

RÜDIGER HAAKE

Methoden zur Bestimmung des Sommer-Parameters auf dem Gitter

Institut für Theoretische Physik
Westfälische Wilhelms-Universität Münster

März 2012

Methoden zur Bestimmung des Sommer-Parameters auf dem Gitter

als Diplomarbeit vorgelegt von
Rüdiger Haake

März 2012

Betreuer:
Prof. Dr. Gernot Münster



Institut für Theoretische Physik
Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung	1
2. Theoretische Grundlagen	5
2.1. Ausgewählte Themen der Quantenfeldtheorie	5
2.1.1. Quantisierung der Felder	6
2.1.2. Eichsymmetrien	8
2.1.2.1. Die Eichsymmetrie in der Elektrodynamik	9
2.1.2.2. Das Eichprinzip	11
2.1.2.3. Eichsymmetrien in Quantenfeldtheorien	12
2.2. Überblick zum verwendeten supersymmetrischen Modell	13
2.3. Gittereichtheorien	15
2.3.1. Der Pfadintegralformalismus	16
2.3.1.1. Pfadintegrale in der Quantenmechanik	16
2.3.1.2. Erweiterung auf die Quantenfeldtheorie	18
2.3.2. Grundlagen der Gitterdiskretisierung	21
2.3.3. Naive Diskretisierung von Fermionen	22
2.3.4. Erweiterte Modelle für Fermionen auf dem Gitter	23
2.3.4.1. Fermi-Statistik	23
2.3.4.2. <i>Fermion doubling</i>	24
2.3.4.3. Wilson-Fermionen	25
2.3.5. Eichfelder und Eichinvarianz	26
2.3.6. Wirkung der Eichfelder	28
2.3.7. Die vollständige Wirkung des benutzten Modells	30
2.3.8. Eigenschaften und Anwendungen der reinen Eichtheorie	31
2.3.8.1. Haarsches Maß	32
2.3.8.2. Wilson- und Polyakov-Loops	34
2.4. Numerische Methoden in Gittereichtheorien	36
2.4.1. Monte-Carlo-Simulation	36
2.4.1.1. Grundlagen der Methode	38
2.4.2. Methoden zur Datenanalyse	40
2.4.2.1. Fehlerabschätzung und Autokorrelation	40
2.4.2.2. <i>Data binning</i>	43
2.4.2.3. Jackknife-Methode	43

3. Die Bestimmung des statischen Quark-Antiquark-Potentials	45
3.1. Einführung des Potentials	45
3.1.1. Zusammenhang mit den Wilson-Loops	46
3.1.1.1. Wilson-Loops in temporaler Eichung	46
3.1.1.2. <i>Hopping expansion</i>	47
3.1.2. Verlauf des Potentials in der reinen Eichtheorie	49
3.1.2.1. Grenzfall schwacher Kopplung	50
3.1.2.2. Grenzfall starker Kopplung	50
3.1.2.3. Confinement und <i>string breaking</i>	53
3.1.3. Einführung des Sommer-Parameters	53
3.2. Methoden zur Bestimmung des statischen Potentials	56
3.2.1. Messung der Wilson-Loops	56
3.2.1.1. Smearing-Verfahren	58
3.2.2. Analyse der Wilson-Loops	65
3.2.2.1. Methoden zur Bestimmung des Potentials $V(r)$	67
3.2.2.2. Methoden zur Bestimmung der Potentialparameter	70
3.2.2.3. Bestimmung des Sommer-Parameters ohne Potential	72
4. Analyse und Auswertung	75
4.1. Zur Auswertung genutzte Methoden	77
4.2. Untersuchung verschiedener Bin-Größen	79
4.2.1. Benutzte Parameter	79
4.2.2. Abhängigkeit des Sommer-Parameters von der Bin-Größe	79
4.2.3. Genauere Untersuchung für Smearing-Level 80	82
4.2.4. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse	88
4.3. Allgemeines Verhalten und Analyse der Smearing-Effekte	90
4.3.1. Benutzte Parameter	90
4.3.2. Verhalten des Sommer-Parameters	90
4.3.3. Vergleich der einzelnen Methoden	95
4.3.3.1. Methoden 1.1a, 1.1b und 1.1c	99
4.3.3.2. Methode 2.2	101
4.3.3.3. Methoden 1.2 und 3	103
4.3.3.4. Methode 2.1	105
4.3.3.5. Untersuchung des Einflusses von Standard- und erweiter- tem Potential	106
4.3.3.6. Zusätzliche Untersuchungen	108
4.3.4. Verhalten des Potentials $V(r)$	112
4.3.4.1. $V(r)$ für alle Methoden	112
4.3.4.2. Einzelne Potentialpunkte $V(r)$ in Abhängigkeit von r	118
4.3.5. Verhalten des Potentials $V(r, t)$	125
4.3.5.1. Einzelne Potentialpunkte $V(r, t)$ in Abhängigkeit von r	130
4.3.6. Verhalten der Potentialparameter	132

4.3.7.	Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen	134
4.3.8.	Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse	138
4.4.	Vergleich von APE- und HYP-geschmierten Daten	144
4.4.1.	Benutzte Parameter	144
4.4.2.	Verhalten des Sommer-Parameters	144
4.4.3.	Skalenvergleich von HYP- und APE-geschmierten Daten	148
4.4.4.	Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen	153
4.4.5.	Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse	154
4.5.	Vergleich verschiedener APE-Parameter	156
4.5.1.	Benutzte Parameter	156
4.5.2.	Verhalten des Sommer-Parameters	156
4.5.3.	Skalenvergleich	159
4.5.4.	Untersuchung der $\varepsilon = 0.6$ -Daten bei den Levels 34 bis 42	163
4.5.5.	Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen	169
4.5.6.	Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse	170
4.6.	Untersuchung des Variational Smearing-Verfahrens	174
4.6.1.	Benutzte Parameter	174
4.6.2.	Darstellung der Ergebnisse für die einzelnen Methoden	174
4.6.3.	Vergleich zwischen Standard- und Variational Smearing	180
4.6.4.	Methodenvergleich	186
4.6.5.	Vergleich der relativen Fehler	187
4.6.6.	Verhalten des Potentials $V(r, t)$	193
4.6.7.	Einfluss der Größe der Korrelationsmatrix	195
4.6.8.	Ergebnisse bei Nutzung einer 2×2 -Korrelationsmatrix	198
4.6.9.	Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen	201
4.6.10.	Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse	203

Zusammenfassung und Ausblick **209**

A. Zusätzliche Abbildungen **213**

A.1.	Allgemeines Verhalten und Analyse der Smearing-Effekte	213
A.2.	Vergleich von APE- und HYP-geschmierten Daten	224

Literaturverzeichnis **231**

1. Einführung

Gittereichtheorien stellen heutzutage ein wichtiges Hilfsmittel zur Untersuchung teilchenphysikalischer Theorien dar. Sie eignen sich aufgrund ihrer Konstruktion hervorragend für eine numerische Simulation und bieten eine alternative, nicht-störungstheoretische Herangehensweise. Insbesondere in der Quantenchromodynamik ist dieser Ansatz äußerst gewinnbringend, weil dadurch in den durch Störungstheorie nicht erreichbaren Bereich kleiner Energien vorgedrungen werden kann. Somit können Phänomene wie das prominente Confinement der Hadronen theoretisch untersucht werden. Sozusagen als Nebeneffekt sind die Gittereichtheorien automatisch regularisiert, das heißt es treten hier keine störenden Ultraviolettdivergenzen auf.

Die Konzepte der Gittereichtheorie sind allerdings nicht auf die Quantenchromodynamik beschränkt. Ebenso können zum Beispiel die Quantenelektrodynamik oder auch supersymmetrische Theorien auf dem Gitter behandelt werden. Die in dieser Arbeit gemessenen Daten wurden auf Basis eines solchen supersymmetrischen Modells erstellt.

Als eine das Standardmodell der Teilchenphysik erweiternde Theorie ist das Konzept der Supersymmetrie ein viel versprechender Kandidat. Mit ihr wird eine Symmetrie zwischen Bosonen und Fermionen postuliert, wodurch bosonische und fermionische Zustände in direkter Weise ineinander transformiert werden können. Damit verdoppelt sich quasi das Teilchenspektrum des Standardmodells: Jedes Teilchen erhält einen sogenannten *Superpartner*. Obgleich eine experimentelle Verifikation noch aussteht - bisher wurde noch kein Superpartner gefunden - bietet das Konzept der Supersymmetrie doch einige Lösungen zu heutigen Problemen des Standardmodells. Beispielsweise findet sich in dieser Theorie ein Ansatz zur Lösung des Problems der Feinabstimmung der Naturkonstanten. Zudem ist es in supersymmetrischen Theorien weitaus einfacher, eine Quantentheorie der Gravitation zu entwickeln. Aus diesen Gründen ist eine genauere Untersuchung der Eigenschaften von supersymmetrischen Quantenfeldtheorien von Interesse. Die Gittereichtheorie bietet sich dabei als nicht-störungstheoretischer Ansatz besonders an, weil hiermit Vorhersagen und offene Fragen analytischer Untersuchungen mit numerischen Methoden abgeklärt werden können.

Die Arbeitsgruppe um Prof. Dr. Gernot Münster, in der diese Arbeit entstanden ist, betrachtet dabei die $N = 1$ supersymmetrische Yang-Mills-Theorie. Ihre Wirkung ähnelt der der Quantenchromodynamik; es existiert ein bosonischer und ein fermionischer Teil der Wirkung. Der bosonische Part beschreibt die aus der QCD bekannten Gluonen, welche bei dem in dieser Arbeit betrachteten Modell in drei Farben auftreten dürfen. Der fermionische Part ist im Gegensatz zur QCD nicht durch die Wirkung der Quarks

gegeben, sondern beschreibt stattdessen die sogenannten Gluinos, die Superpartner der Gluonen. Der Namenszusatz $N = 1$ steht hier für die Anzahl der Gluino-„Flavors“, also die Anzahl der betrachteten Superladungen.

Aufgrund der Tatsache, dass Quarks und ihre zugehörigen supersymmetrischen Partnerpartikel vollständig vernachlässigt werden, stellt die beschriebene Theorie keine supersymmetrische Erweiterung der Quantenchromodynamik dar.

Wie dem Titel dieser Arbeit bereits zu entnehmen ist, soll der Fokus hier auf Methoden zur Bestimmung einer Skala in der Gittereichtheorie liegen. Die Techniken und Verfahren hierfür sind im Grunde unabhängig davon, ob nun die Quantenchromodynamik oder eine supersymmetrische Theorie genutzt wird.

Die Bestimmung der Skala ist von grundlegender Bedeutung, um die auf dem Gitter evaluierten Größen in physikalischen Einheiten oder zumindest in einer einheitlichen Skala darstellen zu können. Ohne Skala können zum Beispiel für den Fall der QCD keine Vergleiche mit dem Experiment erfolgen. Mehr noch: Daten, die auf verschiedenen Gittern berechnet werden, können dann nicht verglichen werden. Dies ist der entscheidende Punkt, warum die Berechnung einer Skala auch für das in dieser Arbeit betrachtete supersymmetrische Modell von Interesse ist. Ein Vergleich zwischen Experiment und Gitterergebnissen ist hier nicht von Interesse. Um jedoch zum Beispiel Ergebnisse für das Kontinuumslimit zu erhalten, müssen zwangsweise Daten mehrerer Gitter betrachtet werden, weshalb eine einheitliche Skala unablässlich ist.

