

# Quarks auf dem Gitter

Das Vakuum der Quantenchromodynamik ist nicht leer. Computersimulationen eröffnen den Zugang zur Femtowelt der Hadronen.

Thomas Lippert und Klaus Schilling

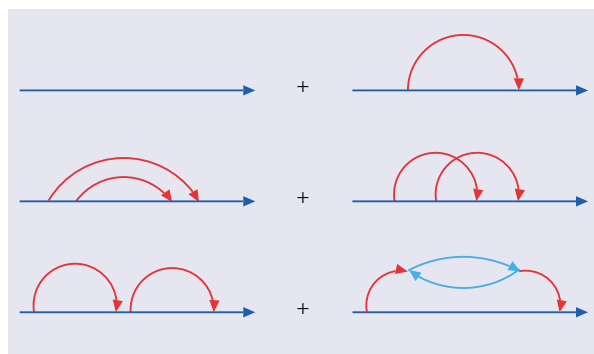
Der Reduktionismus der Elementarteilchenphysik scheint für das reale Experiment auf dem Niveau der Quarks offenbar am Ende angelangt, denn Quarks lassen sich nicht als Einzelobjekte isolieren und im Labor manipulieren. Sie kommen vielmehr – in Folge der Struktur des Vakuums – nur als eingeschlossene Bestandteile von Hadronen vor. Nur durch Experimente im „Computerlabor“, d. h. durch Simulationen auf Höchstleistungsrechnern, gelingt es, die Eigenschaften von Hadronen im Rahmen der Quantenchromodynamik als der fundamentalen Theorie der starken Wechselwirkung zu berechnen. Der Vergleich mit gemessenen Hadronendaten erlaubt es dann, die Massen und andere Parameter der Quarks zu extrahieren.

Vor hundert Jahren hat Albert Einstein aus geometrischen Überlegungen im Rahmen seiner speziellen Relativitätstheorie die Äquivalenz zwischen Masse und Energie hergeleitet, welche zur wohl berühmtesten Formel der Physik wurde:

$$E = mc^2$$

Heute wissen wir sehr wohl, dass die Spaltung eines Atomkerns eine gewaltige Energie freisetzen kann. Sie ist zu verstehen als Folge des Massendefektes der Spaltprodukte,  $M_A > M_B + M_C$ , im Zerfall  $A \rightarrow B + C$ . Dabei liegt die nukleare Bindungsenergie pro Nukleon zwar mit einigen MeV fünf Größenordnungen über der atomaren Energieskala, beträgt aber nur einige wenige Promille der Nukleonmasse ( $\sim 939$  MeV). Der Hauptanteil der Kernmasse ist also durch die Summe der Konstituentenmassen gegeben. Folglich lässt sich die Bindung der Nukleonen im Kernverband mit den Methoden der nichtrelativistischen Schrödinger-Theorie berechnen.

Erst um 1968 gelang es im Experiment, die Substruktur der Nukleonen nachzuweisen: Bei inelastischen Stößen zwischen Elektronen mit Energien im GeV-Bereich und Protonen wurden im Endzustand hadronische „Trümmer“ erzeugt, aus deren Verteilungen man auf punktförmige Konstituenten des Protons schließen konnte. Diese Konstituenten wurden (über das Studium von sog. Summenregeln) mit den Quarks in Verbindung gebracht, die Gell-Mann und Zweig zuvor als mathematische Objekte mit drittelzahliger Elektronenladung eingeführt hatten. Damit war es ihnen gelungen, das empirisch reichhaltige Spektrum der Elementarteilchen mit



**Abb. 1:** Da die Feinstrukturkonstante  $\alpha_c$  klein ist, lässt sich die Propagation eines Elektrons (blau) systematisch in Ordnungen von  $\alpha_c$  berechnen. Bis zur Ordnung  $\alpha_c^2$  gibt es wegen der Ladungsneutralität des Photons nur sechs Feynman-Diagramme zu den möglichen Quantenfluktuationen mit virtuellen Photonen (rot) und Elektron/Positron (hellblau).

gruppentheoretischen Methoden nach der so genannten SU(3)-Flavour-Symmetrie zu ordnen und qualitativ zu erklären. In diesem Schema lassen sich die im Experiment beobachteten Hadronen als gebundene Zustände von Valenzquarks auffassen, die durch die starke Wechselwirkung zusammengehalten werden.

Das leichteste Hadron ist das Pion. Es ist instabil, zerfällt über die schwache Wechselwirkung in Leptonen und besitzt eine Masse von etwa 140 MeV. Nach dem einfachen Quarkmodell von Gell-Mann und Zweig besteht es aus einem Quark und einem Antiquark, während das Proton als leichtestes stabiles Hadron aus drei Quarks aufgebaut ist. Die so genannten u- und d-Quarks als die Konstituenten dieser Hadronen sind im Vergleich dazu allerdings extrem leicht, mit Massen von nur wenigen MeV! So wie das Proton das Hundertfache seiner drei Konstituentenmassen auf die Waage bringt, bestehen Hadronmassen generell hauptsächlich aus Feldenergie, ganz im Sinne der Einsteinschen Masse-Energie-Beziehung. Daher ist die Bestimmung hadronischer Bindungszustände ein *ultrarelativistisches* Problem.

Im Rahmen des Standardmodells der Teilchenphysik ist die Quantenchromodynamik (QCD) die fundamentale Theorie der starken Wechselwirkung. Über die Quarkmassen sowie die Matrixelemente, die den schwachen Zerfall der Quarks charakterisieren, macht die QCD jedoch keine Aussage. Diese Größen sind im Rahmen der QCD freie Parameter, müssen jedoch auf einige Prozent genau bekannt sein, wenn man das Standardmodell besser verstehen möchte. Gelingt es, das einzigartige Problem der Berechnung von gebundenen Hadronen zu lösen, so ließen sich die charakteristischen Quarkparameter aus der Empirie von Spektrum und schwachen Zerfällen der Hadronen erschließen.

