

Roland Krenn

# **Optimierung eines numerischen Lösungsverfahrens für ein nichtlineares Integralgleichungssystem**

## **Diplomarbeit**

zur Erlangung des akademischen Grades eines  
Magisters  
an der Naturwissenschaftlichen Fakultät der  
Karl-Franzens-Universität Graz

Betreuer: Univ.-Prof. Dr. Reinhard Alkofer  
Institut für Physik

2007



# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2 Dyson-Schwinger Gleichungen in der Quantenchromodynamik</b>	<b>7</b>
2.1 Quantenchromodynamik (QCD) . . . . .	7
2.2 Die effektive Wirkung . . . . .	11
2.3 Renormierungsverfahren . . . . .	14
2.4 Dyson-Schwinger Gleichungen für den Quarkpropagator . . . . .	15
2.4.1 Herleitung der Dyson-Schwinger Gleichungen . . . . .	17
2.4.2 Die Gap-Gleichung . . . . .	18
2.4.3 Die Gap-Gleichung in Regenbogennäherung . . . . .	20
2.4.4 Renormierung der Gap-Gleichung . . . . .	21
2.5 Die Gap-Gleichung in Coulombeichung . . . . .	23
2.6 Optimierungsstrategien . . . . .	29
<b>3 Numerische Quadratur</b>	<b>30</b>
3.1 Interpolatorische Quadraturformeln . . . . .	31
3.2 Gauß-Quadratur und Orthogonalpolynome . . . . .	32
3.3 Berechnung der Stützstellen und Gewichte . . . . .	34
3.4 Gauß-Legendre Quadratur . . . . .	35
3.5 Gauß-Kronrod-Quadratur . . . . .	37
3.6 Automatische Integration . . . . .	38
3.7 Mehrdimensionale Integration . . . . .	39
<b>4 Der epsilon-Algorithmus</b>	<b>41</b>

4.1	Verallgemeinerte Summationsprozesse . . . . .	41
4.2	Die Schmidt-Transformation und Wynn's epsilon-Algorithmus . . . . .	42
4.2.1	Programmierung des epsilon-Algorithmus . . . . .	44
<b>5</b>	<b>Programmierung</b>	<b>47</b>
5.1	Das Programm <b>QuarkpropagatorMPI</b> . . . . .	48
5.2	Beschreibung des Lösungsverfahrens . . . . .	50
5.3	Benutzerschnittstelle . . . . .	52
<b>6</b>	<b>Numerische Ergebnisse</b>	<b>53</b>
6.1	Instantane Näherung . . . . .	53
6.2	Hinzunahme von retardierten transversalen Gluonen . . . . .	54
<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>		<b>62</b>
<b>A</b>	<b>Notationen</b>	<b>63</b>
A.1	Einheiten . . . . .	63
A.2	Minkowskiraum . . . . .	63
A.3	Gamma-Matrizen . . . . .	65
<b>B</b>	<b>Herleitung der Quarkpropagatorfunktionen</b>	<b>67</b>
B.1	Setup . . . . .	67
B.2	Herleitung . . . . .	68
<b>C</b>	<b>Wick-Rotation</b>	<b>72</b>
C.1	Wick-Rotation . . . . .	72
<b>D</b>	<b>Interpolation und Extrapolation</b>	<b>73</b>
D.1	Kubische Spline-Interpolation . . . . .	73
D.2	Bikubische Spline-Interpolation . . . . .	76
<b>Danksagung</b>		<b>83</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Eine zentrale Zielsetzung der modernen Physik ist die Beschreibung der fundamentalen Teilchen und ihrer Wechselwirkungen innerhalb einer einheitlichen Theorie. Als vielversprechendster Kandidat zur Beschreibung der starken Wechselwirkung hat sich die Quantenchromodynamik (QCD) etabliert. Die QCD ist eine relativistische Quantenfeldtheorie (QFT) und sie beschreibt die starke Wechselwirkung der fundamentalen Fermionen mit Spin  $\frac{1}{2}$ , den Quarks, durch den Austausch von masselosen SU(3)-Eichbosonen mit Spin 1, den Gluonen. Die Dynamik der beteiligten Teilchen wird durch das Prinzip der lokalen Eichinvarianz festgelegt. In der QCD tragen nicht nur die Materienteilchen (die Quarks) eine fundamentale Ladung (die sogenannte Farbladung), sondern auch die Träger der Wechselwirkung, die Gluonen. Die zugrundeliegende Eichtheorie ist in einem solchen Fall nichtabelsch und die Gluonen koppeln in Gegensatz zu den Photonen in der Quantenelektrodynamik (QED) selbst aneinander. Quarks und Gluonen existieren nicht als beobachtbare freie Zustände, sondern liegen nur als farbneutrale gebundene Zustände vor und sind in den Hadronen eingeschlossen. Jeder Versuch, ein einzelnes Quark durch ein Experiment, bei dem sehr hochenergetische Teilchen zur Kollision gebracht werden, aus einem Hadron herauszulösen, endet nur in der Erzeugung von neuen Hadronen - ein ungebundenes, nicht farbneutrales Teilchen wird niemals erzeugt.

Wie können Hadronen als System von Quarks und Gluonen beschrieben werden? Bei tief inelastischen Streuexperimenten an Nukleonen zeigen die Streuquerschnitte bei hohen Energien eine immer einfachere Struktur. Unter diesen Bedingungen erscheinen die Nukleonen wie eine Ansammlung von freien Teilchen. Dieses Verhalten wird allgemein als "Asymptotische Freiheit" bezeichnet und ihm liegt das Phänomen zugrunde, dass die starke Wechselwirkung bei kleinen Abständen unterhalb von 0.2 fm schwach wird, was die Anwendung von störungstheoretischen (perturbativen) Verfahren ermöglicht.

Das Gegenteil der Asymptotischen Freiheit nennt man etwas blumig "Infrarote Sklaverei". Bei großen Abständen findet lediglich ein kleiner Impulsübertrag statt. In diesem Bereich steigt die effektive Kopplung stark an, was dazu führt, dass die Quarks in den Hadronen permanent eingeschlossen sind und nicht als freie Teilchen beobachtet werden können. Aus diesem Grund hat man die sogenannte Confinement-Hypothese formuliert, der zufolge die sichtbaren Teilchen, die der starken Wechselwirkung unterliegen (Baryonen und Mesonen), nur als farbneutrale Singletts vorliegen dürfen. Es ist wichtig anzumerken, dass es sich bei der Confinement-Hypothese um ein Postulat handelt. Im Gegensatz zur Asymptotischen Freiheit konnte das Confinement bisher noch nicht aus den Grundgleichungen der QCD abgeleitet werden. Es wurden im Laufe der Zeit zwar viele Fortschritte erzielt, eine analytische Erklärung dieser Eigenschaft steht aber trotz mehr als dreißig Jahren intensiver Forschung auf diesem Gebiet nach wie vor aus. Dafür existieren mittlerweile eine Reihe von Ansätzen, um den Farbeinschluss der Quarks zu erklären. Dazu zählen beispielsweise [1] der duale Meissnereffekt, der auf der Kondensation von magnetischen

Monopolen basiert; eine andere Modellvorstellung verwendet das Bild der Wirbelkondensation, bei der der Farbeinschluss von Quarks durch die Vakuumkondensation von Zentrumswirbeln bewirkt wird. Man darf also ohne Übertreibung behaupten, dass die Untersuchung von Mechanismen, die zum Phänomen des Confinement führen, ein anspruchsvolles Problem darstellt.

In dieser Diplomarbeit wird der von Gribov [2] und später von Zwanziger [3] vorgeschlagene Formalismus zur Erklärung des Confinement-Phänomens zugrunde gelegt: Um Mehrdeutigkeiten der Eichfixierung (Gribov-Problem) in Coulombbeichung zu vermeiden, verlangt man, dass die Korrelationen zwischen den transversalen Gluonen für große Abstände verschwinden. Dies führt dazu, dass die Korrelationen zwischen den Coulombgluonen mit dem Abstand sehr stark ansteigen. Dies wiederum führt zu einem Potential zwischen den Quarks, das linear mit dem Abstand zwischen ihnen anwächst und somit zu Confinement. In diesem Formalismus ist das Confinement-Phänomen eng mit dem Infrarotverhalten der eichvarianten Propagatoren verknüpft. Deren Berechnung verlangt nichtstörungstheoretische Methoden. Im Rahmen der Quantenchromodynamik formen die Dyson-Schwinger Gleichungen (DSEs) für die Propagatoren einen Satz von nichtlinearen, gekoppelten Integralgleichungen. Die Lösung dieser gekoppelten Dyson-Schwinger Gleichungen ermöglicht es, die Eigenschaften von Hadronen im nicht-perturbativen Bereich in einem Poincaré-kovarianten Formalismus zu studieren.

Diese Diplomarbeit befasst sich mit Optimierungsverfahren zur Lösung eines trunkierten Systems von nichtlinearen Integralgleichungen. Der Schwerpunkt liegt auf dem Quarkpropagator und seiner effizienten numerischen Behandlung. Im ersten Teil von Kapitel 2 werden einige allgemeine Aspekte der QCD erörtert, die für die Diskussion der Propagatoren der Theorie von Relevanz sind. Im zweiten Teil dieses Kapitels werden dann mit Hilfe des Erzeugenden Funktionalen und der effektiven Lagrangedichte die Dyson-Schwinger Gleichungen für den Quarkpropagator hergeleitet. Diese allgemein als Gap-Gleichung bezeichneten DSEs formen wie alle anderen DSEs auch ein unendliches System von gekoppelten, nichtlinearen Integralgleichungen. Für eine numerische Behandlung ist es notwendig, dieses unendliche Integralgleichungssystem so zu trunkieren, dass die Symmetrieeigenschaften der Theorie berücksichtigt werden. Anschließend erhält man durch Spurnahme einen Satz von gekoppelten nichtlinearen Integralgleichungen für die Quarkpropagatorfunktionen, die mittels eines iterativen Gesamtschrittverfahrens gelöst werden. An Optimierungsstrategien verwende ich unter anderem zwei sich einander ergänzende Techniken: zum einen adaptive numerische Quadraturverfahren mit automatischer Ergebnisverifikation, zum anderen ein Konvergenzbeschleunigungsverfahren, das auf nichtlinearen Folgentransformationen basiert. Zur Lösung der Integralgleichungen wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit ein Automatischer Integrator auf Basis der Gauß-Kronrod Quadraturformeln implementiert. Die verschiedenen Teilaspekte der adaptiven numerischen Quadratur und Kubatur werden in Kapitel 3 behandelt. Das infrarotsinguläre Verhalten der Integralkerne verschlechtert insbesondere das Konvergenzverhalten des verwendeten Iterationsalgorithmus. Abhängig von der Wahl des Infrarotregulators erhöht sich einerseits die Anzahl der benötigten Funktionsauswertungen pro Iterationsschritt, andererseits steigt die Gesamtzahl der benötigten Iterationen stark an. Verallgemeinerte Summationsprozesse zur Konvergenzbeschleunigung und insbesondere der epsilon-Algorithmus werden in Kapitel 4 betrachtet. Das numerische Verfahren zur Lösung der Dyson-Schwinger Gleichungen wird in Kapitel 5 besprochen. Die Diskussion der erzielten Ergebnisse findet sich in Kapitel 6. Einige Teilaspekte dieser Arbeit wurden im Hinblick auf eine bessere Lesbarkeit in Anhänge ausgelagert. Beispielsweise macht es die dynamische Wahl der Stützstellen im Integrationsalgorithmus notwendig, die in den Integralgleichungen vorkommenden Propagatorfunktionen zu interpolieren. In einem solchen Fall wird auf den jeweiligen Anhang verwiesen.

## Kapitel 2

# Dyson-Schwinger Gleichungen in der Quantenchromodynamik

*I consider that I understand an equation when I can predict the properties of its solutions, without actually solving it.*

Paul A. M. Dirac

### 2.1 Quantenchromodynamik (QCD)

Die *Quantenfeldtheorie* bildet die Basis für unser gegenwärtiges Verständnis der Teilchenphysik. Im Rahmen einer Quantenfeldtheorie wird die Wechselwirkung durch den Austausch von Teilchen beschrieben. *Wechselwirkung mittels Austauschteilchen* bedeutet, dass die Quantenfelder entweder miteinander oder gegebenenfalls an sich selbst koppeln. Die mathematische Beschreibung der Wechselwirkung zwischen den Konstituenten gründet sich auf das Prinzip der *lokalen Eichinvarianz*. *Eichinvarianz* bedeutet, dass die Aussagen einer Quantenfeldtheorie unverändert bleiben, wenn die Quantenfelder einer *Eichtransformation* unterworfen werden. *Lokalität* bedeutet, dass die Felder punktförmig aneinander koppeln. Die Forderung nach lokaler Eichinvarianz impliziert die Existenz eines Feldes  $A(x)$ . Dieses Feld wird als *Eichfeld* bezeichnet und es beschreibt das Austauschteilchen, welches die *Eichwechselwirkung* vermittelt. Die *Quantenchromodynamik (QCD)* als Theorie der starken Wechselwirkung ist eine *Eichtheorie* auf Basis der fundamentalen Darstellung der nichtabelschen Eichgruppe  $SU(N_c)$ , mit  $c$  wie color und  $N_c = 3$  die Anzahl der Farbfreiheitsgrade. In Analogie zur Quantenelektrodynamik (QED) mit abelscher Eichgruppe  $U(1)$  erfolgt die Konstruktion der QCD durch Verallgemeinerung des Prinzips der Eichinvarianz auf nichtabelsche Gruppen. Im Gegensatz zur QED koppeln die nichtabelschen Eichfelder der QCD auch selbst aneinander, was die Strukturen gegenüber einer abelschen Eichtheorie wesentlich verändert.

Die Konstruktion einer Eichtheorie baut auf der Quantenfeldtheorie freier Teilchen auf. Eine renormierbare Quantenfeldtheorie ist - bei Angabe eines geeigneten Regularisierungs- und Renormierungsschemas - durch die Angabe ihres Wirkungsfunktionalen

$$\mathcal{S}[\phi] = \int dx \mathcal{L}[\phi] \quad (2.1)$$

vollständig bestimmt. Wie in jeder Quantenfeldtheorie wird auch in der QCD die Lagragedichte  $\mathcal{L}$  aus den Quantenfeldern der Theorie unter Berücksichtigung ihrer relevanten Symmetrien konstruiert. Die Felder der starken Wechselwirkung sind die (lokalen) Quark-Spinorfelder  $q^f(x)$  und die Gluon-Vektorfelder  $A_\mu^a(x)$ . Quarks sind Fermionen mit Spin  $\frac{1}{2}$ , die in sechs verschiedenen Flavors  $f = u, d, s, c, b, t$  und drei verschiedenen Farben ( $N_c = 3$ ) für jeden Flavor vorkommen. Gluonen sind masselose Vektorbosonen mit Spin 1, die in acht verschiedenen Farben  $a = 1, 2, \dots, 8$  ( $N_c^2 - 1 = 8$ ) auftreten.

Die zugrundeliegende Eichsymmetrie zur Konstruktion der Langragedichte der QCD ist die  $SU(3)$ . Das bedeutet formal, dass die Lagragedichte der QCD invariant unter folgenden lokalen Eichtransformationen ist:

$$\begin{aligned} q_i &\rightarrow q'_j = U_{ji}(x)q_i, \\ A_\mu &\rightarrow A'_\mu = U(x)A_\mu U^{-1}(x) + \frac{i}{g}[\partial_\mu U(x)]U^{-1}(x), \end{aligned} \quad (2.2)$$

mit  $A_\mu \equiv A_\mu^a t^a$  und  $a = 1, 2, \dots, 8$ . In Standardnotierung sind  $t^a$  die  $N_c \times N_c$  Farbmatrizen und die acht hermitischen Gell-Mann Matrizen  $(\lambda^a)^\dagger = \lambda^a \equiv 2t^a$  sind Elemente einer Lie-Algebra und die Generatoren der  $SU(3)$ . Die Gruppenelemente  $U$  aus der Lie-Gruppe  $G$  können in der Form

$$U = e^{i\alpha_a t^a} \quad (2.3)$$

geschrieben werden. Dabei bezeichnen die Winkel  $\alpha_a$  die reellen Parameter der Gruppenelemente und  $t^a$  die Generatoren der entsprechenden Lie-Algebra. Die Darstellung der Algebra ist in Übereinstimmung mit der Darstellung der Gruppenelemente  $U$  zu wählen. Die Generatoren  $\lambda^a$  erfüllen die Kommutatorrelationen

$$[\lambda^a, \lambda^b] = 2if^{abc}\lambda^c \quad (2.4)$$

mit den vollständig antisymmetrischen Strukturkonstanten  $f^{abc}$  und sind auf  $Tr(\lambda^a \lambda^b) = 2\delta^{ab}$  normiert. Die Strukturkonstanten erfüllen die Jakobi-Identität

$$f^{abd}f^{cde} + f^{bcd}f^{ade} + f^{cad}f^{bde} = 0 \quad (2.5)$$

und sind auf

$$f^{abc}f^{dbc} = N_c\delta^{ad} \quad (2.6)$$

normiert. Die lokale Eichtransformation in Gleichung (2.2) ist unitär mit  $\det(U) = 1$  und

$$U_{ji}(x) = [\exp(i \sum_a \alpha_a(x) t^a)]_{ji}, \quad \alpha_a(x) \in \mathbb{R}. \quad (2.7)$$

Die so definierte Transformation beschreibt die lokale Abbildung eines fermionischen Spinors  $q(x)$  - eines vierkomponentigen Spaltenvektors, bei dem jede Komponente von der Raumzeit abhängt - an jedem Raum-Zeit-Punkt  $x$  durch ein beliebiges Element  $U$  der Lie-Gruppe  $G$ .

Der lokal eichinvariante Teil  $\mathcal{L}_{invariant}$  der Lagragedichte für eine Theorie mit Quark- und Gluonfeldern setzt sich zusammen aus der Dirac- und der Yang-Mills-Lagragedichte:

$$\mathcal{L}_{invariant} = \mathcal{L}_D + \mathcal{L}_{YM}. \quad (2.8)$$

Dieser Teil der Lagragedichte besteht aus einem kinetischen Anteil für die Quarkfelder, an die die Gluonfelder über die kovariante Ableitung  $D_\mu$  minimal ankoppeln. Die Dynamik des Eichfeldes selbst wird durch eine Yang-Mills Wechselwirkung beschrieben, die die nichtabelschen Selbstwechselwirkungen der Gluonen enthält:

$$\mathcal{L}_{invariant}[\bar{q}, q, A] = \sum_{f=1}^{N_f} \bar{q}^f (i\mathcal{D} - m_0^f) q^f - \frac{1}{4} F^{a\mu\nu} F_{\mu\nu}^a \quad (2.9)$$

für eine Theorie mit  $N_f$  unterschiedlichen Flavours,  $m_0^f$  sind die flavourabhängigen Stromquarkmassen<sup>1</sup>. Auf der rechten Seite von Gleichung (2.9) wurde die von Feynman eingeführte Slash-Schreibweise  $\mathcal{D} \equiv \gamma^\mu D_\mu$  verwendet, wobei hier die Indizes von 0 bis 3 laufen (siehe Anhang A). Durch die Einführung des Eichfeldes  $A_\mu \equiv A_\mu^a t^a$  wurde die Ableitung  $\partial_\mu$  zu einer kovarianten Ableitung

$$\begin{aligned} D_\mu &= \partial_\mu + ig A_\mu^a t^a \\ &\equiv \partial_\mu + ig A_\mu \end{aligned} \quad (2.10)$$

erweitert. Darin bezeichnet  $g$  die starke Kopplungskonstante. Das in Gleichung (2.10) eingeführte Hilfsfeld  $A_\mu$  ist statisch und trägt somit noch keine Freiheitsgrade. Damit dieses Hilfsfeld  $A_\mu$  zu einer dynamischen Feldvariablen wird, benötigt man in der Lagragedichte einen Term, der sowohl eichinvariant ist als auch die quadratischen Ableitungen von  $A_\mu$  enthält. Dazu führt man eine nichtabelsche Verallgemeinerung des Feldstärketensors ein:

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a - g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c. \quad (2.11)$$

Der so definierte Feldstärketensor transformiert sich unter einer Eichtransformation auf dieselbe Weise wie die kovariante Ableitung  $D_\mu$ . Unter Verwendung des Feldstärketensors  $F_{\mu\nu}$  lässt sich daraus durch Spurnahme sofort eine Lagragedichte konstruieren:

$$\mathcal{L}_{YM} = -\frac{1}{2} \text{Tr}(F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}) = -\frac{1}{4} F^{a\mu\nu} F_{\mu\nu}^a. \quad (2.12)$$

Da das Gluon durch ein Vektorfeld repräsentiert wird, hätte es an sich vier Polarisationsfreiheitsgrade. Aufgrund seiner Masselosigkeit kann es aber nur zwei transversale Freiheitsgrade haben. Für eichinvariante Größen wie die Greenschen Funktionen muss daher zusätzlich eine Eichung fixiert werden, damit

---

<sup>1</sup>Um die Notation kompakt zu halten, wird im fermionischen Anteil der Lagragedichte über die Quarkflavours in weiterer Folge implizit summiert, d.h.  $q^f \rightarrow q$  und  $m_0^f \rightarrow m_0$ .

die zugehörigen Funktionalintegrale nicht verschwinden. Dafür erweitert man die Lagragedichte durch Hinzunahme eines Eichfixierungsterms  $\mathcal{L}_{gauge}$ . Dieser lautet in einer allgemeinen kovarianten Eichung

$$\mathcal{L}_{gauge} = -\frac{1}{2\xi_0}(\partial_\mu A_\mu)^2. \quad (2.13)$$

Der Parameter  $\xi_0$  dient der Eichfixierung und kann im wesentlichen frei gewählt werden. Häufig verwendete Spezialfälle sind die Landau-Eichung ( $\xi_0 = 0$ ) und die Feynman-Eichung ( $\xi_0 = 1$ ).

Durch die Hinzunahme des Eichfixierungsterms  $\mathcal{L}_{gauge}$  ist die Lagragedichte nun nicht mehr eichinvariant. Um die Eichinvarianz in kovarianten Eichungen zu erhalten, wurde von Faddeev und Popov (1967) vorgeschlagen, unphysikalische skalare Hilfsfelder mit Spin 0 einzuführen. Diese in weiterer Folge als  $\bar{\omega}^a, \omega^a$  bezeichneten antikommutierenden Felder nennt man Geistfelder. Dadurch entsteht in einer kovarianten Eichung ein zusätzlicher Geistterm  $\mathcal{L}_{ghost}$  in der Lagragedichte. Dieser hängt allgemein von der Eichfixierung ab und lautet in kovarianter Eichung

$$\mathcal{L}_{ghost} = (\partial^\mu \bar{\omega}^a)(\delta^{ab}\partial_\mu - gf^{abc}A_\mu^c)\omega^b. \quad (2.14)$$

Mit der Lagragedichte  $\mathcal{L}_{invariant}$  aus Gleichung (2.9) erhält man so die *unrenormierte effektive Lagragedichte* der QCD:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{eff}[\bar{q}, q, A_\mu, \bar{\omega}, \omega] &= \mathcal{L}_{invariant} + \mathcal{L}_{gauge} + \mathcal{L}_{ghost} = \\ \bar{q}(iD - m_0)q - \frac{1}{4}F^{a\mu\nu}F_{\mu\nu}^a - \frac{1}{2\xi_0}(\partial_\mu A_\mu)^2 + (\partial^\mu \bar{\omega}^a)(\delta^{ab}\partial_\mu - gf^{abc}A_\mu^c)\omega^b. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Durch die Hinzunahme des Eichfixierungsterms und der Faddeev-Popov-Geister ist die effektive Lagragedichte nicht mehr invariant unter lokalen Eichtransformationen. Stattdessen liegt nun die allgemeinere Klasse der nach Becchi, Rouet und Stora benannten BRS-Transformationen vor. Dabei handelt es sich um eine Verallgemeinerung der lokalen Eichtransformationen, die die Eichfixierungs- und Geistterme einschließt. Die Forderung nach BRS-Invarianz einer Eichtheorie erzeugt automatisch die Eichfixierungs- und Geistterme und garantiert gleichzeitig die Eichinvarianz der physikalischen Observablen. Aus der BRS-Invarianz der QCD können dann die Slavnov-Taylor Identitäten (STIs) abgeleitet werden. Die STIs entsprechen den Ward-Takahashi Identitäten (WTIs) der QED und stehen synonym für die Erhaltungssätze der QCD.

Aus den bilinearen Termen der effektiven Lagragedichte ergeben sich die Propagatoren der Störungstheorie. Die trilinearen Terme ergeben 3-Vertizes und die quadrilinearen 4-Vertizes (Quelle: [4], Seite 11),

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{eff} = & \bar{q}(i\partial - m_0)q + \frac{1}{4}(\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a)^2 \\
& \text{---} \\
& - \frac{g}{2} f^{abc} A^{b\mu} A^{c\nu} (\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a) - \frac{g^2}{4} f^{abe} f^{cde} A_\mu^a A_\nu^b A^{c\mu} A^{d\nu} \\
& \text{---} \\
& + g \bar{q} A q + \text{Eichterme,} \\
& \text{---} \\
& \text{---}
\end{aligned}$$

wobei jetzt über doppelt vorkommende Indizes summiert wird. Die Selbstkopplungen der Gluonen existieren aufgrund der nichtverschwindenden Strukturkonstanten. Sie sind somit eine direkte Folge der nichatabelschen Struktur der QCD. Die effektive Wirkung  $\mathcal{S}_{eff}$  der QCD im Minkowskiraum erhält man aus dem Integral über die effektive Lagrangedichte:

$$\mathcal{S}_{eff}[\bar{q}, q, A_\mu, \bar{\omega}, \omega] = \mathcal{S}[\bar{q}, q, A_\mu] + \int d^4x \left[ (\partial^\mu \bar{\omega}^a)(\delta^{ab}\partial_\mu - g f^{abc} A_\mu^c) \omega^b - \frac{1}{2\xi_0} (\partial_\mu A_\mu)^2 \right], \quad (2.16)$$

wobei hier die Abkürzung

$$\mathcal{S}[\bar{q}, q, A_\mu] = \int d^4x \left[ \bar{q}(iD - m_0)q - \frac{1}{4} F^{a\mu\nu} F_{\mu\nu}^a \right] \quad (2.17)$$

verwendet wurde.

## 2.2 Die effektive Wirkung

Wie in jeder anderen physikalischen Theorie auch möchte man in einer Quantenfeldtheorie physikalische Aussagen machen, also Observablen berechnen. Dafür benötigt man eine Größe, die die Theorie definiert. Die zentrale Größe, die eine Quantenfeldtheorie definiert, ist das *Erzeugende Funktional*. Alle physikalischen Aussagen (das heißt alle Observablen) einer Quantenfeldtheorie können aus ihrem Erzeugenden Funktional berechnet werden. Ein Erzeugendes Funktional ist das feldtheoretische Analogon zur Zustandssumme in der statistischen Mechanik. Beide sind definiert als Integral über alle möglichen Konfigurationen oder Zustände eines Systems gewichtet mit einem exponentiellen Faktor. Die physikalischen Aussagen einer renormierbaren Quantenfeldtheorie lassen sich mathematisch durch ihre Einteilchen irreduziblen (1PI) Greenschen Funktionen ausdrücken. Die Greenschen Funktionen sind im Pfadintegral-

oder Funktionalzugang über normierte Funktionalintegrale eines Produkts von  $n$  Quantenfeldern gewichtet mit einer exponentiellen effektiven Wirkung  $S_{eff}$  definiert. Die "Theorie lösen" bedeutet im wesentlichen, diese Funktionalintegrale auszuwerten.

Das Erzeugende Funktional für die Greenschen Funktionen  $G_n$  ist definiert als

$$Z[J] = Z_0^{-1} \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]+J\cdot\phi}, \quad (2.18)$$

wobei in Gleichung (2.18) die Kurzschreibweise  $J \cdot \phi \equiv \int d^4x J(x)\phi(x)$  verwendet wurde. Der Ausdruck  $\mathcal{D}\phi$  ist das Pfadintegralmaß. Hier ist  $J(x)$  eine äußere Quelle des Feldes  $\phi(x)$ , dessen Komponenten mit den Quellenfeldern der Theorie identifiziert werden.  $Z_0$  ist die Zustandssumme, die das Erzeugende Funktional normiert:

$$Z_0 := Z[J=0] = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]}. \quad (2.19)$$

Die Bezeichnung "Erzeugendes Funktional" kommt daher, weil man aus ihm durch funktionale Differentiation von  $Z[J]$  nach  $J(x)$  an der Stelle  $J = 0$  die Greenschen Funktionen erhält:

$$G_n(x_1, \dots, x_n) = \langle 0 | T\phi(x_1) \dots \phi(x_n) | 0 \rangle = \frac{1}{Z_0} \left. \frac{\delta^n}{\delta J(x_1) \dots \delta J(x_n)} Z[J] \right|_{J=0}. \quad (2.20)$$

Hier erkennt man auch die Bedeutung der äußeren Quellen. Man kann sich die Propagation eines Teilchen von einem Vakuumzustand in einen anderen etwa so vorstellen: Zum Zeitpunkt  $t_i$  wird ein Teilchen durch eine Quelle  $\phi$  am Ort  $x_i$  erzeugt. Dieses Teilchen propagiert dann für eine bestimmte Zeit, bis es zum Zeitpunkt  $t_j$  am Ort  $x_j$  wieder vernichtet wird. Dieser Vorgang wird dann ebenfalls durch eine Quelle beschrieben. In Feynman-Diagrammen stellt man die Greenschen Funktionen als separate Diagramme dar, für die jeweils getrennt eine Impulserhaltung gilt.

