

Exposé der Dissertation

1 Einleitung

Quantenchromodynamik (QCD) ist der vielleicht interessanteste Teil des Standard-Modells der Teilchenphysik, da es in diesem Bereich noch viele unbeantwortete Fragen gibt. QCD ist die Theorie der starken Wechselwirkung, d.h. die Theorie der Wechselwirkung zwischen den elementaren Bestandteilen (Partonen) der zusammengesetzten Teilchen (Hadronen). Hierbei ist der Begriff „Bestandteile“ allerdings problematisch, da man unter „normalen“ Umständen, d.h. bei niedrigen Temperaturen, die Partonen (Quarks und Gluonen) nicht trennen kann. Stattdessen bilden sie gebundene, hadronische Zustände, die in diesem Regime die relevanten Freiheitsgrade sind.

Berechnungen in der QCD können analytisch nur für einige Grenzfälle durchgeführt werden. Der interessanteste Teil der Theorie wird heutzutage v.a. über Computersimulationen durch die Gitter QCD zugänglich gemacht. Hierbei wird ein vierdimensionales Gitter mit Quarks (Fermionen) an den Knotenpunkten und Gluonen (Bosonen) zwischen den Knotenpunkten aufgestellt, welches sich nach Monte-Carlo Verfahren weiterentwickeln darf.

2 Stand der Forschung

Mit Hilfe von Weiterentwicklungen in den Bereichen der Algorithmen und Supercomputer konnte die Gitter QCD zahlreiche erfolgreiche Vorhersagen zur starken Wechselwirkung machen, die von Experimenten bestätigt wurden [1]. Allerdings gibt es nach wie vor Gebiete, in denen die Gitter QCD nicht eingesetzt werden kann [2].

Dem Team um Nikolai Prokof'ev und Boris Svistunov ist es gelungen, in den letzten Jahren eine vielversprechende neue Methode zur Berechnung von asymptotischen Reihen basierend auf irreduziblen Feynman Diagrammen aufzustellen [3]. Die ersten Erfolge im Bereich der Festkörperphysik sind bereits bestätigt [4].

Bisher wurden von dieser Gruppe zahlreiche Modelle, wie etwa das Bose-Hubbard-Modell

[5] und das Polaron-Modell [6], aus der Festkörperphysik berechnet und mit den analytischen, numerischen oder experimentellen Ergebnissen verglichen [7, 8]. Ein weiteres interessantes mögliches Einsatzgebiet stellt die QCD dar. In der QCD sind besonders die Fälle mit niedriger Temperatur und hoher Dichte zur Berechnung mit einer neuen Methode interessant, da die Gitter QCD in diesem Bereich versagt.

Versuche, Feynman Diagramme entsprechend zu summieren, gab es bereits früher [9, 10, 11]. Diese beinhalteten allerdings nie einen entsprechenden Auswahlprozess. Häufig wurden Diagramme nur starr summiert, in der Hoffnung, am Ende ein vernünftiges Ergebnis zu erhalten. Mit Portierung der „Bold Diagrammatic Monte Carlo“ Methode besteht nun die Möglichkeit, die Erfolge auf den Bereich der Quantenchromodynamik auszudehnen. Dies würde einen generischen, erfolgreichen Weg der Feynman Diagramm Summierung in der QCD etablieren.

3 Eigene Vorhaben

Das Ziel der Doktorarbeit ist die Nutzung des „Bold Diagrammatic Monte Carlo“ Algorithmus für QCD. Es ist daher zwingend notwendig, die theoretische Grundlage der Methode auf die Quantenfeldtheorie anzugleichen. Hier müssen verschiedene Probleme erkannt und gelöst werden. Als Mittel zum Zweck wird eine neue Codebasis für Simulationen mit Hilfe des Algorithmus geschaffen werden. Der dabei entstehende Code soll leicht erweiterbar und leistungsfähig sein. Ein Teil der Arbeit wird daher aus Softwaredesign und Implementierungen bestehen.