Dr. Dr. Thomas Lippert, Zentralinstitut für Angewandte Mathematik, Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425 Jülich, und Prof. Dr. Klaus Schilling, Fachbereich Physik, Bergische Universität Wuppertal, Gausstraße, 42097 Wuppertal

### Das theoretische Szenario

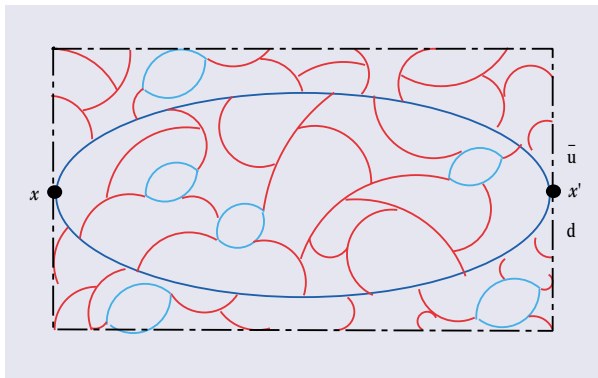
Die starke Wechselwirkung ist durch eine Reichweite im Femtometerbereich gekennzeichnet. Nach der Heisenbergschen Unschärferelation,  $\Delta x \Delta p \approx \hbar$ , begegnet man auf dieser Längenskala hinreichend großen Quantenfluktuationen in der Energiedichte, sodass über die starke Wechselwirkung die Erzeugung und Vernichtung von virtuellen Teilchenpaaren der Art

$$\text{Feldenergie} \rightarrow u\bar{u} + d\bar{d} \rightarrow \text{Feldenergie}$$

ins Spiel kommt. Dies bedeutet anschaulich, dass ein Proton nicht wie im einfachen Quarkmodell lediglich aus exakt drei Valenzquarks besteht, sondern zu einem wesentlichen Teil auch aus einem See von fluktuierenden Quarks- und Antiquarks. Die Dynamik solcher Effekte spielt für die Bestimmung der Hadronstruktur eine wesentliche Rolle. Ihrer Berechnung dient der hochentwickelte Apparat relativistischer Quantenfeldtheorien.

Die QCD hat ebenso wie die relativistische Quantenelektrodynamik (QED) die Struktur einer lokalen Eichfeldtheorie [1]. Dem elektrisch geladenen Elektron entsprechen dabei die Quarks, die drei mögliche „Farb-

**Abb. 2:** Bei der Propagation der  $\bar{u}, d$ -Valenzquarks (dunkelblau) des Pions von  $x$  nach  $x'$  im Hintergrundfeld des fluktuierenden QCD-Vakuums (im Ausschnitt gezeigt) tragen alle Ordnungen der Kopplungskonstante gleichermaßen bei. Rote Linien stehen für Gluon-Fluktuationen, hellblaue für Quark-Fluktuationen.



ladungen“ tragen können, aber nur in „farbneutralen“ Kombinationen als Hadronen beobachtet werden. Das Pendant zum Photon  $\gamma$ , dem Feldquant der elektromagnetischen Wechselwirkung, bildet ein Oktett von so genannten Gluonen, die die Farbkraft zwischen den Quarks vermitteln. Ein fundamentaler Unterschied zwischen beiden Theorien besteht darin, dass das Photon selbst keine elektrische Ladung trägt, die Gluonen aber „farbgeladen“ sind und dadurch – im Gegensatz zum Photon – auch untereinander wechselwirken können.

### Computersimulation des Vakuums

Während die QED wegen der Kleinheit der elektromagnetischen Kopplung  $\alpha_e = e^2/\hbar c \approx 1/137$  (Feinstrukturkonstante) mit Methoden der Störungstheorie auskommt, ist die ab-initio-Berechnung von Hadronen nur über Computersimulationen der QCD möglich. An dieser Stelle kommt die Gittereichtheorie [2] ins Spiel. Wir werden sehen, dass man letztere charakterisieren könnte als eine numerische Technik, um Momentaufnahmen des fluktuierenden QCD-Vakuums zu „produzieren“.

Das QCD-Vakuum, der Zustand niedrigster Energie der Theorie, ist dabei keineswegs leer, wie der Begriff „Vakuum“ suggerieren könnte. Vielmehr kann man es als ein Hintergrundfeld ansehen, das im Femtometerbereich durch alle möglichen Quantenfluktuationen von Gluonen und Paarerzeugungs- und Vernichtungsprozessen geprägt ist. Bringt man die Valenzquarks etwa des Protons in dieses Medium ein, so reagieren sie als „Probeteilchen“ mit diesen Quantenfluktuationen und

erfahren auf diese Art eine starke Wechselwirkung und damit auch die Bindung zum farbneutralen hadronischen Zustand. Mit anderen Worten: Die eingebrachten Probeteilchen propagieren nicht im leeren Raum, sondern im Hintergrundfeld der Quantenfluktuationen des QCD-Vakuums. Daher ist es für die Berechnung der Hadroneigenschaften essenziell, das QCD-Vakuum zu verstehen.

Bevor wir auf die praktischen Aspekte dieser Berechnung eingehen, ist es nützlich, sich noch einmal die entsprechende Situation im Falle der QED zu vergegenwärtigen: Dort ist das Vakuum in der niedrigsten Ordnung ( $n=0$ ) der Störungstheorie nach Potenzen von  $\alpha_e$  tatsächlich leer, d. h. das Elektron bewegt sich wie ein freies Teilchen. Beim Übergang von der  $n$ -ten zur  $n+1$ -ten Ordnung tritt jeweils eine zusätzliche Fluktuation in Form virtueller Prozesse  $\gamma \rightarrow e^+e^- \rightarrow \gamma$  oder  $e^\pm \rightarrow e^\pm + \gamma \rightarrow e^\pm$  hinzu. Der Beitrag von  $n$  solchen Quantenfluktuationen ist um einen Faktor  $\alpha_e^n$  gegenüber der freien Propagation unterdrückt. Dies ergibt ein Berechnungsschema, in dem man sich auf einige wenige Ordnungen beschränken kann, deren kombinatorische Vielfalt man sich in Form von Feynman-Diagrammen veranschaulichen kann. Abb. 1 illustriert z. B. die Propagation eines Elektrons bis zur Ordnung  $\alpha_e^2$ .

In der QCD ist die Kopplung  $\alpha_s$  jedoch in der Größenordnung von eins, sodass man von vornherein mit einem Vakuum konfrontiert ist, in dem sämtliche Ordnungen der Störungstheorie in ähnlicher Stärke beitragen: Das QCD-Vakuum ist ausgefüllt von Quantenfluktuationen aus virtuellen Gluonen und Quarks. Daher ist die Störungstheorie am Ende ihrer Kunst. Abb. 2 veranschaulicht diese komplexe Situation: Um hier weiterzukommen, braucht man ein ganz neues, nichtstörungstheoretisches Verfahren!

