Hochfrequenzhandels des modernen Finanzwesens.

Literaturverzeichnis

- WIPF, A.: Statistical Approach to Quantum Field Theory. An Introduction. Springer, 2013. - 89,257–262 S.
- SCHAEFER, B. J.; PIRNER, H. J.: Renormalization Group Flow and Equation of State of Quarks and Mesons. In: *Nucl.Phys. A* 660 (1999), S. 439–474. http://dx.doi.org/10. 1016/S0375-9474(99)00409-1. - DOI 10.1016/S0375-9474(99)00409-1
- [3] SCHAEFER, Bernd-Jochen ; WAMBACH, Jochen: Renormalization Group Approach towards the QCD Phase Diagram. In: *Phys.Part.Nucl.* 39:1025-1032,2008 (Phys.Part.Nucl.39:1025-1032,2008). http://dx.doi.org/10.1134/S1063779608070083.
 DOI 10.1134/S1063779608070083
- [4] BORCHARDT, J.; KNORR, B.: Solving functional flow equations with pseudo-spectral methods. In: Phys. Rev. D 94, 025027 (2016), S. 1–3
- [5] BORCHARDT, J.; KNORR, B.: Global solutions of functional fixed point equations via pseudo-spectral methods. In: *Phys. Rev. D* 91, 105011 (2015), S. 1–4
- [6] SCHAEFER, B-J.: Skript zur Thermodynamik. Vorlesungsskript, v 2016
- BOHR, O.: Renormierungsgruppen-Flussgleichungen und der chirale Phasenuebergang, Technische Universitaet Darmstadt, Diss., 2001
- [8] DEUFLHARD, P.; BORNEMANN, F.: Numerische Mathematik. Band 2: Gewöhnliche Differentialgleichungen. 2. vollständige und überarbeitete Auflage. de Gruyter, 2002
- [9] P.BOYD: Chebyshev and Fourier spectral methods. Second Edition. Courier Dover Publications, 2000
- [10] FORNBERG, B.: Tau, Galerkin, and collocation (PS) implementations. Cambridge University Press, 1996. – 161–166 S.
- [11] GROSSMANN, C.; ROOS, H-G.; STYNES, Martin: Numerical Treatment of Partial Differential Equations. Springer Science and Business Media, 2007
- [12] CASSING, W.: Skript zur Quantenmechanik I. Vorlesungsskript, v 2015
- [13] GALASSI, M.; DAVIES, J.; THEILER, J.; GOUGH, B.; JUNGMAN, G.; ALKEN, P.; BOOTH, M.; ROSSI, F.; ULERICH, R.: GNU Scientific Library. Edition 2.2.1, for GSL Version 2.2.1 31 August 2016 https://www.gnu.org/software/gsl/manual/gsl-ref.pdf

Für diese Arbeit wurde als Programmiersprache C/C++ verwendet. Das Datenformat war dabei durchgängig *double*.

Die folgenden Programme Bibliotheken wurden benutzt:

- Entwicklungsumgebung Code::Blocks
- Numerische Bibliothek GSL [13]
- Wolfram Mathematica 10

Danksagung

Mein Dank gilt zunächst PD Dr. Bernd-Jochen Schaefer für die Aufnahme in seine Arbeitsgruppe und die Bereitstellung dieses Themas. Auch bei Prof. Dr. Dr. Wolfgang Cassing möchte mich für die Anfertigung des Zweitgutachtens dieser Arbeit bedanken.

Ein großes Dankeschön gilt Julian, mit dem der konstruktive Disput immer eine Freude war. Und zu guter Letzt gilt mein Dank der Korrekturleserin Laura für das Entschachteln von verschachtelten Sätzen.

Selbständigkeitserklärung

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.

Gießen, den 13. September 2016