Während man durch funktionales Differenzieren von  $Z[J]$  nach  $J(x)$  alle Greenschen Funktionen der Theorie erzeugen kann, erhält man die Untermenge der verbundenen Greenschen Funktionen  $G_n^c$  aus dem Funktional  $W[J]$ , das mit  $Z[J]$  über die Beziehung

$$\begin{aligned} Z[J] &= e^{W[J]} \quad \text{oder} \\ W[J] &= \ln Z[J] \end{aligned} \quad (2.21)$$

mit der Normierungsbedingung  $Z[0] = 1$  bzw.  $W[0] = 0$  verknüpft ist. So wie  $Z[J]$  ist auch  $W[J]$  ein Funktional der äußeren Quellen, und man erhält die verbundenen Greenschen Funktionen durch funktionales Differenzieren von  $W[J]$  nach  $J(x)$  an der Stelle  $J = 0$ :

$$G_n^c(x_1, \dots, x_n) = \left. \frac{\delta^n}{\delta J(x_1) \dots \delta J(x_n)} W[J] \right|_{J=0}. \quad (2.22)$$

In der Darstellung durch Feynman-Diagramme entsprechen die verbundenen Greenschen Funktionen Diagrammen, die sich nicht mehr in zwei getrennte Teile zerlegen lassen, ohne eine Linie aufzuschneiden.

Das Erzeugende Funktional für die Einteilchen-irreduziblen (1PI) Greenschen Funktionen  $\Gamma_n$  nennt man die *effektive Wirkung*  $\Gamma[\phi]$ :

$$\Gamma_n(x_1, \dots, x_n) = \frac{\delta^n}{\delta\phi(x_1)\dots\delta\phi(x_n)} \Gamma[\phi] \Big|_{\phi=0} \quad (2.23)$$

In der Darstellung durch Feynman-Diagramme entsprechen die 1PI Greenschen Funktionen  $\Gamma_n$  jenen Diagrammen, die man nicht mehr durch Aufschneiden einer Linie in zwei getrennte Diagramme zerlegen kann. Die effektive Wirkung ist ein geeignetes Werkzeug zur Beschreibung von Vakuumzuständen, da sie nicht von den äußeren Quellen abhängt, sondern ein Funktional des gemittelten Feldes  $\phi^c$  ist. Um zur effektiven Wirkung zu gelangen, geht man vom Erzeugenden Funktional  $W[J]$  aus und setzt  $\phi(x)$  in Abhängigkeit einer äußeren Quelle  $J(x)$ :

$$\frac{\delta W[J]}{\delta J(x)} = \langle \phi(x) \rangle_{[J]} . \quad (2.24)$$

Nach der Definition des Funktionalintegrals ist das der Vakuumerwartungswert des Feldes  $\phi(x)$  in Anwesenheit einer äußeren Quelle. Man bezeichnet diesen Vakuumerwartungswert als das klassische Feld  $\phi^c$ :

$$\frac{\delta W[J]}{\delta J(x)} = \langle \phi(x) \rangle_{[J]} =: \phi^c(x). \quad (2.25)$$

Das klassische Feld ist das gewichtete Mittel über alle Fluktuationen des Feldes. Mit diesem gemittelten klassischen Feld führt man nun eine funktionale Legendre-Transformation nach den Quellen durch und erhält die effektive Wirkung  $\Gamma[\phi^c]$ :

$$\Gamma[\phi^c] := -W[J] + J \cdot \phi^c. \quad (2.26)$$

Durch funktionales Differenzieren von  $\Gamma[\phi^c]$  erhält man eine weitere wichtige Eigenschaft:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta\phi^c(y)} \Gamma[\phi^c] &= -\frac{\delta W[J]}{\delta\phi^c(y)} + \int d^4x \frac{\delta J(x)}{\delta\phi^c(y)} \phi^c(x) + J(y) \\ &= -\int d^4x \frac{\delta J(x)}{\delta\phi^c(y)} \frac{\delta W[J]}{\delta J(x)} + \int d^4x \frac{\delta J(x)}{\delta\phi^c(y)} \phi^c(x) + J(y) \\ &= J(y). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Für verschwindende äußere Quellen gilt also

$$\frac{\delta}{\delta\phi} \Gamma[\phi] \Big|_{\phi=\phi^c} = 0. \quad (2.28)$$

Im Allgemeinen lässt sich  $\Gamma[\phi^c]$  nicht explizit angeben und man ist bei konkreten Rechnungen auf Näherungen angewiesen. Eine Möglichkeit zur näherungsweisen Berechnung von  $\Gamma[\phi^c]$  ist die Ableitungsentwicklung der effektiven Wirkung:

$$\Gamma[\phi^c] = \int d^4x V(\phi^c) + \frac{1}{2} Z(\phi^c)(\partial_\mu \phi^c)^2 + Y(\phi^c) ((\partial_\mu \phi^c)^2)^2 + \dots \quad (2.29)$$

Den Term niedrigster Ordnung in dieser Entwicklung bezeichnet man als effektives Potential  $V(\phi^c)$ ,  $Z$  ist die Wellenfunktionsrenormierung und die höheren Terme sind Vertexkorrekturen. Man nimmt an, dass der Vakuumzustand  $|0\rangle$  translationsinvariant ist, wodurch als Konsequenz  $\phi^c$  nicht mehr von  $x$  abhängt. Durch die Einführung eines konstanten Feldes  $\phi^c(x) \rightarrow \phi^c = \text{const.}$  verschwinden dann alle Ableitungsterme und es gilt:

$$\Gamma[\phi^c] = \int d^4x V(\phi^c). \quad (2.30)$$

Das effektive Potential kann so als die Summe aller 1PI Greenschen Funktionen  $\Gamma_n$  ausgedrückt werden, deren äußere Linien verschwindende Impulse tragen.

## 2.3 Renormierungsverfahren

Ein wichtiges Kriterium für eine Eichtheorie ist ihre Renormierbarkeit. In perturbativen Rechnungen mit Feynman-Diagrammen treten Schleifendiagramme auf, wodurch im allgemeinen Divergenzen entstehen, die aus der Integration über große innere Impulse stammen. Die entsprechenden Schleifenintegrale haben die Form

$$I := \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{(q^2 - M^2 + i\epsilon)^m} \quad (2.31)$$

und sind für  $2m < d$  ultraviolettdivergent. Um diese Divergenzen zu vermeiden, wurde das Konzept der Renormierung entwickelt. Die Lösung dieses Problems erfolgt in zwei Schritten. Zunächst werden die divergenten Integrale durch Einführung von zusätzlichen Parametern in endliche Ausdrücke überführt. Diese Parametrisierung der Divergenzen bezeichnet man als *Regularisierung*. Im nächsten Schritt werden die so parametrisierten Divergenzen aus der Theorie entfernt. Dabei wählt man die Divergenzen der unrenormierten Größen so, dass die Unendlichkeiten in die unrenormierten Felder, Massen und Kopplungen der Lagrangedichte absorbiert werden und so die Divergenzen aufheben. Dieser Vorgang wird als *Renormierung* bezeichnet. Die Art und Weise, wie die Regularisierung und Renormierung durchgeführt wird, bezeichnet man als *Renormierungsverfahren*.

Geeignete Verfahren im Zusammenhang mit Yang-Mills-Theorien in Coulombbeichung sind die *dimensionale Regularisierung* mit anschließender multiplikativer Renormierung oder die Einführung eines *Impuls-Cutoffs*  $\Lambda_{UV}$  mit anschließender Impulssubtraktion (MOM-Schema, MOM steht für "momentum subtraction"). Das Verfahren der dimensionalen Regularisierung basiert auf der Beobachtung, dass die in vier Raum-Zeit Dimensionen divergenten Integrale in  $d \neq 4$  Dimensionen existieren. Die Divergenzen können dann als Terme proportional  $1/\varepsilon$  geschrieben werden. Die Vorgehensweise lässt sich dadurch charakterisieren, dass man die Anzahl der Raum-Zeit Dimensionen von  $d = 4$  auf  $d = 4 - 2\varepsilon$  ändert und die Integrale statt in 4 in  $4 - 2\varepsilon$  Dimensionen löst:

$$\frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \rightarrow \mu^{2\varepsilon} \frac{d^{4-2\varepsilon} p}{(2\pi)^{4-2\varepsilon}}, \quad \varepsilon = 2 - \frac{d}{2}. \quad (2.32)$$

In Gleichung (2.32) wurde der beliebige Skalenparameter  $\mu$  eingeführt, um die Dimensionen der Felder und Kopplungen auch in Dimensionen  $d \neq 4$  zu erhalten. Dieser hat die Dimension einer Masse. In Coulombbeichung ist diese Standardtechnik zur Regularisierung allerdings so noch nicht ausreichend. Der Grund dafür liegt in der Form des Eichbosonpropagators:

$$G_{\mu\nu}^{ab}(p) = -\frac{i\delta^{ab}}{p^2} \left[ g_{\mu\nu} + \frac{n^2}{\mathbf{p}^2} p_\mu p_\nu - \frac{\mathbf{p} \cdot n}{\mathbf{p}^2} (p_\mu n_\nu + n_\mu p_\nu) \right] \quad (2.33)$$

mit  $n_\mu = (1, 0, 0, 0)$ . Dadurch entstehen Schleifenintegrale der Form

$$I := \int \frac{d^d p}{(2\pi)^4} \frac{1}{p^2(\mathbf{p} - \mathbf{q})^2}. \quad (2.34)$$

Diese Integrale sind auch bei Anwendung eines dimensionalen Regularisierungsschemas nicht wohldefiniert. Abhilfe schafft das Konzept der sogenannten "split dimensional regularisation" [5]. Bei diesem Regularisierungsschema werden die Energie- und Impulsintegrale unabhängig voneinander dimensionally regularisiert. Dafür setzt man die Anzahl der Raum-Zeit Dimensionen  $d = 4 - 2\varepsilon = \omega + \rho$  und drückt die Divergenzen der Energieintegrale als Pole in  $\rho$  neben den gewöhnlichen Polen in  $\omega$  aus. Im anschließenden Verfahren der multiplikativen Renormierung werden die unrenormierten Größen  $G_0$  in der Lagragedichte durch die Einführung von Renormierungskonstanten  $Z$ , welche die  $1/\varepsilon$ -Terme absorbieren, in endliche renormierte Größen  $G_R$  überführt:

$$G_0 \rightarrow ZG_R. \quad (2.35)$$

Im MOM-Schema werden die Integrale mit einem Impuls-Cutoff  $\Lambda_{UV}$  regularisiert, wodurch die UV-divergenten Integrale endlich werden. Die Divergenzen treten dann erst im Limes  $\Lambda_{UV} \rightarrow \infty$  auf und werden durch Subtraktion eines gleichartig divergenten Terms annihielt. Dieses Verfahren hat den Nachteil, dass im Allgemeinen eine Abhängigkeit vom Skalenparameter  $\mu$  verbleibt. Aus diesem Grund bezeichnet man  $\mu$  als *Regularisierungsskala*, da der genaue Wert dieses Parameters durch das Renormierungsverfahren nicht festgelegt wird. Jede Wahl von  $\mu$  führt zu anderen Werten für die renormierten Parameter. Da die QCD nur störungstheoretisch gut behandelt werden kann, wählt man im MOM-Schema aufgrund der Asymptotischen Freiheit für  $\mu$  einen großen raumartigen Impuls. Das hat außerdem noch den Vorteil, dass man auf eine freie Theorie renormieren kann.

## 2.4 Dyson-Schwinger Gleichungen für den Quarkpropagator

Nach diesem Überblick über einige allgemeine Aspekte der QCD, die für die Diskussion der Propagatoren der Theorie von Relevanz sind, liegt der Schwerpunkt in diesem Abschnitt auf den Dyson-Schwinger Gleichungen (Dyson-Schwinger Equations, DSEs) für den Quarkpropagator. Die Dyson-Schwinger Gleichungen sind ein nichtperturbativer, Lorentz-kovarianter Formalismus zum Studium von Quark- und Gluon- als auch von Hadroneneigenschaften. Die Lösung dieser Gleichungen beschreibt zunächst einmal die Korrelation zwischen den fundamentalen Quantenfeldern aufgrund der Wechselwirkung. Des Weiteren kann man die Eigenschaften von Bindungszuständen extrahieren: jeder Bindungszustand - mit anderen Worten jedes Hadron - führt zu einem Pol in einer Greenschen Funktion. Die Quantenfeldtheorie der starken Wechselwirkung wird in einer kovarianten Eichung formal durch die Feynman-Schwinger Integraldarstellung für das Erzeugende Funktional

$$Z[\bar{\eta}, \eta, J, \bar{\sigma}, \sigma] = \int \mathcal{D}[\bar{q}, q, A, \bar{\omega}, \omega] \exp \left\{ -\mathcal{S}_{eff} + \int d^4x [\bar{q}\eta + \bar{\eta}q + A_\mu^a J_\mu^a + \bar{\omega}^a \sigma^a + \bar{\sigma}^a \omega^a] \right\} \quad (2.36)$$

zusammen mit den Renormierungsvorschriften definiert. In Gleichung (2.36) wurden Quellenfelder  $\eta$  und  $\bar{\eta}$  für die Antiquarks und Quarks,  $J$  für die Gluonen sowie  $\sigma$  und  $\bar{\sigma}$  für die Antigeister und Geister eingeführt. Der Ausdruck  $\mathcal{D}[\bar{q}, q, A, \bar{\omega}, \omega]$  ist das Pfadintegralmaß. Die unrenormierte effektive Lagrangedichte in Gleichung (2.15) lautet voll ausgeschrieben

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{eff} = & \bar{q}(i\cancel{\partial} - m_0)q + gA_\mu^a \bar{q}\gamma^\mu t^a q + \frac{1}{4}(\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a)(\partial^\mu A^{a\nu} - \partial^\nu A^{\mu a}) \\ & - \frac{g}{2}f^{abc}A^{b\mu}A^{c\nu}(\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a) - \frac{g^2}{4}f^{abe}f^{cde}A_\mu^a A_\nu^b A^{cu}A^{d\nu} \\ & - \frac{1}{2\xi_0}(\partial_\mu A_\mu)^2 + \bar{\omega}^a \partial^2 \omega^b - g f^{abc} \bar{\omega}^a \partial^\mu (A_\mu^c \omega^b). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Um die Divergenzen zu eliminieren, werden nun die unrenormierten Größen in der effektiven Lagrangedichte (2.37) durch die Einführung von multiplikativen Vorfaktoren renormiert:

$$\begin{aligned} q_0 &\rightarrow \sqrt{Z_2}q, \quad A_{0\mu}^a \rightarrow \sqrt{Z_3}A_\mu^a, \quad \omega_0^a \rightarrow \sqrt{\tilde{Z}_3}\omega^a, \\ m_0 &\rightarrow Z_m m, \quad g_0 \rightarrow Z_g g. \end{aligned} \quad (2.38)$$

In Gleichung (2.38) wurden insgesamt fünf Renormierungskonstanten definiert, und zwar  $Z_2$ ,  $Z_3$  und  $\tilde{Z}_3$  für die Quark-, Gluon- und Geistfelder,  $Z_m$  für die Masse und  $Z_g$  für die Kopplung. Die renormierte effektive Lagrangedichte  $\tilde{\mathcal{L}}_{eff}[\bar{q}, q, A_\mu, \bar{\omega}, \omega] \equiv \mathcal{L}_{eff}[\bar{q}_0, q_0, A_{0\mu}, \bar{\omega}_0, \omega_0]$  kann dann geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}}_{eff} = & Z_2 \bar{q}(i\cancel{\partial} - Z_m m)q + Z_{1F} g A_\mu^a \bar{q}\gamma^\mu t^a q + \frac{Z_3}{4}(\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a)(\partial^\mu A^{a\nu} - \partial^\nu A^{\mu a}) \\ & - Z_1 \frac{g}{2}f^{abc}A^{b\mu}A^{c\nu}(\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a) - \frac{Z_4}{4}g^2 f^{abe}f^{cde}A_\mu^a A_\nu^b A^{cu}A^{d\nu} \\ & - \frac{1}{2\xi_0}(\partial_\mu A_\mu)^2 + \tilde{Z}_3 \bar{\omega}^a \partial^2 \omega^b - \tilde{Z}_1 g f^{abc} \bar{\omega}^a \partial^\mu (A_\mu^c \omega^b), \end{aligned} \quad (2.39)$$

wobei die folgenden Abkürzungen verwendet wurden:

$$Z_{1F} = Z_g Z_2 \sqrt{Z_3}, \quad Z_1 = Z_g Z_3^{\frac{3}{2}}, \quad \tilde{Z}_1 = Z_g \tilde{Z}_3 \sqrt{Z_3}, \quad Z_4 = Z_g^2 Z_3^2. \quad (2.40)$$

Diese Beziehungen sind eine Konsequenz der zugrunde liegenden Slavnov-Taylor Identitäten. Als Folge sind die Renormierungskonstanten für alle Quarks gleichen Flavors, alle Gluonen und alle Geister identisch. Das Erzeugende Funktional für die verbundenen Greenschen Funktionen  $W[\bar{\eta}, \eta, J, \bar{\sigma}, \sigma]$  ist definiert als der natürliche Logarithmus des Erzeugenden Funktionals  $Z$  (2.21). Aus dem Erzeugenden Funktional  $W$  erhält man nach einer funktionalen Legendre-Transformation die effektive Wirkung (2.26):

$$\Gamma[\bar{q}, q, A, \bar{\omega}, \omega] = -W[\bar{\eta}, \eta, J, \bar{\sigma}, \sigma] + \int d^4x [\bar{q}\eta + \bar{\eta}q + A_\mu^a J_\mu^a + \bar{\omega}^a \sigma^a + \bar{\sigma}^a \omega^a]. \quad (2.41)$$

Die effektive Wirkung  $\Gamma$  ist das Erzeugende Funktional für die 1PI irreduziblen Vertexfunktionen. Die Felder und Quellen können als funktionale Ableitungen des entsprechenden Funktionals geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \frac{\delta W}{\delta \bar{\eta}} &= q, & \frac{\delta W}{\delta \eta} &= \bar{q}, & \frac{\delta W}{\delta J_\mu} &= A_\mu, \\ \frac{\delta W}{\delta \bar{q}} &= \eta, & \frac{\delta W}{\delta q} &= \bar{\eta}, & \frac{\delta W}{\delta A_\mu} &= J_\mu. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Die grassmannwertigen Operatoren

$$\frac{\delta W}{\delta(\bar{q}, \bar{\eta})} =: \text{linksseitige Ableitung}, \quad \frac{\delta W}{\delta(q, \eta)} =: \text{rechtsseitige Ableitung} \quad (2.43)$$

definieren links- und rechtsseitige Ableitungen.

### 2.4.1 Herleitung der Dyson-Schwinger Gleichungen

Setzt man voraus, dass eine Funktionalintegraldarstellung eines Erzeugenden Funktionals definiert ist, folgt die nichtperturbative Herleitung der DSEs aus der Beobachtung, dass das Funktionalintegral einer totalen Funktionalableitung für geeignete Randbedingungen verschwindet, also

$$0 = \int \mathcal{D}\phi e^{-\mathcal{S}[\phi]+J\cdot\phi} \left( \frac{\delta}{\delta\phi_i(x)} S[\phi] - J_i(x) \right) =: \left\langle \frac{\delta}{\delta\phi_i(x)} S[\phi] - J_i(x) \right\rangle_{[J]}. \quad (2.44)$$

Dies führt auf die folgende funktionale Differentialgleichung:

$$\left( \frac{\delta \mathcal{S}[\phi]}{\delta \phi_i(x)} \left[ \frac{\delta}{\delta J(x)} \right] - J_i(x) \right) Z[J] = 0. \quad (2.45)$$

Gleichung (2.45) ist die Dyson-Schwinger Gleichung für das Erzeugende Funktional  $Z[\bar{\eta}, \eta, J_\mu, \bar{\sigma}, \sigma]$ . Die Herleitung der DSE für den Quarkpropagator erfolgt dann analog zu der für den Geistpropagator [6]. Um zur DSE für den Quarkpropagator zu gelangen, macht man zunächst eine linksseitige Ableitung der Wirkung  $\mathcal{S} := \int d^4x \mathcal{L}$  nach dem Quarkfeld  $\bar{q}^a$ , wobei  $\bar{\eta}$  und  $\eta$  wie gehabt die Quellenfelder für die Quarks und Antiquarks bezeichnen:

$$\left( \frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \bar{q}^a(x)} \left[ \frac{\delta}{\delta J}, \frac{\delta}{\delta \bar{\eta}} \right] + \eta^a(x) \right) Z[\bar{\eta}, \eta, J, \bar{\sigma}, \sigma] \Big|_{\bar{\sigma}=\sigma=0} = \left\langle \frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \bar{q}^a(x)} + \eta^a(x) \right\rangle_{[\bar{\eta}, \eta, J]} = 0, \quad (2.46)$$

wobei der Index  $[\bar{\eta}, \eta, J]$  angibt, welche Quellen für die weiteren Ableitungen beibehalten werden. Nach einer weiteren rechtsseitigen Ableitung  $\delta/\delta\eta^b(y)$  kann die Dyson-Schwinger Bewegungsgleichung für den Quarkpropagator geschrieben werden als

$$\left\langle \frac{\delta S}{\delta \bar{q}^a(x)} \bar{q}^b(y) \right\rangle = \delta^{ab} \delta^4(x - y). \quad (2.47)$$

Mit der Definition für den Quarkpropagator

$$\left\langle \bar{q}^a(x) q^b(y) \right\rangle = \frac{\delta^2 W}{\delta \eta^a(x) \delta \bar{\eta}^b(y)} =: S^{ab}(x - y) \quad (2.48)$$

lautet die exakte DSE für den Quarkpropagator in Ortsraumdarstellung

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\delta S}{\delta \bar{q}^a(x)} \bar{q}^b(y) \right\rangle &= \delta^{ab} \delta^4(x - y) = \\ Z_2 (-\not{p} + Z_m m) S^{ab}(x - y) - Z_{1F} i g \int d^4 z d^4 z' \delta^4(x - z) \delta^4(x - z') (t^a \gamma_\mu) \left\langle q^c(z) \bar{q}^b(y) A_\mu^a(z') \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Diese beinhaltet den inversen freien Propagator  $(-\not{p} + m)$ , die Dreipunkt-Vertexfunktion  $\Gamma_\mu^a(x, y, z) = -Z_{1F} i g t^a \gamma_\mu \delta^4(y - x) \delta^4(z - x)$  und die vollen Quark-Gluon Korrelationen  $\langle q(z) \bar{q}(y) A_\mu^a(x) \rangle$ .

In einem kovarianten Formalismus sind die vollen und verbundenen Dreipunktfunktionen identisch:

$$\left\langle q^c(z) \bar{q}^b(y) A_\mu^a(z') \right\rangle = \left\langle q^c(z) \bar{q}^b(y) A_\mu^a(z') \right\rangle_{conn}. \quad (2.50)$$

Diese verbundene Dreipunktfunktion

$$\left\langle q^c(z) \bar{q}^b(y) A_\mu^a(z') \right\rangle_{conn} := \frac{\delta^3 W[\bar{\eta}, \eta, J]}{\delta \eta^c(z) \delta \bar{\eta}^b(y) \delta J_\mu^a(x)} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=J=0} \quad (2.51)$$

kann in eine 1PI Quark-Gluon Vertexfunktion

$$\Gamma_\mu^{abc}(x, y, z) = \frac{\delta^3 \Gamma[\bar{q}, q, A]}{\delta q^c(z) \delta \bar{q}^b(y) \delta A_\mu^a(x)} \Big|_{q=\bar{q}=A=0} \quad (2.52)$$

mit damit verbundenen Quarkpropagatoren  $S^{ab}(x)$  und Gluonpropagatoren  $D_{\mu\nu}^{ab}(x)$  zerlegt werden.

## 2.4.2 Die Gap-Gleichung

Nach einer Fouriertransformation erhält man die Darstellung der exakten DSE für den renormierten Quarkpropagator im Impulsraum (vergleiche beispielsweise [7] [8]). Diese wird üblicherweise als *die* Dyson-Schwinger oder QCD-Gapgleichung

$$S(p)^{-1} := Z_2(i \not{p} + Z_m m) + \Sigma(p) \quad (2.53)$$

mit der Definition für die Quark-Selbstenergie

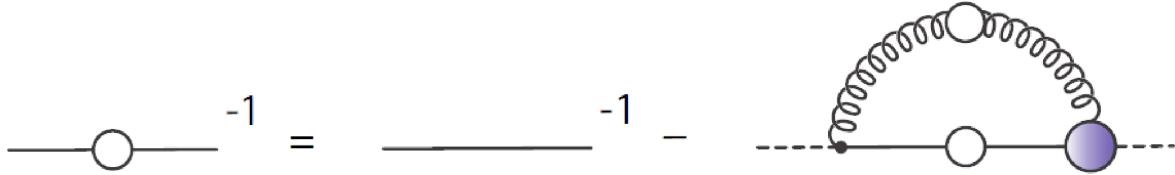


Abbildung 2.1: Diagrammatische Darstellung der Gap-Gleichung (Quelle: [9], Seite 16).

$$\Sigma(p) \equiv Z_{1F} g^2 \int^{\Lambda_{UV}} \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu}(p-q) \frac{\lambda^a}{2} \gamma_\mu S(q) \Gamma_\nu^a(q, p) \quad (2.54)$$

bezeichnet. In Gleichung (2.54) bezeichnet  $D_{\mu\nu}(k = p - q)$  den renormierten Gluonpropagator,  $\Gamma_\nu^a(q, p)$  den renormierten Quark-Gluon-Vertex und  $m$  die  $\Lambda_{UV}$ -abhängige Stromquarkmasse.  $\Lambda_{UV}$  steht für eine translationsinvariante Cutoff-Skala, bei der regularisiert wird (siehe Abschnitt 2.3). Obgleich in Gleichung (2.54) nicht explizit angegeben, hängen sowohl der Quarkpropagator  $S(p)$  als auch der Quark-Gluon-Vertex  $\Gamma_\nu^a(q, p)$  vom Quarkflavor ab. Die Renormierungskonstanten für den Quark-Gluon-Vertex und die Quark-Wellenfunktion, das sind  $Z_{1F}(\mu^2, \Lambda_{UV}^2)$  und  $Z_2(\mu^2, \Lambda_{UV}^2)$ , hängen sowohl vom Renormierungspunkt  $\mu$  als auch von der Regularisierungsskala  $\Lambda_{UV}$  ab.

Die renormierte Kopplungskonstante  $g$  ist mit der laufenden Kopplungskonstante  $\alpha_s(Q^2) := g^2(Q^2)/4\pi$  über

$$g^2 = g^2(Q^2)|_{Q^2=\mu^2} \equiv 4\pi\alpha_s(Q^2)|_{Q^2=\mu^2} \quad (2.55)$$

verknüpft, wobei  $-q^2 \equiv Q^2 > 0$ .

Für  $Q^2 \gg \Lambda_{QCD}^2$  ist die laufende Kopplungskonstante in erster Ordnung Störungstheorie gegeben durch

$$\alpha_s(Q^2) = \frac{12\pi}{(11N_c - 2N_f) \ln(Q^2/\Lambda_{QCD}^2)} \equiv \frac{\gamma_m \pi}{\ln(Q^2/\Lambda_{QCD}^2)}, \quad (2.56)$$

wobei

$$\gamma_m = \frac{12}{(11N_c - 2N_f)} \quad (2.57)$$

üblicherweise als die anomale Dimension der Masse bezeichnet wird.  $\Lambda_{QCD}$  ist der Skalenparameter der QCD. Die Lösung der Gap-Gleichung (2.53) kann in einem Lorentz-kovarianten Formalismus immer als

$$S(p)^{-1} = i \not{p} A(p^2, \mu^2) + B(p^2, \mu^2) = \frac{i \not{p} + M(p^2)}{Z(p^2, \mu^2)} \quad (2.58)$$

mit der Massenfunktion  $M(p^2)$  und der Renormierungsfunktion  $Z(p^2, \mu^2)$  geschrieben werden. Die Renormierungsbedingung lautet

$$S(p)^{-1}|_{p^2=\mu^2} = i \not{p} + m(\mu)|_{p^2=\mu^2}, \quad (2.59)$$

wobei  $m(\mu)$  die Quarkmasse am Renormierungspunkt  $\mu$  ist. Dadurch ist die Theorie asymptotisch frei für kleine Abstände. Für ein hinreichend großes raumartiges  $\mu^2$  kann die rechte Seite von Gleichung (2.53) in Störungstheorie berechnet werden und man findet

$$m(\mu) = \frac{\hat{m}}{(\ln[\mu/\Lambda_{QCD}])^{\gamma_m}}, \quad (2.60)$$

wobei wie in Abschnitt 2.1  $N_c$  die Anzahl der Farben und  $N_f$  die Anzahl der aktiven Flavors bezeichnet;  $\hat{m}$  und  $\Lambda_{QCD}$  sind Renormierungsgruppeninvarianten:  $\hat{m}$  ist die renormierungsgruppeninvariante Stromquarkmasse,  $\Lambda_{QCD}$  bezeichnet den Skalenparameter der QCD.

Die Gap-Gleichung (2.53) illustriert die Eigenschaften einer jeden DSE. Sie ist eine nichtlineare Integralgleichung für den Quarkpropagator  $S(p)$ . Der Kern dieser Integralgleichung beinhaltet die Zweipunktfunktion  $D_{\mu\nu}(k)$  und die Dreipunktfunktion  $\Gamma_\nu^a(q, p)$ . Dadurch ist die Gap-Gleichung an die DSEs gekoppelt, die diese Funktionen erfüllen; diese DSEs wiederum beinhalten höhere n-Punkt Greensfunktionen und formen so ein unendliches System von gekoppelten, nichtlinearen Integralgleichungen. Eine numerische Behandlung der Gap-Gleichung erscheint so auf den ersten Blick nicht möglich. Ein erster Schritt muss daher sein, eine brauchbare nichtperturbative Trunkierung dieses unendlichen Systems von DSEs zu finden, die die relevanten (globalen) Symmetrien der QCD wie die chirale Symmetrie und die Renormierungsgruppe berücksichtigt.