Die Grundlage für einen solchen Zugang zur relativistischen Quantenphysik jenseits der Störungstheorie basiert auf einem von Dirac vorgebrachten und von Feynman später ausgearbeiteten Vorschlag [3], die Quantenfluktuationen als wellenmechanische Abweichungen von der klassischen Trajektorie eines Systems im Sinne des Huygensschen Prinzips zu formulieren, mit welchem dieser schon 1690 Phänomene der Optik wie Brechung und Beugung erklären konnte. Huygens beschreibt bekanntlich die Lichtfortpflanzung als Superposition aller denkbaren Punkt-zu-Punkt-Vielfachstreuungen im Sinne punktförmiger Quellen von Kugelwellen, sodass die Lichtausbreitung allen möglichen Pfaden im Raum folgt. Analog dazu wird die Übergangsamplitude für die zeitliche Evolution eines Quantensystems von einem Anfangszustand  $|A\rangle$  in einen Endzustand  $|B\rangle$  als Überlagerung von Beiträgen über alle möglichen Verbindungswege (Zwischenzustände) zwischen diesen beiden Punkten im Zustandsraum des Systems aufgefasst:

$$\langle B, t_B | A, t_A \rangle = \sum_{\text{alle Pfade}} \exp[iS_{\text{Pfad}}(A \rightarrow B)]$$

Die in dieser „Pfadintegralformulierung“ auftretende Summe ist im Falle einer Quantenfeldtheorie ein Funktionalintegral über alle Feld- oder System-Trajektorien, welche die beiden Feldzustände  $|A\rangle$  (zur Zeit  $t_A$ ) und  $|B\rangle$  (zur Zeit  $t_B$ ) im Zustandsraum miteinander verbinden. Die im Phasengewicht auftretende Wirkung  $S$  selbst ist ein Raum-Zeit-Integral,

$$S_{\phi, \psi} = \int_{t_A}^{t_B} dt \int d^3x L_{\text{QCD}}[\phi(\vec{x}, t), \psi(\vec{x}, t)],$$

wobei die Lagrange-Dichte  $L_{\text{QCD}}(\phi, \psi)$  als Funktion der Quantenfelder ( $\phi$  und  $\psi$  bezeichnen generisch die Gluon- und Quarkfelder) zu sehen ist. Das räumliche Integral erstreckt sich über das gesamte Systemvolumen.

Der skizzierte Pfadintegralformalismus zur nicht-störungstheoretischen Beschreibung der QCD benötigt jedoch noch zwei wesentliche Ingredienzen, bevor er sich den numerischen Methoden der Computational Physics erschließt [4]:

► Man kann durch analytische Fortsetzung von der reellen Zeitachse übergehen zu rein imaginärer Zeit,  $t = i\tau$ , was formal dem Übergang von der Minkowski-Metrik zur Euklidischen Raumzeit-Metrik entspricht. Dadurch werden die stark oszillierenden und daher numerisch kaum beherrschbaren Phasengewichte zu Boltzmann-ähnlichen Gewichten und die Superposition über alle Systempfade nimmt die Form einer Zustandssumme im Sinne der Statistischen Physik an:

$$\sum \exp[iS_{\text{Pfad}(A \rightarrow B)}] \rightarrow \sum \exp[-S_{\text{Pfad}(A \rightarrow B)}]$$

► Die Summe ist mathematisch gesehen ein Funktionalintegral, das sich über alle Feldzustände  $\phi, \psi$  erstreckt, welche  $|A, t_A\rangle$  und  $|B, t_B\rangle$  miteinander verbinden können. Weil die Felder aber ihrerseits Funktionen von  $(\vec{x}, t)$  sind, beinhaltet dies je ein Integral pro Koordinatenwert von  $(\vec{x}, t)$ , d. h. im Endeffekt ein überabzählbar unendlich-faches Integral. Handhaben lässt sich dieses Problem erst durch den Übergang vom Raum-Zeit-Kontinuum auf ein diskretes Raum-Zeit-

Gitter (daher die Bezeichnung „Gittereichtheorie“). Man nimmt gewöhnlich hyperkubische Gitter  $L^3 \times T$  mit periodischen Randbedingungen und „setzt“ das Quarkfeld  $\psi$  (als Farb-Triplett) auf die Gitterpunkte, während das Gluonfeld  $\phi$  (als SU(3)-Matrix im Farbraum) auf den Verbindungslinien zwischen benachbarten Gitterpunkten „lebt“.

Eine solche Diskretisierung der QCD erinnert sehr an die Modellierung eines kristallinen Festkörpers mit „Nächster-Nachbar-Wechselwirkung“ (siehe Kasten im Artikel von Kurt Binder). Die physikalische Auflösung unseres Gitters wird durch die Wahl der Kopplungsstärke in der Lagrange-Funktion gesteuert und muss natürlich hinreichend hoch sein im Hinblick auf die charakteristischen physikalischen Längen des Problems. Gleichzeitig muss das durch das Gitter dargestellte physikalische Raum-Volumen hinreichend groß sein im Verhältnis zur Ausdehnung der betrachteten Hadronen.

Als Folge dieser Forderungen hat es die Gittereichtheorie mathematisch mit sehr hochdimensionalen Integralen ( $L^3 \times T \approx 16^3 \times 32$  und größer) über die Felder  $\psi$  und  $\phi$  zu tun. Die Gluonfelder sind dabei in der Euklidischen Welt mit den klassischen Methoden der Monte-Carlo-Integration mit „Importance Sampling“ zu bewältigen (siehe Kasten im Artikel von Kurt Binder). Da sich das Pfadintegral über die Quarkfelder  $\psi$  als Gauss-Integral sogar analytisch ausführen lässt, sind im Endeffekt die darzustellenden Quantenfluktuationen des Vakuumzustands der QCD,  $|0\rangle$ , im Pfadintegralfor-

### Wettlauf der QCD-Rechner

Aufgrund des extrem großen Rechenzeitbedarfs der Gitter-QCD, der von anteilig genutzten Höchstleistungsrechnern alleine nicht abgedeckt werden kann, gingen einige Gittergruppen schon Anfang 1980 dazu über, mit Supercomputer-Herstellern zu kooperieren und QCD-optimierte Systeme in Eigenregie zu entwerfen. Beispiel für eine Maschine der *ersten Generation* ist das GF11-System, gebaut bei IBM in Yorktown-Heights, das bei Projektstart 1983 auf die damals gigantische Spitzenleistung von 11 Gigaflops ( $1,1 \times 10^{10}$  Fließkommaoperationen pro Sekunde) abzielte, aber erst nach einer Dekade in Betrieb ging. Der Kostenvorteil solcher Selbstbau-Systeme – im Vergleich zu kommerziellen Geräten – beruhte damals wie heute auf der Verwendung von Chipkomponenten älterer Technologie und einem Mesh-Netzwerk, das für die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung der QCD gut geeignet ist und im Verein mit dem datenparallelen Betriebsprinzip eine hohe Skalierbarkeit aufweist.