Die Arbeit stellt einen anderen, neuen Ansatz zur Berechnung von Problemen aus der Teilchenphysik dar. Da noch keine Erfahrungen mit „Feynman Diagram Sampling“ vorliegen, wird der Aufbau der Dissertation entsprechend angepasst, um die Probleme nacheinander anzugreifen. Zunächst wird deshalb die Quantenelektrodynamik (QED) eingebaut. Dies beinhaltet die analytische Berechnung einfacher Probleme, um die Implementation der Simulation zu überprüfen. Bei schwierigeren Problemen kann zum Vergleich auf experimentelle Ergebnisse zurückgegriffen werden.

Am Ende dieses Zyklus sollte die QED [12] mit den bekannten Lösungen übereinstimmen. An dieser Stelle im Code sind nun die sehr einfach zu implementierende $U(1)$ Eichgruppe und die entsprechenden Feynman Regeln für die QED enthalten. Von hier aus ist es möglich, verschiedene Algorithmen zu testen und unter Umständen auch interessante Probleme der QED in der aktuellen Forschung, z.B. QED bei sehr starken Feldern, zu behandeln.

Die nächste Stufe stellt den Aufbau der QCD im Code dar. Hierbei muss v.a. analytisch viel Vorarbeit geleistet werden, um mögliche Probleme früh zu erkennen und Lösungen für diese zu suchen. Die Implementierung der $SU(3)$ Algebra sollte aufgrund der vorhandenen

Lösungen in der Gitter QCD kein Zeitproblem darstellen. Anfangs lohnt es sich, den reduzierten Fall der Quenched QCD [13] zu betrachten. Dies entschärft die grundlegenden Probleme und eignet sich besonders für erste Tests der Implementierung und der Methode.

Nach weiteren Optimierungen an den Algorithmen und Verfahren sowie Verbesserungen am Aufbau der Software wird der Versuch unternommen, QCD bei endlicher Dichte [14] zu behandeln. Dies ist auf dem Gitter nur sehr schwer möglich, da hier das sog. „Sign-Problem“ auftritt [15].

Damit sollen theoretische Vorhersagen für das QCD Phasendiagramm (Quark-Gluon-Plasma, Farbsupraleitung) bestätigt und neue Einsichten zum Aufbau der Materie gewonnen werden. Berechnungen von QCD mit endlicher Dichte sind relevant für superdichte Sterne und hochenergetische Schwerionen-Streuung [16].

Neben der analytischen und numerischen Arbeit wird ein Teil der Zeit für Simulationen auf QPACE 2 aufgewendet. QPACE 2 ist der Nachfolger der Supercomputers QPACE [17]. Dieser konnte sich bei seiner Einführung durch seine enorme Effizienz auf den obersten Platz der Green 500 stellen. Um den Code zur Verwendung auf QPACE 2 zu optimieren, müssen einige Probleme der fortgeschrittenen parallelen Programmierung evaluiert und überwunden werden [18].

4 Methode

Die Methode beschreibt eine neue Möglichkeit, Feynman Skelett-Diagramme zufällig auszuwählen und gewichtet zu summieren. Feynman Diagramme sind irreduzible graphische Darstellungen eines mathematischen Kerns. Der gesuchte Kern der dahinter stehenden partiellen Differentialgleichungen entspricht hierbei der Green'schen Funktion. Als Skelett-Diagramme werden Feynman Diagramme bezeichnet, die kein Selbstenergie-Unterdiagramm besitzen.

Ausgehend von der Lagrangedichte \mathcal{L} der QCD kann die Wirkung S berechnet werden. Die Bewegungsgleichungen ergeben sich nun aus dem Prinzip der kleinsten Wirkung. Dies bedeutet, dass man bei Feldern $\phi(x)$ sowie deren Ableitungen $\partial_\mu\phi$ die Wirkung

$$S = \int d^4x \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu\phi) \quad (1)$$

minimiert. Wenn das System von einer Feldkonfiguration zur Zeit t_i zu einer anderen Feldkonfiguration zur Zeit t_f übergeht, geschieht dies auf einem Pfad im Konfigurationsraum, für den S einen Extremwert annimmt. Eine Möglichkeit, physikalische Prozesse in der Teilchenphysik zu beschreiben, ist der Pfadintegralformalismus. Hierbei wird ein Funktional aufgestellt, das von der Wirkung S abhängt. Diese Methode hat Ähnlichkeit zur statistischen Mechanik. Hier werden Erwartungswerte von Operatoren O über