### 2.4.3 Die Gap-Gleichung in Regenbogennäherung

Die einfachste Näherung, die diese Eigenschaften bewahrt, ist die sogenannte Regenbogennäherung [10][11]:

$$\begin{aligned} i \Gamma_\mu^a &= \frac{i}{2} \lambda^a \Gamma_\mu : \\ Z_{1F} \Gamma_\mu^a(k, p) &= \gamma_\mu \\ &\quad + \frac{1}{2N_c} \int_l^\Lambda g^2 D_{\rho\sigma}(p-l) \gamma_\rho S(l+k-p) \gamma_\mu S(l) \gamma_\rho \\ &\quad + \frac{N_c}{2} \int_l^\Lambda g^2 D_{\sigma'\sigma}(l) D_{\tau'\tau}(l+k-p) \\ &\quad \times \gamma_{\tau'} S(p-l) \gamma_{\sigma'} \Gamma_{\rho\tau\mu}^{3g}(l, -k, k-p) + [\dots] \end{aligned} \quad (2.61)$$

Hier bezeichnet  $\Gamma^{3g}$  den gedressten Drei-Gluon Vertex. Der führende Term dieser Entwicklung ist  $\gamma_\mu$ , der führende Beitrag der explizit ausgeschriebenen Terme ist offensichtlich von  $O(g^2)$ . Die Ellipse repräsentiert Terme mit führendem Beitrag  $O(g^4)$ . Die Regenbogennäherung für die Gap-Gleichung (2.53) ist dann definiert durch die Wahl von

$$Z_{1F} D_{\mu\nu}^{ab}(k) \Gamma_\nu^a(q, p) \rightarrow D_{\mu\nu}^{free}(k) \frac{\lambda^a}{2} \gamma_\nu, \quad (2.62)$$

wobei  $D_{\mu\nu}^{free}(k) =: D_{\mu\nu}(k)$  der freie Gluonpropagator ist. Mit  $\sum_{a=1}^8 (\lambda^a/2)^2 = 4/3 =: C_F$ , wobei  $C_F$  die zweite quadratische Casimirinvariante der fundamentalen Darstellung der  $SU(N_c)$  ist, kann die Gap-Gleichung (2.53) geschrieben werden als

$$S(p)^{-1} := Z_2(i \not{p} + Z_m m) + \frac{C_F}{(2\pi)^4} \int^\Lambda d^4 q \ g^2 D_{\mu\nu}(k) \gamma_\mu S(q) \gamma_\nu. \quad (2.63)$$

## 2.4.4 Renormierung der Gap-Gleichung

Die Dyson-Schwinger Integralgleichungen (2.63) sind im ultravioletten Sektor divergent und müssen renormiert werden. Um die korrekte Renormierung zu finden, betrachtet man die renormierten Integralgleichungen für die Vektor-, Axialvektor- und pseudoskalare Vertexfunktion [12] [13]:

$$\begin{aligned} \Gamma_\mu(p', p) &= Z_{(\mu)} \gamma_\mu + \\ &\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} S(p' + q) \Gamma_\mu(p' + q, p + q) S(p + q) K(p + q, p' + q, q), \\ \Gamma_{\mu 5}(p', p) &= Z_{(\mu)5} \gamma_\mu \gamma_5 + \\ &\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} S(p' + q) \Gamma_{\mu 5}(p' + q, p + q) S(p + q) K(p + q, p' + q, q), \\ \Gamma_5(p', p) &= Z_5 \gamma_5 + \\ &\int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} S(p' + q) \Gamma_5(p' + q, p + q) S(p + q) K(p + q, p' + q, q). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Hier ist  $K(p, p', q)$  der Quark-Antiquark Bethe-Salpeter Kern und  $\Gamma$  sind die gedressten Vertizes. In der QCD sind die acht Renormierungskonstanten  $Z_{(\mu)}$  und  $Z_{(\mu)5}$  gleich. Das ist allerdings nicht der Fall, wenn nur die Zeit-Zeit Komponente des Gluonpropagators verwendet wird. Dieses Problem kann durch die Hinzunahme retardierter transversaler Gluonen gelöst werden [14]. Damit kann dieses Modell als nichtkovariante Näherung an ein kovariant renormiertes Eingluon-Austauschmodell betrachtet werden [13]. Da in diesem Modell Quarkschleifen vernachlässigt werden, verschwinden alle Beiträge zur axialen  $U(1)$ -Anomalie. Damit sind die Vertexfunktionen durch die nichtanomalen Ward-Identitäten mit dem Quarkpropagator verknüpft [12] [15]:

$$\begin{aligned} (p' - p)^\mu \Gamma_\mu(p', p) &= iS^{-1}(p') - iS^{-1}(p), \\ (p' - p)^\mu \Gamma_{\mu 5}(p', p) &= iS^{-1}(p') \gamma_5 + \gamma_5 iS^{-1}(p) + 2m \Gamma_5(p', p). \end{aligned} \quad (2.65)$$

Hier macht man zunächst die Leiternäherung für den Bethe-Salpeter Kern

$$K(p + q, p' + q, q) \approx k(q). \quad (2.66)$$

In dieser Näherung ist  $k(q)$  in niedrigster Ordnung Störungstheorie gegeben durch

$$k(q) = k(\mathbf{q}) = -iC_F g^2 \gamma_\mu \otimes \gamma_\nu D_{\mu\nu} \quad (2.67)$$

und somit kann  $k(q)$  geschrieben werden als

$$k(q) = k(\mathbf{q}) = -i4\pi C_F \gamma_0 \otimes \gamma_0 V_C(\mathbf{q}) + i4\pi C_F \gamma_i \otimes \gamma_j (\delta^{ij} - \frac{q^i q^j}{\mathbf{q}^2}) V_T(\mathbf{q}). \quad (2.68)$$

In Gleichung (2.68) repräsentiert  $V_C(\mathbf{q})$  das berühmte *Color-Coulomb Potential* und  $V_T(\mathbf{q})$  das Potential für die retardierten transversalen Gluonen. Diese Form des Bethe-Salpeter Kerns gehört zu einem Potential, dass sich wie die Komponenten eines Vierervektors unter Lorentztransformationen verhält. Mit den Gleichungen (2.64) und (2.65) erhält man für die Axialvektorvertexfunktion

$$\begin{aligned} (p' - p)^\mu \Gamma_{\mu 5}(p', p) &= iS^{-1}(p') \gamma_5 + \gamma_5 iS^{-1}(p) + 2m\Gamma_5(p', p) = \\ &Z_{(\mu)5} \gamma_\mu \gamma_5 (p' - p)^\mu + \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} S(p' + q) \cdot [iS^{-1}(p' + q) \gamma_5 + \\ &\gamma_5 iS^{-1}(p + q) + 2m\Gamma_5(p' + q, p + q)] S(p + q) k(q). \end{aligned} \quad (2.69)$$

Nun benutzt man die Vektoreigenschaften des Potentials, um die  $\gamma_5$ -Matrix auf die rechte Seite der Gleichung (2.69) zu antikommutieren:

$$\begin{aligned} iS^{-1}(p') \gamma_5 + \gamma_5 iS^{-1}(p) + 2m\Gamma_5(p', p) &= \\ \gamma_5 \left( Z_{(\mu)5} \gamma_\mu p^\mu - Z_5 m + \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} S(p + q) k(q) \right) + \\ \left( Z_{(\mu)5} \gamma_\mu p'^\mu - Z_5 m + \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} S(p' + q) k(q) \right) \gamma_5 + \\ 2m\Gamma_5(p', p). \end{aligned} \quad (2.70)$$

Die pseudoskalare Vertexfunktion  $\Gamma_5(p', p)$  kann in der ersten und letzten Zeile von Gleichung (2.70) gegeneinander weggekürzt werden. Die Abhängigkeit von den Impulsen  $p'$  und  $p$  ist nun vollständig separiert, und man erhält folgende Gleichung für den renormierten Quarkpropagator (vergleiche Gleichung (4.12) in [13]):

$$\begin{aligned} iS^{-1}(p) &= Z_{(\mu)5} \gamma_\mu p^\mu - Z_5 m + \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} S(p + q) k(q) \\ &= Z_{(\mu)5} \gamma_\mu p^\mu - Z_5 m + g^2 C_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu}(k) \gamma_\mu S(q) \gamma_\nu \\ &= Z_{(\mu)5} \gamma_\mu p^\mu - Z_5 m + 4\pi C_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \cdot \\ &[V_C(\mathbf{k}) \gamma_0 S(q) \gamma_0 - V_T(\mathbf{k}) \gamma_i S(q) \gamma_j (\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\mathbf{k}^2})] \end{aligned} \quad (2.71)$$

Da die Eigenschaften der Vertexfunktionen unter Paritätstransformationen durch diese Näherungen nicht verändert wurden, sind die einander entsprechenden Renormierungskonstanten weiterhin gleich [13]:

$$Z_{(\mu)5} = Z_{(\mu)} = \begin{cases} Z_0 & \text{für } \mu = 0, \\ Z_j & \text{für } \mu = j = 1, 2, 3, \end{cases} \quad (2.72)$$

$$Z_{(\mu)5} \gamma_\mu p^\mu = Z_0 \gamma_0 p^0 - Z_j \gamma_j p^j. \quad (2.73)$$

## 2.5 Die Gap-Gleichung in Coulombeichung

Ein Schlüsselement bei der Realisierung eines Confinementszenarios ist die Wahl einer Eichung. Dabei ist im Rahmen dieser Arbeit zur Beschreibung der für das Confinement verantwortlichen Mechanismen das ursprünglich von Gribov [2] und Zwanziger [3] formulierte Szenario zum Farbeinschluss von besonderem Interesse. In Coulombeichung wird Confinement auf das Verhalten des *Color-Coulomb Potentials*  $V_{coul}(R)$  zurückgeführt, das bei großen Abständen linear ansteigt, wodurch die Quarks eingeschlossen (confined) sind. Bei kleinen Abständen verhält es sich hingegen coulombartig und sollte zumindest näherungsweise das richtige asymptotische Verhalten besitzen, das aus der Störungstheorie bekannt ist. Das Coulomb Potential ist der instantane Anteil der Zeit-Zeit Komponente des Gluonpropagators [3] [16] [17]

$$D_{\mu\nu}(x) \equiv \langle gA_\mu(x)gA_\nu(0) \rangle, \quad (2.74)$$

nämlich

$$D_{00}(\mathbf{x}, t) = V(|\mathbf{x}|)\delta(t). \quad (2.75)$$

Bei der Konstruktion eines solchen Potentials unterliegt man zwei Einschränkungen: (i) *lineares Quark Confinement* und (ii) *Asymptotische Freiheit*. Lineares Quark Confinement wird durch die Forderung implementiert, dass das Potential für große Abstände linear ansteigt:

$$\lim_{\Lambda_{QCD} R \gg 1} V(R) \propto \text{const} \times R, \quad (2.76)$$

oder gleichbedeutend

$$\lim_{-q^2 \ll \Lambda_{QCD}^2} V(q^2) \propto \text{const} \times \frac{1}{(q^2)^2}. \quad (2.77)$$

Die Bedingung der Asymptotischen Freiheit erfordert, dass sich die starke effektive Kopplungskonstante  $\alpha_s$  mit  $-q^2 \equiv Q^2 > 0$  für große raumartige Impulsüberträge wie

$$\lim_{Q^2 \gg \Lambda_{QCD}^2} \alpha_s(Q^2) \propto \frac{12\pi}{(11N_c - 2N_f) \ln(Q^2/\Lambda^2)} \quad (2.78)$$

verhält. Ein Potential, dass den erwähnten Anforderungen genügt, ist das Richardson-Potential [18]:

$$V_C(\mathbf{q}) := \frac{\alpha(\mathbf{q}^2)}{\mathbf{q}^2}, \quad (2.79)$$

$$\alpha(\mathbf{q}^2) = \frac{12\pi}{(11N_c - 2N_f) \ln(1 + \mathbf{q}^2/\Lambda^2)}. \quad (2.80)$$

Der Skalenparameter  $\Lambda \equiv \Lambda_{QCD}$  ist dann durch die Stringspannung  $\sigma_C$  gegeben:

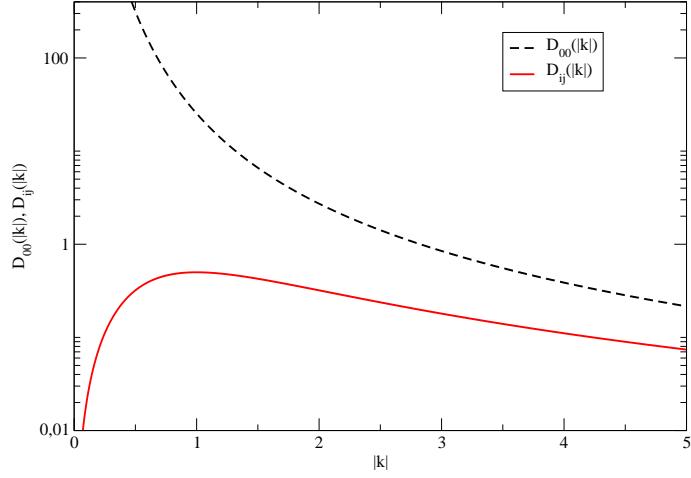


Abbildung 2.2: Die Gluonpropagatoren  $D_{00}(|\mathbf{k}|)$  und  $D_{ij}(|\mathbf{k}|)$  in instantaner Näherung als Funktion der äußeren Impulse  $|\mathbf{k}|$ . Der Skalenparameter  $\Lambda$  wurde gleich eins gesetzt.

$$\sigma_C = \frac{8\pi}{27}\Lambda^2. \quad (2.81)$$

Damit kann die Zeit-Zeit Komponente  $D_{00}$  des Gluonpropagators geschrieben werden als

$$D_{00}(|\mathbf{k}|) = \frac{i}{g^2} 4\pi V_C(|\mathbf{k}|). \quad (2.82)$$

Für die Parametrisierung der transversalen Komponenten  $D_{ij}$  des Gluonpropagators verwende ich folgenden Ansatz:

$$D_{ij}(k_0, |\mathbf{k}|) = \frac{i}{g^2} (\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\mathbf{k}^2}) V_T(k_0, |\mathbf{k}|) \quad (2.83)$$

mit

$$V_T(k_0, |\mathbf{k}|) := \frac{Z(k_0, |\mathbf{k}|)}{k_0^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}. \quad (2.84)$$

Dieser Ansatz für den Gluonpropagator (siehe Abbildung 2.2) steht in guter Übereinstimmung mit Ergebnissen im Hamiltonformalismus [19] und aktuellen Gitterrechnungen [20]. Die Gluonenergie  $\omega_g(k)$  (siehe Abbildung 2.3) muss aufgrund der Asymptotischen Freiheit im ultravioletten Bereich ( $k \rightarrow \infty$ ) das folgende asymptotische Verhalten aufweisen (vergleiche (3.125) in [19]):

$$\omega_g(k) \rightarrow \sqrt{\mathbf{k}^2}, \quad k \rightarrow \infty. \quad (2.85)$$

Da der Gluonpropagator  $D_{ij}$  bis auf einen Faktor 2 mit der inversen Gluonenergie übereinstimmt, verursacht er im infraroten Bereich ( $k \rightarrow 0$ ) eine unendlich hohe Gluonenergie. Das Verschwinden des Gluonpropagators manifestiert sich in der Abwesenheit der Gluonen aus dem physikalischen Spektrum,

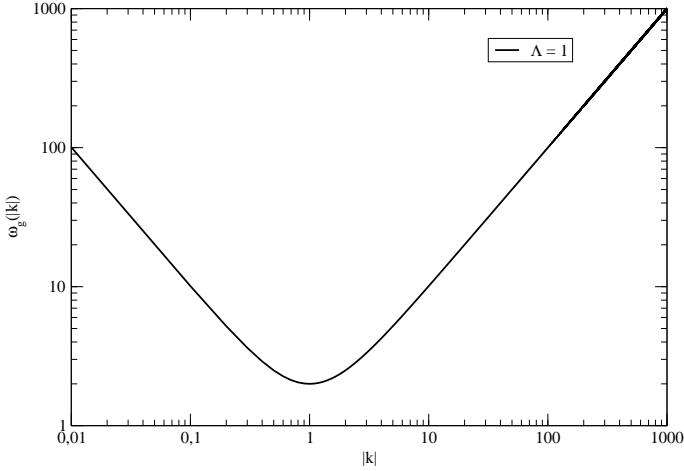


Abbildung 2.3: Die Gluonenergie  $\omega_g(|\mathbf{k}|)$  als Funktion der äußeren Impulse  $|\mathbf{k}|$ . Der Skalenparameter  $\Lambda$  wurde gleich eins gesetzt.

was einen starken Hinweis auf den Farbeinschluss der Gluonen im Yang-Mills-Vakuum bedeutet [19]. Dies führt auf den folgenden Ansatz für die Gluonenergie im Infraroten (vergleiche (3.163) in [19]):

$$\omega_g(k) = \frac{\Lambda^2}{k}. \quad (2.86)$$

Mit einer einfachen Interpolation zwischen dem angenommenen infraroten und dem bekannten ultravioletten Verhalten kann die Gluonenergie geschrieben werden als

$$\omega_g(|\mathbf{k}|) = \frac{\Lambda^2}{|\mathbf{k}|} + |\mathbf{k}|. \quad (2.87)$$

Die Retardierungseffekte werden mittels  $k_0 = p_0 - q_0$  einbezogen. In dieser nichtrelativistischen Näherung macht man folgenden Ansatz für den inversen Quarkpropagator:

$$iS^{-1}(p) = [\gamma_0 p_0 A(p_0, |\mathbf{p}|) - \gamma \cdot \mathbf{p} C(p_0, |\mathbf{p}|) - B(p_0, |\mathbf{p}|) + i\epsilon]. \quad (2.88)$$

Mit diesem Ansatz kann der Quarkpropagator geschrieben werden als:

$$S(p) = i \frac{\gamma_0 p_0 A(p_0, |\mathbf{p}|) - \gamma \cdot \mathbf{p} C(p_0, |\mathbf{p}|) + B(p_0, |\mathbf{p}|)}{p_0^2 A^2(p_0, |\mathbf{p}|) - \mathbf{p}^2 C^2(p_0, |\mathbf{p}|) - B^2(p_0, |\mathbf{p}|)}. \quad (2.89)$$

Setzt man diese Näherungen und Ansätze in die Gap-Gleichung für den renormierten Quarkpropagator (2.71) ein, kann man durch Spurnahme und anschließende Wick-Rotation der  $p_0$ -Komponente (Anhang C) ein System aus drei gekoppelten nichtlinearen Integralgleichungen für die Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  ableiten (Anhang B):

$$\begin{aligned}
A(p_E, |\mathbf{p}|) &= Z_0 + \frac{C_F}{p_E(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) \\
&\quad [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) + \frac{2Z(k_E, |\mathbf{k}|)}{-k_E^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{q_E A(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \tag{2.90}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B(p_E, |\mathbf{p}|) &= Z_m m - \frac{C_F}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) \\
&\quad [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) - \frac{2Z(k_E, |\mathbf{k}|)}{-k_E^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{B(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \tag{2.91}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C(p_E, |\mathbf{p}|) &= Z_j - \frac{C_F}{|\mathbf{p}|(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^3 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) \\
&\quad [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) \cos \vartheta - (\cos \vartheta + \frac{|\mathbf{p}| |\mathbf{q}| (\cos^2 \vartheta - 1)}{\mathbf{k}^2})] \frac{2Z(k_E, |\mathbf{k}|)}{-k_E^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)} \frac{C(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \tag{2.92}
\end{aligned}$$

wobei hier die Kurzschriftweise

$$\text{denom} := -q_E^2 A^2(q_E, |\mathbf{q}|) - \mathbf{q}^2 C^2(q_E, |\mathbf{q}|) - B^2(q_E, |\mathbf{q}|) \tag{2.93}$$

verwendet wurde. In den Gleichungen (2.90) - (2.92) bezeichnet  $\mathbf{q}$  den inneren Schleifenimpuls,  $\mathbf{k} = \mathbf{p} - \mathbf{q}$  den äußeren Impuls und  $\vartheta$  den Winkel, den beide Vektoren miteinander einschließen. Um die Notation kompakt zu halten, ist es zweckmäßig, für die Winkelintegrale (Anhang B) die folgende Kurzschriftweise einzuführen:

$$\text{Bek1}(|\mathbf{p}|, \vartheta) = \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) 4\pi V_C(|\mathbf{k}|), \tag{2.94}$$

$$\text{Bek2}(|\mathbf{p}|, \vartheta) = \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) 4\pi V_C(|\mathbf{k}|) \cos \vartheta, \tag{2.95}$$

$$\text{Bek3}(p_E, |\mathbf{p}|, \vartheta) = \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) \frac{2Z(k_E, |\mathbf{k}|)}{-k_E^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}, \tag{2.96}$$

$$\text{Bek4}(p_E, |\mathbf{p}|, \vartheta) = \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) (\cos \vartheta + \frac{|\mathbf{p}| |\mathbf{q}| (\cos^2 \vartheta - 1)}{\mathbf{k}^2}) \frac{2Z(k_E, |\mathbf{k}|)}{-k_E^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}. \tag{2.97}$$

Die  $|\mathbf{p}|$ -Koordinate ist für die Propagatorfunktionen eine Symmetriechse:

$$ABC(p_E, |\mathbf{p}|) = ABC(-p_E, |\mathbf{p}|). \quad (2.98)$$

Da das Integral einer Summe gleich der Summe über die Integrale ist, folgt mit (2.98):

$$\int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\infty}^\infty dq_E \text{Bek1}(|\mathbf{p}|, \vartheta) \frac{q_E A(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}} = 0, \quad (2.99)$$

$$\int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\infty}^\infty dq_E \text{Bek1}(|\mathbf{p}|, \vartheta) \frac{B(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}} = 2 \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_0^\infty dq_E \text{Bek1}(|\mathbf{p}|, \vartheta) \frac{B(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \quad (2.100)$$

$$\int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^3 \int_{-\infty}^\infty dq_E \text{Bek2}(|\mathbf{p}|, \vartheta) \frac{C(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}} = 2 \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^3 \int_0^\infty dq_E \text{Bek2}(|\mathbf{p}|, \vartheta) \frac{C(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}. \quad (2.101)$$

Damit können die Dyson–Schwinger Gleichungen für die Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  im kompakter Form geschrieben werden als

$$\begin{aligned} A(p_E, |\mathbf{p}|) &= Z_0 + \frac{C_F}{p_E(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) \\ &\quad [\text{Bek3}(p_E, |\mathbf{p}|, \vartheta)] \frac{q_E A(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \end{aligned} \quad (2.102)$$

$$\begin{aligned} B(p_E, |\mathbf{p}|) &= Z_m m - \frac{C_F}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) \\ &\quad [\text{Bek1}(|\mathbf{p}|, \vartheta) - \text{Bek3}(p_E, |\mathbf{p}|, \vartheta)] \frac{B(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \end{aligned} \quad (2.103)$$

$$\begin{aligned} C(p_E, |\mathbf{p}|) &= Z_j - \frac{C_F}{|\mathbf{p}|(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^3 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) \\ &\quad [\text{Bek2}(|\mathbf{p}|, \vartheta) - \text{Bek4}(p_E, |\mathbf{p}|, \vartheta)] \frac{C(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

Die Regularisierung der Integrale im Ultravioletten erfolgt mit einem Impuls-Cutoff  $\Lambda_{UV}$ . Die Renormierung der Gleichungen wird unter Verwendung eines MOM-Schemas (siehe Abschnitt 2.3), wobei  $\mu_E$  und  $|\mu|$  die jeweiligen Regularisierungsskalen bezeichnen, durch Subtraktion am Renormierungspunkt  $(\mu_E, |\mu|)$  durchgeführt. Wegen der Asymptotischen Freiheit kann man dann schließen, dass

$$Z_0 = 1, \quad Z_m m = m_0, \quad Z_j = 1. \quad (2.105)$$

Insgesamt können die renormierten Dyson–Schwinger Integralgleichungen für die Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  geschrieben werden als:

$$A(p_E, |\mathbf{p}|) = 1 + \frac{C_F}{p_E(2\pi)^3} \int_0^{\Lambda_{UV}} d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\Lambda_{UV}}^{\Lambda_{UV}} dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) [Bek3(p_E, |\mathbf{p}|, \vartheta)] \frac{q_E A(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \quad (2.106)$$

$$B(p_E, |\mathbf{p}|) = m_0 - \frac{C_F}{(2\pi)^3} \int_0^{\Lambda_{UV}} d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\Lambda_{UV}}^{\Lambda_{UV}} dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) [Bek1(|\mathbf{p}|, \vartheta) - Bek3(p_E, |\mathbf{p}|, \vartheta)] \frac{B(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \quad (2.107)$$

$$C(p_E, |\mathbf{p}|) = 1 - \frac{C_F}{|\mathbf{p}|(2\pi)^3} \int_0^{\Lambda_{UV}} d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^3 \int_{-\Lambda_{UV}}^{\Lambda_{UV}} dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) [Bek2(|\mathbf{p}|, \vartheta) - Bek4(p_E, |\mathbf{p}|, \vartheta)] \frac{C(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}. \quad (2.108)$$

Die Gleichungen (2.106) - (2.108) sind nun ultraviolettdlich. Wie jede andere physikalisch sinnvolle Wahl für  $V_C(|\mathbf{k}|)$  hat auch das Richardson-Potential notwendigerweise eine nichtintegrierbare Divergenz bei  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{p} - \mathbf{q}| = \mathbf{0}$ . Deshalb sind  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  divergente Größen, wenn  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}$  geht. Diese Infrarotdivergenzen werden durch Einführung eines Infrarotregulators  $\mu_{IR}$  kontrolliert:

$$\mathbf{k}^2 \rightarrow \mathbf{k}^2 + \mu_{IR}^2. \quad (2.109)$$

Ein analytischer Beweis für die Konvergenz eines solchen Regularisierungsschemas findet sich in [13]. Hingegen ist das Verhältnis

$$M(p_E, |\mathbf{p}|) := \frac{B(p_E, |\mathbf{p}|)}{C(p_E, |\mathbf{p}|)} \quad (2.110)$$

im Limes  $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$  endlich und kann dazu verwendet werden, eine impulsabhängige Konstituentenquarkmasse zu definieren [13] [21]. Die einzige verbliebene Unbekannte in den Gleichungen (2.106) - (2.108) ist  $Z(k_E, |\mathbf{k}|)$ . Im vorliegenden Modell wird die *instantane Näherung* durch die Wahl von

$$Z(k_E, |\mathbf{k}|) \equiv 0 \quad \text{instantane Näherung} \quad (2.111)$$

realisiert. Bei *Hinzunahme von transversalen Komponenten und Retardierungseffekten* wird  $Z(k_E, |\mathbf{k}|)$  zur Vereinfachung auf den konstanten Wert 1 gesetzt:

$$Z(k_E, |\mathbf{k}|) \equiv 1 \quad \text{mit retardierten transversalen Gluonen}. \quad (2.112)$$

## 2.6 Optimierungsstrategien

Eine numerische Lösung der Dyson-Schwinger Integralgleichungen für die Quarkpropagatorfunktionen gestaltet sich aus zwei Gründen schwierig. Zum einen sind diese Integralgleichungen *nichtlinear*, so dass Standardmethoden zur Lösung von linearen Integralgleichungen (Nystrom-Methode, method of iterated kernels) nicht verwendet werden können. Das Integralgleichungssystem (2.106) - (2.108) wird deshalb mittels eines iterativen Gesamtschrittverfahrens gelöst. Dabei werden die Ergebnisse der aktuellen Iteration als Startwerte für die nächste Iteration verwendet. Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis die vom Benutzer vorgegebenen Konvergenzkriterien erfüllt sind. Dieses Verfahren wird in weiterer Folge als *Standardtechnik* bezeichnet. Zum anderen wird der Kern der Integralgleichungen für  $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$  hochgradig *infrarotsingulär*. Dieses infrarotsinguläre Verhalten der Integralkerne hat weitreichende Auswirkungen auf die Konvergenzgeschwindigkeit: abhängig von der Wahl des Infrarotregulators  $\mu_{IR}^2$  erhöht sich einerseits die Anzahl der benötigten Funktionsauswertungen pro Iterationsschritt, andererseits steigt die Gesamtzahl der benötigten Iterationen stark an. Gerade im interessanten Fall der retardierten transversalen Gluonen ist man nicht in der Lage, mehr als eine vergleichsweise geringe Anzahl von Iterationen durchzuführen. An Optimierungsstrategien bieten sich somit zwei einander ergänzende Vorgehensweisen an:

### 1. Die Rechenzeit für eine einzelne Iteration minimieren

- Hier muss das Hauptaugenmerk zunächst darauf liegen, die Integrale in den Gleichungen (2.106)–(2.108) möglichst effizient auszuwerten. Dafür wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit ein **Automatischer Integrator** auf Basis der Gauß-Kronrod Quadraturformeln mit adaptiver rekursiver Bisektion implementiert. Die verschiedenen Teilaspekte der adaptiven numerischen Quadratur und Kubatur werden in Kapitel 3 behandelt.
- Das von mir in weiterer Folge als **Freezing** bezeichnete Verfahren leitet sich aus der Beobachtung ab, dass die Integrale im Ultravioletten deutlich schneller konvergieren als im Infraroten. Wesentlich in diesem Zusammenhang ist die Definition des Abbruchkriteriums. Während bei der Standardmethode für das Erreichen von Kovergenz die Bedingung

$$\left| 1 - \frac{f_{n+1}(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)}{f_n(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)} \right| < \varepsilon \quad \forall i, j, \quad 0 \leq i, j < N, \quad (2.113)$$

wobei  $f_n(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)$  den Wert der Propagatorfunktion nach  $n$  Iterationen am Gitterpunkt  $(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)$  bezeichnet,  $\forall i, j$  nach  $n$  Iterationen erfüllt sein muss, wird bei der Freezing-technik der Wert der Propagatorfunktion am Gitterpunkt  $(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)$  bereits nach einmaligem Erfüllen dieser Bedingung "eingefroren".

- Ein weiterer naheliegender Weg, um die Rechenzeit für eine einzelne Iteration zu minimieren, ist natürlich die **Parallelisierung** des Programms.

### 2. Die Gesamtzahl der Iterationen minimieren

- Allen gängigen Iterationsverfahren ist inhärent (vorausgesetzt das Iterationsverfahren konvergiert), dass die Anzahl der Iterationen mit der Problemgröße anwächst. Hier kann durch den Einsatz von Konvergenzbeschleunigungsverfahren eine Verringerung des Rechenzeitbedarfs erreicht werden. In dieser Arbeit wird Wynn's  $\epsilon$ -Algorithmus auf eine Folge von Partialsummen der Quarkpropagatorfunktionen angewendet. Näheres zu nichtlinearen Folgentransformationen und dem  $\epsilon$ -Algorithmus findet sich in Kapitel 4.