► **APE (Italien/Deutschland).** Die italienische INFN-Gruppe in Rom und Pisa begann 1984 mit dem

Bau des ersten APE-Systems (Array Processor Element), das eine Spitzenleistung von 1 Gigaflops erzielte. Nach dem erfolgreichen APE100-Rechner (1993, 100 Gigaflops) und APEmille (2000, 1 Teraflops) stehen INFN und DESY kurz vor dem Prototypen von apeNEXT. Der Chip ist für QCD-Matrix-Vektor-Multiplikationen optimiert, bei einem balancierten Verhältnis von Memory-Zugriff zu CPU-Leistung und Dimensionierung des Netzwerks. Bei einer Abwärme von etwa 20 W/Gigaflops ist apeNEXT auf eine Kosteneffizienz von etwa 1 Euro/Megaflops ausgelegt. Italien will mehrere Teraflops installieren, die Realisierung der in Deutschland anvisierten Leistung von über 10 Teraflops (effektiv) bei DESY und GSI erscheint mittlerweile fraglich.

► **QCDOC (USA/UK).** Die Nase vorn unter den Selbstbauern hat derzeit die Columbia-Gruppe mit ihrem QCDOC-Rechner (QCDOC-on-chip), als Nachfolger des QCDSP-Systems ebenfalls ein Rechner der *vierten Generation*. Der Chip wurde aus Standard-Komponenten des Power3-Prozessors integriert, bei einer Ab-

wärme von nur etwa 10 W/Gigaflops. QCDOC skaliert für QCD-Codes selbst bei kleinen Gittern bis hin zu tausenden von Prozessoren. Ein Prototyp mit 256 Prozessoren arbeitet bereits. Auch hier wird eine Kosteneffizienz von 1 Euro/Megaflops angestrebt, wobei USA und UK bis 2006 die Installation von über 20 Teraflops (effektiv) planen. QCDOC wurde übrigens zum Vorbild für BlueGene/L, der 2005 zur Berechnung der Protein-Faltung mit einer Peak-Leistung von 360 Teraflops an den Start gehen soll.

► **CPPACS (Japan).** Gänzlich andere Pfade schlug die Tsukuba-Gruppe ein. Sie hat 1996 zusammen mit Hitachi den CPPACS-Supercomputer mit einer Spitzenleistung von 640 Gigaflops bei über 50 % Effizienz konstruiert, ein General-purpose-System aus Vektorprozessoren mit innovativer Sliding-window-Technologie, das einige Jahre die TOP500-Liste der schnellsten Rechner der Welt angeführt hat und auch heute noch einer der stärksten QCD-Computer ist. Allerdings ist das Preis-Leistungs-Verhältnis um Faktoren schlechter als bei Selbstbau-Systemen. CP-

PACS wurde von Hitachi kommerzialisiert. Japanische Gitter-Gruppen planen bis 2007 Upgrades auf über 20 Teraflops (effektiv).

► **PC-Cluster.** Ernsthaftige Konkurrenz haben QCDOC und apeNEXT von QCD-optimierten PC-Clustern bekommen. Erste große Pilotsysteme in den USA und an den Universitäten Budapest und Wuppertal haben gezeigt, wie man QCD parallel auf hunderten von PCs simuliert. Bereits heute kann man Systeme mit einer Effizienz  $< 1$  Euro/Megaflops bauen. Die Kommunikation wird über ein Gigabit-Ethernet-Mesh oder Grid geführt, sodass man nicht auf teure Netze wie Myrinet oder Infiniband zurückgreifen muss. In Kürze wird an der Universität Wuppertal mit ALiCenext ein 1024-Prozessor-Cluster installiert, mit einer effektiven Leistung von 1,5 Teraflops. Zusätzlich mit einem Gigabit-Ethernet Crossbar-Netz ausgestattet, soll es ebenfalls für allgemeine Probleme der Computational Science sowie im Hochenergie-Grid eingesetzt werden. In den USA sind bis 2006 QCD-Cluster mit einer effektiven Leistung bis 10 Teraflops geplant.



malismus nichts anderes als Beiträge zu einer Zustands-  
summe über gluonische Feldverteilungen  $\{\phi\}$ . Diese  
treten jeweils mit Gewicht

$$P\{\phi\} = \exp[-\tilde{S}_{\{\phi\}}]$$

auf. Die gluonische Wirkung  $\tilde{S}$  enthält aber – durch die  
ausintegrierten Seequarkzustände induziert – eine lang-  
reichweitige Wechselwirkung, deren Implementierung in  
der Simulation eines zusätzlichen Monte-Carlo-Prozesses  
bedarf und dadurch äußerst rechenzeitintensiv wird.

An dieser Stelle bestand für die Gittereichtheorie  
über lange Zeit ein unüberwindlicher Ressourceneng-  
pass. So verzichtete man bis in die neunziger Jahre hin-  
ein weitgehend auf die Berücksichtigung von Seequarks  
und beschränkte sich auf Simulationen in der sog. Valenz-  
quarknäherung (Stichwort „quenched QCD“ oder Yang-  
Mills-Theorie (YMT)<sup>1)</sup>), die um mindestens zwei  
Größenordnungen weniger aufwändig als Simulationen  
der vollen Theorie sind.