Die einzige Größe, die für eine Skalierung der auf dem Gitter berechneten Größen von Nöten ist, ist der Abstand zweier Gitterpunkte, der *Gitterabstand* a . Um dieser Größe einen physikalischen Wert zuzuordnen, besteht die Möglichkeit, die dimensionslose Größe aM auf dem Gitter zu messen, wobei M die Masse eines bekannten physikalischen Zustands sein muss. Da in Theorien wie der QCD, die mit dem Experiment vergleichbar sind, der Wert für M in physikalischen Einheiten aus dem Experiment bekannt ist, kann a durch direkten Vergleich ermittelt werden. In Theorien wie der Vorliegenden ist dies natürlich nicht direkt möglich. Stattdessen kann aber auch einfach eine willkürlich gesetzte Größe als Referenz dienen. Dadurch ist die so erlangte Skala zwar „unphysikalisch“, kann aber zum Vergleich von auf verschiedenen Gittern berechneten Größen herangezogen werden.

Eine andere Möglichkeit zur Einführung einer Skala ist die Bestimmung des Sommer-Parameters. Diese Methode soll in der vorliegenden Arbeit untersucht werden. Das Prinzip ist hier so, wie im letzten Abschnitt erläutert: Eine Größe - der Sommer-Parameter - muss auf dem Gitter berechnet und aus Experimenten bekannt sein. Ein Vergleich ergibt dann einen Wert für den Gitterabstand. Der Sommer-Parameter in der QCD entspricht einem spezifischen Abstand zwischen zwei statischen Quarks und ist über die Kraft zwischen diesen definiert. Diese Kraft kann in Experimenten gut in den Spektren schwerer Quarks gemessen werden. Auf dem Gitter ist eine Berechnung über das Potential zwi-

schen diesen Quarks ebenfalls zuverlässig möglich.

Wiederum gilt hier, dass der Sommer-Parameter auch beim benutzten supersymmetrischen Modell zur Festlegung einer „unphysikalischen“, aber vergleichbaren Skala angewendet werden kann.

Um ein möglichst gutes Ergebnis für das Potential, aus welchem der Sommer-Parameter in direkter Weise ermittelt wird, zu erhalten, ist ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit bei den sogenannten Smearing-Verfahren zu finden. Smearing-Verfahren werden auch für andere Observablen auf dem Gitter angewandt und stellen eine Möglichkeit zur Verbesserung der Daten dar. Wie der Name vermuten lässt, „schmieren“ sie das Gitter durch Mittelungsverfahren aus und verringern damit unerwünschte kurzreichweitige Fluktuationen. Insbesondere soll auch das Variational Smearing-Verfahren, welches sich besonders gut für die Bestimmung des Potentials und damit des Sommer-Parameters eignet, untersucht werden.

An dieser Stelle soll die Gliederung dieser Arbeit kurz vorgestellt werden. Dafür folgt nun eine kurze Zusammenfassung der drei Hauptteile.

Zunächst sollen die theoretischen Grundlagen präsentiert werden. Insbesondere der Gittereichtheorie und ihren numerischen Verfahren soll besondere Beachtung geschenkt werden, wobei jedoch lediglich Themen dargestellt werden sollen, die für den weiteren Verlauf von Interesse sein werden.

Der zweite Teil widmet sich dem statischen Quark-Antiquark-Potential auf dem Gitter. Nach einer Einführung und Begründung der Gitterversion des Potentials soll auch auf die rechentechnische Realisierung der Messung und Analyse des Potentials und des Sommer-Parameters eingegangen werden. Im Grunde handelt es sich bei diesem Teil natürlich ebenfalls um theoretische Grundlagen; die dortigen Inhalte liegen jedoch im zentralen Fokus dieser Arbeit, weshalb sie hier eigenständig abseits der anderen Grundlagen präsentiert werden sollen.

Der dritte Teil bildet den Hauptteil dieser Arbeit. Dort sollen die durchgeführten Analysen dargestellt und diskutiert werden. Die zentralen Fragen, die in diesem Abschnitt gestellt und beantwortet werden sollen, sind solche nach den Auswirkungen verschiedener Verfahren zur Ermittlung des Sommer-Parameters, beispielsweise:

- Wie verhalten sich die Daten generell bei Anwendung des Smearing-Verfahrens?
- Welche Unterschiede weisen die Ergebnisse bei Benutzung des APE- und HYP-Smearing-Verfahrens auf?
- Welche Methoden eignen sich am Besten zur Bestimmung des Potentials?
- Wie gut eignet sich das Variational Smearing-Verfahren zur Bestimmung des Potentials?

Abschließend soll dann eine Zusammenfassung und ein kurzer Ausblick folgen.

2. Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel sollen wichtige theoretische Grundlagen herausgearbeitet werden. Nach einem Einblick in die für diese Arbeit wichtigsten Eigenschaften der Quantenfeldtheorie soll kurz auf das hier benutzte supersymmetrische Modell eingegangen werden. Darauf folgt ein Überblick zur Definition und zu Eigenschaften von Gittereichtheorien. Abschließend sollen dann die Grundlagen der numerischen Methoden in Gittereichtheorien insbesondere mit Hinblick auf die allgemeine Datenanalyse dargestellt werden. Das supersymmetrische Modell ist der Vollständigkeit und der Einordnung wegen von Interesse; es spielt jedoch für diese Arbeit eine eher untergeordnete Rolle, weil die benutzten Techniken und Methoden zur Bestimmung des statischen Potentials und der Sommer-Skala im Ganzen unabhängig vom benutzten Modell angewendet werden können und auch im Analyse-Teil keine für die Supersymmetrie spezifischen Effekte zu erwarten sind.

In allen folgenden Rechnungen soll im Fall freistehender Indizes die Einsteinsche Summenkonvention verwendet werden. Ebenso soll wie oft üblich $\hbar = 1$ gesetzt werden.

2.1. Ausgewählte Themen der Quantenfeldtheorie

Die Quantenfeldtheorie bildet die Basis für die heutige Theorie der Elementarteilchenphysik; mehr noch, sie stellt vielmehr die mathematische Sprache, mit der die physikalischen Prozesse beschrieben werden können, dar. Dabei beschreibt sie keine einzelne Theorie, sondern eher einen Formalismus, der auch abseits der Elementarteilchenphysik breite Verwendung gefunden hat. Sie zählt nach etwa achtzig Jahren Entwicklung zu den umfangreichsten Theorien der Physik überhaupt. Ein Grund dafür ist darin zu finden, dass im Laufe der Zeit immer wieder neue Ansätze und neue Ideen entwickelt wurden, um aufgetretene Probleme zu beseitigen. Einige haben sich dabei bewährt, andere jedoch mussten aufgrund neuer Erkenntnisse wieder verworfen werden. Heutzutage ist, wie eingangs erwähnt, das Konzept der Supersymmetrie ein Kandidat für eine mögliche Erweiterung des Standardmodells der Teilchenphysik. Im Hinblick auf die laufenden Messungen des LHC am CERN werden die nächsten Jahre wohl Aufschluss darüber geben, ob Supersymmetrie in der Natur tatsächlich realisiert ist, oder ob auch diese Theorie wieder verworfen werden muss. Dabei ist die Beschäftigung mit solchen neuen Konzepten auch im Fall einer nicht in der Natur realisierten Theorie fruchtbar, da sich

doch meist neue Rechenmethoden und tiefere Einsichten ergeben, welche an anderer Stelle wiederverwertet werden können.

Die Anwendungen der Quantenfeldtheorie im Standardmodell erwiesen sich bisher als außerordentlich effizient. Theorie und Experiment zeigen eine unvergleichbar hohe Übereinstimmung. Dies zeigt auf der einen Seite natürlich den großen Erfolg des Standardmodells, dessen Theorien ja quasi durch die Quantenfeldtheorie ausgedrückt werden. Auf der anderen Seite ist diese Übereinstimmung aber auch problematisch, weil erst durch die Messung von Diskrepanzen zwischen Theorie und Experiment auf neue Theorien geschlossen werden kann. Und diese sind tatsächlich erforderlich, um letztlich einen Ansatz zu entwickeln, wie starke, elektroschwache und gravitative Wechselwirkung mithilfe ein und derselben Theorie beschrieben können.

Für diese Arbeit werden nur einige wenige Facetten der Quantenfeldtheorie benötigt, die als Grundlage für die weiteren Betrachtungen dienen sollen. Dafür soll zunächst der Vorgang der Quantisierung der Felder gestreift werden, um eine anschauliche Vorstellung von Quantenfeldern darzustellen. Ein Exkurs zu Eichsymmetrien, die die Grundlage heutiger wechselwirkender Theorien bilden, soll diesen Abschnitt dann abschließen.

Die Darstellungen orientieren sich dabei an der Vorgehensweise in [AH03].

2.1.1. Quantisierung der Felder

Der Prozess der Quantisierung der Felder ist sehr komplex und eine nur annähernd vollständige Beschreibung ist hier weder möglich noch erwünscht. Stattdessen soll lediglich eine Idee davon vermittelt werden, wie die klassischen Felder quantisiert werden können und welche Struktur sie dabei aufweisen. Es sollen lediglich skalare, reelle Felder betrachtet werden, die die Wellengleichung erfüllen. Diese Betrachtung reicht an dieser Stelle als Grundlage für die folgenden Betrachtungen aus.

Wie in der Quantenmechanik wird die Quantisierung der Felder durch den Übergang zu Operatoren vollzogen. Neben dem eigentlichen *Feld* $\phi(\vec{x}, t)$ ist dabei noch das kanonisch konjugierte *Impulsfeld*

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(\vec{x}, t)} \quad (2.1.1)$$

zu nennen. Dieses Feld ergibt sich analog zum kanonisch konjugierten Impuls im Lagrange-Formalismus der klassischen Mechanik, wo er durch

$$p_i(t) = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (2.1.2)$$

gegeben ist. $\pi(\vec{x}, t)$ ist an dieser Stelle deshalb von Interesse, weil Orte und Impulse in der Quantenmechanik durch die kanonischen Vertauschungsrelationen über Kommutatoren miteinander verknüpft sind und gerade durch diese Nicht-Vertauschbarkeit typische quantenmechanische Effekte hervorgerufen werden. Analog zu

$$[q_i, p_j] = i\delta_{ij} \quad (2.1.3)$$

in der Quantenmechanik werden folgende Kommutatoren für die Felder angesetzt:

$$\left[\hat{\pi}(\vec{x}, t), \hat{\phi}(\vec{y}, t) \right] = i\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \quad (2.1.4)$$

$$\left[\hat{\phi}(\vec{x}, t), \hat{\phi}(\vec{y}, t) \right] = [\hat{\pi}(\vec{x}, t), \hat{\pi}(\vec{y}, t)] = 0. \quad (2.1.5)$$

Durch diesen Übergang zu operatorwertigen Größen werden die Felder zunächst zu einer unanschaulichen Größe, dessen physikalische Natur auf den ersten Blick nicht zu erkennen ist. Das Feld wird nun zur Observable, mit der die physikalischen Eigenschaften des Feldes in noch zu spezifizierender Weise gemessen werden können.