## Kapitel 3

# Numerische Quadratur

*The game is to obtain the integral as accurately as possible with the smallest number of function evaluations of the integrand.*

Press et al. (1992)

Der Begriff Quadratur hat (zumindest) drei inkompatible Bedeutungen [22]. Integration durch Quadratur bedeutet entweder die analytische Auswertung (z.B. symbolisch in Form von bekannten Funktionen) oder die numerische Approximation (z.B. durch Quadraturformeln) von Integralen. Daneben versteht man unter Quadratur auch ein klassisches Problem der Geometrie: die Konstruktion eines Vierecks nur mit Zirkel und Lineal mit demselben Flächeninhalt wie eine gegebene geometrische Figur.

Unter numerischer Quadratur bzw. numerischer Integration versteht man die näherungsweise Berechnung von bestimmten Integralen

$$I(f) := \int_a^b f(x)dx \quad (3.1)$$

mit einer gegebenen integrierbaren Funktion  $f$  und einem endlichen Intervall  $[a, b]$  als Integrationsbereich. Die Formeln zur näherungsweisen Berechnung von  $I(f)$  heißen Integrations- oder Quadraturformeln. Die geeignete Methode zur Bestimmung von  $I(f)$  hängt wesentlich von den Eigenschaften des Integranden im Integrationsintervall ab: ist der Integrand glatt oder gibt es Singularitäten der Funktion  $f(x)$ ? Liegt eine Wertetabelle vor oder ist  $f(x)$  für beliebige Argumente  $x$  berechenbar? Was ist die gewünschte Genauigkeit und wie viele verschiedene Integrale sind zu berechnen?

Zur Durchführung der numerischen Integration sind zwei Teilaufgaben zu bewältigen [23]: Die eine beschäftigt sich mit der Konstruktion von Quadraturformeln, die andere mit der Abschätzung der Approximationsgüte. Dabei hat man natürlich gewisse Freiheiten, was sich recht deutlich in den unterschiedlichen Konzepten der gängigen Integrationsmethoden zeigt (Newton-Cotes-Formeln, Romberg-Integration, Gauß-Quadratur, Monte-Carlo-Integration).

Das einfachste Beispiel für die Konstruktion einer Quadraturformel  $Q_n$  ist, das bestimmte Integral als Fläche zwischen dem Funktionsgraphen und der x-Achse zu definieren und den Wert des Integrals mit

Hilfe von Riemann-Summen

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) =: Q_n \quad (3.2)$$

und einer äquidistanten Zerlegung  $x_i = a + i(b-a)/n$  von  $[a, b]$  zu approximieren. Allerdings zeigt sich, dass diese Methode in der Regel sehr langsam konvergiert und damit für praktische Anwendungen kaum geeignet ist.

### 3.1 Interpolatorische Quadraturformeln

Ein anderer naheliegender Weg zur Konstruktion von Quadraturformeln ist der über Polynominterpolation. Dabei wird die zu integrierende Funktion  $f(x)$  im Integrationsintervall  $[a, b]$  durch ein Interpolationspolynom  $p_n(x)$  an  $(n+1)$  verschiedenen *Stützstellen (Knoten, Abszissen)*  $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n < b$  angenähert und man verwendet als Näherung für den Wert  $I(f)$  das Integral über das Interpolationspolynom:

$$I(f) := \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p(x)dx. \quad (3.3)$$

Unter Verwendung der Lagrangeschen Interpolationsformel

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x)f(x_i) \quad (3.4)$$

mit den  $(n+1)$  speziellen Lagrangeschen Interpolationspolynomen

$$l_i(x) := \prod_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad (3.5)$$

ergibt sich so

$$I(f) = \int_a^b \sum_{i=0}^n l_i(x)f(x_i)dx + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i)dx. \quad (3.6)$$

Aus dem ersten Anteil resultiert die Quadraturformel

$$Q_n = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x)dx =: (b-a) \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i), \quad (3.7)$$

die nur von den gewählten Stützstellen  $x_0, x_1, \dots, x_n$  und den *Integrationsgewichten*

$$\omega_i := \frac{1}{(b-a)} \int_a^b l_i(x) dx \quad (k = 0, 1, \dots, n) \quad (3.8)$$

abhängt. Der Quadraturfehler

$$E_n[f] := I(f) - Q_n = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i) dx \quad (3.9)$$

kann im Fall von äquidistant verteilten Stützstellen explizit angegeben werden. Der Gesamtfehler setzt sich dann aus dem Quadraturfehler und dem bei numerischen Verfahren immer vorhandenen Rundungsfehler zusammen. Alle diese interpolatorischen Quadraturformeln besitzen konstruktionsbedingt die Eigenschaft, dass  $Q_n$  für  $I(f)$  den exakten Wert liefert, falls der Integrand  $f(x)$  ein Polynom  $p_n$  vom Grad  $\deg p_n \leq n$  ist. So hat eine beliebige Quadraturformel  $Q_n$  die Fehlerordnung  $m$ , wenn für den Fehler (i)  $E[p] = 0$  für alle Polynome  $p \in \prod_{m-1}$  und (ii)  $E[p] \neq 0$  für ein Polynom  $p \in \prod_m$  gilt.

Wählt man die Stützstellen  $x_i$  äquidistant, erhält man die *Newton-Cotes-Formeln*. Die einfachsten Newton-Cotes-Formeln ergeben sich aus der linearen Interpolation (Trapezregel) und der quadratischen Interpolation (Simpson-Formel oder Keplersche Fassregel). Entsprechende Formeln höherer Ordnung bis  $n \leq 8$  können auch konstruiert werden. Diese Verfahren sind ausgenommen die zusammengesetzte Trapezregel in Kombination mit der Richardson-Extrapolation (Romberg-Integration) heute aber nur mehr "schöne Museumsstücke" [24].

## 3.2 Gauß-Quadratur und Orthogonalpolynome

Die Idee bei der Gauß-Quadratur besteht darin, die Einschränkung von äquidistant verteilten Stützstellen aufzugeben und dieselben zusammen mit den Integrationsgewichten so zu wählen, dass die resultierende Quadraturformel maximale Genauigkeit besitzt. Das fundamentale Theorem der Gauß-Quadratur besagt, dass die durch die Summe definierte Quadraturformel

$$I(f) := \int_a^b \omega(x) f(x) dx = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) + \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!} \int_a^b \omega(x) \prod_{i=1}^n (x - x_i)^2 dx \quad (3.10)$$

mit einer positiven Gewichtsfunktion  $\omega(x) > 0$  den maximalen Genauigkeitsgrad  $m = (2n - 1)$  besitzt (also Fehlerordnung  $2n$  hat), falls die Stützstellen der Quadraturformel genau mit den Nullstellen eines Satzes von Orthogonalpolynomen im selben Intervall zusammenfallen. Eine  $n$ -Punkt Gauß-Quadraturformel

$$G_n(f) := \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (3.11)$$

ist also exakt ( $E_n[f] = 0$ ), falls  $f(x)$  ein Polynom  $p$  vom Grad  $\deg(p) \leq (2n - 1)$  oder weniger ist. Wir suchen nun nach einer notwendigen Bedingung dafür, dass die Quadraturformel (3.11) die Fehlerordnung  $2n$  besitzt. Dazu bezeichnet man mit  $p_n \in \prod_n$  das Polynom

$$p_n(x) := \prod_{i=1}^n (x - x_i). \quad (3.12)$$

Ist  $p \in \prod_{2n-1}$  beliebig, so gibt es Polynome  $q, r \in \prod_{n-1}$  mit

$$p(x) = p_n(x)q(x) + r(x). \quad (3.13)$$

Aus der Exaktheit von (3.11) folgt

$$\begin{aligned} \int_a^b \omega(x)p(x)dx &= \int_a^b \omega(x)[p_n(x)q(x) + r(x)]dx \\ &= \sum_{i=1}^n \omega_i [p_n(x_i)q(x_i) + r(x_i)] = \sum_{i=1}^n \omega_i r(x_i) = \int_a^b \omega(x)r(x)dx, \end{aligned} \quad (3.14)$$

also

$$\int_a^b \omega(x)p_n(x)q(x)dx = 0. \quad (3.15)$$

Durchläuft  $p$  die Menge aller Polynome  $\prod_{2n-1}$ , so durchläuft  $q$  in der obigen Zerlegung von  $p$  die Menge  $\prod_{n-1}$ . Notwendig für die Exaktheit der Quadraturformel (3.11) ist also, dass  $p_n$  orthogonal zu  $\prod_{n-1}$  bzgl. des Skalarprodukts

$$(f, g)_\omega = \int_a^b \omega(x)f(x)g(x)dx \quad (3.16)$$

ist. Die gesuchten Stützstellen  $x_i$  müssen also die Nullstellen von Orthogonalpolynomen  $p_n$  vom Grad  $\deg p_n = n$  sein. Man bezeichnet mit

$$\overline{\prod}_n := \{p \in \prod_n : p(x) = x^n + \sum_{i=0}^{n-1} a_i x^i\} \quad (3.17)$$

die Menge der normierten Polynome. Für eine Menge von normierten orthogonalen Polynomen gilt:

$$(p_n, p_m) = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.18)$$

Solche orthogonalen Polynomsysteme können mittels Gram-Schmidt Orthogonalisierung aus den Monomien  $\{1, x, x^2, \dots\}$  konstruiert werden. Die Gewichte und Stützstellen der Quadraturformel hängen dann von der jeweiligen Wahl der Gewichtsfunktion  $\omega(x)$  ab. Die gängigsten Gewichtsfunktionen und die zugehörigen Orthogonalpolynome sind in Tabelle 3.2 zusammengestellt.

$\omega(x)$	Intervall $[a, b]$	Orthogonalpolynome
1	$-1 \leq x \leq 1$	Legendre-Polynome $P_n$
$(1 - x^2)^{-1/2}$	$-1 \leq x \leq 1$	Chebychev-Polynome $T_n$
$e^{-x}$	$0 \leq x < \infty$	Laguerre-Polynome $L_n$
$e^{-x^2}$	$-\infty < x < \infty$	Hermite-Polynome $H_n$
$(1 - x)^\alpha(1 + x)^\beta$	$-1 \leq x \leq 1$	Jacobi-Polynome $P_n^{\alpha, \beta}$

Tabelle 3.1: Gängige Gewichtsfunktionen und zugehörige Orthogonalpolynome.

### 3.3 Berechnung der Stützstellen und Gewichte

Es gibt (vergleiche z.B. [23] [25]) zu jeder zulässigen Gewichtsfunktion  $\omega(x)$  ein System von Orthogonalpolynomen  $\{p_n\}$ , die bis auf einen Normierungsfaktor eindeutig bestimmt sind. Diese genügen einer Drei-Term-Rekursionsformel

$$p_{-1}(x) \equiv 0 \quad (3.19)$$

$$p_0(x) \equiv 1 \quad (3.20)$$

$$p_{n+1}(x) = (x - a_n)p_n(x) - b_n^2 p_{n-1}(x), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.21)$$

mit

$$a_n := \frac{(xp_n|p_n)}{(p_n|p_n)} \quad 0, 1, \dots, n \quad (3.22)$$

$$b_n := \frac{(p_n|p_n)}{(p_{n-1}|p_{n-1})} \quad 1, 2, \dots, n \quad (3.23)$$

Bei den in der Praxis vorkommenden Polynomen handelt es sich in der Regel um charakteristische Polynome von Matrizen [25]. Die Nullstellen  $x_i = x_1, \dots, x_n$  des  $n$ -ten Orthogonalpolynoms  $p_n$  sind dann die Eigenwerte der symmetrischen Tridiagonalmatrix

$$T_n := \begin{bmatrix} a_1 & b_2 & & \\ b_2 & a_2 & \ddots & \\ \ddots & \ddots & b_n & \\ & b_n & a_n & \end{bmatrix}, \quad (3.24)$$

die beispielsweise mit einem QR-Dekompositionsverfahren berechnet werden können.  $T_n$  nennt man die zur Gauß-Formel  $G_n$  gehörige *Jacobi-Matrix*. Die zugehörigen Gewichte  $\omega_i$  können ebenfalls mit Hilfe der Jacobi-Matrix  $T_n$  berechnet werden, da für die Gewichte  $\omega_i$  die Gleichung (vergleiche [25])

$$\omega_i = (v_1^{(i)})^2, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.25)$$

gilt, wobei  $v^{(i)} = (v_1^{(i)}, \dots, v_n^{(i)})^T$  Eigenvektor zum Eigenwert  $x_i$  von  $T_n$  ist. Die erste Komponente  $v_1^{(i)}$  des Eigenvektors  $v^{(i)}$  und damit  $\omega_i$  kann so beim QR-Verfahren zur Bestimmung der Eigenwerte leicht mitberechnet werden.

### 3.4 Gauß-Legendre Quadratur

Für das Intervall  $[-1, 1]$  und die Gewichtsfunktion  $\omega(x) \equiv 1$  sind die zugehörigen Orthogonalpolynome

$$p_n(x) = \frac{n!}{(2n)!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (3.26)$$

bis auf einen Normierungsfaktor gerade die Legendre-Polynome. Die Nullstellen der Legendre-Polynome sind alle verschieden, liegen im offenen Intervall  $(-1, 1)$  und sind bezüglich des Ursprungs symmetrisch. Sie dienen als Stützstellen  $x_i$  in den Gauss-Legendre Formeln und können unter Verwendung der Rekursionsbeziehungen

$$\begin{aligned} (n+1)P_{n+1} &= (2n+1)xP_n - nP_{n-1} \\ (x^2 - 1)P'_{n+1} &= nxP_n - nP_{n-1} \end{aligned} \quad (3.27)$$

entweder mit den in Abschnitt 3.3 beschriebenen Methoden oder durch Nullstellensuche beispielsweise mit dem Newton-Raphson Verfahren bestimmt werden:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \quad (3.28)$$

Eine hilfreiche Tatsache bei der Implementierung eines Root-Finders für die Legendre-Polynome ist die Tatsache, dass die Nullstellen von  $P_{n+1}$  zwischen denen von  $P_n$  liegen und diese als Startwerte für die Berechnung der Nullstellen von  $P_{n+1}$  verwendet werden können. Alternativ kann auch die Näherung (vergleiche z.B. [24])

$$x_n \approx \cos[\pi(n - 1/4)/(N + 1/2)] \quad (3.29)$$

als Startwert verwendet werden. Die Gewichte können auf mehrere Arten berechnet werden:

- **Direkt** aus dem nichtlinearen Gleichungssystem

$$\int_a^b \omega(x)p(x)dx = \sum_{i=1}^n \omega_i p(x_i) \quad (3.30)$$

- Durch Lösung des **linearen Gleichungssystems**

$$\sum_{j=1}^n \omega_j p_i(x_j) = \delta_{i0} \langle p_0, p_0 \rangle_\omega. \quad (3.31)$$

- Eine **effiziente Methode** ist folgende: man berechnet das Lagrangesche Interpolationspolynom für  $f(x)$  durch [26]:

$$p_n(x) = \prod_{j=1}^n (x - x_j), \quad (3.32)$$

$$p'_n(x_j) = \frac{dp_n(x)}{dx} \Big|_{x=x_j} = \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n (x_j - x_i) \quad (3.33)$$

und füttet mit der Lagrangeschen Interpolationsformel (3.4) durch  $n$  Punkte (Gleichungen (3.5) bis (3.7)):

$$\int_a^b \omega(x) f(x) dx = \int_a^b \sum_{i=1}^n \omega(x) \frac{p_n(x)}{(x - x_i)p'_n(x_i)} dx f(x_i) = \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (3.34)$$

mit Gewicht

$$\omega_i = \frac{1}{p'_n(x_i)} \int_a^b \omega(x) \frac{p_n(x)}{(x - x_i)} dx. \quad (3.35)$$

Für orthogonale Polynome  $P_n(x)$  gilt [26]:

$$P_n(x) = A_n p_n(x), \quad (3.36)$$

wobei  $A_n$  der Koeffizient von  $x^n$  in  $P_n(x)$  ist. (3.35) wird dann unter Verwendung der Christoffel-Darboux Identitäten [27] integriert und man erhält

$$\omega_i = \frac{A_n}{A_{n-1}} \frac{\int |P_{n-1}(x)|^2 dx}{P_{n-1}(x_i) P'_{n-1}(x_i)}. \quad (3.37)$$

Die Gewichte (3.37) können mit Hilfe der Rekursionsbeziehungen (3.27) und folgenden Identitäten [26] vereinfacht werden:

$$\int_{-1}^1 |P_n(x)|^2 dx = \frac{2}{2n+1}, \quad (3.38)$$

$$\frac{A_n}{A_{n-1}} = \frac{2n-1}{n}. \quad (3.39)$$

Die Gewichte  $\omega_i$  erhalten so die für die numerische Berechnung günstige Form:

$$\omega_i = \frac{2}{(1-x_i)^2 [P'_n(x_i)]^2}. \quad (3.40)$$

Für beliebige Integrationsbereiche  $[a, b]$  kann das Integral  $\int_a^b f(x) dx$  mit der Transformation

$$x = g(t) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t, \quad dx = \frac{b-a}{2} dt, \quad (3.41)$$

$$a = g(t_1) = -1, \quad b = g(t_2) = 1 \quad (3.42)$$

in ein Integral über das Intervall  $[-1, 1]$  überführt werden:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right) dt. \quad (3.43)$$

Insgesamt erhalten die Gauß-Legendre Formeln die Gestalt

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n \omega_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right). \quad (3.44)$$

Der Quadraturfehler ist

$$E_n[f] = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{[(2n)!]^3(2n+1)} f^{2n}(\xi), \quad \xi \in (-1, 1). \quad (3.45)$$

Integrale über unbeschränkte Intervalle<sup>1</sup> werden häufig unter Verwendung der Knoten und Gewichte von Orthogonalpolynomen mit exponentiellen Gewichtsfunktionen, beispielsweise den Laguerre- oder Hermite-Polynomen berechnet. In der Regel erhält man bessere Ergebnisse, wenn man versucht, Orthogonalpolynome für ein endliches Intervall durch eine geeignete Transformation auf ein unendliches Intervall abzubilden. So können etwa die Gauß-Legendre Formeln mittels der logarithmischen Transformation

$$x(t) = \log\left(\frac{2}{1-t}\right) \quad (3.46)$$

auf das semi-unendliche Intervall  $[0, \infty)$  abgebildet werden:

$$\int_0^\infty f(x)dx = \int_{-1}^1 f(x(t)) \frac{dx}{dt} dt. \quad (3.47)$$

### 3.5 Gauß-Kronrod-Quadratur

Wie alle Gauß-Formeln haben auch die Gauß-Legendre-Formeln bei der praktischen Anwendung auf Integrationsprobleme einen gravierenden Nachteil: zwei beliebige Quadraturformeln  $G_m(f), G_n(f)$  mit  $m \neq n$  haben (außer eventuell den Intervallmittelpunkt) keine Knoten gemeinsam. Damit gibt es keine effiziente Methode, um zu einer praktisch berechenbaren Fehlerabschätzung zu gelangen. Die übliche Vorgehensweise, Formeln mit verschiedener Knotenzahl auszuwerten und die Differenz als Fehlerabschätzung zu verwenden, würde zu viele Auswertungen des Integranden benötigen und damit einen zu hohen Aufwand verursachen. Von A. S. Kronrod [29] wurde 1965 eine Vorgehensweise vorgeschlagen, die diesen Nachteil weitgehend vermeidet. Ausgehend von einer  $n$ -Punkt Gauß-Formel

$$G_n(f) := \sum_{i=1}^n \omega_i f(x_i) \quad (3.48)$$

der Ordnung  $2n$  mit  $n$  Abszissen  $x_1, \dots, x_n \in (-1, 1)$  bestimmt man  $(n+1)$  weitere Knoten  $y_0, \dots, y_n \in (-1, 1)$  und  $(2n+1)$  Gewichte  $\alpha_i, \beta_i$  so, dass die Quadraturformel

---

<sup>1</sup>In der älteren Literatur wird häufig die irreführende Bezeichnung "uneigentliche" Integrale verwendet. Tatsächlich gibt es nur einen einzigen Integralbegriff (das Lebesgueintegral), der sowohl beschränkte als auch unbeschränkte Integranden und Integrationsgebiete umfasst [28].

$$K_{2n+1}(f) := \sum_{i=1}^n \alpha_i f(x_i) + \sum_{i=0}^n \beta_i f(y_i) \quad (3.49)$$

möglichst hohe Ordnung besitzt. Die resultierende  $(2n + 1)$ -Punkt *Gauß-Kronrod-Quadraturformel* hat die Form

$$K_{2n+1}(f) := \sum_{i=1}^{2n+1} \omega_i f(x_i) \quad (3.50)$$

mit den folgenden beiden Eigenschaften:

- $n$  Knoten von  $K_{2n+1}$  fallen mit denen einer  $n$ -Punkt Gauß-Formel  $G_n$  für dieselbe Gewichtsfunktion zusammen.
- $K_{2n+1}(f) = I(f)$ , falls  $f$  ein Polynom vom Grad  $(3n + 1)$  oder weniger ist.

Der offensichtliche Vorteil ist nun, dass wegen der ersten Eigenschaft Funktionsauswertungen des Integranden zur Fehlerabschätzung wiederverwendet werden können. Aus diesem Grund ist die Gauß-Kronrod-Quadratur in den meisten Mathematikpaketen (Mathematica, MAPLE, QUADPACK-Library, GSL-Library,...) das Standardverfahren zur eindimensionalen numerischen Integration. Außerdem lassen sich aus (3.49) iterativ Kronrod-Formeln höherer Ordnung konstruieren, die sogenannten Patterson-Extensions [30].

Zur Berechnung der Knoten und Gewichte existieren verschiedene Methoden, die großteils auf dem in Abschnitt 3.2 beschriebenen Verfahren basieren [31] [32] [33]. Ihre effiziente Berechnung erweist sich allerdings als schwierig. So schreiben z.B. die Autoren von [33]: *"The presented iterative method is very sensitive with respect to perturbations in an early step. Numerical validation therefore requires high precision arithmetic."* und die Autoren von [32] *"...that allow the computation of the nodes and weights ... in  $O(n^2)$  or  $O(n^3)$  arithmetic operations. The faster algorithm yields nodes and weights with sufficient accuracy for most applications. The slower algorithm gives higher accuracy for certain difficult problems."* Um die Stabilität des Verfahrens zu gewährleisten, empfiehlt es sich daher, auf tabellierte Werte zurückzutreten.

## 3.6 Automatische Integration

Aus Sicht des Benutzers muss ein Quadraturverfahren - unabhängig vom konkreten Zugang - für das bestimmte Integral

$$I(f) := \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \quad (3.51)$$

eine Näherung  $I$  derart finden, so dass

$$|I(f) - I| < \max(\varepsilon_a, \varepsilon_r \cdot |I|) \quad (3.52)$$

gilt, wobei  $\varepsilon_a$  und  $\varepsilon_r$  vom Benutzer vorgegebene Oberschranken für den absoluten bzw. relativen Fehler sind. Um die notwendige Genauigkeit möglichst effizient zu erreichen, erweist es sich als zweckmäßig, den Integrationsbereich abhängig vom Funktionsverhalten des Integranden und der geforderten Genauigkeit dynamisch in verschiedene Teilbereiche zu zerlegen. Für jeden Teilbereich wird dann eine Integrationsformel verwendet. Ein *Automatischer Integrator* unterteilt das Integrationsintervall solange rekursiv, bis in jedem Teilintervall die erforderliche Genauigkeit erreicht ist. Diese dynamische Zerlegung des Integrationsbereiches wird auch adaptive Verfeinerung genannt [23]. Für die Bereichsverfeinerung unterteilen sich die verwendeten Methoden in zwei Klassen, die als *lokale* bzw. *globale Strategie* bezeichnet werden. Bei der *globalen Strategie* wird die Bedingung

$$\sum_{j=1}^N d([I^{(j)}]) < \max(\varepsilon_a, \varepsilon_r \cdot |I|) \quad (3.53)$$

geprüft. Erreicht die erzielte Integralnäherung mit der aktuellen Zerlegung die geforderte Genauigkeit nicht, dann wird der Teilbereich mit dem maximalen lokalen Fehler weiter unterteilt. Dieser Vorgang wird solange fortgesetzt, bis entweder die Bedingung (3.53) erfüllt ist oder eine vorgegebene maximale Anzahl von Zerlegungen erreicht wurde. Hingegen wird bei der *lokalen Strategie* verlangt, dass für jeden Teilbereich  $\Omega_j$  die Bedingung

$$d([I^{(j)}]) < \frac{|\Omega_j|}{|\Omega|} \max(\varepsilon_a, \varepsilon_r \cdot |I|) \quad (3.54)$$

erfüllt werden muss. Die lokale Strategie ist im Allgemeinen weniger effizient als die globale Strategie, da sie mehr Rechenaufwand erfordert und im Extremfall ein unendlicher Programmlauf verursacht werden kann [23].

### 3.7 Mehrdimensionale Integration

Ein numerisches Kubaturverfahren (manchmal auch als mehrdimensionale numerische Quadratur bezeichnet) hat die Aufgabe, ein bestimmtes Integral einer Funktion  $f(\mathbf{x})$  in mehr als einer Dimension zu approximieren. Formal sind mehrdimensionale Integrale einfach wiederholte Integrationen über jeweils andere Integrationsvariablen, sogenannte iterierte eindimensionale Integrale. Für diese gilt der *Satz von Fubini* (iterierte Integration): Hat der Integrationsbereich  $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2$  Produktstruktur, dann gilt

$$\int_{\Omega_1 \times \Omega_2} f(x, y) dx dy = \int_{\Omega_2} \left( \int_{\Omega_1} f(x, y) dx \right) dy = \int_{\Omega_1} \left( \int_{\Omega_2} f(x, y) dy \right) dx. \quad (3.55)$$

Wenn die Integrationsgrenzen konstant sind, dann ist dieses iterierte Integral unabhängig von der Integrationsreihenfolge. Um Kubaturverfahren zu entwickeln, die ähnlich funktionieren wie im eindimensionalen Fall, kann man unter Verwendung des Satzes von Fubini das mehrdimensionale Integral auf wiederholte Integrationen von eindimensionalen Integralen zurückführen.

Alle direkten Integrationsverfahren haben jedoch denselben Nachteil, der anhand einer einfachen Gaußformel  $G_n$  erläutert werden soll. Dazu sei  $\Omega = [-1, 1]^d$  und  $f$  beliebig. Im mehrdimensionalen Fall  $d > 1$  erhält man mit dem Satz von Fubini

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int_{-1}^1 \dots \int_{-1}^1 f(x_1, \dots, x_d) dx_1 \dots dx_d \approx \sum_{i_1=0}^n \dots \sum_{i_d=0}^n \omega_{i_1} \dots \omega_{i_d} f(x_{i_1}, \dots, x_{i_d}). \quad (3.56)$$

Um den Aufwand abzuschätzen, muss man zählen, wie viele Funktionsauswertungen die Approximation benötigt (Funktionsauswertungen sind bei der numerischen Integration die aufwändigste Operation). Die Anzahl der Auswertungen beträgt  $N = (n + 1)^d$ . Als erstes sollte man sich bei der Behandlung von mehrdimensionalen Integralen daher die Frage stellen, ob es möglich ist, das Integral analytisch auf eine niedrigere Dimension zu bringen.

## Kapitel 4

# Der epsilon-Algorithmus

*The epsilon algorithm is recommended as the best all-purpose method for slowly converging sequences.*

Graves-Morris, Roberts, Salam (1999)

In vielen Bereichen der Physik und anderen Naturwissenschaften ist man auf Lösungen in Form von unendlichen Reihen angewiesen. Das konventionelle Verfahren zur näherungsweisen Berechnung des Wertes einer unendlichen Reihe  $s$  besteht darin, die Glieder der Reihe  $a_n$  einfach solange aufzuaddieren, bis Konvergenz erreicht ist:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} s_n = s. \quad (4.1)$$

Ein solches Verfahren stößt natürlich rasch an seine Grenzen. Ein gutes Beispiel dafür ist die Reihenentwicklung der Riemannschen Zeta-Funktion

$$\zeta(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)^{-z}. \quad (4.2)$$

Es ist bekannt, dass diese Reihe für alle komplexen Zahlen mit  $\operatorname{Re}(z) > 1$  konvergiert. Ist allerdings  $\operatorname{Re}(z)$  nur wenig größer als 1, konvergiert diese Reihe extrem langsam. So benötigt man beispielsweise ungefähr  $10^{20}$  Reihenglieder, um  $\zeta(1.1)$  auf wenigstens ein Prozent genau zu berechnen (vergleiche [34]). Die Idee, die Konvergenz einer Reihe durch einen verallgemeinerten Summationsprozess zu verbessern, ist deshalb beinahe so alt wie die Analysis selbst. Bereits Euler veröffentlichte 1755 eine Reihentransformation, die heute nach ihm benannt ist.

### 4.1 Verallgemeinerte Summationsprozesse

Unter einem verallgemeinerten Summationsprozess versteht man eine Transformation  $T$ , die eine gegebene Folge von Partialsummen  $\{s_n\}$  in eine neue Folge  $\{s'_n\}$  überführt:

$$T : \{s_n\} \rightarrow \{s'_n\}. \quad (4.3)$$

Um die Konvergenz einer Folge  $\{s_n\}$  zu verbessern, muss  $T(\{s_n\})$  schneller konvergieren als  $\{s_n\}$ . Es liegt nahe zu fordern, dass eine solche Transformation *regulär* sein muss: wenn  $\{s_n\}$  konvergiert, dann konvergiert auch  $T(\{s_n\})$  gegen den gleichen Grenzwert. Fordert man noch zusätzlich

$$T(\{s_n\} + \{t_n\}) = T(\{s_n\}) + T(\{t_n\}), \quad (4.4)$$

dann nennt man diese Transformation *linear*. Solche Transformationen haben eine besonders einfache Struktur, da die Elemente von  $\{s'_n\}$  aus gewichteten Mittelwerten der ursprünglichen Folge  $\{s_n\}$  gebildet werden können [35]. Daran lassen sich Bedingungen knüpfen, die die Regularität des Verfahrens garantieren. Trotzdem ist der praktische Nutzen von regulären linearen Transformationen beschränkt. Der Grund dafür mutet zunächst paradox an: die Klasse von Folgen, für die lineare Methoden regulär sind, ist einfach zu groß. Aber wie die Erfahrung zeigt, existiert in den seltensten Fällen ein Verfahren, das für eine Klasse von Problemen für jeden Spezialfall gleich gut konditioniert ist.