Bei den extremen Anforderungen, welche die Gitter-  
QCD an die verfügbare Computerleistung und Daten-  
haltung stellt, können nur solche Arbeitsgruppen welt-  
weit konkurrieren, die Zugang zu Rechnern der interna-  
tionalen Leistungsspitze haben, wie sie an nationalen  
Großrechenzentren wie dem John von Neumann-Insti-  
tut für Computing – vormals Höchstleistungsrechen-  
zentrum (HLRZ) – zur Verfügung stehen. Neben der  
Nutzung von Höchstleistungsrechnern wie der CRAY  
T3E und dem neuen Supercomputer IBM p690 der 10-  
Teraflops-Klasse des Zentralinstituts für Angewandte  
Mathematik des FZ-Jülich, werden in Deutschland seit  
etwa zehn Jahren QCD-Spezialrechner der APE-Linie  
als Simulations-Backend eingesetzt, die am DESY/  
Zeuthen im Rahmen des NIC sowie an der Universität  
Bielefeld betrieben werden. Theoretische Physiker in

New York, Yorktown Heights, Rom und Tsukuba haben  
solche Systeme seit Beginn der achtziger Jahre entwi-  
ckelt [5]. In jüngster Zeit werden so genannte Cluster-  
computer, d. h. große Rechnerbündel aus Standard-PCs  
sowie schnellen Gigabit-Vernetzungen wie Myrinet  
oder auch Gigabit-Ethernet, immer beliebter, da diese  
leicht auf die Bedürfnisse der Gitter-QCD zugeschnit-  
ten werden und QCD-Codes sehr effektiv ausführen  
können [6]. Ein Überblick über derzeitige Maschinen-  
Entwicklungen ist auf S. 67 zu finden.

### Einige Meilensteine der Gittereichtheorie

Einige markante Beispiele sollen nun illustrieren,  
welche Fortschritte beim Verständnis der starken  
Wechselwirkung mit den Möglichkeiten der Computer-  
simulation erreicht wurden.

**Mechanismus des Farbeinschlusses:** Die Gittereich-  
theorie erlebte 1979 ihren eigentlichen Durchbruch  
mit einer bahnbrechenden Simulation der Yang-Mills-  
Theorie durch M. Creutz [7]. Er beobachtete als erster  
eindeutig, dass das Potential zwischen zwei statischen  
Farbladungen  $Q$  und  $\bar{Q}$  asymptotisch linear ansteigt,  
wenn man den Abstand zwischen den Farbladungen  
vergrößert. Es gibt hier also keine endliche „Ionisa-  
tionsenergie“ wie beim Coulomb-Potential zwischen  
zwei entgegengesetzten Ladungen, die sich voneinan-  
der trennen lassen: eine klare Evidenz für den Ein-  
schluss von Farbladungen. Dieser Anstieg lässt sich  
einer Modellvorstellung von 't Hooft zufolge durch eine  
Analogie zur Supraleitung erklären: Im Gegensatz zum  
Kondensat von Elektronen-Paaren (Cooper-Paare) in  
einem gewöhnlichen Supraleiter wirkt das Yang-Mills-  
Vakuum demnach wie ein Kondensat aus Paaren von  
magnetischen Monopolen und Antimonopolen. So wie  
beim herkömmlichen Meissner-Effekt die magnetischen  
Feldlinien aus dem Kondensat verdrängt werden, wür-  
den die chromoelektrischen Feldlinien zwischen zwei  
statischen Farbladungen auf einen sehr engen, linearen  
Flussschlauch komprimiert.<sup>2)</sup> Die konstante Energie-  
dichte dieses Schlauchs führt zum linearen Anstieg des  
Potentials. Diese Situation ist grundverschieden von  
der bekannten elektrostatischen Feldverteilung um ein-  
en elektrischen Dipol. Erst ein Jahrzehnt später, mit  
dem Aufkommen leistungsfähiger Parallelrechner und  
nach zahlreichen methodischen Verbesserungen, gelang  
es durch Simulation der YMT auf Rechnern der 1-Gi-  
gaflops-Klasse, diese Modellvorstellung zu verifizieren  
(Abb. 3).

Nach Übergang in die sog. maximal abelsche  
Eichung können die in der Simulation bestimmten  
chromoelektrischen und -magnetischen Feldverteilun-  
gen in der Tat im Sinne der Ginzburg-Landau-Theorie  
der Supraleitung interpretiert werden [9].

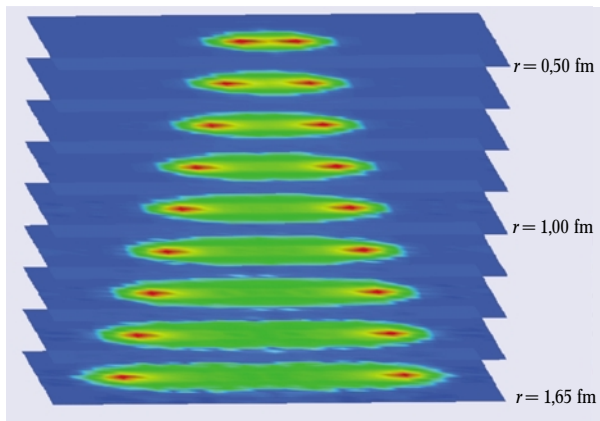
**Was bewirken die Seequarks?** Ab 1994 verfügte die  
deutsche Gitter-Community über Parallelrechner des  
Typs APE100 im 20-Gigaflops-Bereich, die als QCD-  
Spezialrechner vom italienischen INFN entwickelt  
worden waren. Das am HLRZ durchgeführte SESAM-  
Projekt<sup>3)</sup> stellte sich der Herausforderung, Seequark-  
effekte aus QCD-Vakuumfeldern direkt nachzuweisen  
[10]. Dazu wurden in einem europäischen, per Internet  
vernetzten „Computerexperiment“ QCD-Vakuumkon-  
figurationen am DESY/Zeuthen, am INFN/Rom und  
in Wuppertal „produziert“, die dann als Grundlage  
dienten, um auf den CRAY-Rechnern des ZAM in Jülich  
verschiedene Größen zu „messen“. In einer Laufzeit  
von fünf Jahren wurden nach integraler Rechenzeit von

1) Dies ist eine rein gluonische Theorie mit fermionischen äußeren Quellen

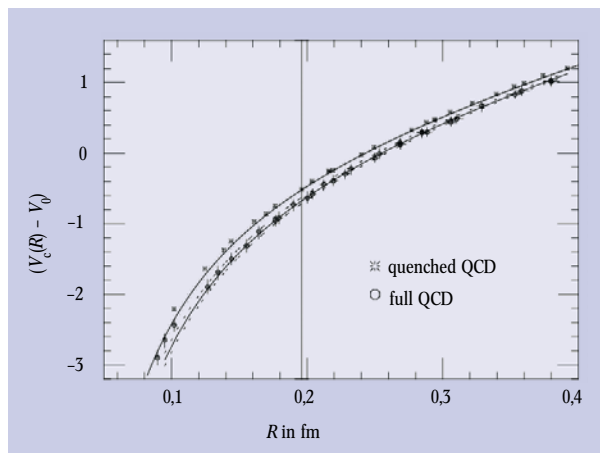
2) Da die Rollen von  $\vec{E}$  und  $\vec{B}$ -Feldern vertauscht sind, spricht man in diesem Zusammenhang auch von einem dualen Supraleiter.