Zum näheren Verständnis ist die Fourierdarstellung der Felder hilfreich, die im kontinuierlichen Fall durch [AH03, S. 131]

$$\phi(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3k}{(2\pi)^3 \sqrt{2\omega(\vec{k})}} \left[a(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega(\vec{k})t) + a^*(\vec{k}) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x} + i\omega(\vec{k})t) \right] \quad (2.1.6)$$

gegeben ist, falls das hier als reell angenommene Feld $\phi(\vec{x}, t)$ die Wellengleichung erfüllt. Anschaulich kann dies als Entwicklung des Feldes in seine einzelnen Moden interpretiert werden, wobei die Parameter $a(\vec{k})$ und $a^*(\vec{k})$ die Verteilung der Moden angeben. Der Übergang zu Operatoren bringt dann

$$\hat{\phi} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3k}{(2\pi)^3 \sqrt{2\omega(\vec{k})}} \left[\hat{a}(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x} - i\omega(\vec{k})t) + \hat{a}^\dagger(\vec{k}) \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{x} + i\omega(\vec{k})t) \right]. \quad (2.1.7)$$

Es kann gezeigt werden, dass von den nun operatorwertigen $\hat{a}(\vec{k})$ und $\hat{a}^\dagger(\vec{k})$ die Kommutatorrelationen

$$\left[\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}^\dagger(\vec{k}') \right] = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}') \quad (2.1.8)$$

$$\left[\hat{a}^\dagger(\vec{k}), \hat{a}^\dagger(\vec{k}') \right] = \left[\hat{a}(\vec{k}), \hat{a}(\vec{k}') \right] = 0 \quad (2.1.9)$$

erfüllt werden müssen, um konsistent mit den Kommutatoren der quantisierten Felder zu sein [AH03, S. 132]. Diese Kommutatorrelationen sind kontinuierliche Verallgemeinerungen derjenigen Kommutatoren, die für zwei quantenmechanische harmonische Oszillatoren gelten müssen:

$$\left[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger \right] = \delta_{ij} \quad (2.1.10)$$

$$\left[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger \right] = \left[\hat{a}_i, \hat{a}_j \right] = 0. \quad (2.1.11)$$

Das heißt, die einzelnen Moden des Feldes werden durch die Auf- und Absteigeoperatoren harmonischer Oszillatoren erzeugt. Da die Moden für kontinuierliche Werte \vec{k} existieren

können, müssen dementsprechend auch die Kommutatorrelationen (2.1.8) dieses Kontinuum berücksichtigen, weshalb statt des Kronecker-Deltas in der Quantenmechanik an dieser Stelle die Deltadistribution verwendet wird.

Damit kann bereits eine Interpretation des quantisierten Feldes gegeben werden: das Feld $\hat{\phi}$ setzt sich aus Moden zusammen, welche durch \hat{a}^\dagger und \hat{a} nur quantisiert angeregt werden können. Diese Anregungsquanten sind Quanten harmonischer Oszillatoren und können als die durch das Feld beschriebenen Partikel interpretiert werden. Sie besitzen bei passender Wahl des Feldes die gewünschten Eigenschaften dieser Partikel.

Es sollte noch angemerkt werden, dass das klassische Feld $\phi(\vec{x}, t)$ eine Funktion von Raum und Zeit ist, die im hier dargestellten Fall auf skalare Werte abbildet. Die Größe $\phi(\vec{x}, t)$ enthält somit alle im Feld enthaltenen Informationen: sie beschreibt den Zustand. Im quantisierten Fall ist das anders. Dort ist der Feldoperator eine Observable, welche auf einen Zustand wirkt. Sie entspricht physikalisch einer Messgröße und enthält keine Informationen über den Feldzustand selbst. Die Information ist im Systemzustand enthalten, der im Fock-Formalismus beschrieben werden kann. Beispielsweise beschreibt

$$|\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_3\rangle = N \hat{a}^\dagger(\vec{k}_3) \hat{a}^\dagger(\vec{k}_2) \hat{a}^\dagger(\vec{k}_1) |0\rangle \quad (2.1.12)$$

drei Partikel mit unterschiedlichen Werten für \vec{k} , wobei N der Normalisierung dient.

Um Partikel, wie beispielsweise Elektronen oder Photonen, adäquat beschreiben zu können, müssen die hier vorgestellten Ideen natürlich erweitert werden. Durch die Skalarwertigkeit der Felder wurde zum Beispiel der Spin vernachlässigt. Weiterhin kommutieren die Erzeugungsoperatoren \hat{a}^\dagger , wodurch die Zustände symmetrisch unter Vertauschung zweier Quanten sind:

$$|\vec{k}_1, \vec{k}_2\rangle = N \hat{a}^\dagger(\vec{k}_2) \hat{a}^\dagger(\vec{k}_1) |0\rangle = N \hat{a}^\dagger(\vec{k}_1) \hat{a}^\dagger(\vec{k}_2) |0\rangle = |\vec{k}_2, \vec{k}_1\rangle. \quad (2.1.13)$$

Dementsprechend können mithilfe dieses Ansatzes lediglich Bosonen dargestellt werden. An dieser Stelle sollten aber lediglich die wichtigsten Grundlagen der Quantisierung rekapituliert werden, weshalb diese Darstellung hier reichen soll.

2.1.2. Eichsymmetrien

Symmetrien spielen heute in der Physik eine zentrale Rolle. Und so bildet die Quantenfeldtheorie auch keine Ausnahme; für sie gelten sogenannte *Eichsymmetrien*. Je nach Perspektive können sie sogar als Bedingung bei deren Formulierung vorausgesetzt werden. Das Konzept der Eichsymmetrie ist dabei nicht auf Quantenfeldtheorien beschränkt. Im Grunde beschreibt der Begriff Eichsymmetrie im weiteren Sinne lediglich den Umstand, dass die Physik eines beschriebenen Systems gegenüber einer Eichung - also gegenüber einer Transformation bestimmter Systemgrößen - invariant ist.

In der Quantenfeldtheorie führt die Voraussetzung einer lokalen Eichsymmetrie der Felder zwangsläufig auf die Existenz sogenannter *Eichfelder*. Durch die Einführung der Eichfelder wird die vormals nicht-wechselwirkende Theorie zu einer wechselwirkenden Theorie. Dabei können die durch die Eichfelder erzeugten Quanten als Austauschteilchen der Wechselwirkung interpretiert werden.

Eine *lokale* Eichsymmetrie liegt vor, wenn die Symmetrietransformationen für jeden Ort unabhängig voneinander sein dürfen. Bei einer *globalen* Eichsymmetrie müssen die Transformationen dementsprechend an jedem Ort gleich sein.

Aufgrund der hohen Relevanz dieser Symmetrien, die dem Namen entsprechend auch in *Gittereichtheorien* Anwendung finden, soll das Konzept der Eichsymmetrie nun vorgestellt werden.

2.1.2.1. Die Eichsymmetrie in der Elektrodynamik

Ein prominentes Beispiel für eine klassische Theorie, die eine Eichsymmetrie erfüllt, ist die klassische Elektrodynamik. Dort kann das elektromagnetische Feld durch ihm zugrundeliegende Potentiale Φ und \vec{A} repräsentiert werden:

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{x}, t) &= -\vec{\nabla}\Phi(\vec{x}, t) - \frac{\partial \vec{A}(\vec{x}, t)}{\partial t} \\ \vec{B}(\vec{x}, t) &= \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{x}, t).\end{aligned}\tag{2.1.14}$$

Die gesamte Elektrodynamik kann dann durch die Maxwellgleichungen und die Potentiale beschrieben werden. Aus obigen Gleichungen ist jedoch sofort abzulesen, dass die Potentiale nicht eindeutig bestimmt sind. Das heißt, verschiedene Potentiale Φ , \vec{A} können die gleiche Physik, welche durch \vec{E} und \vec{B} messbar ist, beschreiben. Dies ist jedoch nicht problematisch, weil sie keine wirklich physikalischen Größen repräsentieren. Im Gegensatz zu den elektrischen und magnetischen Feldern \vec{E} und \vec{B} sind die Potentiale nämlich nicht direkt messbar. Diese fehlende Eindeutigkeit bedeutet lediglich, dass ein Eichfreiheitsgrad existiert, der es erlaubt, die Potentiale in festgelegten Grenzen frei zu bestimmen.

Im Fall der Elektrostatik ($\vec{A} = 0$) gilt beispielsweise

$$\vec{E}(\vec{x}) = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{x}).\tag{2.1.15}$$

Wird ein $\Phi'(\vec{x})$ gewählt, für welches

$$\vec{E}(\vec{x}) = -\vec{\nabla}\Phi(\vec{x}) = -\vec{\nabla}\Phi'(\vec{x}) = \vec{E}'(\vec{x})\tag{2.1.16}$$

gilt, so ist das beschriebene System physikalisch invariant unter der sogenannten Eichtransformation $\Phi \rightarrow \Phi'$. In diesem speziellen Beispiel muss diese Transformation die Gleichung

$$\Phi(\vec{x}) \rightarrow \Phi'(\vec{x}), \quad \Phi'(\vec{x}) = \Phi(\vec{x}) + C\tag{2.1.17}$$

erfüllen. Das Φ' genügt dabei Gleichung (2.1.16), falls $\vec{\nabla}C = 0$ gilt. Die eingeführte Eichfunktion C darf also nicht von Raum und Zeit abhängen. Deshalb besitzt die Elektrostatik eine globale Eichsymmetrie.

Wird hingegen die gesamte Elektrodynamik beschrieben, so kann durch Einsetzen in (2.1.14) leicht nachgewiesen werden, dass die messbaren elektromagnetischen Felder und damit die Physik des Systems unter der Eichtransformation

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{x}, t) &\rightarrow \Phi'(\vec{x}, t) = \Phi(\vec{x}, t) + \frac{\partial\chi(\vec{x}, t)}{\partial t} \\ \vec{A}(\vec{x}, t) &\rightarrow \vec{A}'(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t) + \vec{\nabla}\chi(\vec{x}, t)\end{aligned}\quad (2.1.18)$$

invariant sind. Einzige Bedingung an die Eichfunktion $\chi(\vec{x}, t)$ ist ihre Skalarwertigkeit, insbesondere kann sie aber von Raum und Zeit abhängen. Damit besitzt die klassische Elektrodynamik eine lokale Eichsymmetrie.

Naiv sollte angenommen werden, dass die bisherige Eichung problemlos auf die klassische Elektrodynamik in der Quantenmechanik übertragen werden kann. Die Beschreibung in der nicht-relativistischen Quantenmechanik ändert schließlich die Felder und Potentiale nicht. In dieser Theorie wird ein Teilchen im elektromagnetischen Feld durch die Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{p} - q\vec{A}(\vec{x}, t) \right)^2 + q\Phi(\vec{x}, t) \quad (2.1.19)$$

beschrieben. Hierbei stellt q die elektrische Ladung dar. Es stellt sich jedoch heraus, dass die lokale Eichsymmetrie gegenüber der Transformation (2.1.18) verloren geht. Eine lokale Eichsymmetrie ist nur dann vorhanden, wenn die quantenmechanische Wellenfunktion durch die Eichung ebenfalls ortsabhängig transformiert wird. Da die Wellenfunktion genau wie die elektromagnetischen Potentiale keine direkt messbare Größe darstellt und lediglich Betragsquadrate und Phasendifferenzen messbar sind, ist dies auch nicht weiter problematisch.