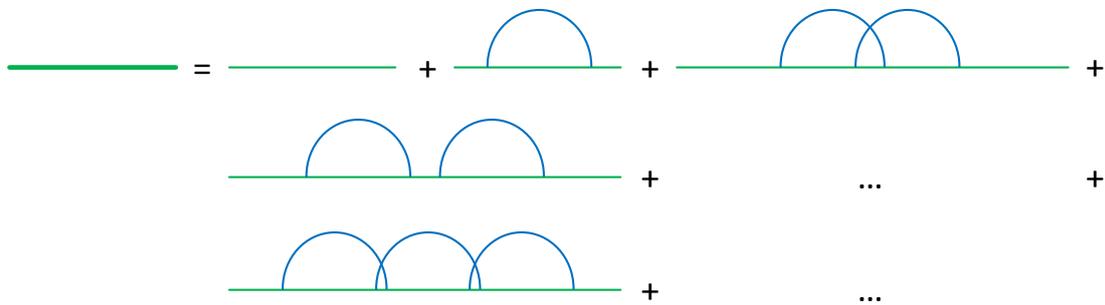
$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi O[\phi] \exp(i\mathcal{S}[\phi]) \quad \text{mit} \quad Z \equiv \int \mathcal{D}\phi \exp(i\mathcal{S}[\phi]) \quad (2)$$

berechnet. Ist man an der Zustandssumme Z interessiert, so kann man diese, über eine Entwicklung der Exponentialfunktion, in die einzelnen Feynman Diagramme zerlegen. Es ergibt sich

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\alpha_n} \int D(\alpha_n, y_1, y_2, \dots, y_n) dy_1 dy_2 \cdots dy_n, \quad (3)$$

wobei n die Diagrammordnung darstellt. Zu jeder Diagrammordnung gibt es eine Anzahl von verschiedenen Diagrammen, die durch Symmetriefaktoren unterschiedlich stark gewichtet werden müssen. Die Funktion D hängt vom Diagrammtyp α_n und den ordnungsabhängigen Wechselwirkungspunkten y_1, \dots, y_n ab.

Die Darstellung dieser mathematisch nicht-trivialen Reihe mit Hilfe von Diagrammen hat z.B. für eine Zweipunktfunktion die Form



Hierbei kann man den einzelnen Linien physikalische Bedeutungen zuordnen. Diese lassen sich wiederum mathematisch ausdrücken. Jeder Art von Linie kann man eine Funktion zuordnen, jedem Vertex einen Wert. Außerdem müssen für Probleme in der Teilchenphysik noch Impulserhaltung und Teilcheneigenschaften berücksichtigt werden.

Man kann also aus dem Pfadintegralformalismus der QED oder QCD über eine Entwicklung der Exponentialfunktion zu einer Darstellung der Theorie in Feynman Diagrammen gelangen. Aus dieser ergibt sich automatisch ein Satz Regeln für die Berechnung von Übergangsamplituden, die sogenannten Feynman-Regeln. Diese sind zur schnellen Berechnung der möglichen Diagramme essentiell. Ist diese Vorarbeit geleistet, reduziert sich die eigentliche Arbeit auf das Berechnen und Aufsummieren der entstandenen Integrale.

Mit „Bold Diagrammatic Monte Carlo“ führt man eine Transformation der eigentlichen Berechnungsebene hinzu. Im Fokus des Interesses steht dabei anfangs nicht der Wert der Integrale. Stattdessen sind nur die Diagrammtopologie sowie die eigentlichen Diagrammparameter (Integrationsvariablen) zur entsprechenden Diagrammordnung interessant. Diese werden zunächst zufällig nach einem Monte Carlo Verfahren ausgewählt. Ein möglicher Auswahlprozess ist dabei in Abbildung 1 aufgeführt.