3) SESAM ist ein Akronym für „Sea Quark Effects on Spectrum and Matrix Elements“.

**Abb. 3:** Wächst der Abstand  $R$  zwischen statischen Farbladungen (Quark und Anti-quark, rot) adiabatisch ( $0,5 \text{ fm} \leq R \leq 1,65 \text{ fm}$ ), so bildet sich ein chromoelektrischer Flussschlauch (grün), der für den Einschluss der Farbladung verantwortlich ist [8].



**Abb. 4:** Die Berücksichtigung der Seequarks (full QCD) führt zu einem stärkeren Potential zwischen Quark und Antiquark für  $R \leq 0,4 \text{ fm}$ , verglichen mit einer Rechnung, die nur die Valenzquarks berücksichtigt (quenched QCD) [11].



ca. 400 Teraflops-Stunden etwa 5000 Vakuum-Feldkonfigurationen bei verschiedenen Seequarkmassen auf Gittern der Größe  $16^3 \times 32$  und  $24^3 \times 40$  produziert. Daraus ergab sich eine erste Evidenz für Seequarkeffekte im statischen Quark-Antiquark-Potential [11], das sich bei *sehr kurzen* Abständen ( $R \leq 0,5$  fm) coulomb-artig verhalten sollte, gemäß  $-\alpha_s(R)/R$ . Abb. 4 belegte erstmals, dass sich die starke Kopplung  $\alpha_s(R)$  um etwa 10 Prozent vergrößert, wenn man zwei Quark-Flavours im Quarksee berücksichtigt. Man erwartet, dass das in Abb. 4 unterdrückte langreichweitige Verhalten des Potentials infolge Mesonenbildung  $QQ \rightarrow \bar{Q}q + \bar{q}Q$  mit Anlagerung von Seequarks abflacht (Stichwort „Stringbreaking“) – doch braucht man verbesserte, sehr rechenaufwändige Methoden (mit leichten  $q, \bar{q}$ -Quarks), um dies wirklich in der Simulation nachweisen zu können.

Die japanische Theoretiker-Gruppe um Y. Iwasaki vollendete 1996 am Center for Computational Physics der University of Tsukuba zusammen mit der Firma Hitachi den Parallelrechner CPPACS, mit dem erstmals der Nachweis gelang, dass sich *ohne* Berücksichtigung der Seequarks die Massen der Hadronen  $K^*, \Phi, N, \Lambda, \Sigma, \Xi, \Sigma^*, \Xi^*$  und  $\Omega$  auf 10 Prozent genau aus den empirischen  $\pi$ -,  $\rho$ - und  $K$ -Meson-Massen reproduzieren lassen, wenn man die jeweiligen Valenzquark-Inhalte der Hadronen aus dem Quarkmodell eingibt. Für höhere Präzision bedarf es also der Mitnahme der Seequarks!

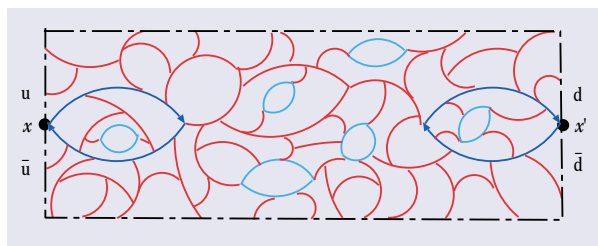
**Materie aus Gluonen?** Wegen der Selbstwechselwirkung der Gluonen ist es im Prinzip auch möglich, dass sich rein gluonische Bindungszustände formieren, d. h. Hadronen ohne Valenzquarkinhalt. Um solche Gluebälle auf dem Gitter zu beobachten, regt man das Vakuum  $|0\rangle$  mit einem rein gluonischen Operator<sup>4)</sup>  $O_g$  an und bestimmt die Masse des gluonischen Bindungszustands aus dem (in der imaginären Zeit  $\tau$ ) exponentiellen Abklingen des Korrelators

$$\langle 0 | O_g^\dagger(t) O_g(t=0) | 0 \rangle \simeq \exp[im_g t] = \exp[-m_g \tau].$$

Die numerischen Signale für Glueballmassen  $m_g$  sind infolge der Quantenfluktuationen ziemlich verrauscht. Dennoch gelang es einer deutsch-englischen Kollaboration mit Rechnern des Typs Connection Machine CM2, die Masse des leichtesten Glueballzustands mit den Quantenzahlen  $J^{PG} = 0^{++}$  zu 1700 MeV zu bestimmen [12], später bestätigt durch Simulationen auf dem QCD-Spezialrechner GF11 der IBM Forscher in Yorktown-Heights [13]. Neben diesem skalaren konnte auch ein tensorieller Glueballzustand mit der Masse 2,3 GeV auf dem Gitter identifiziert werden. Experimentell fand man eine Reihe von Kandidaten für rein gluonische Hadronen.