Ein freies Teilchen, welches durch die Schrödingergleichung beschrieben wird, ist bereits invariant bezüglich der globalen Transformation, die durch

$$\psi'(\vec{x}, t) = \exp(-iCt) \cdot \psi(\vec{x}, t) \quad (2.1.20)$$

vermittelt wird.¹ Durch die Erweiterung auf eine lokale Transformation der Wellenfunktion ist die Elektrodynamik in der Quantentheorie insgesamt wieder lokal eichinvariant, sofern wie folgt transformiert wird:

$$\begin{aligned}\Phi(\vec{x}, t) &\rightarrow \Phi'(\vec{x}, t) = \Phi(\vec{x}, t) + \frac{\partial\chi(\vec{x}, t)}{\partial t} \\ \vec{A}(\vec{x}, t) &\rightarrow \vec{A}'(\vec{x}, t) = \vec{A}(\vec{x}, t) + \vec{\nabla}\chi(\vec{x}, t) \\ \psi(\vec{x}, t) &\rightarrow \psi'(\vec{x}, t) = \exp(-i\chi(\vec{x}, t)) \cdot \psi(\vec{x}, t).\end{aligned}\quad (2.1.21)$$

¹Durch Bildung des Betragsquadrats fällt der Phasenfaktor weg. Eine lokale Symmetrie ist hingegen nicht gegeben, weil sonst Auswirkungen auf Phasendifferenzen messbar wären.

Dabei sollte betont werden, dass die lokale Eichinvarianz der Wellenfunktion erst in der wechselwirkenden Theorie möglich ist. Die Wellenfunktion eines freien Teilchens besitzt in der nicht-relativistischen Quantenmechanik lediglich eine globale Eichsymmetrie. Ferner ist die lokale Eichinvarianz der Wellenfunktion sogar zwingend erforderlich, um eine zur klassischen Elektrodynamik konsistente Beschreibung in der Quantenmechanik zu erhalten. Auf diesem Sachverhalt basiert das Eichprinzip. Es postuliert den Zusammenhang zwischen Eichsymmetrie und Wechselwirkung und ermöglicht die Einführung einer solchen Wechselwirkung allein aufgrund der Annahme einer lokalen Symmetrie.

2.1.2.2. Das Eichprinzip

Statt wie im letzten Abschnitt lediglich festzustellen, dass der Übergang einer freien Theorie zu einer wechselwirkenden Theorie das Vorliegen einer lokalen Eichsymmetrie erfordert, kann der entgegengesetzte Ansatz verwendet werden: es wird vorausgesetzt, dass die freie Theorie lokal eichinvariant sein soll, was zwangsläufig den Übergang zu einer wechselwirkenden Theorie erfordert. Diese Voraussetzung führt dann auf die Notwendigkeit der Einführung sogenannter Eichfelder, die die Wechselwirkung vermitteln. Diese Vorgehensweise wird Eichprinzip genannt.

Als Beispiel sei die durch die Dirac-Gleichung beschriebene Theorie einer relativistischen Quantenmechanik genannt. Die freie Theorie besitzt hier folgende Bewegungsgleichung für die Spinoren ψ :

$$\left(-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} - i\frac{\partial}{\partial t} + \beta m \right) \psi(\vec{x}, t) = 0. \quad (2.1.22)$$

Dabei ist

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (2.1.23)$$

eine mögliche Wahl für die Koeffizienten, $\vec{\alpha}$ ist ein Vektor im Ortsraum von Matrizen im Spinorraum. In relativistisch kovarianter Schreibweise ergibt sich

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(\vec{x}, t) = 0, \quad (2.1.24)$$

wobei γ_μ die Gamma-Matrizen repräsentieren und die Einsteinsche Summenkonvention genutzt wurde. Diese Gleichung ist erwartungsgemäß so nicht lokal eichinvariant. Das Eichprinzip diktiert nun die Einführung einer Wechselwirkung, um diese lokale Eichinvarianz zu erfüllen. Es stellt sich heraus, dass der einzige Weg hierfür die Einführung einer sogenannten *kovarianten Ableitung* darstellt:

$$\partial^\mu \rightarrow D^\mu = \partial^\mu + iqA^\mu. \quad (2.1.25)$$

A^μ ist dabei das neu eingeführte Eichfeld und im Fall der elektromagnetischen Wechselwirkung durch

$$A^\mu = (\Phi, \vec{A}) \quad (2.1.26)$$

gegeben. Die dadurch entstandene Bewegungsgleichung ist lokal eichinvariant gegenüber der Transformation (2.1.21), welche in relativistisch kovarianter Form als

$$\begin{aligned} A^\mu(\vec{x}, t) &\rightarrow A'^\mu(\vec{x}, t) = A^\mu(\vec{x}, t) + \partial^\mu \chi(\vec{x}, t) \\ \psi(\vec{x}, t) &\rightarrow \psi'(\vec{x}, t) = \exp(-i\chi(\vec{x}, t)t) \cdot \psi(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (2.1.27)$$

geschrieben werden kann. Bei den ψ 's handelt es sich hier um Spinoren und nicht um einfache Wellenfunktionen.

Das Eichprinzip erweist sich als sehr nützlich für die Formulierung der wechselwirkenden Theorien. Vor allem interessant ist aber, dass die dadurch entstehenden Wechselwirkungen nicht für sich postuliert werden, sondern sich als Folge der vorausgesetzten inneren Symmetrie erweisen.

2.1.2.3. Eichsymmetrien in Quantenfeldtheorien

In den Quantenfeldtheorien ist das Konzept prinzipiell das Gleiche wie beim Elektromagnetismus in der Quantenmechanik. Dort ist eine Eichsymmetrie ebenfalls durch Invarianz gegenüber einer Transformation

$$\hat{\psi}(\vec{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}'(\vec{x}, t) \quad (2.1.28)$$

gegeben. Transformiert werden müssen hier allerdings die Quantenfelder. Diese Transformationen werden durch Multiplikation mit einem Phasenfaktor vermittelt, wie in (2.1.27) bereits dargestellt:

$$\hat{\psi}'(\vec{x}, t) = \exp(-i\hat{\chi}(\vec{x}, t)t)\hat{\psi}(\vec{x}, t). \quad (2.1.29)$$

Im allgemeinen Fall ist es nun aber möglich, dass zwei unterschiedliche Eichtransformationen untereinander nicht kommutieren. Kommutativität ist im oben beschriebenen Fall der Elektrodynamik gegeben, weil die Eichtransformation durch Addition einer reellwertigen Funktion bzw. durch Multiplikation mit einem skalarwertigen Faktor entsteht. In den Quantenfeldtheorien wird die Transformation allerdings im Allgemeinen durch Multiplikation mit möglicherweise operatorwertigen Funktionen vermittelt, die nicht notwendigerweise kommutieren müssen. Eichtheorien werden deshalb in abelsche (kommutierende Transformationen) und nichtabelsche (nicht-kommutierende Transformationen) Theorien unterteilt. Nichtabelsche Eichtheorien sind im Allgemeinen weitaus komplexer und bringen fundamentale Neuerungen wie die Selbstwechselwirkung der Eichfelder mit sich. Die Quantenchromodynamik ist ein Beispiel für eine solche nichtabelsche Eichtheorie, ebenso wie das im nächsten Abschnitt beschriebene supersymmetrische Modell, das in dieser Arbeit benutzt werden soll.

2.2. Überblick zum verwendeten supersymmetrischen Modell

In diesem Abschnitt soll in aller Kürze auf das bei der Messung der Daten genutzte Modell eingegangen werden. Hier soll lediglich die Wirkung präsentiert und erläutert werden. Weitergehende Informationen sind für die Fragestellung dieser Arbeit nicht relevant und können zum Beispiel in [Dem09] gefunden werden.

Nach dem Konzept der Supersymmetrie kann jedem Elementarteilchen ein sogenannter *Superpartner* zugeordnet werden kann. Diese Superpartner unterscheiden sich von den ihnen zugehörigen Teilchen bei ungebrochener Supersymmetrie lediglich im Spin, der eine Differenz von $\frac{1}{2}$ aufweist. Fermionen haben bosonische Superpartner und Bosonen haben fermionische Superpartner. Beide können dabei durch eine Symmetrieoperation ineinander umgewandelt werden.

Supersymmetrie kann in der Natur - wenn überhaupt - nur als gebrochene Symmetrie realisiert sein. Bei ungebrochener Symmetrie besäßen die jeweiligen Partnerteilchen auch gleiche Massen, was der Beobachtung widersprechen würde, dass bis heute noch kein Superpartner gefunden wurde.

Das Modell, mit welchem die für diese Arbeit untersuchten Konfigurationen erzeugt wurden, ist die $N = 1$ supersymmetrische Yang-Mills-Theorie ($N = 1$ -SYM-Theorie). In der Einleitung wurde sie bereits grob erläutert. Im Grunde ist sie eine Yang-Mills-Theorie (nicht-abelsche Theorie) für Gluonen und ihre Superpartner. Dabei werden die Superpartner - die sogenannten Gluinos - durch lediglich *eine* Sorte Majorana-Fermionen miteinbezogen.

Die Wirkung dieser Theorie ist im Kontinuum durch

$$S = \int d^4x \left(-\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu} + \frac{i}{2} \bar{\lambda}^a (\not{D}\lambda)^a \right) \quad (2.2.1)$$

gegeben. Es sei darauf hingewiesen, dass es sich hierbei um die Darstellung in Minkowski-Metrik handelt und \not{D} gemäß der Feynman-Konvention zu verstehen ist:

$$\not{D} = \sum_{\mu=0}^3 \gamma^\mu \mathcal{D}_\mu. \quad (2.2.2)$$

Die bosonischen Felder und die Majorana-Spinoren liegen in der adjungierten Darstellung vor. Für diese gilt:

$$\begin{aligned} A_\mu(x) &= -ig A_\mu^a(x) T^a \\ \lambda(x) &= \lambda^a(x) T^a. \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

Die T^a sind dabei die Generatoren der zugrundeliegenden Eichgruppe; im Fall des in dieser Arbeit benutzten Modells sind das die Generatoren der Gruppe $SU(2)$. Dementsprechend ist a der Farbindex und kann dabei Werte zwischen 1 und $N_c^2 - 1 = 3$ annehmen. g bezeichnet die Kopplungsstärke.

Die kovariante Ableitung \mathcal{D}_μ wird in diesem Modell durch

$$(\mathcal{D}_\mu \bar{\lambda})^a = \partial_\mu \bar{\lambda}^a + g f_{abc} A_\mu^b \bar{\lambda}^c \quad (2.2.4)$$

beschrieben.

Zusätzlich kann und soll noch ein weiterer Term in das Integral der Wirkung eingeführt werden:

$$\mathcal{L}_{\tilde{g}} = -\frac{m_{\tilde{g}}}{2} (\bar{\lambda}^a \lambda^a). \quad (2.2.5)$$

Dieser Term führt eine Masse für die Gluinos ein und bricht so die Supersymmetrie.

Der wichtigste Unterschied zwischen „klassischen“ Theorien wie um Beispiel der QCD und dem hier vorgestellten Modell ist das verschiedene Transformationsverhalten der Fermionen beider Modelle und die in der supersymmetrischen Theorie zusätzliche Invarianz gegenüber Supersymmetrie-Transformationen

$$\begin{aligned} A_\mu(x) &\rightarrow A_\mu(x) + \delta A_\mu(x) = A_\mu(x) - 2g \bar{\lambda}(x) \gamma_\mu \varepsilon \\ \lambda(x) &\rightarrow \lambda(x) + \delta \lambda(x) = \lambda(x) - \frac{i}{g} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \varepsilon \\ \bar{\lambda}(x) &\rightarrow \bar{\lambda}(x) + \delta \bar{\lambda}(x) = \bar{\lambda}(x) + \frac{i}{g} \bar{\varepsilon} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x), \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

wobei ε den sogenannten *fermionischen Parameter* darstellt.