Wichtig ist, dass bis zu diesem Zeitpunkt keinerlei Berechnungen der eigentlichen Integrale durchgeführt werden müssen. Die Methode funktioniert, da sich in einer bestimmten Ordnung verschiedene Diagramme mit einem Fehler von $1/n!$ genau aufheben. Dies wird

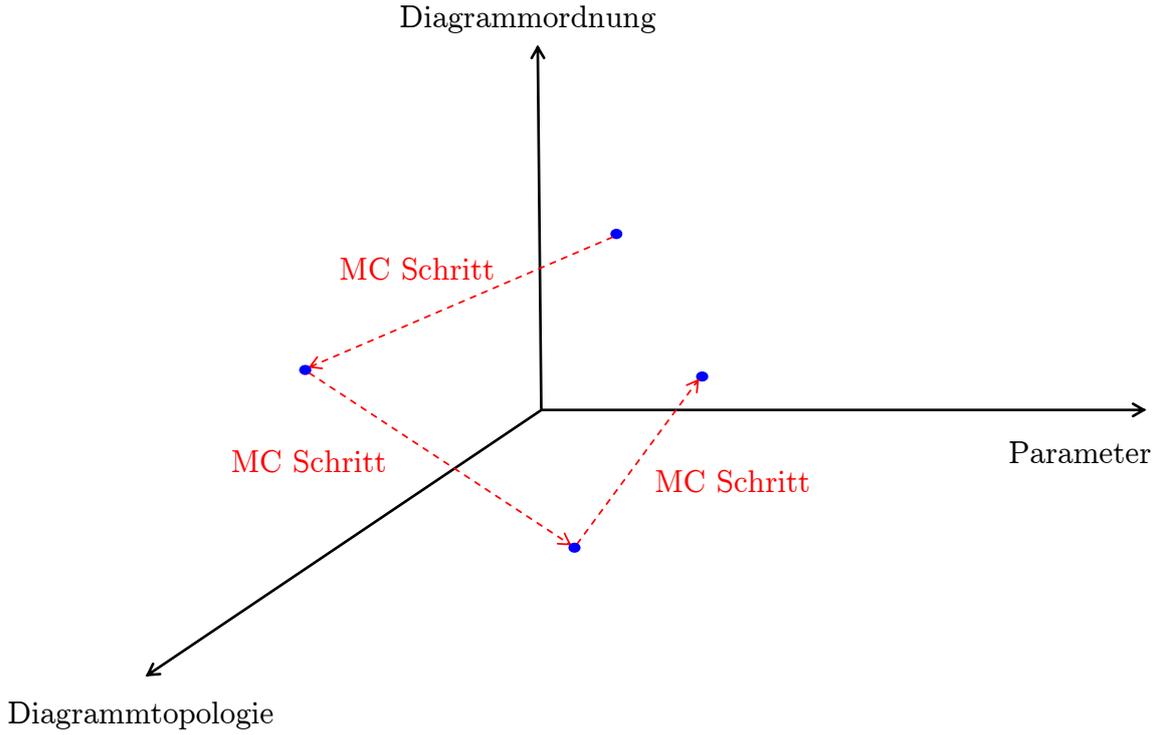


Abbildung 1: Schematischer Ablauf des zufälligen Auswahlprozesses in der Parameter-Typ-Ordnung Darstellung der Diagramme.

„Sign-Blessing“ genannt und ermöglicht, dass sich mit der faktoriell anwachsenden Anzahl an Diagrammen Konvergenz ergibt. Entscheidend hierfür ist die Verwendung von Fermionen und Pseudofermionen [19], d.h. die Behandlung von nicht-fermionischen Systemen (Spins, Bosonen) als Fermionen mit entsprechender Kopplung. Somit werden Bosonen als Paare von Fermionen angesehen.

Das eigentliche Auswählen kann über den Metropolis-Hastings Algorithmus durchgeführt werden [20]. Hierfür wird Z als Zustandssumme für ein Ensemble von Diagrammen D interpretiert. Durch Einführung einer Markov Kette werden zufällige Änderungen am System vorgenommen und Mittelwerte aus der mitgeführten Statistik berechnet. Dieser Markov Prozess führt dazu paarweise komplementäre Änderungen durch. In einem solchen Paar ist der erste Teil A damit beschäftigt, ein grafisches Element inklusive der dafür notwendigen Variablen zu erstellen, während der zweite Teil B das entsprechende Element entfernt.