Verbesserungen bringen die allgemeineren nichtlinearen Verfahren, die allerdings in der Regel auch nichtregulär sind. Ein nichtlinearer verallgemeinerter Summationsprozess unterscheidet sich von einem linearen dadurch, dass die Linearitätsbedingung (4.4) nicht mehr gilt. Stattdessen kann man nur mehr Translationsinvarianz fordern:

$$T(\{s_n\} + \{c_n\}) = T(\{s_n\}) + T(\{c_n\}) \text{ für jede konstante Folge } \{c_n\}. \quad (4.5)$$

Nichtlinearität und Nichtregularität sind sicher Eigenschaften, die man eigentlich lieber vermeiden möchte. Trotzdem sind sie unverzichtbar, da die Leistungsfähigkeit vieler verallgemeinerter nichtlinearer Summationsprozesse eine direkte Folge ihrer Nichtlinearität und Nichtregularität ist.

## 4.2 Die Schmidt-Transformation und Wynn's epsilon-Algorithmus

Der  $\epsilon$ -Algorithmus ist eines der wichtigsten numerischen Verfahren zur Berechnung eines verallgemeinerten nichtlinearen Summationsprozesses. Die Methode findet beispielsweise Verwendung in den Mathematica-Befehlen *SequenceLimit*, *NSum*, *NProduct* und *NLimit*, auch basieren alle Konvergenzbeschleunigungsverfahren des QUADPACK auf diesem Algorithmus.

Der  $\epsilon$ -Algorithmus ist ein zweidimensionales nichtlineares Rekursionsschema zur Berechnung der 1941 veröffentlichten Transformation von Schmidt [36], die 1955 von Shanks [37] wiederentdeckt wurde. Die Herleitung der Schmidt- Transformation ist völlig heuristisch und folgt aus der Beobachtung, dass viele unendliche Reihen von praktischer Bedeutung so konvergieren, als ob sie aus ihrem Grenzwert und einer Linearkombination aus exponentiellen *mathematischen Transienten* – in Analogie zu *physikalischen Transienten*, die nach hinreichend langer Zeit verschwinden – zusammengesetzt wären:

$$s_n = s + \sum_{i=0}^{k-1} a_i \lambda_i^n, \quad n \in \mathbb{N}_0, \lambda_\alpha \neq \lambda_\beta \neq 0. \quad (4.6)$$

In dieser Modellfolge ist der Restterm

$$r_n = \sum_{i=0}^{k-1} a_i \lambda_i^n. \quad (4.7)$$

Da sich  $r_n$  offenkundig aus einer Linearkombination von  $k$  Exponentialfunktionen zusammensetzt, existiert auch ein linearer finiter Differenzenoperator  $\Delta$  der Ordnung  $k$  mit konstanten Koeffizienten  $b_j$ , der  $r_n$  annihiliert [35]:

$$\sum_{j=0}^k b_j r_{n+j} = 0, \quad b_0 b_j \neq 0. \quad (4.8)$$

Man sieht leicht, dass

$$r_{n+j} = r_n + \Delta r_n + \Delta r_{n+1} + \dots + \Delta r_{n+j-1} = r_n + \Delta s_n + \Delta s_{n+1} + \dots + \Delta s_{n+j-1}. \quad (4.9)$$

Einsetzen von (4.9) in (4.8), Division durch  $\sum b_j$  und anschließende Redefinition der Konstanten liefert

$$s_n = s + \sum_{j=0}^{k-1} c_j \Delta s_{n+j}. \quad (4.10)$$

Die Modellfolge (4.10) enthält  $k + 1$  Unbekannte: den Grenzwert  $s$  und die  $k$  linearen Koeffizienten  $c_0, \dots, c_{k-1}$ . Unter Verwendung der *Cramerschen Regel* erhält man für den verallgemeinerten Summationsprozess  $e_k(s_n)$  der Modellfolge (4.10) eine Darstellung als Quotient zweier Determinanten:

$$e_k(s_n) = \frac{\begin{vmatrix} s_n & s_{n+1} & \dots & s_{n+k} \\ \Delta s_n & \Delta s_{n+1} & \dots & \Delta s_{n+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta s_{n+k-1} & \dots & \dots & \Delta s_{n+2k-1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \Delta s_n & \Delta s_{n+1} & \dots & \Delta s_{n+k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta s_{n+k-1} & \dots & \dots & \Delta s_{n+2k-1} \end{vmatrix}}. \quad (4.11)$$

Gleichung (4.11) ist die Schmidt-Transformation. Es fällt sofort auf, dass die Schmidt Transformation  $e_k(s_n)$  aufgrund ihrer Definition als Quotient zweier Determinanten für praktische Zwecke wenig brauchbar ist (außer vielleicht für kleine  $k$ ). Diese Problematik konnte bereits ein Jahr nach der Veröffentlichung von Shanks durch Wynn [38] überwunden werden, der zeigen konnte, dass die Transformation von Schmidt mit Hilfe des folgenden zweidimensionalen Rekursionsschemas auf ausgesprochen effiziente Weise berechnet werden kann. Er setzte

$$\epsilon_{2k}^{(n)} = e_k(s_n), \quad (4.12)$$

$$\epsilon_{2k+1}^{(n)} = 1/e_k(s_{n+1} - s_n), \quad k, n \in \mathbb{N}_0 \quad (4.13)$$

und konnte zeigen, dass die folgenden Rekursionsbeziehungen gelten:

$$\epsilon_{-1}^{(n)} = 0, \quad \epsilon_0^{(n)} = s_n, \quad (4.14)$$

$$\epsilon_{k+1}^{(n)} = \epsilon_{k-1}^{(n+1)} + 1/[\epsilon_k^{(n+1)} - \epsilon_k^{(n)}], \quad k, n \in \mathbb{N}_0. \quad (4.15)$$

Die Gleichungen (4.14) und (4.15) werden heute allgemein als  $\epsilon$ -Algorithmus bezeichnet. Die Elemente  $\epsilon_k^{(n)}$  der Transformation werden üblicherweise in Form einer unendlichen Matrix dargestellt [34], wobei der obere Index  $n$  die Zeile und der untere Index  $k$  die Spalte der Matrix bezeichnet:

$$\begin{matrix} \epsilon_0^{(0)} & \epsilon_1^{(0)} & \dots & \epsilon_n^{(0)} & \dots \\ \epsilon_0^{(1)} & \epsilon_1^{(1)} & \dots & \epsilon_n^{(1)} & \dots \\ \epsilon_0^{(2)} & \epsilon_1^{(2)} & \dots & \epsilon_n^{(2)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \\ \epsilon_0^{(n)} & \epsilon_1^{(n)} & \dots & \epsilon_n^{(n)} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots \end{matrix}. \quad (4.16)$$

Die Einträge in der ersten Spalte  $\epsilon_0^{(n)}$  sind die ersten  $n$  Partialsummen  $s_1, s_2, \dots, s_n$  der Reihe und dienen als Startwerte im  $\epsilon$ -Algorithmus. Die restlichen Elemente können dann mit der Rekursionsbeziehung (4.15) berechnet werden. Dieses nichtlineare 4-Term Rekursionsschema verbindet jeweils 4 Elemente der  $\epsilon$ -Tabelle (4.16), die wie die Eckpunkte eines Rhombus angeordnet sind:

$$\begin{matrix} & \epsilon_k^{(n)} & \epsilon_{k+1}^{(n)} \\ \epsilon_{k-1}^{(n+1)} & \epsilon_k^{(n+1)} & \end{matrix} \quad (4.17)$$

Offensichtlich bilden diese Elemente ein gleichseitiges Dreieck in der linken oberen Hälfte der  $\epsilon$ -Tabelle. Diese Zusammenhänge werden deutlicher, wenn man den  $\epsilon$ -Algorithmus auf folgende Weise umformuliert [39]:

$$\epsilon_{-1}^{(n)} = 0, \quad \epsilon_0^{(n)} = s_n, \quad (4.18)$$

$$\epsilon_j^{(n-j)} = \epsilon_{j-2}^{(n-j+1)} + 1/[\epsilon_{j-1}^{(n-j+1)} - \epsilon_{j-1}^{(n-j)}], \quad n \geq 2, \quad 2 \leq j \leq n. \quad (4.19)$$

## 4.2.1 Programmierung des epsilon-Algorithmus

Die systematische Berechnung der  $\epsilon$ -Tabelle (4.16) kann auf zwei verschiedene Arten erfolgen:

**Spaltenweise:** ausgehend von den Startwerten  $\epsilon_0^{(n)}$  werden die Elemente der zweiten Spalte berechnet, dann die Elemente der dritten Spalte usw.

**Moving Lozenge Technique:** Diese Art der Implementierung basiert auf der Beobachtung, dass bei der Berechnung einer neuen Gegendiagonale diese nur Eingabedaten von sich selbst und der unmittelbar zuvor hinzugefügten Gegendiagonale benötigt. Sobald ein neues Element  $\epsilon_0^{(n)} = s_n$  zur Verfügung steht,

$k$	$s_n$	$\epsilon_1^{(n)}$	$\epsilon_2^{(n)}$	$\epsilon_3^{(n)}$	$\epsilon_4^{(n)}$
0	0	2	0.57142857	89.111111	0.58574349
1	0.5	16	0.58510638	1658.7132	0.58578573
2	0.5625	60.235294	0.58573198	20262.247	
3	0.57910156	211.0554	0.58578185		
4	0.58383965	725.93661			
5	0.58521719				

Tabelle 4.1: Numerisches Beispiel für den  $\epsilon$ -Algorithmus (die Nullstelle von  $x^2 - 4x - 2$  ist 0.5857864375).

werden sukzessive die neuen Elemente  $\epsilon_1^{(n-1)}$  bis  $\epsilon_n^{(0)}$  berechnet. Programmertechnisch etwas aufwändiger, reduziert diese Technik den Speicherbedarf, da die  $\epsilon$ -Tabelle (4.16) unter Verwendung von nur zwei eindimensionalen Arrays berechnet werden kann.

Als numerisches Beispiel betrachten wir zuerst die bereits von Wynn untersuchte iterative Folge

$$s_{n+1} = \frac{1}{4}(s_n^2 + 2), \quad n \in \mathbb{N}_0, s_0 = 0. \quad (4.20)$$

Diese Folge konvergiert (ausgesprochen langsam) gegen die kleinere der beiden Nullstellen des Laguerre-Polynoms  $L_2(x) = x^2 - 4x - 2$ , d.h.  $x = 0.5857864375$ . Tabelle 4.1 zeigt den Effekt des  $\epsilon$ -Algorithmus auf  $s_n$ . Man erkennt, dass die ungeraden Elemente der  $\epsilon$ -Tabelle  $\epsilon_{2k+1}^{(n)}$  für  $n \rightarrow \infty$  divergieren. Dieses Verhalten ist allgemein der Fall.

Tabelle 4.2 illustriert den Effekt des  $\epsilon$ -Algorithmus auf die Gregory-Formel  $\sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} (2k-1)^{-1}$ , die zur Berechnung der Kreiszahl  $\pi$  verwendet werden kann, und die Riemannsche Zeta-Funktion  $\zeta(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)^{-z}$  für  $\zeta(2) = \pi^2/6$ . Es fällt auf, dass der  $\epsilon$ -Algorithmus die Konvergenz der Riemannschen Zeta-Funktion  $\zeta(2)$  wesentlich schlechter beschleunigen kann als die der Gregory-Formel.

Zum Abschluss dieses Abschnitts möchte ich die Aufmerksamkeit daher nochmals auf den Gültigkeitsbereich von Algorithmen richten. Es ist bekannt, dass der  $\epsilon$ -Algorithmus nicht in der Lage ist, logarithmische Konvergenz zu beschleunigen. Definitionsgemäß konvergiert eine Folge von Partialsummen  $\{s_n\}$  logarithmisch gegen ihren Grenzwert  $s$ , wenn gilt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_{n+1} - s}{s_n - s} = 1 \quad (4.21)$$

Die Situation kann dann etwa durch Verwendung des dem  $\epsilon$ -Algorithmus strukturell sehr ähnlichen  $\rho$ -Algorithmus

$$\rho_{-1}^{(n)} = 0, \quad \rho_0^{(n)} = s_n, \quad (4.22)$$

$$\rho_{k+1}^{(n)} = \rho_{k-1}^{(n+1)} + \frac{k+1}{\rho_k^{(n+1)} - \rho_k^{(n)}}, \quad k, n \in \mathbb{N}_0 \quad (4.23)$$

verbessert werden (Tabelle 4.2).

$k$	$\pi_k$	$\epsilon_k^{(0)}$	$\zeta(2)_k$	$\epsilon_k^{(0)}$	$\rho_k^{(0)}$
0	4	4	1	1	1
2	3.4666666667	3.1666666667	1.361111111	1.45	1.65
4	3.33968254	3.142342342	1.463611111	1.55161744	1.644894895
6	3.283738484	3.141614907	1.511797052	1.59030541	1.644934376
8	3.252365935	3.141593312	1.539767731	1.60908691	1.644934064
10	3.232315809	3.141592673	1.558032194	1.61960991	1.644934067
12	3.218402766	3.141592654	1.570893798	1.62609473	1.644934067
14	3.208185652	3.141592654	1.580440283	1.63037238	1.644934067

Tabelle 4.2: Vergleich von  $\epsilon$ - und  $\rho$ -Algorithmus ( $\pi = 3.141592653589$ ,  $\pi^2/6 = 1.644934066848$ ).

Daher habe ich auch Vergleichsrechnungen mit dem  $\rho$ -Algorithmus vorgenommen. Dabei hat sich herausgestellt, dass die in der vorliegenden Arbeit untersuchten Folgen lineare Konvergenz zeigen:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_{n+1} - s}{s_n - s} = \rho, \quad 0 \leq |\rho| \leq 1. \quad (4.24)$$

## Kapitel 5

# Programmierung

*A theory is worthless without good supporting data.*

Alexis L. Romanoff, Encyclopedia of Thoughts, Aphorismus 2410

Zur Berechnung der renormierten Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit das Programm **QuarkpropagatorMPI** entwickelt. Die Realisierung erfolgte in der Programmiersprache C++ [40][41][42], wobei der ANSI-Standard [43] zugrunde gelegt wurde. Diese Wahl war neben dem obligatorischen Klassenkonzept vor allem durch die Standard Template Library (STL) als wesentlichem Bestandteil von C++ motiviert. Im Entwicklungsprozess selbst wurde auf die wichtigen Kriterien der einfachen Wartbarkeit und hohen Wiederverwendbarkeit besonderer Wert gelegt.

Für die Interprozesskommunikation im Zuge der Parallelisierung wurden die **MPICH**-Bibliotheken verwendet. MPICH [44] ist eine freie Implementierung des Message Passing Interface (MPI) Standards [45], der sich mittlerweile als Quasistandard für wissenschaftliche Berechnungen etabliert hat. Der grundlegende Mechanismus für die Kommunikation in MPI ist das Senden und Empfangen von Nachrichten. Dabei wird davon davon ausgegangen, dass eine fixe Anzahl von Prozessen vorhanden ist und im allgemeinen jeder Prozess auf einem eigenen Prozessor läuft. Jeder Prozess arbeitet mit seinen eigenen Daten und seinem eigenen Programm. Die Prozesse kommunizieren untereinander via Message Passing, d.h. der benötigte Datenaustausch geschieht, indem Nachrichten von einem Prozess zum nächsten geschickt werden.

Um eine übersichtliche Dokumentation der Quelltextdateien zu erstellen, wurde das Dokumentationswerkzeug **Doxxygen** [46] verwendet, das seit 1997 von Dimitri van Heesch entwickelt wird. Doxygen unterstützt neben C/C++ auch Java, (Corba and Microsoft) Java, Python, IDL, C#, Objective-C sowie teilweise D und PHP Sources. Die von Doxygen unterstützten Ausgabeformate sind HTML, RTF, LATEX, XML und Unix-Man page. Um Kommentare von Doxygen bearbeiten zu lassen, werden spezielle Dokumentationsblöcke im Quellcode gesetzt. Zusätzlich zur Beschreibung können mit Doxygen Formeln eingebunden sowie Vererbungs- und Kompositionsdigramme erstellt werden.

In den beiden nächsten Abschnitten beschreibe ich den strukturellen Aufbau des Programms **QuarkpropagatorMPI** und den Algorithmus zur Lösung der gekoppelten Dyson-Schwinger Integralgleichungen. Anschließend folgt eine kurze Beschreibung der Benutzerschnittstelle. Die Software wurde mit einer ausführlichen Programmdokumentation im html-Format auf CD-ROM der Arbeit beigefügt.

## 5.1 Das Programm QuarkpropagatorMPI

Das folgende Diagramm zeigt die hierarchische Struktur der Bausteine des Programms **QuarkpropagatorMPI**:

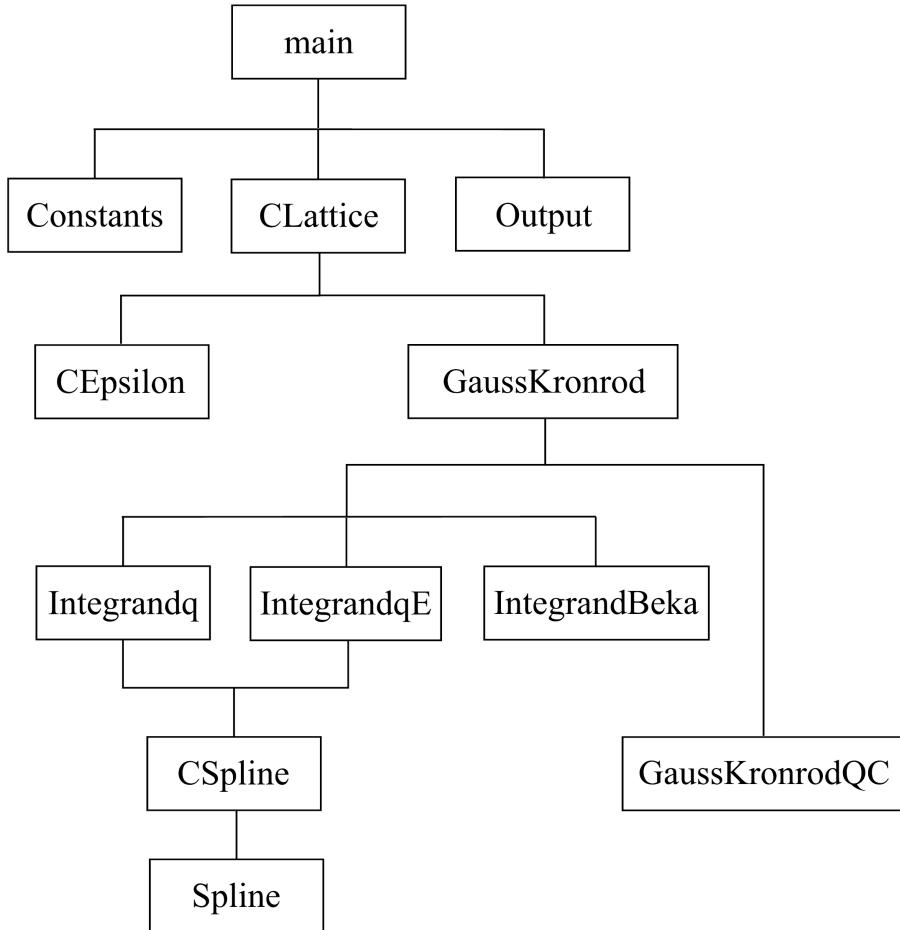


Abbildung 5.1: Struktureller Aufbau des Programms **QuarkpropagatorMPI**.

- **main**

Im Hauptmodul main werden die folgenden Teilaufgaben erledigt:

1. Die Initialisierung der in den Modulen **CLattice**, **CEpsilon** und **CSpline** definierten Container mit Anfangswerten.
2. Die Verwaltung der Interprozesskommunikation. Dafür wird das Gitter in Streifen zerlegt, die auf die verschiedenen Prozesse aufgeteilt werden.
3. Die Berechnung der Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  durch Aufruf der entsprechenden Unterfunktionen.
4. Die Berechnung des  $\epsilon$ -Algorithmus.
5. Die Überprüfung der vom Benutzer festgelegten Abbruchkriterien.
6. Die Ausgabeverwaltung der numerischen Ergebnisse in Dateien.

- **Constants**

Im Modul **Constants** werden die systemweiten Konstanten definiert. Dieses Modul dient gleichzeitig als Benutzerschnittstelle. Hier kann der Benutzer festlegen, mit welchen Parametern das Programm ausgeführt werden soll. Daneben sind in diesem Modul noch Konstanten wie  $\pi$  oder  $C_F$  definiert.

- **CLattice**

Das Modul **CLattice** enthält die Klasse *LatticeEppE()*. Diese Klasse ist ein Container, der die Eigenschaften des Gitters wie die Energien  $p_E$ , die Impulse  $|\mathbf{p}|$  sowie die Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  an jedem Gitterpunkt  $(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)$  verwaltet. Dafür enthält das Modul die Methoden *clearLattice()* und *occupyLattice()* zur Besetzung des Gitters, *updateLattice()* zur Aktualisierung der Gitterdaten sowie *setSaveDataLattice()* und *getSaveDataLattice()* zum Anlegen und Wiedereinlesen von Sicherungsdateien.

- **Output**

In diesem Modul sind die Prozeduren zur Ausgabe der numerischen Ergebnisse zusammengefasst.

- **CEpsilon**

Das Modul **CEpsilon** enthält die Klasse *LatticeEpsilon()*. Diese Klasse ist ein Container, der die Eigenschaften und Methoden des Gitters zur Berechnung des  $\epsilon$ -Algorithmus verwaltet. In diesem Modul sind die Methoden *getEpsilonTransformation()* zur Berechnung des  $\epsilon$ -Algorithmus und *updateLatticeEpsilon()* zum Speichern der Werte der Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  aus den vorherigen Iterationen definiert.

- **GaussKronrod**

Das Modul **GaussKronrod** enthält die Funktionen *GKAdaptive()* und *GKRule1021()*. Die Funktion *GKAdaptive()* erhält als Eingabeparameter einen Pointer auf eine extern definierte Funktion  $f(x)$  und zerlegt den Integrationsbereich adaptiv in verschiedene Teilintervalle. Dabei speichert und akkumuliert *GKAdaptive()* die verschiedenen Teilergebnisse, bis eine Näherung für den Wert des Integrals innerhalb der vom Benutzer vorgegebenen Genauigkeit erzielt wird. Die notwendigen Integrationsroutinen sind in der Funktion *GKRule1021()* enthalten.

- **Integrandq**

Dieses Modul beinhaltet die Subroutinen zur Berechnung der Impulsintegrale.

- **IntegrandqE**

Dieses Modul beinhaltet die Subroutinen zur Berechnung der Energieintegrale.

- **IntegrandBeka**

Dieses Modul beinhaltet die Subroutinen zur Berechnung der Winkelintegrale.

- **GaussKronrodQC**

In diesem Modul werden die Stützstellen  $x_i$  und Gewichte  $\omega_i$  für eine Gauß-Kronrod 10-21 Punkt Quadraturformel definiert.

- **CSpline**

Das Modul **CSpline** enthält die Klasse *Splinep()*. Diese Klasse ist ein Container, der die Eigenschaften und Methoden zur Berechnung der kubischen Splineinterpolation verwaltet. Die Member der Klasse sind vector Templates. Dadurch kann die Klasse sowohl zur Berechnung der kubischen (instantane Näherung) als auch der bikubischen (bei Hinzunahme von retardierten transversalen Gluonen) Splineinterpolation verwendet werden (Anhang D).

- **Spline**

Das Modul Spline enthält die Subroutinen zur Berechnung der kubischen Splineinterpolation (Anhang D). Es besteht aus den Funktionen *setSpline()* zur Berechnung der Koeffizientenmatrix (D.15) für natürliche Randbedingungen unter Verwendung des Tridiagonal-Algorithmus sowie *getSpline()* zur Berechnung eines splineinterpolierenden Wertes  $y$ . Die Funktionen *setSpline()* und *getSpline()* sind Adaptierungen der Routinen *spline()* und *splint()* aus Numerical Recipes [24], Seiten 115ff.

## 5.2 Beschreibung des Lösungsverfahrens

Nach der Initialisierung von MPI erzeugt das Programm zunächst ein Gitter (Lattice, Grid) der Größe  $N \times N$ , auf dem die Energien  $p_E$  und Impulse  $|\mathbf{p}|$  gemäß der Konstruktionsvorschrift

$$\begin{aligned} p_{Ei} &= k^i p_{E\min}, \\ |\mathbf{p}|_i &= k^i |\mathbf{p}|_{\min} \end{aligned} \quad (5.1)$$

diskretisiert werden. Dabei sind  $p_{E\min}$  und  $|\mathbf{p}|_{\min}$  vom Benutzer vorgegebene Unterschranken für die Energien und Impulse. Der Parameter  $k$  wird durch die Nebenbedingungen

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}|_{\min} &= |\mathbf{p}|_0 = p_{E0}, \\ |\mathbf{p}|_{\max} &= k^{N-1} |\mathbf{p}|_0 = k^{N-1} p_{E0} \end{aligned} \quad (5.2)$$

und anschließendes Auflösen der Gleichungen (5.2) nach  $k$  festgelegt:

$$k = \left( \frac{|\mathbf{p}|_{\max}}{|\mathbf{p}|_{\min}} \right)^{\frac{1}{N-1}}. \quad (5.3)$$

Diese Art der Gitterskalierung erzeugt ein symmetrisches Gitter und trägt dem Abfall der Integranden bei hohen Impulsen Rechnung. Im nächsten Schritt werden jedem Wertepaar  $(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)$  Anfangswerte zugeordnet:

$$A(p_E, |\mathbf{p}|) = 1, \quad (5.4)$$

$$B(p_E, |\mathbf{p}|) = \frac{1}{1 + \mathbf{p}^2}, \quad (5.5)$$

$$C(p_E, |\mathbf{p}|) = \frac{1}{1 + \mathbf{p}^2} + 1. \quad (5.6)$$

Mit diesen Anfangswerten werden die Routinen zur Berechnung der kubischen Splineinterpolation und des  $\epsilon$ -Algorithmus initialisiert.

Für die Parallelisierung wird das Gitter in instantaner Näherung in der  $|\mathbf{p}|$ -Koordinate in Streifen zerlegt und auf die zur Verfügung stehenden Prozessoren verteilt. Bei Hinzunahme von transversalen Gluonen und Retardierungseffekten erfolgt die Parallelisierung entlang der  $p_E$ -Koordinate.

Die Berechnung der Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  erfolgt iterativ innerhalb der Hauptschleife. Dafür werden die dreidimensionalen Integrale durch wiederholte Integrationen über die jeweils anderen Integrationsvariablen approximiert (iterierte eindimensionale Integrale, vergleiche Abschnitt 2.7). Die Berechnung selbst erfolgt innerhalb der automatischen Integrationsroutine `GKAdaptive()` mit einer Gauß-Kronrod 10-21 Punkt Quadraturformel (Automatischer Integrator, siehe Abschnitt 2.6). Die Integration erfolgt "von außen nach innen", d.h. die Impuls-, Energie- und Winkelintegrationsroutinen werden solange rekursiv aufgerufen und dabei der Integrationsbereich adaptiv verfeinert, bis das Ergebnis die vom Benutzer vorgegebene Genauigkeit erfüllt. Die im Integranden vorkommenden Quarkpropagatorfunktionen  $A(q_E, |\mathbf{q}|)$ ,  $B(q_E, |\mathbf{q}|)$  und  $C(q_E, |\mathbf{q}|)$  werden dabei mit Hilfe der kubischen Splineinterpolation (Anhang D) bestimmt. Nachdem jeder Prozessor den ihm zugewiesenen Teilbereich berechnet hat, verschiickt er eine Kopie seiner Ergebnisse an alle anderen Prozessoren. Anschließend erfolgt die Berechnung des  $\epsilon$ -Algorithmus und die Ausgabe der Zwischenergebnisse in Dateien.

Die Ergebnisse der aktuellen Iteration werden wiederum als Startwerte für die nächste Iteration verwendet. Dieser Vorgang wird solange wiederholt, bis die vom Benutzer vorgegebenen Konvergenzkriterien erfüllt sind. Wesentlich in diesem Zusammenhang ist die Wahl eines geeigneten Abbruchkriteriums. Zum einen konvergiert das Integral im Zähler von Gleichung (2.110) deutlich langsamer als im Nenner, zum anderen konvergieren beide Integrale im ultravioletten Bereich deutlich schneller als im Infraroten, was auf das infrarotsinguläre Verhalten des Integralkerns zurückzuführen ist. Ein Abbruchkriterium, das dieses Verhalten berücksichtigt, lautet

$$\left| 1 - \frac{f_{n+1}(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)}{f_n(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)} \right| < \varepsilon \quad \forall i, j, \quad 0 \leq i, j < N, \quad (5.7)$$

wobei  $f_n(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)$  den Wert der Propagatorfunktion nach  $n$  Iterationen am Gitterpunkt  $(p_{Ei}, |\mathbf{p}|_j)$  bezeichnet. Damit wird erreicht, dass die Iteration so lange weitergeführt wird, bis sich *jeder einzelne* Wert höchstens um einen Faktor  $\varepsilon$  ändert. Bei aktiviertem "Freezing" gilt (5.7) für die jeweilige Propagatorfunktion bereits nach einmaligem Erreichen als dauerhaft erfüllt.

Die numerischen Ergebnisse werden nach jedem Durchlauf der Hauptschleife in Dateien geschrieben. Zusätzlich werden noch Sicherungsdateien angelegt, um gegen eventuell auftretende systembedingte Probleme gewappnet zu sein.

## 5.3 Benutzerschnittstelle

Der Benutzer kommuniziert mit dem Programm über das Modul **Constants**. Vor der Berechnung der Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  können zunächst die gewünschten Parameter angepasst werden. Anschließend wird das Programm mittels **mpicxx -Olevel -ansi QuarkpropagatorMPI.cpp -o outfile** kompiliert. **level** legt die Optimierungsstufe fest. Das Programm sollte zumindest mit -O3 kompiliert werden, damit Optimierungen wie Inlining und Loop Unrolling benutzt werden [47][48]. Die Option ”**-o**” des Compilers legt den Namen der erzeugten ausführbaren Datei **outfile** fest. Wird das Programm auf einem Hochleistungsrechner der Karl-Franzens-Universität Graz ausgeführt [49], wird noch zusätzlich ein SGE-Skript benötigt. Abgesetzt wird der Job dann mit **qsub ./scriptname.sh**, wobei **scriptname.sh** der Name des obigen Skripts ist. Ein Beispielskript auf CD-ROM wurde der Arbeit beigefügt.