Wie in der Einleitung bereits erwähnt, ähnelt die hier verwendete supersymmetrische Wirkung von der Form her der Wirkung der Quantenchromodynamik. Jedoch sind lediglich die Gluonen in beiden Theorien vorhanden. Quarks werden in der hier dargestellten Theorie nicht beschrieben. Der fermionische Teil der Wirkung, der der Wirkung der Quarks in der QCD ähnelt, beschreibt hier die Superpartner der Gluonen, die Gluinos. Die Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_G = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{a\mu\nu}$$

beschreibt demnach die Dynamik und Kinematik der Gluonen und

$$\mathcal{L}_F = \frac{i}{2} \bar{\lambda}^a (\not{D} \lambda)^a$$

die der Gluinos.

Die Farbindizes a , b und c wurden hier explizit ausgeschrieben. Auf eine Aufsummierung wurde der Übersichtlichkeit wegen aber verzichtet.

2.3. Gittereichtheorien

Die störungstheoretische Betrachtung von elementaren Prozessen durch Feynman-Graphen hat sich als sehr nützliches Werkzeug zur Beschreibung von Phänomenen der Quantenfeldtheorien erwiesen. Insbesondere im Rahmen der Quantenelektrodynamik werden außerordentlich gute Ergebnisse erzielt. Auch in der Quantenchromodynamik können im hochenergetischen Fall, in dem die Teilchen *asymptotische Freiheit* besitzen, mit dem Experiment verträgliche Vorhersagen getroffen werden. Sollen hingegen niederenergetische Prozesse beschrieben werden, so ist die Anwendung der Störungstheorie ausgeschlossen, weil ihre Kernvoraussetzung - die Kleinheit der Kopplung - nicht mehr gegeben ist. In diesem Energiebereich sind Phänomene wie das Confinement farbgeladener Objekte zu erwarten. Auch binden sich hier die Quarks zu Hadronen. Es besteht also die Notwendigkeit einer nicht-störungstheoretischen Methode, um diesen Energiebereich beschreiben zu können.

Ein Ansatz, um zu diesem Energiebereich vordringen zu können, stellt die Gittereichtheorie dar, die insbesondere auch für numerische Simulationen hervorragend geeignet ist. Kenneth Wilson entwickelte 1974 erste Ideen hierfür [Wil74]. Die Idee ist einfach: die kontinuierliche Raumzeit soll durch ein diskretes vierdimensionales Gitter aus Raumzeit-Punkten ersetzt werden. Dabei soll das Gitter selbst keine physikalische Realität abbilden, sondern lediglich als Hilfskonstrukt dienen. Die Theorie geht also nicht davon aus, dass die Raumzeit wirklich in Form eines kubischen Gitters vorliegt. Gittereichtheorien stellen damit eine Rechenmethode dar, mit der auch der störungstheoretisch unzugängliche Bereich abgedeckt werden kann. Neue Ergebnisse werden heute in der Regel durch Monte-Carlo-Simulationen erlangt, allerdings bietet bereits die analytische Untersuchung der Eichtheorien auf dem Gitter konzeptionell neue Einsichten. Beispielsweise kann das Confinement der QCD im Grenzfall starker Kopplung in der reinen Eichtheorie relativ einfach gezeigt werden, ohne Simulationen durchführen zu müssen. Gleichzeitig treten Probleme mit Ultraviolettdivergenzen, wie sie zum Beispiel aus der QED oder der QCD bekannt sind, hier erst gar nicht auf.

Im Folgenden soll nun dargestellt werden, wie eine Gittereichtheorie formuliert werden kann. Basis hierfür soll der Pfadintegralformalismus sein, der den Vorteil mitbringt, keine operatorwertigen Größen zu verwenden. Die im Anschluss beschriebene Gitterdiskretisierung ist in diesem Formalismus schnell geschehen. Schwieriger wird es dann bei den Fermionen und Eichfeldern, die auf das Gitter gebracht werden sollen. Abschließend soll in diesem Abschnitt auf Eigenschaften der reinen Eichtheorie eingegangen und insbesondere ein erster Einblick in die für das statische Potential wichtigen Wilson-Loops gegeben werden.

Mit Ausnahme des ersten Unterabschnitts zu Pfadintegralen basiert die Vorgehensweise und die Auswahl der Themen auf der Darstellung in [GL10]. Der Pfadintegral-Abschnitt orientiert sich an [MW00].

2.3.1. Der Pfadintegralformalismus

Der aus der Quantenmechanik bekannte Pfadintegralformalismus ist geradezu prädestiniert zur Diskretisierung von Raum und Zeit. Der Formalismus beschreibt Übergangsamplituden anschaulich durch eine Integration über alle möglichen Bahnen, die das System von Zustand $|x\rangle$ zu Zustand $|x'\rangle$ durchlaufen kann. Dadurch ergibt sich im Kontinuum ein unendlichdimensionales Integral mit der bekannten Form

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \int \mathcal{D}x \exp(iS). \quad (2.3.1)$$

Bei diskreter Raumzeit ist die maximale Anzahl der unterscheidbaren Bahnen endlich und somit einer numerischen Berechnung prinzipiell zugänglich.

Zunächst sollen hier noch einmal kurz die Grundlagen des Formalismus in der Quantenmechanik dargestellt werden, bevor dieser auf die Funktionalintegrale in der Quantenfeldtheorie angewendet wird.

2.3.1.1. Pfadintegrale in der Quantenmechanik

Von Interesse sind Übergangsamplituden $\langle x', t' | x, t \rangle$, deren Betragsquadrate die Wahrscheinlichkeit zum Übergang von Zustand $|x, t\rangle$ zu Zustand $|x', t'\rangle$ beschreiben. Zur Darstellung der Amplituden in Form von Pfadintegralen wird nun wie folgt vorgegangen: Ausgangspunkt sei ein quantenmechanisches System, dessen Hamiltonoperator der Einfachheit halber als nicht explizit zeitabhängig angenommen wird,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x). \quad (2.3.2)$$

Das Potential V darf jedoch explizit vom Ort abhängen. Die Zeitabhängigkeit der Übergangsamplitude kann dann durch den Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{T}(t', t) = \exp[-i\hat{H}(t' - t)] \quad (2.3.3)$$

dargestellt werden. Es gilt also

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \langle x' | \hat{T}(t', t) | x \rangle. \quad (2.3.4)$$

Der Zeitentwicklungsoperator $\hat{T}(t', t)$ kann auch als Hintereinanderausführung von N Zeitentwicklungsoperatoren aufgefasst werden, die den Zustand jeweils um ein Zeitintervall $\Delta t = (t' - t)/N$ weiterentwickeln. Dann folgt mit

$$\hat{T}(t', t) = \exp[-i\hat{H}(t' - t)] = \underbrace{\exp(-i\hat{H}\Delta t) \cdots \exp(-i\hat{H}\Delta t)}_{N\text{-mal}} \quad (2.3.5)$$

die Gleichung

$$\Rightarrow \langle x', t' | x, t \rangle = \langle x' | \hat{T}(t', t) | x \rangle = \langle x' | \exp(-i\hat{H}\Delta t) \cdots \exp(-i\hat{H}\Delta t) | x \rangle. \quad (2.3.6)$$

Dieser Ausdruck kann mit Hilfe der Vollständigkeitsrelation $\mathbb{1} = \int dx_i |x_i\rangle \langle x_i|$ in Integralform gebracht werden. Dazu wird diese $(N - 1)$ -mal eingesetzt:

$$\begin{aligned} \langle x', t' | x, t \rangle &= \int dx_{N-1} \cdots dx_1 \langle x' | \exp(-i\hat{H}\Delta t) | x_{N-1} \rangle \cdots \langle x_1 | \exp(-i\hat{H}\Delta t) | x \rangle \\ &= \int dx_{N-1} \cdots dx_1 \prod_{j=1}^N \langle x_j | \exp(-i\hat{H}\Delta t) | x_{j-1} \rangle, \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

wobei $x_N := x'$ und $x_0 := x$ definiert wurden. In dieser Form werden die Übergangsamplituden als Integrale repräsentiert.

Die wahre Stärke des Pfadintegralformalismus liegt allerdings in der Tatsache, dass sämtliche operatorwertigen Größen in Zahlen umgewandelt werden. Das ist von großem Vorteil, weil diese numerisch sehr viel leichter zu handhaben sind. Deshalb muss das Matrixelement $\langle x_j | \exp(-i\hat{H}\Delta t) | x_{j-1} \rangle$ nun explizit ausgerechnet werden.

Diese Matrixelemente können als abschnittsweise Übergangsamplituden interpretiert werden und können zur Vereinfachung zunächst approximiert werden. Dazu wird die Exponentialfunktion gemäß der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel in ihre Anteile aufgeteilt, wobei die Korrekturterme vernachlässigt werden. Es folgt dann

$$\langle x_j | \exp(-i\hat{H} \cdot \Delta t) | x_{j-1} \rangle \approx \langle x_j | \exp(-i\hat{H}_0 \cdot \Delta t) | x_{j-1} \rangle \exp(-iV(x_{j-1})\Delta t), \quad (2.3.8)$$

wobei mit $H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ substituiert wurde. Gleichzeitig wurde ausgenutzt, dass das Potential V lediglich vom Ort abhängt. Das verbleibende Matrixelement ist nun leicht auszuwerten, indem die Vollständigkeitsrelation bezüglich der Impulseigenzustände,

$$\mathbb{1} = \int dp |p\rangle \langle p|, \quad (2.3.9)$$

eingesetzt wird. Damit kann wie folgt vorgegangen werden:

$$\begin{aligned} \langle x_j | \exp(-i\hat{H}_0 \cdot \Delta t) | x_{j-1} \rangle &= \langle x_j | \exp\left(-i\frac{\hat{p}^2}{2m} \cdot \Delta t\right) | x_{j-1} \rangle \\ &= \int dp \langle x_j | \exp\left(-i\frac{\hat{p}^2}{2m} \cdot \Delta t\right) | p \rangle \langle p | x_{j-1} \rangle \\ &= \int dp \exp\left(-i\frac{p^2}{2m} \cdot \Delta t\right) \langle x_j | p \rangle \langle p | x_{j-1} \rangle. \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

Hier wurde ausgenutzt, dass $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$ gilt. Die Entwicklungskoeffizienten $\langle x | p \rangle$ sind aus der Quantenmechanik als

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ipx) \quad (2.3.11)$$

bekannt. Unter Ausnutzung dieser Formel kann das Integral (2.3.10) als Gaußintegral gelöst werden[MW00, S. 6]:

$$\langle x_j | \exp(-i\hat{H}_0 \cdot \Delta t) | x_{j-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \Delta t}} \exp \left\{ i \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta t} \right)^2 \right] \right\}. \quad (2.3.12)$$

Wird dieses Ergebnis in (2.3.7) eingesetzt, so folgt

$$\int dx_{N-1} \cdots dx_1 \sqrt{\frac{m}{2\pi i \Delta t}}^N \exp \left\{ i \sum_{j=1}^N \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta t} \right)^2 - V(x_{j-1}) \right] \right\}. \quad (2.3.13)$$

Dabei wurde das Produkt als Summe in das Argument der Exponentialfunktion gezogen und das Potential V direkt in diese integriert. Um die aus der Quantenmechanik bekannte Form für das Pfadintegral zu erreichen, wird das Zeitintervall Δt als infinitesimal klein betrachtet. Dies entspricht anschaulich einer Aufteilung des Zeitentwicklungsoperators in unendlich viele Operatoren. Hierdurch wird die Summe im Argument der Exponentialfunktion im Riemannschen Sinne zum Integral:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\Delta t} \right)^2 - V(x_{j-1}) \right] \\ & \rightarrow \int_t^{t'} d\tilde{t} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tilde{t}} \right)^2 - V(x) \right] \text{ für } N \rightarrow \infty \\ & = S. \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

Die Größe S ist hierbei eine Definition der aus der analytischen Mechanik und dem Lagrange-Formalismus bekannten Wirkung. Mit der Notation folgt dann die eingangs vorgestellte Pfadintegraldarstellung der Übergangsamplitude

$$\langle x', t' | x, t \rangle = \int \mathcal{D}x \exp(iS). \quad (2.3.15)$$

Die rechte Seite der Gleichung enthält jetzt keine operatorwertigen Größen mehr und lediglich die Wirkung S aller möglichen Pfade des Teilchens ist von Nöten, um die Übergangswahrscheinlichkeit zu berechnen.