Die Akzeptanzraten für die komplementären Änderungen $A - B$ sind hierbei durch

$$R_A(X) = \frac{D_i}{D_{i-1}} W(X)^{-1} \quad \text{und} \quad (4)$$

$$R_B(X) = \frac{D_i}{D_{i-1}} W(X) \quad (5)$$

gegeben. In diesen Gleichungen stellt $W(X)$ eine beliebige Verteilungsfunktion zum Generieren von speziellen Werten der neuen Variablen, aus den Änderungen von A , dar. Mit D_i

wird das Diagramm nach und mit D_{i-1} das Diagramm vor der Änderung bezeichnet.

Verbesserungen am eigentlichen Markov Prozess sind denkbar und sollten auf jeden Fall entwickelt werden [21]. Eine wichtige Rolle für das Gelingen der Resummierung stellt dabei der Gewichtungsfaktor und die Behandlung im Fall $n \rightarrow \infty$ dar. Man definiert sich hierfür eine Funktion $f_{n,N}$, welche bei $n \ll N$ in etwa $f_{n,N} \approx 1$ ist. Im Grenzfall $n \gg N$ gilt $f_{n,N} \rightarrow 0$. Die Summierung erfolgt nun mit konkret berechneten Werten c_n , so dass man

$$A_N = \sum_{n=0}^{\infty} c_n f_{n,N} \quad (6)$$

erhält. Um das Ergebnis A aus A_N zu erhalten, muss man nur noch $N \rightarrow \infty$ extrapolieren. Als Gewichtungsfunktion kann dabei die Lindelöf-Funktion [22] verwendet werden, z.B. erhält man für zwei Parameter n und N

$$f_{n,N} = \exp(-(n/N) \ln(n/N)). \quad (7)$$

Mit Hilfe dieser ist es möglich, die Diagramme nach der Auswahl in einer Rechnung zusammenzufassen. Das Berechnen des Wertes c_n eines einzelnen Diagramms stellt hierbei noch den geringsten Aufwand dar, da hier bereits seit Jahren aktive Forschungsarbeit betrieben wird [23, 24, 25]. Abschließend wird der finale Wert entsprechend extrapoliert.

5 Zusammenfassung

Die Arbeit setzt sich zum Ziel, eine neue, zur Gitter QCD alternative Methode für Berechnungen in der QCD einzuführen. Diese Methode soll v.a. in Bereichen, in denen die Gitter QCD nur stark eingeschränkt funktioniert, eingesetzt werden können. Zur Umsetzung der Arbeit wird zunächst die QED implementiert, um die Methode am einfacheren Modell zu testen und relativ früh erste Ergebnisse zu erzielen. Zur erfolgreichen Umsetzung müssen einige analytische und numerische Probleme überwunden werden. Ein Großteil der Arbeit besteht daher aus analytischen Rechnungen und numerischen Analysen.

Der dabei entstehende Simulationscode soll zur weiteren Verwendung öffentlich gemacht werden und den Anstoß für weitere Entwicklungen im Bereich des Feynman Diagram Sampling geben. Hierfür ist eine starke Kooperation mit den ursprünglichen Entwicklern der „Bold Diagrammatic Monte Carlo“ Methode geplant. Ein Teil der Simulationen soll auf dem zukünftigen Supercomputer QPACE 2 laufen. Dies motiviert entsprechende Optimierungen im Code und in der Architektur von QPACE 2. Die im Laufe der Dissertation entstehende Applikation soll daher nicht nur auf klassischen Clustern, sondern auch auf Many-Core und hybriden Systemen optimiert ausgeführt werden können.