Die nachfolgende Tabelle gibt einen Überblick über die modifizierbaren Parameter des Programms **QuarkpropagatorMPI**. Eine detaillierte Beschreibung der Parameter findet sich im Text und in der Programmdokumentation.

Bezeichnung	Typ	Parameter	siehe
M0	double	Stromquarkmasse $m_0$	Gleichung (2.9)
NC	integer	Anzahl der Farben $N_c$	Abschnitt 2.1, 2.4
NF	integer	Anzahl der aktiven Flavours $N_f$	Abschnitt 2.1, 2.4
SIGMA	double	Coulomb Stringsspannung $\sigma_C$	Gleichung (2.81)
MU_SQUARED	double	Infrarotregulator $\mu_{IR}^2$	Gleichung (2.109)
CUTOFF	double	UV-Cutoff $\Lambda_{UV}$	Abschnitt 2.3, 2.4
MU	double	Renormierungspunkt $ \mu $	Abschnitt 2.4
MUE	double	Renormierungspunkt $\mu_E$	Abschnitt 2.4
WITH_TRANSVERSAL	boolean	mit / ohne transversale Komponenten	Dokumentation
P_POINTS	integer	Anzahl der Gitterpunkte in $ \mathbf{p} $	Abschnitt 5.2
PE_POINTS	integer	Anzahl der Gitterpunkte in $p_E$	Abschnitt 5.2
P_START	double	kleinster $ \mathbf{p} $ -Wert	Gleichung (5.2)
P_END	double	größter $ \mathbf{p} $ -Wert	Gleichung (5.2)
PE_START	double	kleinster $p_E$ -Wert	Gleichung (5.2)
PE_END	double	größter $p_E$ -Wert	Gleichung (5.2)
IMPROVEMENT	boolean	mit / ohne Freezing	Abschnitt 2.6
MAX_ITERATIONS	integer	max. Bisektionen in <b>GaussKronrod</b>	Abschnitt 3.6
MAX_REL_ERROR	double	max. rel. Fehler in <b>GaussKronrod</b>	Gleichung (3.53)
MAX_ABS_ERROR	double	max. abs. Fehler in <b>GaussKronrod</b>	Gleichung (3.53)
MAX_SIZE	integer	max. Größe der $\epsilon$ -Tabelle	Gleichung (4.16)
COOLING_ITERATIONS	integer	Einsprungpunkt für den $\epsilon$ -Algorithmus	Dokumentation
EPSILON_EPSALGO	double	Abbruchkriterium für $\epsilon$ -Algorithmus	Dokumentation
EPSILON	double	Abbruchkriterium für Iterationsschema	Gleichung (5.7)
ZKKE	double	$Z(k_E,  \mathbf{k} ) = 1$	Gleichung (2.111f)
FOLDERNAME	string	Ausgabeordner	Dokumentation
NEW_RUN	boolean	neue Rechnung / Wiederaufnahme	Dokumentation

Tabelle 5.1: Parameter in **QuarkpropagatorMPI**

# Kapitel 6

## Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel präsentiere ich die numerischen Ergebnisse für die renormierten Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  in instantaner Näherung und unter Hinzunahme von retardierten transversalen Gluonen. Die Rechnungen wurden im chiralen Limes ( $m_0 = 0$ ) und für ein leichtes Quark mit Strommasse  $m_0 = 0.0037$  GeV durchgeführt. Die instantane Näherung dient als Modell zur Erprobung der in Abschnitt 2.6 diskutierten Optimierungsstrategien, die dann zur Berechnung des numerisch aufwändigeren Falls bei Hinzunahme der transversalen Komponenten des Gluonpropagators in Verbindung mit Retardierungseffekten verwendet werden.

### 6.1 Instantane Näherung

Im vorliegenden Modell wird die instantane Näherung durch die Wahl von

$$Z(k_E, |\mathbf{k}|) \equiv 0 \quad (6.1)$$

realisiert. Die Rechnungen wurden in Regenbogennäherung unter Verwendung eines nackten Quark-Gluon Vertex durchgeführt. Die Integralgleichungen wurden wie in Kapitel 5 beschrieben mit einem iterativen Gesamtschrittverfahren gelöst. Für die Kopplungskonstante wurde die Richardson-Form (2.79) verwendet. Der Skalenparameter  $\Lambda$  ist dann durch die Stringspannung  $\sigma_C$  gegeben (2.81). Die Integrale wurden infrarotregularisiert durch Addieren eines kleinen Massenterm  $\mathbf{k}^2 \rightarrow \mathbf{k}^2 + \mu_{IR}^2$  (2.109) und ultraviolettrregularisiert mit einem Impuls-Cutoff  $\Lambda_{UV} = 80000$  GeV. Für größere Werte von  $\Lambda_{UV}$  ändern sich die Ergebnisse nur mehr unwesentlich. Die Integrale wurden in jeder Dimension mit einer relativen Genauigkeit von  $10^{-5}$  bzw. einer absoluten Genauigkeit von  $10^{-16}$  berechnet (3.53). Als Renormierungspunkt habe ich  $|\mu| = 45000$  GeV genommen. Die Rechnungen wurden mit 48 diskreten Werten in der  $|\mathbf{p}|$ -Koordinate durchgeführt, um anschließend ein Vergleichset für die Ergebnisse im transversalen Fall mit Retardierungseffekten zu haben. Die numerische Lösung für die Massenfunktion  $M(|\mathbf{p}|) := B(|\mathbf{p}|)/C(|\mathbf{p}|)$  zeigt ein charakteristisches Plateau im Infraroten (Abbildungen 6.1 und 6.2) ebenso wie das richtige asymptotische Verhalten für große äußere Impulse (Abbildung 6.3). Der Wert der Massenfunktion  $M(|\mathbf{p}|)$  im Infraroten kann dazu verwendet werden, eine Konstituentenquarkmasse zu definieren [21]. Mit dem verwendeten Wert für die Coulomb-Stringspannung  $\sigma_C = 0.5476$  GeV<sup>2</sup> aus [50] beträgt der Wert der Massenfunktion im Infraroten nur etwa ein Drittel des gewünschten Wertes [21][51]. Um die Situation zu verbessern, bestand die weitere Vorgehensweise darin, durch Hinzunahme von transversalen Gluonen in Verbindung mit Retardierungseffekten einen merklichen Einfluss auf den Wert der Massenfunktion im Infraroten zu erzielen. Die entsprechenden numerischen Ergebnisse

befinden sich im nächsten Abschnitt. Zwar liefert die instantane Näherung nicht die gewünschten Ergebnisse, dafür eignet sie sich ausgesprochen gut als Modell zur Erprobung der Optimierungsstrategien. Im folgenden werden die Auswirkungen des  $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Methode auf die Gesamtzahl der benötigten Iterationen sowie auf die Anzahl der zu lösenden Integralgleichungen betrachtet. Die Gesamtzahl der zu berechnenden Integrale  $G_i$  in instantaner Näherung unter Verwendung der Standardmethode ergibt sich aus

$$G_i = 2 \times \text{Anzahl der Iterationen} \times [\text{Punkte in } |\mathbf{p}| + \Omega] \quad (6.2)$$

mit

$$\Omega = \begin{cases} 0.5 & \text{im chiralen Limes,} \\ 1 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (6.3)$$

Der Faktor  $\Omega$  wurde eingeführt, um die in jedem Schritt ebenfalls neu zu berechnenden Renormierungsintegrale richtig mitzuzählen (im chiralen Limes entfällt die Renormierung der Propagatorfunktion  $B(|\mathbf{p}|)$ ). Die Ergebnisse in den Abbildungen 6.5 und 6.6 wurden auf  $\mu_{IR}^2[10^{-3}] = 1$  im chiralen Limes skaliert, um deren Werte in einen für die graphische Darstellung vergleichbaren Zahlenspektrum zu transformieren. Wie die Abbildung 6.5 zeigt, konvergiert das Verfahren für kleinere Werte von  $\mu_{IR}^2$  deutlich langsamer. Der andere skalierende Faktor ist die Strommasse  $m_0$ . Diese Erhöhung der Anzahl an Iterationen schlägt doppelt zu Buche, da der Rechenaufwand für jeden einzelnen Iterationsschritt für kleinere Werte von  $\mu_{IR}^2$  ebenfalls anwächst. Durch die Verwendung des  $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Technik kann die Anzahl der Iterationen effizient reduziert werden (Abbildung 6.5). Wie aus Abbildung 6.6 ersichtlich, konvergiert das  $C(|\mathbf{p}|)$ -Integral bei Anwendung der Konvergenzbeschleunigungsverfahren schneller als das  $B(|\mathbf{p}|)$ -Integral. Insgesamt lässt sich die Gesamtzahl der zu berechnenden Integrale bei vergleichbarer Genauigkeit der Ergebnisse (Abbildung 6.4) um etwa eine Größenordnung reduzieren.

## 6.2 Hinzunahme von retardierten transversalen Gluonen

Im vorliegenden Modell wird die Hinzunahme von transversalen Komponenten und Retardierungseffekten durch die Wahl von

$$Z(k_E, |\mathbf{k}|) \equiv 1 \quad (6.4)$$

realisiert. Die Rechnungen wurden wie in Abschnitt 6.1 in Regenbogennäherung unter Verwendung eines nackten Quark-Gluon Vertex durchgeführt. Dafür wurden je 48 diskrete Werte in der  $p_E$  und  $|\mathbf{p}|$ -Koordinate verwendet. Als Renormierungspunkt habe ich  $\mu_E = |\mu| = 45000$  GeV genommen. Die Parameter sind ansonsten dieselben wie in Abschnitt 6.1. Bei den in den folgenden Abbildungen dargestellten Ergebnissen handelt es sich um Vorhersagen des  $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Technik, die mit einer relativen Genauigkeit von  $10^{-3}$  berechnet wurden. Die  $|\mathbf{p}|$ -Achse ist für alle gezeigten Funktionen eine Symmetriechse. Die Propagatorfunktion  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$  steigt im Infraroten für größere Werte von  $\mu_{IR}^2$  leicht an. Dieser Effekt schwächt sich für kleinere Werte von  $\mu_{IR}^2$  wieder ab (Abbildung 6.7). Die Propagatorfunktionen  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  divergieren für  $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$  (Abbildungen 6.8 und 6.9), die Massenfunktion  $M(p_E, |\mathbf{p}|)$  hingegen konvergiert für  $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$  (Abbildung 6.10). Eine Aufspaltung der Massenfunktion entlang der  $p_E$ -Achse ist nicht zu beobachten. Die numerischen Ergebnisse für die Massenfunktion  $M(p_E, |\mathbf{p}|)$  (Abbildungen 6.11 und 6.12) sind im wesentlichen identisch mit denen für die Massenfunktion  $M(|\mathbf{p}|)$  in instantaner Näherung (Abbildungen 6.1 und 6.2). Die Propagatorfunktionen  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  weichen zwar voneinander ab (Abbildungen 6.13 und 6.14), ein Anstieg der Massenfunktion  $M(p_E, |\mathbf{p}|)$  ist im Infraroten für  $Z(k_E, |\mathbf{k}|) \equiv 1$  aber nicht zu beobachten.

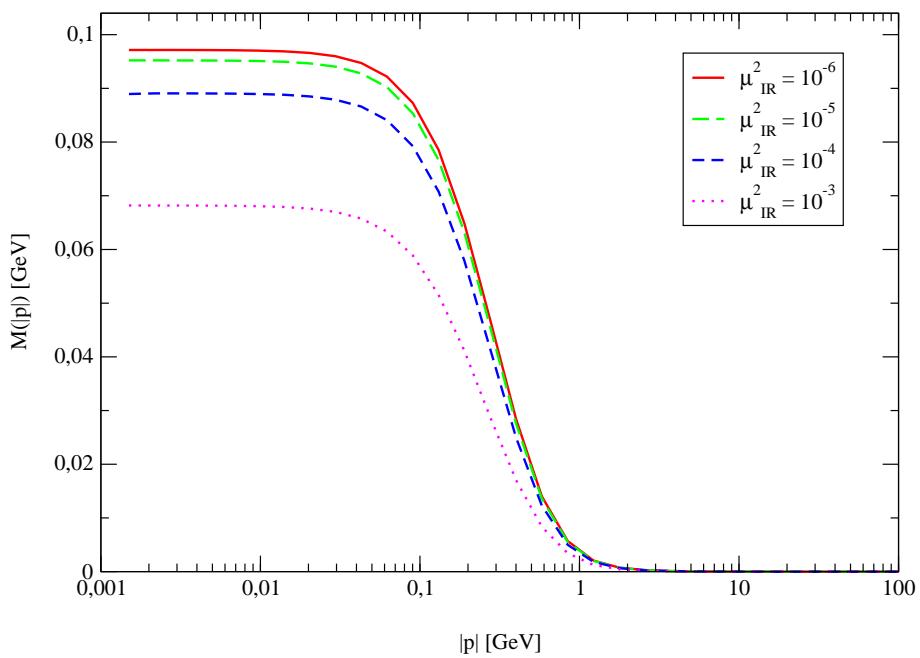


Abbildung 6.1: Die Massenfunktion  $M(|\mathbf{p}|)$  für vier verschiedene Werte von  $\mu_{IR}^2$  im chiralen Limes.

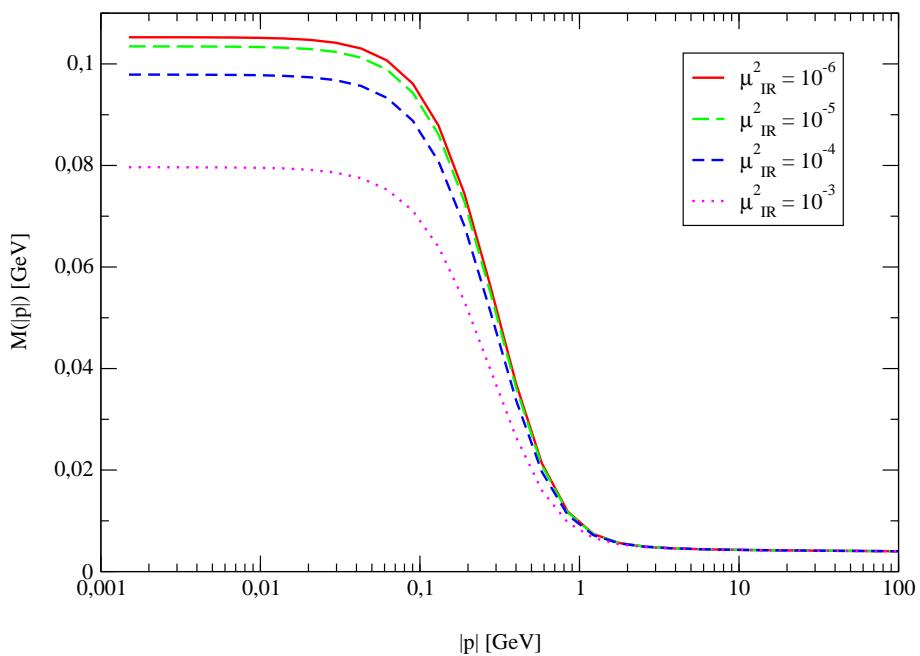


Abbildung 6.2: Die Massenfunktion  $M(|\mathbf{p}|)$  für vier verschiedene Werte von  $\mu_{IR}^2$  für  $m_0 = 0.0037$  GeV.

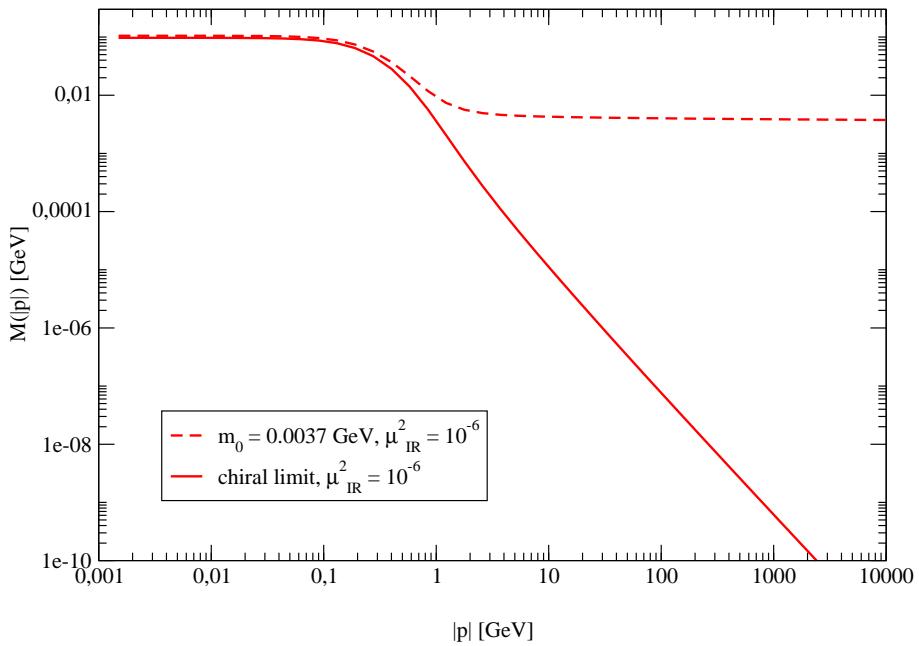


Abbildung 6.3: Vergleich der Massenfunktionen  $M(|\mathbf{p}|)$  für  $\mu_{IR}^2 = 10^{-6}$  im chiralen Limes und  $m_0 = 0.0037 \text{ GeV}$  in doppellogarithmischer Darstellung.

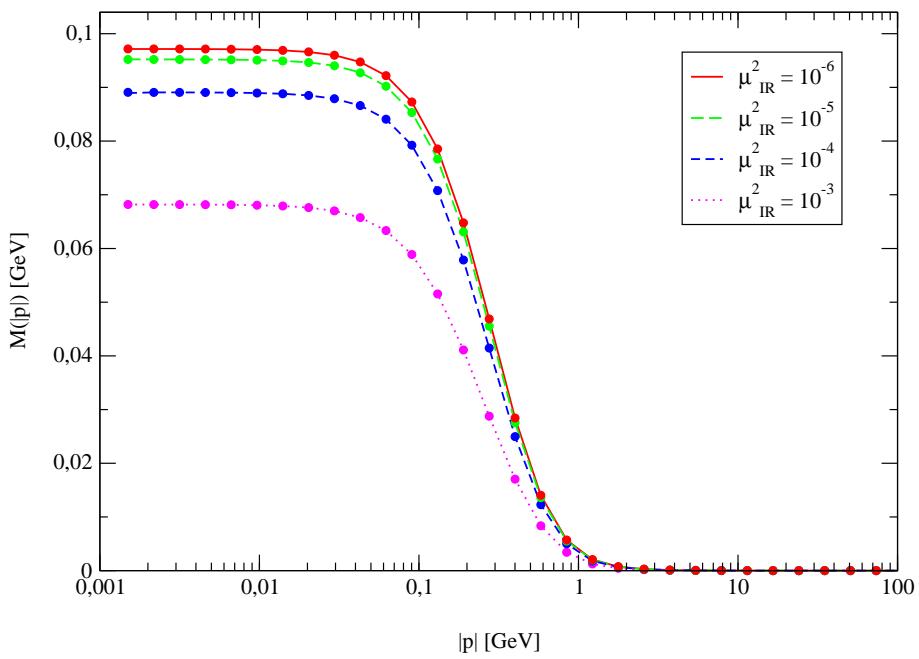


Abbildung 6.4: Vergleich der mit der Standardmethode (Linien) und dem  $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Technik (Punkte) berechneten Ergebnisse im chiralen Limes.

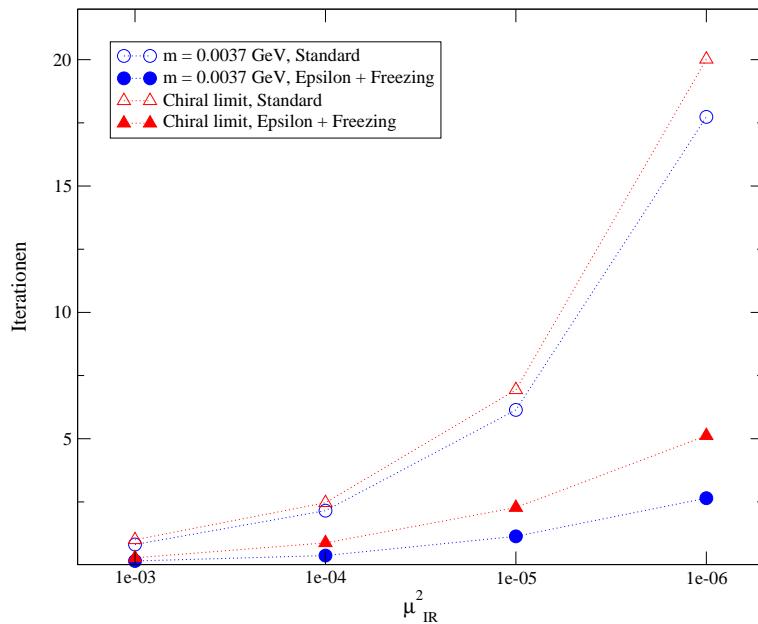


Abbildung 6.5: Relative Anzahl der benötigten Iterationen bei Verwendung der Standardmethode (leere Symbole) und des  $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Technik (volle Symbole) im chiralen Limes (rote Dreiecke) und  $m_0 = 0.0037 \text{ GeV}$  (blaue Kreise) in Abhängigkeit vom Infrarotregulator  $\mu_{IR}^2$ .

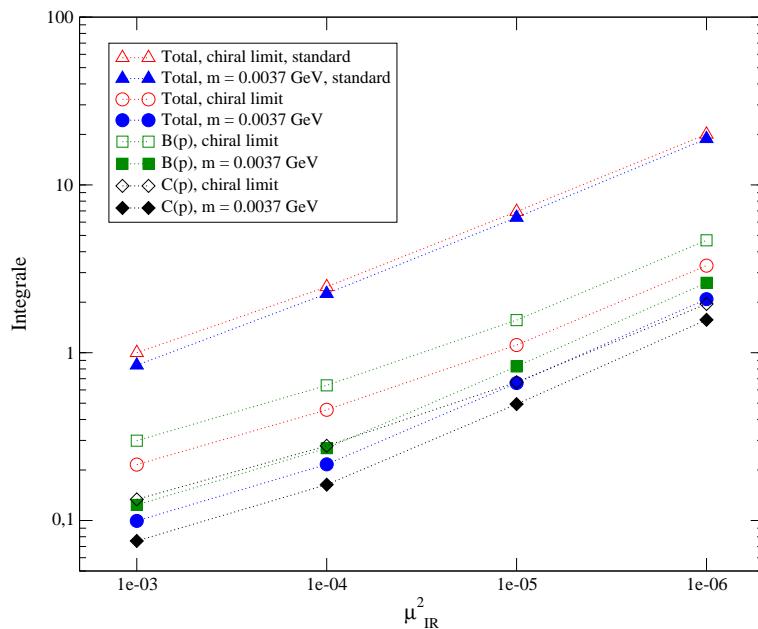


Abbildung 6.6: Relative Anzahl der zu berechnenden Integrale bei Verwendung der Standardmethode (Dreiecke) und des  $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Technik (Kreise, Vierecke) im chiralen Limes (leere Symbole) und  $m_0 = 0.0037 \text{ GeV}$  (volle Symbole) in Abhängigkeit vom Infrarotregulator  $\mu_{IR}^2$ .

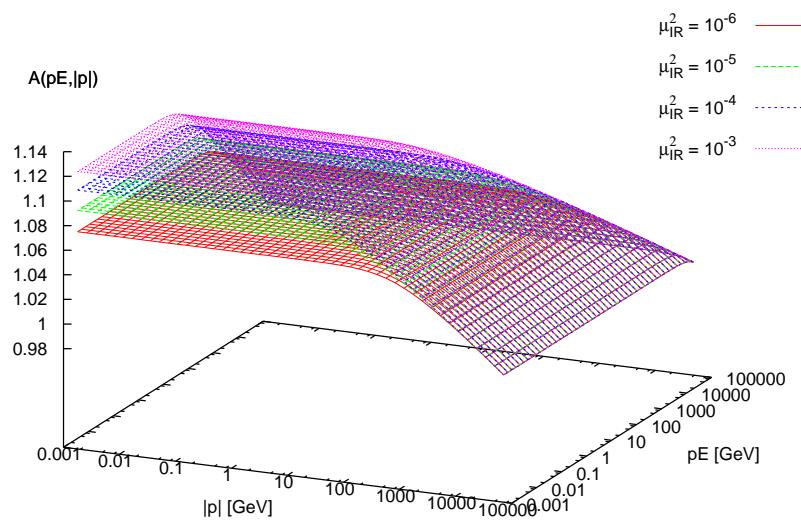


Abbildung 6.7: Die Propagatorfunktion  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$  im chiralen Limes in Abhangigkeit vom Infrarotregulator  $\mu_{IR}^2$ .

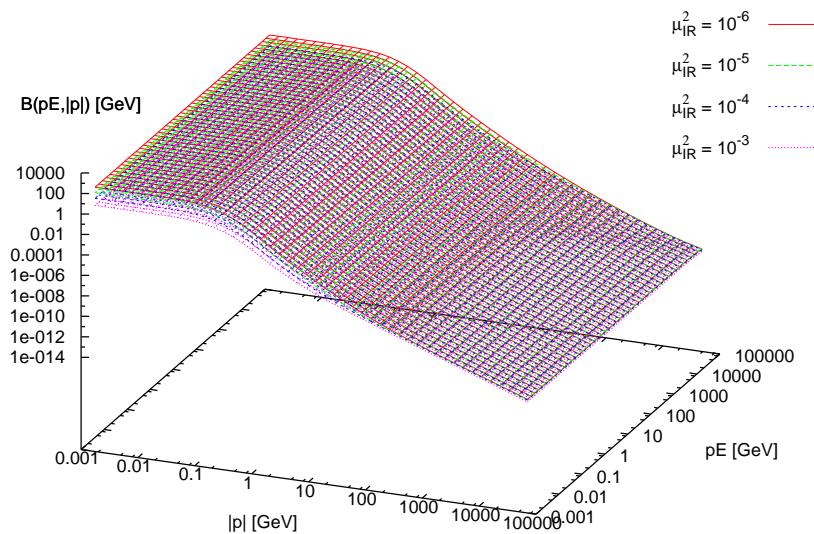


Abbildung 6.8: (analog zu Abbildung 6.7) Die Propagatorfunktion  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$ . Die Funktion divergiert im Limes  $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$ .

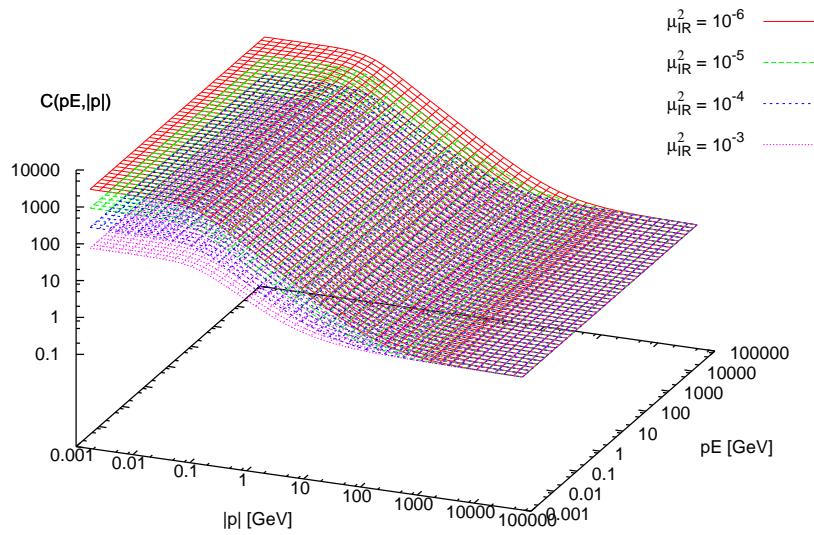


Abbildung 6.9: (analog zu Abbildung 6.7) Die Propagatorfunktion  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$ . Die Funktion divergiert im Limes  $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$ .

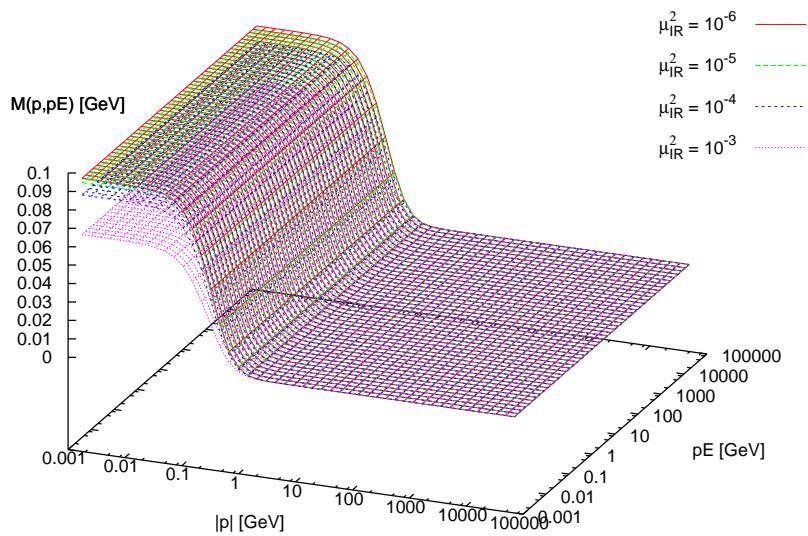


Abbildung 6.10: (analog zu Abbildung 6.7) Die Massenfunktion  $M(p_E, |\mathbf{p}|)$ . Die Massenfunktion konvergiert im Limes  $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$ .