2.3.1.2. Erweiterung auf die Quantenfeldtheorie

Der für die *Quantenmechanik* entwickelte Formalismus zur Beschreibung der Übergangsamplituden durch Pfadintegrale lässt sich auf die *Quantenfeldtheorie* verallgemeinern. Hier sind die Vakuum Erwartungswerte

$$\langle 0 | \hat{\phi}(x_n) \cdots \hat{\phi}(x_1) | 0 \rangle \quad (2.3.16)$$

von Interesse, wobei $\hat{\phi}(x_i)$ die Feldoperatoren bei den Raumzeitkoordinaten $x_i = (\vec{x}_i, t_i)$ darstellen. Diese Erwartungswerte, die auch Greensche Funktionen genannt werden, enthalten alle physikalisch relevanten Informationen des beschriebenen Systems. Sie stellen in gewisser Weise das Analogon zu den Übergangsamplituden in der Quantenmechanik dar.

Zur Anwendung des Pfadintegralformalismus aus dem letzten Abschnitt müssen die folgenden Übersetzungsregeln beachtet werden [MW00, S. 8]:

$$\begin{aligned} x_i(t) &\leftrightarrow \hat{\phi}(\vec{x}, t) \\ i &\leftrightarrow \vec{x} \\ \prod_{t,i} dx_i(t) &\leftrightarrow \prod_{t,\vec{x}} d\phi(\vec{x}, t) =: \mathcal{D}\phi \\ S = \int dt L &\leftrightarrow S = \int dt d^3x \mathcal{L}. \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

Hierdurch wird lediglich die Feldnatur von $\phi(\vec{x}, t)$ berücksichtigt. Dementsprechend ist die physikalische Basis auch nicht länger die Lagrangefunktion sondern die Lagrangedichte, wie in Feldtheorien üblich. Analog zum quantenmechanischen Pfadintegral ergibt sich das quantenfeldtheoretische Funktionalintegral dann durch [MW00, S. 9]

$$\langle 0 | \hat{\phi}(x_n) \dots \hat{\phi}(x_1) | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_n) \dots \phi(x_1) \exp(iS), \quad (2.3.18)$$

wobei $Z = \int \mathcal{D}\phi \exp(iS)$ die sogenannte *Zustandssumme* ist. Zu beachten ist hier, dass die $\phi(x_i)$ auf beiden Seiten der Gleichung unterschiedliche mathematische Objekte repräsentieren. Links finden sich Operatoren, rechts hingegen sind es ganz normale Felder.

Die Darstellung des Funktionalintegrals in (2.3.18) kann allerdings noch modifiziert werden, um die numerische Berechnung zu vereinfachen. Störend ist hier der oszillierende Faktor $\exp(iS)$, welcher lediglich Werte auf dem komplexen Einheitskreis annehmen kann und deswegen Fragen zur Konvergenz des Integrals aufwirft. Um die Oszillation loszuwerden, liegt es nahe, den Faktor $\exp(iS)$ so zu transformieren, dass sein Argument reell ist. Dies ist tatsächlich möglich, indem zu imaginären Zeiten $t = -i\tau$ übergegangen wird. Im Grunde handelt es sich hierbei um eine einfache Koordinatentransformation. Es ergibt sich dann für das Funktionalintegral

$$\frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_n) \dots \phi(x_1) \exp(-S_E), \quad (2.3.19)$$

wobei sich die Wirkung S_E durch den Übergang $t \rightarrow -i\tau$ ergibt. Die Zustandssumme Z muss ebenfalls transformiert werden und ist nun durch

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp(-S_E) \quad (2.3.20)$$

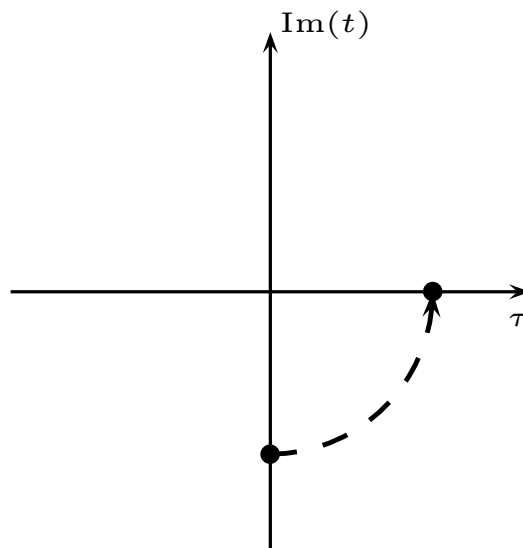


Abbildung 2.1.: Grafische Darstellung der Wick-Rotation.

gegeben. Der Index E soll andeuten, dass es sich bei dieser Wirkung um die *euklidische* Wirkung handelt. Durch die Transformation wird die benutzte Minkowski-Metrik

$$-ds^2 = -dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 \quad (2.3.21)$$

zur euklidischen Metrik

$$-ds^2 = d\tau^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (2.3.22)$$

Wird diese Transformation genutzt, so wird von einer euklidischen Feldtheorie gesprochen. Nach dem Übergang zu imaginärer Zeit - also in euklidischer Metrik - werden die Berechnungen durchgeführt. Um letztlich jedoch die physikalisch relevanten Ergebnisse zu ermitteln, muss natürlich wieder zurücktransformiert werden. Dies geschieht durch die Rückkehr zu reellen Zeiten. Dieser Vorgang wird als Wick-Rotation bezeichnet, welche allgemein ein in euklidischer Metrik gelöstes Problem auf die Minkowski-Metrik überträgt. Rotation wird diese Prozedur deshalb genannt, weil die Transformation vermittelnde Multiplikation mit $-i$ gerade als Drehung in der komplexen Ebene um $\pi/2$ interpretiert werden kann (siehe Abb. 2.1).

Die Vorteile der Darstellung in Gleichung (2.3.19) sind offensichtlich: der vormals komplex-oszillierende Faktor $\exp(iS)$ ist nun eine exponentielle Gewichtung des Integranden, die mit steigender Wirkung S_E abfällt. Dadurch werden Pfade mit hoher Wirkung, also starker Fluktuation, exponentiell unterdrückt. Ebenso existiert aufgrund des Prinzips der minimalen Wirkung ein minimales S_E und damit ein maximales $\exp(-S_E)$. Gleichzeitig ist die rechentechnische Realisierung zumindest für die Berechnung des Funktionalintegrals einfacher, weil der Integrand reell ist.

2.3.2. Grundlagen der Gitterdiskretisierung

Die Benutzung des Pfad- bzw. Funktionalintegralformalismus ist deshalb so nützlich für Gittertheorien, weil eine Diskretisierung hier relativ einfach zu bewerkstelligen ist. Eine Beschreibung auf dem Gitter bedeutet, wie eingangs bereits beschrieben, eine Diskretisierung der Raumzeit, bei der lediglich ein endliches Volumen betrachtet wird. Das heißt, die physikalischen Objekte sind nur für Punkte einer endlichen Menge und deren Verbindungen definiert. Die Menge der Punkte ist durch

$$\Lambda = \{x | x_\mu = a \cdot n_\mu\} \text{ mit } n_\mu \in G_\mu \quad (2.3.23)$$

gegeben. a ist hierbei der physikalische Abstand zwischen zwei Gitterpunkten, G_μ beschreibt die Menge der betrachteten Gitterpunkte in μ -Richtung. Um nun Pfadintegrale auf dem Gitter zu betrachten, bedarf es prinzipiell lediglich zwei Übersetzungsvorschriften:

- Raumzeitintegrale gehen in Summen über

$$\int d^4x \rightarrow \sum_x a^4. \quad (2.3.24)$$

- Partielle Ableitungen werden zu Differenzen²

$$\nabla_\mu = \frac{\phi(x + a\mu) - \phi(x - a\mu)}{2a}, \quad (2.3.25)$$

wobei μ den Einheitsvektor in μ -Richtung darstellt.

Im Folgenden soll - wie es in vielen Publikationen üblich ist - auf die Darstellung etwaiger Vektorpfeile verzichtet werden.

Ein einfaches Beispiel, an dem die Gitterdiskretisierung nachvollzogen werden kann, ist das Klein-Gordon-Feld mit der Wirkung:

$$S = \int dt d^3x \frac{1}{2} (\partial_\mu \phi(x, t)) (\partial^\mu \phi(x, t)) - \frac{m^2}{2} \phi(x, t)^2 - V(\phi(x, t)). \quad (2.3.26)$$

In euklidischer Metrik wird diese Wirkung durch Diskretisierung dann zu:

$$S_E = a^4 \sum_{x \in \Lambda} \left[\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^4 \left(\frac{\phi(x + \mu) - \phi(x - \mu)}{2a} \right)^2 + \frac{m^2}{2} \phi(x)^2 + V(\phi(x)) \right]. \quad (2.3.27)$$

²Hier ist die diskrete Darstellung der Ableitung unter anderem durch die Differenz von $\phi(x)$ und $\phi(x + \mu)$, oder von $\phi(x - \mu)$ und $\phi(x + \mu)$ möglich. Letzteres beschreibt die symmetrische Ableitung. Sie besitzt einen geringeren Diskretisierungsfehler[GL10, S. 19], weshalb sie im Folgenden betrachtet werden soll. Es sei hier angemerkt, dass die Ableitung auch in anderer Weise diskretisiert werden kann.

Es sei angemerkt, dass $\mu = 4$ hier die zeitliche Komponente darstellt, im Gegensatz zum Minkowski-Raum, in dem die Zeit durch $\mu = 0$ charakterisiert wird. Dadurch, dass zudem ein endliches Gitter betrachtet wird, wird das unendlichdimensionale Pfadintegral in (2.3.19) endlichdimensional, weil auf einem *endlichen* Gitter nur eine *endliche* Anzahl von unterscheidbaren Pfaden existiert.

Ganz analog zu den Phononen in der Festkörperphysik, die sich auf einem Gitter befinden, haben auch die hier beschriebenen Felder auf dem Gitter einen maximalen Impuls. Dadurch treten die in der kontinuierlichen Theorie problematischen Ultraviolettdivergenzen in Gittertheorien erst gar nicht auf.