Literaturverzeichnis

- [1] L. Lellouch, R. Sommer, B. Svetitsky, A. Vladikas, and L. F. Cugliandolo. Modern perspectives in lattice QCD: Quantum field theory and high performance computing. Proceedings, International School, 93rd Session, Les Houches, France, August 3-28, 2009. 2011.
- [2] M. Hanada, Y. Matsuo, and N. Yamamoto. Sign problem and phase quenching in finite-density QCD: models, holography, and lattice. 2012.
- [3] N. Prokof'ev and B. Svistunov. Bold Diagrammatic Monte-Carlo Technique: When the Sign Problem Is Welcome. *Phys. Rev. Lett.*, 99:250201, Dec 2007.
- [4] N. Prokof'ev and B. Svistunov. Bold diagrammatic Monte Carlo: A generic technique for polaron (and many-body?) problems. *ArXiv e-prints*, January 2008.
- [5] B. Capogrosso-Sansone, Şebnem Güneş Söyler, N. Prokof'ev, and B. Svistunov. Monte Carlo study of the two-dimensional Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. A*, 77:015602, Jan 2008.
- [6] N. Prokof'ev and B. Svistunov. Polaron Problem by Diagrammatic Quantum Monte Carlo. *Phys. Rev. Lett.*, 81:2514–2517, Sep 1998.
- [7] A. Schirotzek, C.-H. Wu, A. Sommer, and M. W. Zwierlein. Observation of Fermi Polarons in a Tunable Fermi Liquid of Ultracold Atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 102:230402, Jun 2009.
- [8] E. Kozik, K. Van Houcke, E. Gull, L. Pollet, N. Prokof'ev, B. Svistunov, and M. Troyer. Diagrammatic Monte Carlo for correlated fermions. *EPL (Europhysics Letters)*, 90(1):10004, 2010.
- [9] J. N. Corcoran, U. Schneider, and H.-B. Schüttler. Perfect Stochastic Summation in High Order Feynman Graph Expansions. *Int. J. Mod. Phys. C*, 17(11):1527–1549, 2005.
- [10] C. Liu. *Monte Carlo and Self-Consistent Feynman Diagram Studies of Magnetic and Correlated Electron Models*. Dissertation, University of Georgia, 2002.
- [11] A. Voigt, C. Liu, and H.-B. Schüttler. Stochastic Feynman diagram summation for the

Literaturverzeichnis

- Anderson impurity model. *APS Meeting Abstracts*, 2002.
- [12] A. Grozin. Lectures on QED and QCD. *APS Meeting Abstracts*, 2002.
- [13] J. B. Kogut, M.-P. Lombardo, and D. K. Sinclair. Quenched QCD at finite density. *Phys. Rev. D*, 51:1282–1291, Feb 1995.
- [14] D. J. Gross, R. D. Pisarski, and L. G. Yaffe. QCD and instantons at finite temperature. *Rev. Mod. Phys.*, 53:43–80, Jan 1981.
- [15] J. Bloch and T. Wettig. The QCD sign problem and dynamical simulations of random matrices. *JHEP*, 1105:048, 2011.
- [16] T. Klahn, D. Blaschke, and R. Lastowiecki. Compact Stars, Heavy Ion Collisions, and Possible Lessons For QCD at Finite Densities. 2011.
- [17] H. Baier, H. Boettiger, M. Drochner, N. Eicker, U. Fischer, et al. QPACE: A QCD parallel computer based on Cell processors. *PoS*, LAT2009:001, 2009.
- [18] F. Lu, J. Song, F. Yin, and X. Zhu. Performance evaluation of hybrid programming patterns for large CPU/GPU heterogeneous clusters. *Computer Physics Communications*, 183(6):1172 – 1181, 2012.
- [19] N. Prokof'ev and B. Svistunov. From Popov-Fedotov trick to universal fermionization. 2011.
- [20] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *J. Chem. Phys.*, 21(6):1087–1092, 1953.
- [21] J. Ray, A. Pinar, and C. Seshadhri. Are we there yet? When to stop a Markov chain while generating random graphs. *CoRR*, abs/1202.3473, 2012.
- [22] E. Lindelöf. Sur l'application de la théorie des résidus au prolongement analytique des séries de Taylor. *J. Math.*, 9:213–221, 1903.
- [23] J. Hakkinen and H. Kharraziha. COLOR: A Computer program for QCD color factor calculations. *Comput. Phys. Commun.*, 100:311–321, 1997.
- [24] R. Harlander and M. Steinhauser. Automatic computation of Feynman diagrams. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, 43:167–228, 1999.
- [25] M. Fischler, E. Boos, D. Broadhurst, S. Eidelman, S. Groote, R. Harlander, S. Heine-meyer, and T. et al. Ishikawa. Summaries of recent computer-assisted Feynman diagram calculations. *AIP Conference Proceedings*, 583(1):280–284, 2001.