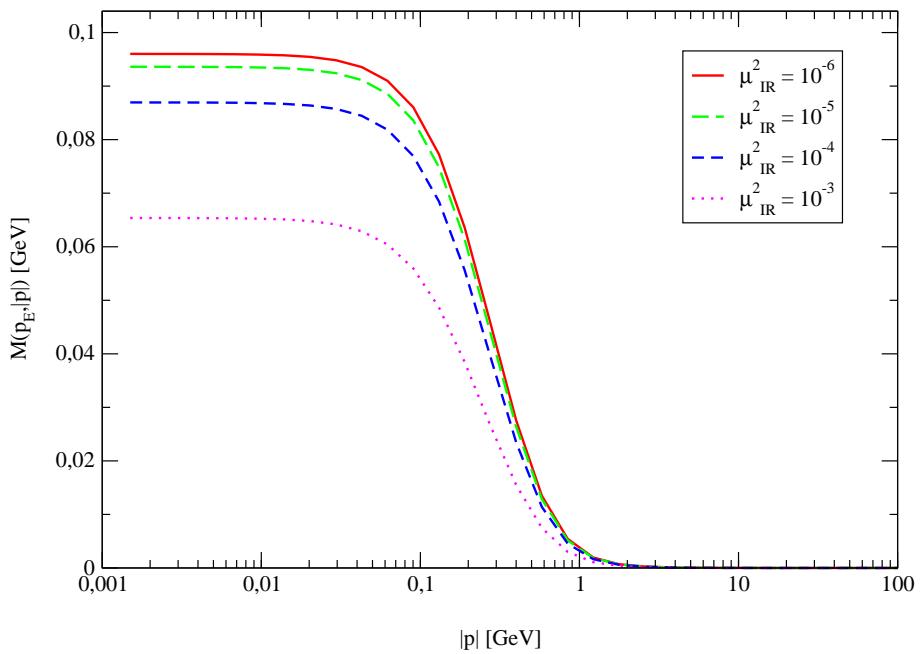


Abbildung 6.11: Die Massenfunktion  $M(p_E, |\mathbf{p}|)$  für vier verschiedene Werte von  $\mu_{IR}^2$  im chiralen Limes mit unterdrückter  $p_E$ -Koordinate.

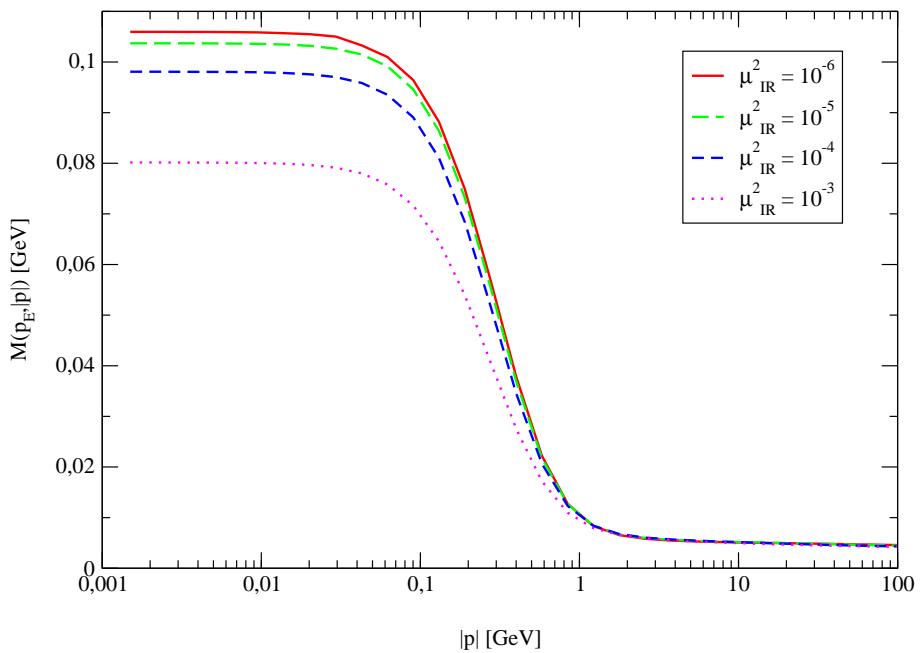


Abbildung 6.12: (analog zu Abbildung 6.11) Die Massenfunktion  $M(p_E, |\mathbf{p}|)$  für  $m_0 = 0.0037$  GeV.

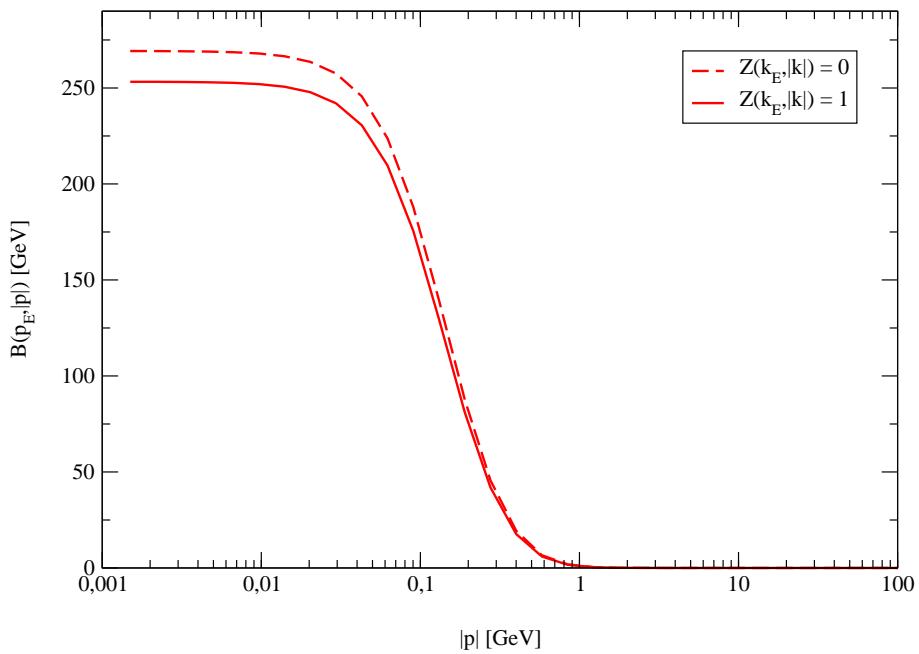


Abbildung 6.13: Die Propagatorfunktion  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  für  $\mu_{IR}^2 = 10^{-6}$  im chiralen Limes mit unterdrückter  $p_E$ -Koordinate.

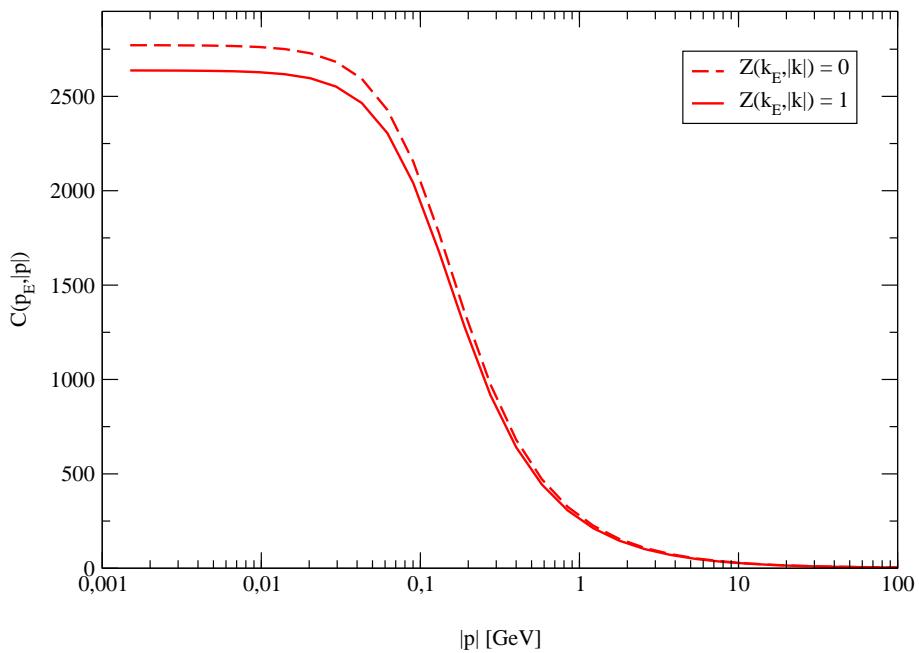


Abbildung 6.14: (analog zu Abbildung 6.13) Die Propagatorfunktion  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$ .

# Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Diplomarbeit wurde ein numerisches Lösungsverfahren für ein nichtlineares Integralgleichungssystem optimiert. Die Berechnungen erfolgten auf Grundlage des von Gribov [2] und Zwanziger [3] vorgeschlagenen Formalismus zur Erklärung des Confinement-Phänomens und wurden in Coulombbeichung durchgeführt. Nach einem Überblick über einige allgemeine Aspekte der QCD (Abschnitt 2.1 bis 2.3) wurden zunächst die Dyson-Schwinger Gleichungen (DSEs) für den Quarkpropagator hergeleitet (Abschnitt 2.4). Diese allgemein als Gap-Gleichung bezeichneten DSEs formen wie alle anderen DSEs auch ein unendliches System von gekoppelten, nichtlinearen Integralgleichungen. Für eine numerische Behandlung ist es notwendig, eine nichtperturbative Trunkierung dieses unendlichen Systems von DSEs zu finden, die die relevanten Symmetrien der QCD berücksichtigt (Abschnitt 2.4.3) und die im ultravioletten Sektor divergenten Gleichungen zu renormieren (Abschnitt 2.4.4). In Coulombbeichung wird Confinement auf das Verhalten des Color-Coulomb Potentials  $V_{coul}(R)$  zurückgeführt, das mit dem instantanen Anteil der Zeit-Zeit Komponente des Gluonpropagators identifiziert werden kann. In diesem Modell kann man durch Spurnahme (Anhang B) und anschließende Wick-Rotation der  $p_0$ -Komponente (Anhang C) ein System aus drei gekoppelten, nichtlinearen Integralgleichungen für die Quarkpropagatorfunktionen  $A(p_E, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_E, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_E, |\mathbf{p}|)$  ableiten (Abschnitt 2.5). Da Standardmethoden zur Lösung von linearen Integralgleichungen nicht verwendet werden konnten, wurde dieses Integralgleichungssystem mit einem iterativen Gesamtschrittverfahren gelöst. Dafür wurde im Rahmen dieser Diplomarbeit ein Automatischer Integrator auf Basis der Gauß-Kronrod Quadraturformeln implementiert. Die verschiedenen Teileaspekte der adaptiven numerischen Quadratur und Kubatur wurden in Kapitel 3 behandelt. Durch das infrarotsinguläre Verhalten der Integralkerne verschlechtert sich das Konvergenzverhalten des verwendeten Iterationsalgorithmus. Verallgemeinerte Summationsprozesse zur Konvergenzbeschleunigung und insbesondere der epsilon-Algorithmus wurden in Kapitel 4 betrachtet. Das numerische Lösungsverfahren wurde in Kapitel 5 besprochen.

Die Ergebnisse in instantaner Näherung entsprechen den Erwartungen. Dass der Wert der Massenfunktion in diesem Fall zu niedrig ausfällt, war bereits seit längerem bekannt [13][21]. Die Performancesteigerung durch die Anwendung von numerischen Techniken zur Konvergenzbeschleunigung ist ausgesprochen erfreulich, vor allem hinsichtlich der Tatsache, dass ein einzelner Durchlauf ansonsten auch auf einem Hochleistungsrechner mehrere Wochen in Anspruch nehmen würde. Möglicherweise sind hier in der Zukunft noch weitere Effizienzsteigerungen zu erzielen, beispielsweise durch die Anwendung von anderen nichtlinearen Folgentransformationen, die in dieser Arbeit aus Zeitgründen nicht näher untersucht werden konnten. Die Ergebnisse bei Hinzunahme von retardierten transversalen Gluonen decken sich mit denen von Markus Kloker, die er im Rahmen seiner Dissertation [51] erzielt hat. Diese sind doch einigermaßen überraschend. Hier hätten wir uns einen merklichen Einfluss auf den Wert der Massenfunktion im Infraroten erwartet. Vergleichsrechnungen mit  $Z(k_E, |\mathbf{k}|) \gg 1$  heben die Massenfunktion in diesem Bereich zwar an, dieser Effekt verschwindet aber für  $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$ . Auch zeigen diese Ergebnisse keine Frequenzabhängigkeit. Das deutet darauf hin, dass  $Z$  eine für kleine Gluonimpulse divergierende Funktion sein muss. Verbesserungen könnten hier durch ein Dressing des nackten raumartigen Vertex mit einer skalaren Funktion oder durch Einbau von zusätzlichen Tensorstrukturen erreicht werden [52].

# Anhang A

## Notationen

### A.1 Einheiten

In der vorliegenden Arbeit werden die natürlichen Einheiten

$$\hbar = c = 1 \quad (\text{A.1})$$

verwendet. Mit dieser Wahl ist insbesondere die Beziehung zwischen Länge und Energie

$$1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m} = (197.33 \text{ MeV})^{-1}. \quad (\text{A.2})$$

### A.2 Minkowskiraum

In dieser Arbeit wird die übliche Standardnotierung verwendet, vor allem bezeichnet  $a$  einen *Vierervektor* und  $\mathbf{a}$  einen *Dreiergektor*. In Verallgemeinerung des Distanzbegriffes zwischen zwei Punkten im Raum ist der "Abstand" zwischen zwei Punkten in der Raumzeit

$$ds^2 = dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2. \quad (\text{A.3})$$

Mit dieser Definition sind zwei Ereignisse in der Raumzeit entweder durch ein zeitartiges ( $ds^2 > 0$ ), raumartiges ( $ds^2 < 0$ ) oder lichtartiges ( $ds^2 = 0$ ) Intervall voneinander separiert.

Im Minkowskiraum wird ein *kontravarianter* Vierervektor dargestellt durch

$$x^\mu := (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (t, x, y, z). \quad (\text{A.4})$$

Ein *kovarianter* Vierervektor entsteht, indem man die Vorzeichen der räumlichen Komponenten eines kontravarianten Vierervektors ändert:

$$x_\mu := (x_0, x_1, x_2, x_3) \equiv (t, -x, -y, -z) = g_{\mu\nu} x^\nu \quad (\text{A.5})$$

mit dem *metrischen Tensor*

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

Die Poincaré-invariante Länge eines jeden Vektors ist

$$x^2 := x \cdot x = t^2 - \mathbf{x}^2. \quad (\text{A.7})$$

Das Skalarprodukt zweier Vierervektoren

$$a \cdot b := g_{\mu\nu} a^\mu b^\nu = a_\mu b^\mu = a_0 b_0 - a_i b_i \quad (\text{A.8})$$

ist ein kontrahiertes Produkt eines kovarianten und eines kontravarianten Vierervektors und eine Invariante (ein Skalar). Dabei werden die Lorentz-Indizes, welche von 0 bis 3 laufen, mit griechischen Buchstaben bezeichnet, wogegen die lateinischen Indizes die Raumrichtungen bezeichnen und von 1 bis 3 laufen.

Die *Energie-Impuls Vierervektoren* sind ähnlich definiert:

$$p^\mu = (E, p_x, p_y, p_z) = (E, \mathbf{p})$$

$$p_\mu = (E, -p_x, -p_y, -p_z) = (E, -\mathbf{p}) \quad (\text{A.9})$$

mit der Invariante

$$p^2 = p^\mu p_\mu = E^2 - \mathbf{p}^2 = m^2 \quad (\text{A.10})$$

und

$$p \cdot k = p_\mu k^\mu = E_p E_k - \mathbf{p} \cdot \mathbf{k}. \quad (\text{A.11})$$

Die *vierdimensionalen Ableitungsoperatoren* sind auf folgende Weise definiert:

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left( \frac{\partial}{\partial t}, \nabla \right), \quad \partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left( \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right), \quad (\text{A.12})$$

wobei  $\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$  gilt. Der *Impulsoperator*

$$\mathbf{p}^\mu := i \frac{\partial}{\partial x_\mu} = (i \frac{\partial}{\partial t}, \frac{1}{i} \nabla) =: i \nabla^\mu \quad (\text{A.13})$$

transformiert sich wie ein kontravarianter Vierervektor. Das Poincaré-invariante Analogon zum Laplace-Operator ist der *d'Alembert-Operator*:

$$\square = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2. \quad (\text{A.14})$$

Die elektrischen und magnetischen Feldstärken erhält man aus dem *Feldstärketensor*

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu. \quad (\text{A.15})$$

Die *nichtabelsche Verallgemeinerung des Feldstärketensors*

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a - g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c \quad (\text{A.16})$$

mit den vollständig antisymmetrischen Strukturkonstanten  $f^{abc}$  transformiert sich unter einer Eichtransformation auf dieselbe Weise wie die *kovariante Ableitung*

$$D_\mu = \partial_\mu + ig A_\mu^a t^a. \quad (\text{A.17})$$

### A.3 Gamma-Matrizen

Die Gamma- bzw. Dirac-Matrizen sind ein essentieller Bestandteil einer manifest Poincaré-kovarianten Beschreibung von Teilchen mit Spin. Die Gamma-Matrizen formen eine Clifford-Algebra und sind definiert durch

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}. \quad (\text{A.18})$$

Die zugrunde liegende Gruppe ist die Lorentz-Gruppe. Die 4x4 Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$  auf der rechten Seite von Gleichung (A.18) ist implizit.

Eine häufig verwendete, kompakte Darstellung der Gamma-Matrizen ist die üblicherweise als Standard-darstellung bezeichnete Dirac-Darstellung (jeder Eintrag repräsentiert eine 2x2 Matrix):

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma \\ -\sigma & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (\text{A.19})$$

mit den Pauli-Matrizen  $\sigma$

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

mit  $\gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$  und der 4x4 Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$ . Offensichtlich ist  $\gamma_0^\dagger = \gamma_0$  und  $\gamma^\dagger = -\gamma$ . Diese Eigenschaften hängen nicht von der gewählten Darstellung ab. Vielmehr sind alle Matrizen, die durch Ähnlichkeitstransformationen aus den genannten Matrizen hervorgehen, Darstellungen einer Clifford-Algebra. Neben der Dirac-Basis werden noch häufig die Weyl- und die Majorana-Basis verwendet.

Im Zusammenhang mit Gamma-Matrizen trifft man häufig auf die von Feynman eingeführte Slash-Schreibweise:

$$\gamma^\mu A_\mu =: \not{A} = \gamma^0 A^0 - \gamma \cdot \mathbf{A}, \quad (\text{A.21})$$

$$\gamma^\mu p_\mu =: \not{p} = \gamma^0 E - \gamma \cdot \mathbf{p}, \quad (\text{A.22})$$

$$\gamma^\mu \mathbf{p}_\mu =: i\not{\nabla} \equiv i\not{\partial} = i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu}. \quad (\text{A.23})$$

Die folgenden Identitäten sind bei Rechnungen mit Gamma-Matrizen nützlich. Da sie aus den fundamentalen Kommutatorrelationen folgen, gelten sie in jeder Basis.

$$\text{Tr}[\mathbb{1}] = 4, \quad (\text{A.24})$$

$$\text{Tr}[\gamma^\mu \dots \gamma^\nu]_n = 0 \text{ für } n \text{ ungerade}, \quad (\text{A.25})$$

$$\text{Tr}[\gamma^\mu \gamma^\nu] = 4g^{\mu\nu}, \quad (\text{A.26})$$

$$\text{Tr}[\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma] = 4(g^{\mu\nu} g^{\rho\sigma} - g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma} g^{\nu\rho}), \quad (\text{A.27})$$

$$\text{Tr}[\gamma^5] = 0, \quad (\text{A.28})$$

$$\text{Tr}[\not{a}\not{b}] = 4(a \cdot b), \quad (\text{A.29})$$

$$\text{Tr}[\not{a}\not{b}\not{c}\not{d}] = 4[(a \cdot b)(c \cdot d) - (a \cdot c)(b \cdot d) + (a \cdot d)(b \cdot c)]. \quad (\text{A.30})$$

## Anhang B

# Herleitung der Quarkpropagatorfunktionen

### B.1 Setup

Im folgenden bezeichnet  $p$  einen Vierervektor und  $\mathbf{p}$  einen Dreiergekotor (siehe Anhang A.2). Die Gap-Gleichung für den renormierten Quarkpropagator ist

$$iS^{-1}(p) = Z_{(\mu)}\gamma_\mu p^\mu - Z_m m + ig^2 C_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} D_{\mu\nu}(q) \gamma_\mu S(q) \gamma_\nu. \quad (\text{B.1})$$

Für die nichtverschwindenden Komponenten des Gluonpropagators werden die folgenden Näherungen angenommen:

$$D_{00}(|\mathbf{k}|) = \frac{i}{g^2} 4\pi V_C(|\mathbf{k}|), \quad (\text{B.2})$$

$$V_C(|\mathbf{k}|) := \frac{\alpha(\mathbf{k}^2)}{\mathbf{k}^2}, \quad \alpha(\mathbf{k}^2) = \frac{12\pi}{(11N_c - 2N_f) \ln(1 + \mathbf{k}^2/\Lambda^2)} \quad (\text{B.3})$$

und

$$D_{ij}(k_0, |\mathbf{k}|) = \frac{i}{g^2} (\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\mathbf{k}^2}) V_T(k_0, |\mathbf{k}|), \quad (\text{B.4})$$

$$V_T(k_0, |\mathbf{k}|) := \frac{Z(k_0, |\mathbf{k}|)}{k_0^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}. \quad (\text{B.5})$$

Der Skalenparameter  $\Lambda$  ist durch die Stringspannung  $\sigma_C$  gegeben:

$$\sigma_C = \frac{8\pi}{27} \Lambda^2. \quad (\text{B.6})$$

Setzt man diese Näherungen in die Gap-Gleichung (B.1) ein, kann man folgende Gleichung für den renormierten Quarkpropagator ableiten:

$$iS^{-1}(p) = Z_{(\mu)}\gamma_\mu p^\mu - Z_m m - C_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|)\gamma_0 S(q)\gamma_0 + V_T(k_0, |\mathbf{k}|)]\gamma_i S(q)\gamma_j (\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\mathbf{k}^2}). \quad (\text{B.7})$$

Für die zugehörigen Renormierungskonstanten gilt:

$$Z_{(\mu)} = \begin{cases} Z_0 & \text{für } \mu = 0, \\ Z_j & \text{für } \mu = j = 1, 2, 3. \end{cases} \quad (\text{B.8})$$

Die Parametrisierung für den inversen Quarkpropagator lautet

$$iS^{-1}(p) = [\gamma_0 p_0 A(p_0, |\mathbf{p}|) - \gamma \cdot \mathbf{p} C(p_0, |\mathbf{p}|) - B(p_0, |\mathbf{p}|) + i\epsilon]. \quad (\text{B.9})$$

Mit diesem Ansatz kann der Quarkpropagator geschrieben werden als:

$$S(p) = i \frac{\gamma_0 p_0 A(p_0, |\mathbf{p}|) - \gamma \cdot \mathbf{p} C(p_0, |\mathbf{p}|) + B(p_0, |\mathbf{p}|)}{p_0^2 A^2(p_0, |\mathbf{p}|) - \mathbf{p}^2 C^2(p_0, |\mathbf{p}|) - B^2(p_0, |\mathbf{p}|)}. \quad (\text{B.10})$$

Das angenommene Verhalten für die Gluonenergie  $\omega_g$  führt auf

$$\omega_g(|\mathbf{k}|) = \frac{\Lambda}{|\mathbf{k}|} + |\mathbf{k}|. \quad (\text{B.11})$$

Für die weitere Herleitung werden sich die folgenden Definitionen als zweckmäßig erweisen:

$$\text{denom} := q_0^2 A^2(q_0, |\mathbf{q}|) - \mathbf{q}^2 C^2(q_0, |\mathbf{q}|) - B^2(q_0, |\mathbf{q}|), \quad (\text{B.12})$$

$$G^{ij} := (\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\mathbf{k}^2}) \frac{Z(k_0, |\mathbf{k}|)}{k_0^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}. \quad (\text{B.13})$$

## B.2 Herleitung

Mit den Definitionen aus Abschnitt B.1 kann die Gap-Gleichung (B.1) geschrieben werden als

$$[\gamma_0 p_0 A(p_0, |\mathbf{p}|) - \gamma \cdot \mathbf{p} C(p_0, |\mathbf{p}|) - B(p_0, |\mathbf{p}|)] = Z_0 \gamma_0 p_0 - Z_j (\gamma \cdot \mathbf{p}) - Z_m m - i C_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) \gamma_0 S(q)\gamma_0 + G^{ij} \gamma_i S(q)\gamma_j]. \quad (\text{B.14})$$

Durch Spurnahme erhält man ein System aus drei gekoppelten Integralgleichungen für die Quarkpropagatoren  $A(p_0, |\mathbf{p}|)$ ,  $B(p_0, |\mathbf{p}|)$  und  $C(p_0, |\mathbf{p}|)$ :

$A(p_0, |\mathbf{p}|) \rightarrow \text{Tr}[\gamma_0 \cdot (\text{B.14})]$ :

$$\begin{aligned}
4p_0 A(p_0, |\mathbf{p}|) &= 4Z_0 p_0 - iC_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) \underbrace{\text{Tr}[\gamma_0 \gamma_0 \gamma_0 \gamma_0]}_4 + G^{ij} \underbrace{\text{Tr}[\gamma_0 \gamma_i \gamma_0 \gamma_j]}_{4\delta_{ij}}] \frac{q_0 A(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}} \\
p_0 A(p_0, |\mathbf{p}|) &= Z_0 p_0 - iC_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) + \underbrace{(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\mathbf{k}^2}) \delta_{ij}}_{3-1=2} \frac{Z(k_0, |\mathbf{k}|)}{k_0^2 + \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{q_0 A(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}} \\
p_0 A(p_0, |\mathbf{p}|) &= Z_0 p_0 - iC_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) + \frac{2Z(k_0, |\mathbf{k}|)}{k_0^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{q_0 A(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}
\end{aligned} \tag{B.15}$$

$B(p_0, |\mathbf{p}|) \rightarrow \text{Tr}[(\text{B.14})]$ :

$$\begin{aligned}
-4B(p_0, |\mathbf{p}|) &= -4Z_m m - iC_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) \underbrace{\text{Tr}[\gamma_0 \gamma_0]}_4 + G^{ij} \underbrace{\text{Tr}[\gamma_i \gamma_j]}_{-4\delta_{ij}}] \frac{B(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}} \\
B(p_0, |\mathbf{p}|) &= Z_m m + iC_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) - \underbrace{(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\mathbf{k}^2}) \delta_{ij}}_{3-1=2} \frac{Z(k_0, |\mathbf{k}|)}{k_0^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{B(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}} \\
B(p_0, |\mathbf{p}|) &= Z_m m + iC_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) - \frac{2Z(k_0, |\mathbf{k}|)}{k_0^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{B(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}
\end{aligned} \tag{B.16}$$

$C(p_0, |\mathbf{p}|) \rightarrow \text{Tr}[(\gamma \cdot \mathbf{p}) \cdot (\text{B.14})]$ :

$$\begin{aligned}
\text{Tr}[(\gamma \cdot \mathbf{p})(-\gamma \cdot \mathbf{p})] C(p_0, |\mathbf{p}|) &= Z_j \text{Tr}[(\gamma \cdot \mathbf{p})(-\gamma \cdot \mathbf{p})] + \\
iC_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) \text{Tr}[(\gamma \cdot \mathbf{p}) \gamma_0 (-\gamma \cdot \mathbf{p}) \gamma_0] + G^{ij} \text{Tr}[(\gamma \cdot \mathbf{p}) \gamma_i (-\gamma \cdot \mathbf{q}) \gamma_j]] \frac{C(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}
\end{aligned}$$

Vergleiche (A.29):  $\text{Tr}[(\gamma \cdot \mathbf{a})(\gamma \cdot \mathbf{b})] = 4(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$ :

$$\begin{aligned}
4\mathbf{p}^2 C(p_0, |\mathbf{p}|) &= 4Z_j \mathbf{p}^2 - iC_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \\
&\quad [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) p_i q_j \underbrace{\text{Tr}[\gamma_i \gamma_0 \gamma_j \gamma_0]}_{4\delta_{ij}} + G^{ij} p_k q_l \underbrace{\text{Tr}[\gamma_k \gamma_i \gamma_l \gamma_j]}_{4(\delta_{ki}\delta_{lj} - \delta_{kl}\delta_{ij} + \delta_{kj}\delta_{il})} \frac{C(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}]
\end{aligned} \tag{B.17}$$

Mit

$$p_i q_j \delta_{ij} = (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}), \quad (\text{B.18})$$

$$p_k q_l (\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\mathbf{k}^2})(\delta_{ki} \delta_{lj} - \delta_{kl} \delta_{ij} + \delta_{kj} \delta_{il}) = -\frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k})}{\mathbf{k}^2} \quad (\text{B.19})$$

folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^2 C(p_0, |\mathbf{p}|) &= Z_j \mathbf{p}^2 - i C_F \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} \\ &\quad [4\pi V_C(|\mathbf{k}|)(\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) - \frac{2(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k})}{\mathbf{k}^2} \frac{2Z(k_0, |\mathbf{k}|)}{k_0^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{C(q_0, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}} \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Die in diesen nichtlinearen Integralgleichungen auftretenden vierdimensionalen Einschleifenintegrale haben in sphärischen Koordinaten die allgemeine Form

$$\begin{aligned} I(k) &:= \int d^4 q g(q, k) \\ &= \int dq_0 \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta f(k, q, \vartheta). \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Dabei bezeichnet  $\mathbf{q}$  den inneren Schleifenimpuls,  $\mathbf{k}$  den äußeren Impuls und  $\vartheta$  den Winkel, den beide Vektoren miteinander einschließen. Da der Integrand von  $\varphi$  unabhängig ist, kann diese Integration analytisch ausgeführt werden und man findet

$$I(k) := 2\pi \int dq_0 \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \text{Bek}(k, q, \cos \vartheta) \quad (\text{B.22})$$

mit dem Winkelintegral

$$\text{Bek}(k, q, \vartheta) = \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) f(k, q, \cos \vartheta). \quad (\text{B.23})$$

Nach einer Wick-Rotation um  $90^\circ$  (Anhang C)

$$p_0 \rightarrow ip_E, \quad q_0 \rightarrow iq_E, \quad \int dq_0 \rightarrow i \int q_E, \quad (\text{B.24})$$

$$\text{denom} := -q_E^2 A^2(q_E, |\mathbf{q}|) - \mathbf{q}^2 C^2(q_E, |\mathbf{q}|) - B^2(q_E, |\mathbf{q}|) \quad (\text{B.25})$$

kann die  $q_0$ -Integration im Euklidischen ausgeführt werden. Die Skalarprodukte können dann geschrieben werden als:

$$(\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}) = |\mathbf{p}| |\mathbf{q}| \cos \vartheta, \quad (\text{B.26})$$

$$\frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{k})(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k})}{\mathbf{k}^2} = |\mathbf{p}| |\mathbf{q}| (\cos \vartheta + \frac{|\mathbf{p}| |\mathbf{q}| (\cos^2 \vartheta - 1)}{\mathbf{k}^2}) \quad (\text{B.27})$$

Daraus erhält man die folgenden gekoppelten nichtlinearen Dyson-Schwinger Integralgleichungen für die Quarkpropagatorfunktionen:

$$A(p_E, |\mathbf{p}|) = Z_0 + \frac{C_F}{p_E(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) + \frac{2Z(k_E, |\mathbf{k}|)}{-k_E^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{q_E A(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \quad (\text{B.28})$$

$$B(p_E, |\mathbf{p}|) = Z_m m - \frac{C_F}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^2 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) - \frac{2Z(k_E, |\mathbf{k}|)}{-k_E^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)}] \frac{B(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}, \quad (\text{B.29})$$

$$C(p_E, |\mathbf{p}|) = Z_j - \frac{C_F}{|\mathbf{p}|(2\pi)^3} \int_0^\infty d|\mathbf{q}| |\mathbf{q}|^3 \int_{-\infty}^\infty dq_E \int_{-1}^{+1} d(\cos \vartheta) [4\pi V_C(|\mathbf{k}|) \cos \vartheta - (\cos \vartheta + \frac{|\mathbf{p}| |\mathbf{q}| (\cos^2 \vartheta - 1)}{\mathbf{k}^2})] \frac{2Z(k_E, |\mathbf{k}|)}{-k_E^2 - \omega_g^2(|\mathbf{k}|)} \frac{C(q_E, |\mathbf{q}|)}{\text{denom}}. \quad (\text{B.30})$$

Der Fall  $Z(k_E, |\mathbf{k}|) = 0$  entspricht in diesem Modell der instantanen Näherung, bei Hinzunahme von transversalen Komponenten und Retardierungseffekten wird  $Z(k_E, |\mathbf{k}|)$  zur Vereinfachung gleich 1 gesetzt. Die Infrarotdivergenzen werden durch Einführung eines Infrarotregulators  $\mu_{IR}$  kontrolliert:

$$\mathbf{k}^2 \rightarrow \mathbf{k}^2 + \mu_{IR}^2. \quad (\text{B.31})$$

Die Renormierung der Integralgleichungen erfolgt mit Hilfe der Bedingungen

$$A(\mu_E, |\mu|) = 1, \quad (\text{B.32})$$

$$B(\mu_E, |\mu|) = m_0, \quad (\text{B.33})$$

$$C(\mu_E, |\mu|) = 1, \quad (\text{B.34})$$

wobei  $\mu_E$  und  $|\mu|$  die jeweiligen Renormierungspunkte bezeichnen.