**Annihilation von Valenzquarks:** Der QCD als einer lokalen Eichfeldtheorie liegt die so genannte SU(3)-Flavour-Symmetrie zugrunde, die bei allen Prozessen der starken Wechselwirkung erhalten ist. Da das Vakuum ein Singulett-Zustand dieser Symmetrie ist, muss man bei der Propagation von Hadronen unterscheiden, ob es sich ebenfalls um Singulett- oder um andere Zustände (wie Triplets) handelt. Ein Triplet-Teilchen wie das Pion kann wegen dieser Symmetrie nicht im Vakuum „aufgehen“; in Abb. 2 drückt sich das durch die durchgängigen Valenzquarklinien aus. Flavour-Singulett-Mesonen wie das  $\eta'$  hingegen unterliegen bei ihrer Propagation von  $x$  nach  $x'$  einem *zusätzlichen* Einfluss, da ihre  $u, \bar{u}$ -Valenzquarks etc. unterwegs auch in Gluonen annihilieren können, welche sich später wieder in Valenzquarks rückverwandeln, gemäß

$u\bar{u} + d\bar{d} + s\bar{s} \rightarrow \text{Vakuum} \rightarrow u\bar{u} + d\bar{d} + s\bar{s}$ . Wie Abb. 5 zeigt, bilden die Valenzquarks in diesem Falle zwei Schleifen (dunkelblau). Diese Tatsache ist für die große Massenaufspaltung (empirisch 820 MeV!!) zwischen  $\eta'$  und Pion verantwortlich – ein Effekt, der besonders sensitiv auf die Struktur des Vakuums ist. Auf dem Gitter sind – ähnlich wie bei den Gluebällen – die Signale allerdings stark verrauscht. Durch die Verwendung spektraler Approximationen für die Quarkschleifen ist es unserer Gruppe kürzlich gelungen, erste gute Signale für Flavour-Singlett-Mesonen zu erzielen und die Massenaufspaltung zwischen  $\eta'$ - und  $\pi$ -Meson auf dem Gitter zu beobachten.



**Abb. 5:** Die  $u\bar{u}$ -Valenzquarks (blau) des  $\eta'$ -Mesons können sich auf ihrem Weg von  $x$  nach  $x'$  wie in Abb. 2 verhalten oder, wie hier illustriert, vernichten und als  $\bar{d}d$ -Paar ankommen.

**Fundamentale Parameter der QCD:** Infolge des Farbeinschlusses lassen sich die Quarkmassen und die starke Kopplung  $\alpha_s$  als fundamentale Parameter der QCD am besten aus dem Hadronenspektrum extrahieren. Die QCD-Lagrange-Funktion enthält die Größen als Parameter in Form von „nackten“ Massen und „nackter“ Kopplungskonstante  $\alpha_n$ . Letztere wird übrigens durch Quantenfluktuationen effektiv skalenabhängig:  $\alpha_n \rightarrow \alpha_s(\mu)$  (Stichwort „running coupling“). Die 1992 von M. Lüscher begründete ALPHA-Kollaboration hat sehr consequent Methoden zur Präzisionsbestimmung von  $\alpha_s(\mu)$  entwickelt und eingesetzt, die im Wesentlichen auf kleinen Gittern durchgeführt werden können und dadurch über die erzielbare Genauigkeit der in Abb. 4 vorgestellten Potential-Methode weit hinausgehen [14].

Die „nackten“ Massen werden dabei so angepasst, dass die Gitterrechnungen die gemessenen Massen von Pion, Kaon oder  $\Phi$  korrekt reproduzieren. Die „nackte“ Kopplung regelt dabei die Größe des Gitterabstandes  $a$  und damit die physikalische Skala. Dabei kann  $a(\alpha_n)$  aus einer dimensionsbehafteten Größe (wie z.B. der  $\rho$ -Meson-Masse) auf dem Gitter,  $m_\rho^L$ , nach der Beziehung  $a m_\rho^L = m_\rho^{\text{exp}}$  bestimmt werden.

Nach einer ersten Analyse der leichten Quarkmassen durch die SESAM-Gruppe [15] gelang es der japanischen CPPACS-Gruppe [16] auf Grund ihrer damals konkurrenzlosen Rechenausstattung, die Quarkmassen bei mehreren Gitterabständen zu bestimmen. Daher hatte sie eine recht gute Kontrolle über die Diskretisierungsfehler und konnte erstmals den Versuch unternehmen, den Kontinuumsmites  $a \rightarrow 0$  bei der Bestimmung der Quarkmassen zu vollziehen. Auch systematische Fehler wurden untersucht (durch „Messung“ der Quarkmassen auf dem Gitter über die Bestimmung von Matrixelementen der sogenannten PCAC-Relation). Als Ergebnis ergaben sich im Kontinuumsmites  $a \rightarrow 0$  die konsistenten Werte der Quarkmassen [16]:

$$\begin{aligned} m_{u,d}(2 \text{ GeV}) &= 3,1 \pm 0,1 \text{ MeV} \\ m_s(2 \text{ GeV}) &= 84 \pm 3 \text{ MeV} . \end{aligned}$$

Aber sind die angegebenen Fehler wirklich verlässlich im Sinne einer „Präzisionsmessung“?

4) Normale Mesonen erzeugt man aus dem Vakuum mit einem bilinearen Quarkoperator der Art  $\bar{\psi}T\psi$ .

## Simulation realistischer Seequarks

Ein ernsthaftes Handicap aller bisherigen QCD-Simulationen bestand darin, dass sie wegen der stark fluktuierenden Konditionszahl<sup>5)</sup> der Dirac-Matrix nur bei unrealistisch großen ud-Seequarkmassen (im Bereich  $\geq 80$  MeV) durchgeführt wurden (oder gar mit einer Fermion-Diskretisierung, welche neben der Lorentz-Symmetrie die Flavoursymmetrie bricht, die so genannten „Staggered Fermionen“). Dies erfordert Extrapolationen in der Quarkmasse aus einem Massenbereich heraus, wo die chirale Störungstheorie (Entwicklungen in Potenzen von  $m_{u,d}$ ) deren funktionale Form nicht festlegen kann. Wenn man etwa die Tabellen der Particle Data Group [17] (also den Landolt-Börnstein der Teilchenphysik) zum aktuellen Wissensstand über die Werte der Quarkmassen konsultiert, so kann man unschwer erkennen, dass die systematischen Fehler der Gitterresultate noch nicht hinreichend unter Kontrolle sind.

So wurde bei der Gitter-Diskretisierung der QCD bislang der fermionische Dirac-Operator durch eine (schwach besetzte) Dirac-Matrix approximiert. Um die dabei als Folge der Diskretisierung mit lokalen Differentialoperatoren auftretenden 15 unphysikalischen Quarkzustände im Kontinuumslimit auszufrieren, hat Wilson sich eines Tricks bedient, der auf eine explizite Brechung der chiralen Symmetrie bei  $a \neq 0$  führte [2]. Diese Symmetriebrechung strebt zwar mit  $a \rightarrow 0$  gegen null, ist aber letztlich die Ursache dafür, dass bei der Simulation sehr leichter Seequarks die Quantenfluktuationen im Spektrum der Dirac-Matrix überhandnehmen.