Die Pfadintegrale sind bereits jetzt prinzipiell numerisch zugänglich. Im Gegensatz zur bloßen Beschreibung des Gitters und des Pfadintegrals auf diesem ist die Beschreibung physikalischer Objekte wie beispielsweise Fermionen oder Eichfelder auf dem Gitter eine komplexe Aufgabe. Nachfolgend soll der Fokus deshalb auf der Entwicklung der Wirkung des benutzten supersymmetrischen Modells liegen. Hierfür sollen zunächst die Fermionen - hier Gluinos - auf das Gitter gebracht werden, um dann anschließend durch die Anwendung des Eichprinzips die Eichfelder einzuführen.

Zuvor soll an dieser Stelle allerdings noch der Begriff des *Kontinuumslikes* erläutert werden.

Die im Formalismus des Gitters berechneten Größen besitzen neben allen Effekten zunächst allein schon dadurch eine Abweichung vom im Kontinuum evaluierten Wert, weil eben die Raumzeit als diskretes Gitter betrachtet wird. Um aus den auf dem Gitter berechneten Größen den Wert zu erhalten, der im Kontinuum erwartet wird, muss ein recht hoher Aufwand betrieben werden; das Prinzip ist jedoch einfach: Die Berechnung der Größen muss dafür auf mehreren Gittern, die sich lediglich durch ihren Gitterabstand unterscheiden, durchgeführt werden. Bei immer feiner werdendem Gitter, nähern sich auch die Werte der Observablen ihren Kontinuumswerten an. Da offensichtlich nicht unendlich feine Gitter betrachtet werden können, weil in diesem Fall immer größere Gitter zur Beibehaltung des physikalischen Volumens untersucht werden müssten, muss aus den Ergebnissen der verschiedenen Gitter der Wert für die Observable bei verschwindendem Gitterabstand $a = 0$ extrapoliert werden.

Eine genauere Beschreibung findet sich zum Beispiel in [GL10, S. 69] und in [Nec03, S. 11ff.].

2.3.3. Naive Diskretisierung von Fermionen

Die *naive Diskretisierung* von Fermionen³ ist die naheliegendste Prozedur, um Fermionen und ihre Kinematik auf das Gitter zu bringen. Sie verwendet lediglich die Diskretisierungsvorschriften, die bereits beim Pfadintegral von Nöten waren. Die auf diese Weise

³Die in den folgenden Abschnitten entwickelten Rechnungen und Beispiele orientieren sich am benutzten supersymmetrischen Modell. Allerdings sind die verwendeten Techniken allgemein anwendbar und können in ähnlicher Form auch in der QCD angewendet werden.

beschriebene freie Theorie der Fermionen ermöglicht über die Anwendung des Eichprinzips die Einführung der korrekten Eichfelder. Für Gluinos gilt folgende Wirkung für die freie Theorie im Kontinuum:

$$S_{\text{F,Kontinuum}}^0 = \frac{1}{2} \int d^4x \, \bar{\lambda}(x)(\gamma_\mu \partial_\mu + m_{\tilde{g}})\lambda(x). \quad (2.3.28)$$

Farbindizes wurden hier der Übersichtlichkeit wegen weggelassen, weil diese in der freien Theorie keine Rolle spielen. Es sei angemerkt, dass es sich hierbei um die euklidische Wirkung handelt. Im Folgenden soll immer in euklidischer Metrik gearbeitet werden. Wird nun die im letzten Abschnitt entwickelte Prozedur angewendet, so ergibt sich durch Summation statt Integration und Differenzbildung statt partieller Ableitung

$$S_{\text{F,naiv}}^0 = \frac{1}{2} a^4 \sum_{x \in \Lambda} \left[\sum_{\mu=1}^4 \bar{\lambda}(x) \gamma_\mu \frac{\lambda(x+\mu) - \lambda(x-\mu)}{2a} + m_{\tilde{g}} \bar{\lambda}(x) \lambda(x) \right]. \quad (2.3.29)$$

Damit ist die naive Diskretisierung bereits abgeschlossen und es besteht ein erster Ansatz für die Beschreibung freier Fermionen auf dem Gitter. Aus diesem lassen sich die Eichfelder wie erwähnt bereits in korrekter Weise ableiten. Dies soll in einem späteren Abschnitt geschehen. Zunächst soll hier jedoch auf Verbesserungen der Theorie eingegangen werden, weil die naive Diskretisierung zu Gitterartefakten, den sogenannten *fermion doublers*, führt.

2.3.4. Erweiterte Modelle für Fermionen auf dem Gitter

Obwohl im weiteren Verlauf dieser Arbeit der Schwerpunkt bei den Eichfeldern liegen wird, sollen zumindest einige wichtige Grundzüge der Theorie mit Fermionen dargestellt werden.

Der erste, naheliegendste Schritt hin zu einer verbesserten Beschreibung von Fermionen auf dem Gitter ist die Hinzunahme der Fermi-Statistik. In den Funktionalintegralen, auf denen ja die Berechnung der Vakuumerwartungswerte beruht, sind die Felder als klassische Felder enthalten. Dies ist einerseits ein Vorteil des Pfadintegralformalismus, weil die numerische Rechnung mit Operatoren problematisch ist. Andererseits muss dann auch sichergestellt sein, dass diese klassischen Felder im Fall der Beschreibung von Fermionen die Antikommutationsregeln reproduzieren.

2.3.4.1. Fermi-Statistik

Die Einführung der Fermi-Statistik wird durch Benutzung der sogenannten Grassmann-Zahlen ermöglicht. Diese haben unter anderem die fundamentale Eigenschaft:

$$\phi_i \phi_j = -\phi_j \phi_i, \quad (2.3.30)$$

reproduzieren also die Antisymmetrie der Fermionen unter Vertauschung. Die im Folgenden genutzten Fermionfelder sollen deshalb von diesem Typ sein. Hier soll nicht weiter auf die besonderen Eigenarten der Grassmann-Zahlen eingegangen werden, weil in dieser Arbeit nur eine grundlegende Beschreibung der Fermionen erfolgen soll und weitere Eigenschaften hierzu nicht von Nöten sind.

2.3.4.2. Fermion doubling

Das Phänomen des *fermion doubling* beschreibt das Auftreten von zusätzlichen - unphysikalischen - Fermionen. Es beschreibt den Grund, warum die naive Diskretisierung für physikalische Berechnungen nicht ausreicht. Um das Phänomen zu verdeutlichen, muss im Folgenden der Dirac-Operator auf dem Gitter betrachtet werden. Anzusetzen ist hier bei Gleichung (2.3.29), welche zunächst erweitert werden kann auf

$$S_{\text{F,naiv}}^0 = \frac{1}{2}a^4 \sum_{x,y \in \Lambda} \sum_{a,b,\alpha,\beta} \bar{\lambda}_a(x) \left[\sum_{\mu=1}^4 (\gamma_\mu)_{\alpha\beta} \frac{\delta_{ab}\delta_{x+\mu,y} - \delta_{ab}\delta_{x-\mu,y}}{2a} + m_{\tilde{g}}\delta_{ab}\delta_{\alpha\beta}\delta_{xy} \right] \lambda_b(y). \quad (2.3.31)$$

Hierbei wurden die Farbindizes a und b explizit angeführt, weil diese Darstellung bei der späteren Einführung der wechselwirkenden Theorie nützlich sein wird. Der Dirac-Operator ist hier durch

$$D(x,y)_{\alpha\beta,ab}^{\text{naiv}} = \sum_{\mu=1}^4 (\gamma_\mu)_{\alpha\beta} \frac{\delta_{ab}\delta_{x+\mu,y} - \delta_{ab}\delta_{x-\mu,y}}{2a} + m_{\tilde{g}}\delta_{ab}\delta_{\alpha\beta}\delta_{xy} \quad (2.3.32)$$

gegeben, die Wirkung lautet mit diesem dementsprechend

$$\Rightarrow S_{\text{F,naiv}}^0 = \frac{1}{2}a^4 \sum_{x,y \in \Lambda} \sum_{a,b,\alpha,\beta} \bar{\lambda}_a(x) D(x,y)_{\alpha\beta,ab}^{\text{naiv}} \lambda_b(y). \quad (2.3.33)$$

Der Dirac-Operator ist deshalb von Interesse, weil sein Inverses den Propagator der Fermionen darstellt. Durch Fouriertransformation und anschließende Invertierung der Matrix ergibt sich:

$$\tilde{D}(p)_{\text{naiv}}^{-1} = \frac{m_{\tilde{g}} - ia^{-1} \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \sin(p_{\mu}a)}{m_{\tilde{g}}^2 + a^{-2} \sum_{\mu} \sin^2(p_{\mu}a)}. \quad (2.3.34)$$

Dass die Fouriertransformierte von $D(x,y)$ bzgl. x und y eine Diagonalmatrix ist - deshalb auch die Abhängigkeit von nur *einem* Impuls p - kann durch die Impulserhaltung erklärt werden: die Impulse vor und nach der Propagation müssen übereinstimmen.⁴

⁴Eine explizite Rechnung zur Bestimmung des invertierten und fouriertransformierten Dirac-Operators im Fall der QCD kann zum Beispiel in [GL10, S. 111f.] oder in [Smi02, S. 151ff.] gefunden werden. Der hier dargestellte Rechenweg orientiert sich an Ersterem; die Unterschiede aufgrund der Nutzung des supersymmetrischen Modells sind dabei nur gering.

Im Kontinuumslimit, wenn also das Gitter immer feiner und feiner betrachtet werden und die Gluino-Masse gegen Null laufen würde, ergäbe sich der Propagator

$$\tilde{D}(p)_{\text{naiv}}^{-1} \xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{-i \sum_{\mu} \gamma_{\mu} p_{\mu}}{p^2}, \quad (2.3.35)$$

der dem Kontinuums-Propagator im Impulsraum entspricht. Für den Grenzwert wurde die Sinusfunktion in Gleichung (2.3.34) durch ihr Argument genähert. Im Fall masseloser Fermionen im Kontinuum hat dieser Propagator also eine Singularität bei $p = (0, 0, 0, 0)$, die ein einzelnes Fermion beschreibt, dessen Kinematik durch den Dirac-Operator bestimmt ist.

Auf dem Gitter ist der Propagator in (2.3.34) allerdings für beliebiges a periodisch in p_{μ} . Wären auf dem Gitter alle Impulse erlaubt, so gäbe es unendlich viele Singularitäten für alle $p_{\mu} = n \cdot \frac{\pi}{a}$ mit $n \in \mathbb{Z}$. Durch die Gitterdiskretisierung sind wie bereits erwähnt aber nicht alle Impulse erlaubt. Lediglich Impulse

$$p_{\mu} \in \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right] \quad (2.3.36)$$

können existieren.⁵ Damit reduziert sich die Anzahl der Singularitäten pro Impulsrichtung p_{μ} auf zwei Punkte, für die eine Singularität auftauchen kann: $p_{\mu} = \frac{\pi}{a}$ und $p_{\mu} = 0$, weshalb in der englischsprachigen Literatur auch von *fermion doubling* die Rede ist. Insgesamt ergeben für sich vier Raumzeitdimensionen aber immerhin 15 zusätzliche Singularitäten, die in der Kontinuumstheorie nicht auftreten und zudem noch vom verwendeten Gitterabstand a abhängen. Da das Gitter jedoch nur ein Hilfskonstrukt für die numerische Berechnung darstellt, bildet es selbst keine physikalische Realität ab. Die zusätzlichen Singularitäten können damit keine physikalische Realität besitzen.