## Anhang C

# Wick-Rotation

## C.1 Wick-Rotation

Unter einer Wick-Rotation versteht man die Drehung der zeitartigen Komponente eines Vierervektors um  $90^\circ$  in der komplexen Ebene, wobei die Ortskoordinaten beibehalten werden. Es handelt sich um eine analytische Fortsetzung vom Minkowskiraum ins Euklidische. Dafür setzt man

$$p_0 = e^{\frac{i\pi}{2}} p_{E_i}^0 = i p_E^0, \quad (\text{C.1})$$

$\mathbf{p} = \mathbf{p}_E$  und integriert über  $p_E^0$  von  $-\infty$  bis  $+\infty$ .

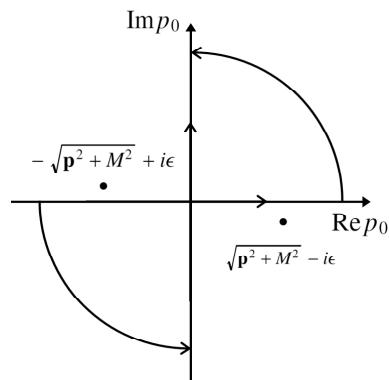


Abbildung C.1: Rotation der  $p_0$ -Kontour um 90°.

## Kontourintegrale der Form

$$I := \int \frac{d^d p}{(2\pi)^4} \frac{1}{(p^2 - M^2 + i\epsilon)^m} \quad (\text{C.2})$$

können so im Euklidischen berechnet werden, ohne dabei den Wert des Integrals zu verändern:

$$I = i(-1)^m \int \frac{d^d p_E}{(2\pi)^4} \frac{1}{(p^2 + M^2)^m}. \quad (\text{C.3})$$

## Anhang D

# Interpolation und Extrapolation

### D.1 Kubische Spline-Interpolation

Unter einer Spline-Funktion versteht man eine stückweise auf Teilintervallen definierte Funktion, deren Teile an den Nahtstellen zumindest stetig oder ein- bzw. mehrfach stetig differenzierbar aneinanderstoßen. Ein Spline  $n$ -ten Grades ist eine Funktion, die stückweise aus Polynomen vom maximalen Grad  $n$  zusammengesetzt ist. Im Gegensatz zur Polynominterpolation, bei der die Polynome zu einer größeren Anzahl von Stützstellen die Tendenz haben, gegen die Enden des Interpolationsintervalls sehr stark zu oszillieren, liefert die Spline-Interpolation eine glatte Interpolationsfunktion. Glatt bedeutet im mathematischen Sinne, dass die Funktion zumindest zweimal stetig differenzierbar sein soll. Alle gegebenen Punkte der Funktion stellen Nahtstellen zwischen den Teilkurven dar, an denen sowohl die Funktionswerte als auch die ersten und zweiten Ableitungen der zusammentreffenden Teilkurven übereinstimmen.

Der im folgenden betrachtete Spezialfall der kubischen Spline-Interpolation ist motiviert durch das Modell einer dünnen Holzlatte (englisch *spline*), die an einzelnen Punkten fixiert wird und sich genau wie ein kubischer Spline mit natürlichen Randbedingungen (*natural spline*) biegt. Die natürlichen Randbedingungen entsprechen der Situation, dass die Latte außerhalb des Intervalls  $[a, b]$  gerade ist.

Im folgenden bezeichnet

$$\|g\|_2 := \left( \int_a^b |g(x)|^2 \right)^{1/2} \quad (\text{D.1})$$

die  $L_2$ -Norm für Funktionen  $g \in C[a, b]$ . Die Krümmung einer parametrisierten Kurve  $g$  in der Ebene an der Stelle  $x \in [a, b]$  ist gegeben durch

$$\kappa(x) := \frac{g''(x)}{(1 + g'(x)^2)^{3/2}}. \quad (\text{D.2})$$

Beschreibt  $g(x)$  die Lage einer dünnen Holzlatte, so misst

$$E = \int_a^b \left( \frac{g''(x)}{(1 + g'(x)^2)^{3/2}} \right)^2 dx \quad (\text{D.3})$$

die "Biegeenergie" dieser Latte. Aufgrund des Hamiltonschen Prinzips stellt sich die Latte so ein, dass diese Energie minimiert wird. Für kleine Auslenkungen  $g'(x)$ , wie sie typischerweise bei solchen Latten auftreten, gilt näherungsweise  $\kappa(x) \approx g''(x)$  und damit

$$E \approx \int_a^b g''(x)^2 dx = \|g''\|_2^2. \quad (\text{D.4})$$

Ist  $g \in C[a, b]$  eine beliebige Funktion und  $s$  ein zugehöriger interpolierender kubischer Spline, gilt für  $g$  und  $s$  die Beziehung

$$\|s''\|_2 \leq \|g''\|_2. \quad (\text{D.5})$$

Kubische Splines besitzen also gemäß (D.5) im genäherten Sinne (D.4) minimale Krümmung.

Ein *interpolierender kubischer Spline*  $s$  mit den Stützstellen  $x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n$  und den zugehörigen gegebenen Funktionswerten  $y_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, n$  ist durch die folgenden Eigenschaften festgelegt [28, Seite 1126]:

- a)  $s(x_i) = y_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$
  - b)  $s(x)$  ist für  $x \in [x_i, x_{i+1}]$ ,  $i = 0, 1, \dots, n - 1$  ein Polynom vom Grad 3,
  - c)  $s(x) \in C^2([x_0, x_n])$ .
- (D.6)

Die Funktionsklasse  $C^2[a, b]$  besteht aus allen Funktionen  $f \in C[a, b]$ , die auf dem offenen Intervall  $]a, b[$  stetige Ableitungen  $f'$ ,  $f''$  besitzen, die sich zu stetigen Funktionen auf  $[a, b]$  fortsetzen lassen. Da ein interpolierender kubischer Spline per definitionem auf jedem Intervall  $[x_i, x_{i+1}]$ ,  $i = 0, 1, \dots, n - 1$  mit einem Polynom dritten Grades  $p_i \in \Pi_3$  identisch ist, macht man folgenden Ansatz:

$$\begin{aligned} s(x) &= p_i(x) := a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3, \\ s'(x) &= p'_i(x) = b_i + 2c_i(x - x_i) + 3d_i(x - x_i)^2, \\ s''(x) &= p''_i(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_i). \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Insgesamt wird ein kubischer Spline also durch  $4n$  Koeffizienten  $a_i, b_i, c_i$  und  $d_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$  bestimmt. An den inneren Stützstellen  $x_{i+1}$  gelten wegen  $s(x) \in C^2([x_0, x_n])$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, n - 2$  insgesamt  $3(n - 1)$  Glattheitsbedingungen:

- a) Stetigkeit:  $p_i(x_{i+1}) = p_{i+1}(x_{i+1}) \quad (n - 1)$
  - b) einfach stetig differenzierbar:  $p'_i(x_{i+1}) = p'_{i+1}(x_{i+1}) \quad (n - 1)$
  - c) zweifach stetig differenzierbar:  $p''_i(x_{i+1}) = p''_{i+1}(x_{i+1}) \quad (n - 1)$
- (D.8)

Dazu kommen wegen  $s(x_i) = y_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$  noch  $(n + 1)$  Interpolationsbedingungen:

$$d) \text{ Interpolation: } p_i(x_i) = y_i, \quad p_{n-1}(x_n) = y_n \quad (n + 1) \quad (\text{D.9})$$

Damit stehen für die Konstruktion eines interpolierenden kubischen Splines mit den  $(n + 1)$  Interpolationsbedingungen und den  $3(n - 1)$  Glattheitsbedingungen zunächst  $(4n - 2)$  Gleichungen zur Verfügung.

Die Festlegung der zwei noch fehlenden Freiheitsgrade erfolgt durch eine der folgenden Randbedingungen:

- |           |  |                       |
|-----------|--|-----------------------|
| <i>a)</i> | $s_0''(x_0) = s_{n-1}''(x_n) = 0$  | natürliche RB,        |
| <i>b)</i> | $s_0'(x_0) = y'_0, \quad s_{n-1}'(x_n) = y'_n,$  | eingespannter Rand,   |
| <i>c)</i> | $s_0'(x_0) = s_{n-1}'(x_n), \quad s_0''(x_0) = s_{n-1}''(x_n)$                           | periodische RB,       |
| <i>d)</i> | $s_0^{(3)}(x_1) = s_1^{(3)}(x_1), \quad s_{n-2}^{(3)}(x_{n-1}) = s_{n-1}^{(3)}(x_{n-1})$ | Not-a-knot-Bedingung. |
- (D.10)

Neben den gegebenen Funktionswerten  $y_i$  sollen noch die zweiten Ableitungen  $y_i''$  zur Berechnung der Teilpolynome  $s_i(x)$  verwendet werden. Zuerst definiert man

$$h_i := x_{i+1} - x_i > 0, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n - 1 \quad (\text{D.11})$$

die Längen der Teilintervalle  $[x_i, x_{i+1}]$ . Durch Einsetzen von (D.8) und (D.9) in (D.7) erhält man dann für die Koeffizienten  $a_i, b_i, c_i$  und  $d_i$  für  $s_i(x)$  die Formeln

$$\begin{aligned} a_i &:= y_i, \quad b_i := \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{h_i}{6}(s_{i+1}'' + 2s_i''), \\ c_i &:= \frac{s_i''}{2}, \quad d_i := \frac{s_{i+1}'' - s_i''}{6h_i}. \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

Mit diesen Setzungen liefert die Bedingung der Stetigkeit der ersten Ableitungen (D.8b) an den  $(n - 1)$  inneren Stützstellen  $x_i$  die  $(n - 1)$  gekoppelten linearen Gleichungen

$$h_{i-1}s_{i-1}'' + 2(h_{i-1} + h_i)s_i'' + h_is_{i+1}'' = g_i, \quad i = 1, 2, \dots, n - 1, \quad (\text{D.13})$$

mit

$$g_i := 6\frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - 6\frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}}. \quad (\text{D.14})$$

Dies stellt ein lineares Gleichungssystem für die  $(n - 1)$  Unbekannten  $s_1'', s_2'', \dots, s_{n-1}''$  dar. Im Fall natürlicher Randbedingungen  $s_0'' = s_n'' = 0$  lassen sich die Gleichungen (D.13) in folgender Form angeben:

$$\left( \begin{array}{ccccc} 2(h_0 + h_1) & h_1 & 0 & \dots & 0 \\ h_1 & 2(h_1 + h_2) & h_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & h_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & h_{n-2} \\ 0 & \dots & 0 & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \end{array} \right) \begin{pmatrix} s_1'' \\ \vdots \\ s_{n-1}'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_{n-1} \end{pmatrix} \quad (\text{D.15})$$

Die Koeffizientenmatrix ist symmetrisch, tridiagonal und diagonal dominant. Solche Gleichungssysteme haben eine eindeutige Lösung, die beispielsweise mit einem LU-Dekompositionsverfahren durch Vorwärts- und Rückwärtssubstitution in  $O(n)$  Operationen berechnet werden kann.

Es ist wichtig anzumerken, dass diese Zerlegung nur einmal durchgeführt werden muss. Die kubische Splinefunktion  $s$  kann dann mittels (D.7) für jeden Wert von  $x$  beliebig oft in  $O(\log n)$  Operationen

ausgewertet werden. Routinen zur Berechnung von kubischen Splines finden sich beispielsweise in [24, Seiten 113-116].

## D.2 Bikubische Spline-Interpolation

Die bikubische Spline-Interpolation ist eine häufig verwendete Technik zur Berechnung von kubischen Splines in zwei Dimensionen. Angenommen, es liegen die Stützwerte  $z_{ij} =: f(x_i, y_j)$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots, m$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots, n$  in Form einer Tabelle vor, dann berechnet man zunächst  $m$  eindimensionale Splines entlang der Zeilen in der Tabelle, gefolgt von *einem* zusätzlichen eindimensionalen Spline entlang der neu entstandenen Spalte.

Um den Rechenaufwand zu minimieren, geht man im Regelfall so vor: Man berechnet zunächst die zweiten Ableitungen nur in einer Richtung und speichert die Ergebnisse in Form einer Hilfstabelle ab. Um einen Funktionswert zu interpolieren, konstruiert man dann  $m$  Splines entlang der Zeilen ( $O(\log m)$ ). Diese dienen als Basis für die Berechnung der zweiten Ableitungen entlang der neuen Spalte ( $O(n)$ ), gefolgt von einer  $O(\log n)$  Operation für die Auswertung.

# Literaturverzeichnis

- [1] Reinhard Alkofer and Jeff Greensite. Quark confinement: The hard problem of hadron physics. [arXiv: hep-ph/0610365v2], 2006.
- [2] Vladimir N. Gribov. Quantization of non-abelian gauge theories. *Nuclear Physics B*, 139:1–19, 1978.
- [3] Daniel Zwanziger. Critical limit of lattice gauge theory. *Nuclear Physics B*, 378:525–590, 1992.
- [4] Armin Wegner. *Messung von Multijettraten in der tief inelastischen Elektron-Proton Streuung mit dem H1 Detektor bei HERA*. Dissertation, Universität Hamburg, 1994.
- [5] George Leibbrandt and Jimmy Williams. Split dimensional regularization for the coulomb gauge. *Nuclear Physics B*, 475:469–483, 1996. [arXiv: hep-th/9601046].
- [6] Christian S. Fischer. *Non-perturbative Propagators, Running Coupling and Dynamical Mass Generation in Ghost-Antighost Symmetric Gauges in QCD*. Dissertation, Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen, 2003.
- [7] Pieter Maris and Craig D. Roberts. Dyson-schwinger equations: A tool for hadron physics. *International Journal of Modern Physics E*, 12(3):297–365, 2003. [arXiv: nucl-th/0301049].
- [8] Reinhard Alkofer and Lorenz v. Smekal. The Infrared Behaviour of QCD Green’s Functions—Confinement, Dynamical Symmetry Breaking, and Hadrons as Relativistic Bound States. *Physics Reports*, 353:281–465, 2001. [arXiv: hep-ph/0007355].
- [9] Gernot Eichmann. *The Analytic Structure of the Quark Propagator in the Covariant Faddeev Equation of the Nucleon*. Diplomarbeit, Karl-Franzens-Universität Graz, 2006.
- [10] Pieter Maris and Peter C. Tandy. Qcd modeling of hadron physics. [arXiv: nucl-th/0511017], 2005.
- [11] A. Bender, W. Detmold, C.D. Roberts, and A.W. Thomas. Bethe-Salpeter equation and a nonperturbative quark-gluon vertex. *Physical Review C*, 65:065203, 2002. [arXiv: nucl-th/0202082v1].
- [12] James D. Bjorken and Sidney Drell. *Relativistic Quantum Fields*. McGraw-Hill, 1965.
- [13] Reinhard Alkofer. *Chirale Symmetriebrechung und der chirale Phasenübergang in instantanen Näherungen zur Quantenchromodynamik in Coulombbeichung*. Dissertation, Technische Universität München, 1988.
- [14] Stephen L. Adler. Gap equation models for chiral symmetry breaking. *Progress of Theoretical Physics*, Supplement No.86:12–17, 1986.
- [15] Claude Itzykson and Jean-Bernard Zuber. *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill, 1980.

- [16] Attilio Cucchieri and Daniel Zwanziger. Confinement made simple in the coulomb gauge. talk presented by D. Zwanziger at Lattice2001(confinement), Berlin, August 20-24, 2001, 2001. [arXiv: hep-lat/0110189v1].
- [17] Daniel Zwanziger. No confinement without coulomb confinement. *Physical Review Letters*, 90(10):102001, 2003. [arXiv: hep-lat/0209105].
- [18] John L. Richardson. The heavy quark potential and the upsilon, j/psi systems. *Physics Letters B*, 82:272–274, 1979. Issue 2.
- [19] Claus Feuchter. *Yang-Mills-Theorie in Coulombeichung*. Dissertation, Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen, 2006.
- [20] Attilio Cucchieri and Daniel Zwanziger. Fit to gluon propagator and gribov formula. *Physics Letters B*, 524:123–128, 2002. [arXiv: hep-lat/0012024v3].
- [21] Reinhard Alkofer, Markus Kloker, Andreas Krassnigg, and Robert F. Wagenbrunn. Aspects of the confinement mechanism in coulomg-gauge qcd. *Physical Review Letters*, 96(2):022001(4), 2006. [arXiv: hep-ph/0510028].
- [22] Eric W. Weisstein. Quadrature. From MathWorld - A Wolfram Web Resource, 2006. <http://mathworld.wolfram.com/Quadrature.html>.
- [23] Chin-Yun Chen. *Adaptive numerische Quadratur und Kubatur mit automatischer Ergebnisverifikation*. Dissertation, Universität Karlsruhe, 1998.
- [24] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C - The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, second edition, 1992.
- [25] Josef Stoer. *Numerische Mathematik 1*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1972.
- [26] Francis B. Hildebrand. *Introduction to Numerical Analysis*. Dover Publications, Inc., second edition, 1974.
- [27] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, Inc., 1972.
- [28] Ilja N. Bronstein and Günter Grosche. *Teubner-Taschenbuch der Mathematik*. B. G. Teubner Verlagsgesellschaft Leipzig, 1996.
- [29] Alexander S. Kronrod. Nodes and weights of quadrature formulas. Consultants Bureau, 1965. (Translated from Russian).
- [30] T. N. L. Patterson. The optimum addition of points to quadrature formulae. *Mathematics of Computation*, 22(104):847–856, 1968.
- [31] Dirk P. Laurie. Calculation of gauss-kronrod quadrature rules. *Mathematics of Computation*, 66(219):1133–1145, 1997.
- [32] G. S. Ammar, D. Calvetti, and L. Reichel. Computation of gauss-kronrod quadrature rules with non-positive weights. *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 9:26–38, 1999.
- [33] René Alt, Andreas Frommer, R. Baker Kearfott, and Wolfram Luther. *Numerical Software with Result Verification*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 2004.

- [34] Ernst J. Weniger. Nonlinear sequence transformations for the acceleration of convergence and the summation of divergent series. *Computer Physics Reports*, 10:189–371, 1989. [arXiv: math.NA/0306302].
- [35] Jet Wimp. *Sequence Transformations and their Applications*. Academic Press, 1981.
- [36] J. R. Schmidt. On the numerical solution of linear simultaneous equations by an iterative method. *Philosophy Magazine*, 32:369–383, 1941.
- [37] Daniel Shanks. Non-linear transformations of divergent and slowly convergent series. *Journal of Mathematics and Physics*, 34:1–42, 1955.
- [38] P. Wynn. On a device for computing the  $e_m(S_n)$  transformation. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation*, 10(54):91–96, 1956.
- [39] Ernst J. Weniger. *Verallgemeinerte Summationsprozesse als numerische Hilfsmittel für quantenmechanische und quantenchemische Rechnungen*. Habilitationsschrift, Universität Regensburg, 1994.
- [40] Dirk Louis. *C/C++ Die praktische Referenz*. Markt+Technik Verlag, 2003.
- [41] Stanley B. Lippmann and Josée Lajoie. *C++ IT-Studienausgabe*. mitp-Verlag/Bonn, 2003. Aus dem Amerikanischen von Jobst Giesecke.
- [42] Nate Kohl. C/C++ Reference, 2007. <http://www.cppreference.com/>.
- [43] American National Standards Institute. Ansi standard, 2007. <http://www.ansi.org/>.
- [44] MCS. Mpich homepage, 2007. <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/index.htm>.
- [45] Knoxville University of Tennessee. Mpi standard, 2007. <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpi-standard/mpi-report-2.0/mpi2-report.htm>.
- [46] Dimitri van Heesch. Doxygen homepage, 2007. <http://www.stack.nl/~dimitri/doxygen/>.
- [47] Intel Corporation. *Quick-Reference Guide to Optimization with Intel Compilers*, 2006.
- [48] Richard M. Stallman and the GCC Developer Community. *Using the GNU Compiler Collection (GCC)*. GNU Press, 2005.
- [49] ZID. Linux sun cluster, 2007. <http://www.uni-graz.at>.
- [50] Atsushi Nakamura and Takuya Saito. Color confinement in coulomb gauge qcd. *Progress of Theoretical Physics*, 115(1):189–200, 2006. [arXiv: hep-lat/0512042 v1].
- [51] Markus Kloker. *The QCD Quark Propagator in Coulomb Gauge and some Implications for Hadronic Physics*. Dissertation, Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen, 2007.
- [52] Klaus Lichtenegger. Persönliches Gespräch, 2007.

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Diagrammatische Darstellung der Gap-Gleichung (Quelle: [9], Seite 16). . . . .	19
2.2	Die Gluonpropagatoren $D_{00}( \mathbf{k} )$ und $D_{ij}( \mathbf{k} )$ in instantaner Näherung als Funktion der äußeren Impulse $ \mathbf{k} $ . Der Skalenparameter $\Lambda$ wurde gleich eins gesetzt. . . . .	24
2.3	Die Gluonenergie $\omega_g( \mathbf{k} )$ als Funktion der äußeren Impulse $ \mathbf{k} $ . Der Skalenparameter $\Lambda$ wurde gleich eins gesetzt. . . . .	25
5.1	Struktureller Aufbau des Programms <b>QuarkpropagatorMPI</b> . . . . .	48
6.1	Die Massenfunktion $M( \mathbf{p} )$ für vier verschiedene Werte von $\mu_{IR}^2$ im chiralen Limes. . . . .	55
6.2	Die Massenfunktion $M( \mathbf{p} )$ für vier verschiedene Werte von $\mu_{IR}^2$ für $m_0 = 0.0037 \text{ GeV}$ . . . . .	55
6.3	Vergleich der Massenfunktionen $M( \mathbf{p} )$ für $\mu_{IR}^2 = 10^{-6}$ im chiralen Limes und $m_0 = 0.0037 \text{ GeV}$ in doppellogarithmischer Darstellung. . . . .	56
6.4	Vergleich der mit der Standardmethode (Linien) und dem $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Technik (Punkte) berechneten Ergebnisse im chiralen Limes. . . . .	56
6.5	Relative Anzahl der benötigten Iterationen bei Verwendung der Standardmethode (leere Symbole) und des $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Technik (volle Symbole) im chiralen Limes (rote Dreiecke) und $m_0 = 0.0037 \text{ GeV}$ (blaue Kreise) in Abhängigkeit vom Infrarotregulator $\mu_{IR}^2$ . . . . .	57
6.6	Relative Anzahl der zu berechnenden Integrale bei Verwendung der Standardmethode (Dreiecke) und des $\epsilon$ -Algorithmus in Kombination mit der Freezing-Technik (Kreise, Vierecke) im chiralen Limes (leere Symbole) und $m_0 = 0.0037 \text{ GeV}$ (volle Symbole) in Abhängigkeit vom Infrarotregulator $\mu_{IR}^2$ . . . . .	57
6.7	Die Propagatorfunktion $A(p_E,  \mathbf{p} )$ im chiralen Limes in Abhängigkeit vom Infrarotregulator $\mu_{IR}^2$ . . . . .	58
6.8	(analog zu Abbildung 6.7) Die Propagatorfunktion $B(p_E,  \mathbf{p} )$ . Die Funktion divergiert im Limes $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$ . . . . .	58
6.9	(analog zu Abbildung 6.7) Die Propagatorfunktion $C(p_E,  \mathbf{p} )$ . Die Funktion divergiert im Limes $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$ . . . . .	59
6.10	(analog zu Abbildung 6.7) Die Massenfunktion $M(p_E,  \mathbf{p} )$ . Die Massenfunktion konvergiert im Limes $\mu_{IR}^2 \rightarrow 0$ . . . . .	59

6.11 Die Massenfunktion $M(p_E,  \mathbf{p} )$ für vier verschiedene Werte von $\mu_{IR}^2$ im chiralen Limes mit unterdrückter $p_E$ -Koordinate. . . . .	60
6.12 (analog zu Abbildung 6.11) Die Massenfunktion $M(p_E,  \mathbf{p} )$ für $m_0 = 0.0037 \text{ GeV}$ . . . . .	60
6.13 Die Propagatorfunktion $B(p_E,  \mathbf{p} )$ für $\mu_{IR}^2 = 10^{-6}$ im chiralen Limes mit unterdrückter $p_E$ -Koordinate. . . . .	61
6.14 (analog zu Abbildung 6.13) Die Propagatorfunktion $C(p_E,  \mathbf{p} )$ . . . . .	61
C.1 Rotation der $p_0$ -Kontour um $90^\circ$ . . . . .	72

# Tabellenverzeichnis

3.1	Gängige Gewichtsfunktionen und zugehörige Orthogonalpolynome.	34
4.1	Numerisches Beispiel für den $\epsilon$ -Algorithmus (die Nullstelle von $x^2 - 4x - 2$ ist 0.5857864375).	45
4.2	Vergleich von $\epsilon$ - und $\rho$ -Algorithmus ( $\pi = 3.141592653589$ , $\pi^2/6 = 1.644934066848$ ) . .	46
5.1	Parameter in <b>QuarkpropagatorMPI</b> . . . . .	52

# Danksagung

Mein besonderer Dank gilt meinem Betreuer Reinhard Alkofer für die interessante Aufgabenstellung, die hervorragende Betreuung und den ausgesprochen großzügig bemessenen Zeitrahmen für die Fertigstellung dieser Arbeit. Obwohl er unter chronischem Zeitmangel leidet, hatte er für meine Fragen jederzeit ein offenes Ohr und war immer für mich da, wenn ich seiner Unterstützung bedurfte.

Mein Dank gebührt auch den Mitgliedern der Arbeitsgruppe Markus Kloker, Andreas Krassnigg und Klaus Lichtenegger für die zahlreichen Diskussionen und Hilfestellungen sowie das angenehme Arbeitsklima.

Mein herzlicher Dank gilt meinem Kollegen Martin Schwinzerl, dem unerschütterlichen mathematischen Felsen in der physikalischen Brandung, für die unzähligen Gespräche und die zahlreichen Tipps und Tricks, die maßgeblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Weiterhin danke ich Babsi, Mätty, Elmar, Michi und Gerry, die mich auf meinem Weg durchs Studium begleitet haben.

Bedanken möchte ich mich auch bei meiner geliebten Tochter Jasmin für ihre Rücksichtnahme und ihr Verständnis, wenn mich das Verfassen dieser Arbeit zeitlich allzu sehr in Anspruch genommen hat, und dass sie mir hinsichtlich Lerneifer und Fleiß immer ein gutes Vorbild war. Ich hab dich ganz, ganz lieb, mein Schatz.

Bei meiner Mutter, auf deren Unterstützung ich jederzeit zählen konnte.

Bei meinem Chef DI Kurt Wiederwohl, dem ich sehr viel zu verdanken habe und ohne dessen Unterstützung diese Arbeit wohl nicht zustande gekommen wäre.

Bei meinen Freundinnen und Freunden Martin, Susi, Dieter, Tommy, Kathy, Wolfi, Doris, Barney, Elisabeth, Rossi, Alex, Claudia, Schlossberg Martin, Bettina, Jürgen, Gerry und Richie.