Symmetrien haben bekanntlich Erhaltungssätze und Auswahlregeln zur Folge, welche Problemlösungen i. A. erheblich erleichtern. Eine Symmetrie der Kontinuumsphysik sollte sich also nach Möglichkeit in einer exakten Symmetrie auf dem Gitter widerspiegeln, welche die Gitterresultate bestmöglich vor Gitterartefakten schützt. Genau dieses Ziel wurde von Neuberger Ende der neunziger Jahre mit seiner Overlap-Form des Dirac-Operators erreicht, der eine exakte chirale Symmetrie auf dem Gitter erfüllt [14]. Die Overlap-Form zeigt ein erheblich verbessertes Verhalten unter Quantenfluktuationen. Aber ihre numerische Simulation ist um etwa zwei Größenordnungen aufwändiger als z. B. das SESAM-Projekt, weil sie die Berechnung der signum-Funktionen eines Matrixoperators  $M$  erfordert.

Angesichts dieses Ressourcenproblems der Overlap-Fermionen konzentrierten sich die Simulationen derselben zunächst wieder auf die quenched-Näherung. In den vergangenen beiden Jahren wurden in diesem Rahmen dramatische Verbesserungen bei der Behandlung leichter Valenzquarks nachgewiesen. Aber wird man mit dieser Idee auch die Quantenfluktuationen von Seequarks im Massenbereich  $\leq 40$  MeV in den Griff bekommen?

### Ausblick 2004

Angesichts der genannten Herausforderung im Bereich des „Large Scale Computing“ gewinnt die Algorithmenforschung immer größere Bedeutung. Gefragt ist weiterhin die enge interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen theoretischen Physikern, angewandten Mathematikern und Informatikern. So sind durch algorithmische Verbesserungen in den letzten zehn Jahren Effizienzsteigerungen der Gittersimulationen um mindestens eine bis zwei Größenordnungen erzielt worden.

In diesem Jahr werden in Deutschland Höchstleistungsrechner der Multi-Teraflops-Klasse für die Com-

putational Science installiert (siehe die Übersicht auf S. 67). Diese Systeme lassen extrem kurze Speichertzugriffszeiten und damit eine hohe „sustained performance“ für QCD-Anwendungen erwarten. Sie können als Plattformen für die Entwicklung und praktische Erprobung schneller Algorithmen zur Darstellung von Overlap-Fermionen und erste physikalische Simulationen auf Gittern intermediärer Größe dienen.

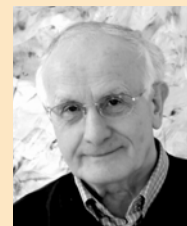
Die „Lösung“ des *Grand-Challenge-Problems* „Gittereichtheorie“ wird allerdings den Superrechnern der nächsten Generation im Bereich der 100-Teraflops- bis Petaflops-Klasse vorbehalten bleiben.

### Literatur

- [1] L. O. Raifeartaigh, *The Dawning of Gauge Theory*, Princeton Univ. Press, Princeton (1997)
- [2] K. Wilson, *Phys. Rev.* **D10**, 2445 (1974)
- [3] R. P. Feynman und A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York (1965)
- [4] I. Montvay und G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1994)
- [5] N. Cabibbo, Y. Iwasaki und K. Schilling (Hrsg.), *High Performance Computing in Lattice Gauge Theory*, *Parallel Computing* **25**, 1197 (1999)
- [6] Th. Lippert, *Recent Development and Perspectives of Machines for Lattice QCD*, hep-lat 0311011 (erscheint in *Proc. of Lattice 2003*, Tsukuba)
- [7] M. Creutz, *Quarks, Gluons and Lattices*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1983)
- [8] G. S. Bali et al., *Phys. Rev.* **D51**, 5165 (1995)
- [9] G. S. Bali et al., *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **131**, 645 (1998)
- [10] Th. Lippert, *Habilitationsschrift*, Bergische Universität, Wuppertal (2001)
- [11] U. Glässner et al., *Phys. Lett.* **383**, 98 (1996)
- [12] G. S. Bali et al., *Phys. Lett.* **B309** 378 (1993)
- [13] J. Sexton et al., *Phys. Rev. Lett.* **D75** 4563 (1995)
- [14] M. Lüscher, *Phys. Blätter*, Juli/August 2000, S. 65
- [15] N. Eicker et al., *Phys. Lett.* **B407**, 290 (1997)
- [16] A. AliKhan et al., *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4674 (2000)
- [17] <http://www.pdg.lbl.gov>
- [18] M. Lüscher, *Phys. Lett.* **B428**, 342 (1998)

### Die Autoren

**Klaus Schilling** promovierte 1966 an der Universität Hamburg bei G. Kramer in Elementarteilchentheorie. Von 1968 bis 1971 war er Stipendiat am Caltech und Research Associate am CERN. Nach einer Professur in Bielefeld war Schilling von 1974 bis zu seiner Emeritierung 2002 Lehrstuhlinhaber an der Gesamthochschule Wuppertal, wo er die Theoretische Physik aufgebaut und die Lehre im Bereich Computational Physics



etabliert hat. Klaus Schilling war u. a. 1986 Mitbegründer des HLRZ und von 1995 bis 2000 Leiter der von DESY im Rahmen des HLRZ/NIC betriebenen Forschergruppe „Elementarteilchentheorie“. **Thomas Lippert** promovierte in Theoretischer Elementarteilchenphysik an der Universität Wuppertal bei Klaus Schilling und im Bereich Parallelcomputing an der Universität Groningen bei Nicolai Petkov. Er ist



Direktor des Zentralinstituts für Angewandte Mathematik am Forschungszentrum Jülich und Mitglied des Direktoriums des John von Neumann-Instituts für Computing. Seine wissenschaftlichen Interessen liegen auf den Gebieten Gittereichtheorie, numerische und parallele Algorithmen sowie Clustercomputing.

5) Die Konditionszahl einer Matrix ist das Verhältnis ihres größten zu ihrem kleinsten Eigenwert.