2.3.4.3. Wilson-Fermionen

Eine mögliche Lösung für das Problem des *fermion doubling* stellt die Einführung eines neuen Terms im Dirac-Operator dar. Voraussetzung ist natürlich, dass dieser im Kontinuumslimit verschwindet und die unphysikalischen Singularitäten (*doublers*) im Fall endlicher Gitterabstände a entfernt. Vorgeschlagen wurde der folgende modifizierte Dirac-Operator im Impulsraum:

$$\tilde{D}(p) = m_{\tilde{g}} + \frac{i}{a} \sum_{\mu=1}^4 \gamma_{\mu} \sin(p_{\mu} a) + \underbrace{\frac{1}{a} \sum_{\mu=1}^4 (1 - \cos(p_{\mu} a))}_{\text{Wilson-Term}}. \quad (2.3.37)$$

Der physikalische Impuls $p = (0, 0, 0, 0)$ bleibt vom sogenannten Wilson-Term unberührt - dieser ergibt dann keinen Beitrag. Die anderen unphysikalischen Impulse werden allerdings entfernt und tauchen nicht mehr als Singularitäten im Impulsraum-Propagator

⁵Dies entspricht gerade der ersten Brillouin-Zone. Die offene Intervallgrenze ergibt sich dadurch, dass $p_{\mu} = -\frac{\pi}{a}$ durch die Periodizität bereits durch $p_{\mu} = +\frac{\pi}{a}$ gegeben ist.

$\tilde{D}(p)^{-1}$ auf [GL10, S. 113]. Für diese ergibt sich der Wilson-Term zu

$$\frac{1}{a} \sum_{\mu=1}^4 (1 - \cos(p_\mu a)) = \frac{2}{a} \cdot l, \quad (2.3.38)$$

wobei l die Anzahl der Impulsrichtungen mit dem Wert $p_\mu = \frac{\pi}{a}$ darstellt. Hierdurch wird das Kontinuumslimit in jedem Fall bewahrt: Der Wilson-Term wirkt wie eine zusätzliche Masse für den Fall einer unphysikalischen Singularität. Im Limes $a \rightarrow 0$ wird diese Masse unendlich groß, wodurch die unphysikalischen *doublers* von der Theorie entkoppeln. Der Beitrag zum nicht-invertierten Dirac-Operator im Ortsraum ergibt sich aus der Fouriertransformation von Gleichung (2.3.37) zu

$$D(x, y)_{\alpha\beta,ab}^{\text{Wilson}} = -a \sum_{\mu=1}^4 \frac{\delta_{ab} \delta_{x+\mu,y} + \delta_{ab} \delta_{x-\mu,y} + 2\delta_{ab} \delta_{xy}}{2a^2}. \quad (2.3.39)$$

Damit ergibt sich die Wirkung für freie Fermionen letztendlich zu [GL10, S. 113]:

$$\Rightarrow S_F^0 = \frac{1}{2} a^4 \sum_{x,y \in \Lambda} \sum_{a,b,\alpha,\beta} \bar{\lambda}_\alpha(x) D(x, y)_{\alpha\beta,ab}^0 \lambda_\beta(y) \quad (2.3.40)$$

mit

$$D(x, y)_{\alpha\beta,ab}^0 = (m_{\tilde{g}} + 4/a) \delta_{ab} \delta_{\alpha\beta} \delta_{xy} - \frac{1}{2a} \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} (\mathbb{1} - \gamma_\mu)_{\alpha\beta} \delta_{ab} \delta_{x+\mu,y}. \quad (2.3.41)$$

Es sollte noch einmal hervorgehoben werden, dass hier der Fall einer Theorie freier Fermionen betrachtet wurde, die erwartungsgemäß so nicht eichinvariant ist. Da die Eichfelder für die bisherige Betrachtung aber nicht benötigt wurden, wurde die Erweiterung des Fermion-Modells durch den Wilson-Term für die freie Theorie durchgeführt. Das dargestellte Prinzip ändert sich durch die Hinzunahme von Eichfeldern nicht, im Prinzip müssen lediglich die Deltadistributionen δ_{ab} durch Links V_{ab} ersetzt werden.⁶

2.3.5. Eichfelder und Eichinvarianz

Die bisher noch nicht betrachteten Eichfelder können im Gegensatz zu den Fermionen nicht einfach aus der Kontinuums-theorie auf das Gitter übertragen werden. Ihre Einführung geschieht über das Eichprinzip. Die Wirkung der in Abschnitt 2.3.3 naiv diskretisierten Fermionen dient dabei als freie Theorie, für welche dann die Forderung nach einer $SU(2)$ -Eichinvarianz im Fall des benutzten Modells auf die Einführung der

⁶Eine explizite Rechnung, die die Eichfelder in der QCD miteinbezieht, ist in [GL10, S. 112f.] zu finden. Für das hier verwendete Modell müssen zusätzlich noch die Links in adjungierter Darstellung benutzt werden (siehe Gl. (2.3.58)).

Eichfelder führt. Die *doublers* spielen für die Wirkung der Eichfelder keine Rolle, weshalb nicht unbedingt Wilson-Fermionen genutzt werden müssen. Ausgangspunkt soll deshalb der Einfachheit wegen die Wirkung naiv diskretisierter Fermionen sein,

$$S_{\text{F,naiv}}^0 = \frac{1}{2}a^4 \sum_{x \in \Lambda} \left[\sum_{\mu=1}^4 \bar{\lambda}(x) \gamma_\mu \frac{\lambda(x+\mu) - \lambda(x-\mu)}{2a} + m_{\tilde{g}} \bar{\lambda}(x) \lambda(x) \right]. \quad (2.3.42)$$

Gemäß dem Eichprinzip wird die Eichinvarianz gegenüber den Transformationen

$$\lambda'(x) \rightarrow \Omega(x) \lambda(x), \quad \bar{\lambda}'(x) \rightarrow \bar{\lambda}(x) \Omega^\dagger(x) \quad (2.3.43)$$

gefordert. $\Omega(x)$ sind die Elemente der Eichgruppe, also $\Omega(x) \in \text{SU}(2)$ im Fall des benutzten Modells. Davon soll in diesem Abschnitt ausgegangen werden; der dargestellte Vorgang an sich ist jedoch allgemeiner anwendbar.

Der Massenterm in (2.3.42) ist bereits eichinvariant und erfordert keine zusätzlichen Felder. Dagegen ist der kinetische Term problematisch. Der relevante Term verhält sich unter der Eichtransformation (2.3.43) wie folgt:

$$\begin{aligned} & \bar{\lambda}(x) \lambda(x+\mu) - \bar{\lambda}(x) \lambda(x-\mu) \\ \rightarrow & \bar{\lambda}(x) \Omega^\dagger(x) \Omega(x+\mu) \lambda(x+\mu) - \bar{\lambda}(x) \Omega^\dagger(x) \Omega(x-\mu) \lambda(x-\mu). \end{aligned} \quad (2.3.44)$$

Dieser Term ist nicht eichinvariant. Die Eichfelder $U_\mu(x)$, welche die Eichinvarianz herbeiführen sollen, sind jedoch einfach einzuführen. Sie werden zwischen den Fermionfeldern eingefügt, sodass der problematische Term *vor* der Transformation als

$$\bar{\lambda}(x) U_\mu(x) \lambda(x+\mu) - \bar{\lambda}(x) U_{-\mu}(x) \lambda(x-\mu) \quad (2.3.45)$$

geschrieben werden kann. Das Verhalten der Eichfelder unter einer Eichtransformation wird durch

$$U_\mu(x) \rightarrow \Omega(x) U_\mu(x) \Omega^\dagger(x+\mu), \quad U_{-\mu}(x) \rightarrow \Omega(x) U_{-\mu}(x) \Omega^\dagger(x-\mu) \quad (2.3.46)$$

definiert, wodurch sich die Ω 's gerade gegenseitig wegheben und der in (2.3.45) betrachtete Term eichinvariant ist. Dabei wurde die Definition

$$U_{-\mu}(x) = U_\mu^\dagger(x-\mu) \quad (2.3.47)$$

genutzt.

Die Eichfelder $U_\mu(x)$ werden auch als *Links* bezeichnet, weil sie jedem Verbindungsstück zwischen zwei Gitterpunkten - quasi jeder *Gitterstrebe* - zugeordnet werden können. Sie sind orientiert, $U_\mu(x)$ verläuft also vom Punkt x in μ -Richtung. Der entsprechende Link in Rückrichtung ist aber nicht unabhängig, sondern ergibt sich aus dem Link in Hinrichtung durch die Definition in Gleichung (2.3.47). Eine symbolische Darstellung findet

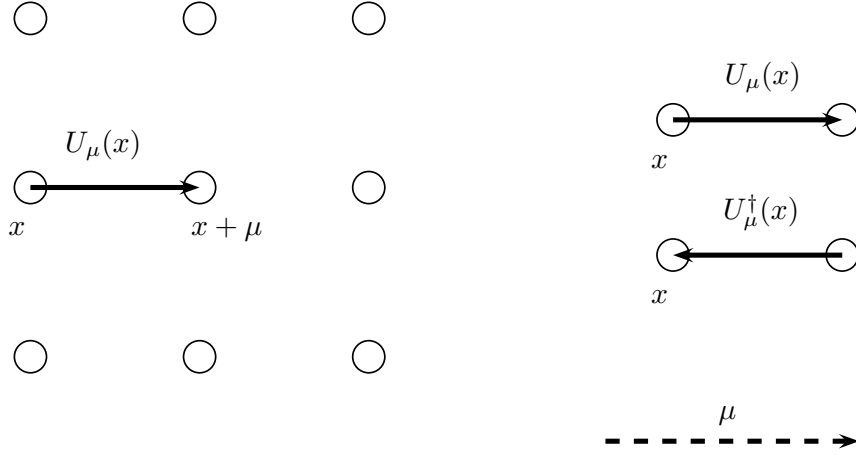


Abbildung 2.2.: Symbolische Darstellung der Links auf dem Gitter.

sich in Abb. 2.2.

Hervorzuheben ist, dass die Eichfelder hier als *Elemente der Eichgruppe* eingeführt werden müssen, das heißt $U_\mu(x) \in \text{SU}(3)$. Dies steht im Kontrast zur Kontinuumsstheorie, in der die Eichfelder mathematisch gesehen Elemente der Lie-Algebra sind.

Insgesamt ergibt sich mit den Ergebnissen dieses Abschnitts eine Wirkung, die die Kinematik und Dynamik von Fermionen in der naiven Diskretisierung beschreibt. Sie lautet:

$$S_{\text{F,naiv}} = \frac{1}{2}a^4 \sum_{x \in \Lambda} \left[\sum_{\mu=1}^4 \bar{\lambda}(x) \gamma_\mu \frac{U_\mu(x) \lambda(x + \mu) - U_{-\mu}(x) \lambda(x - \mu)}{2a} + m_{\tilde{g}} \bar{\lambda}(x) \lambda(x) \right]. \quad (2.3.48)$$

Die Einführung der Eichinvarianz und damit der Links geschieht für Wilson-Fermionen ganz analog. Dort müssen genau wie hier Links zu den Fermion-Feldern hinzugefügt werden. Die dadurch erlangten Links sind jedoch identisch mit den hier hergeleiteten Links, weshalb diese Prozedur ausgespart wurde.

2.3.6. Wirkung der Eichfelder

Für eine vollständige Beschreibung der Theorie muss die Wirkung Kinematik und Dynamik von Fermionen und Eichfeldern beschreiben. In den Abschnitten 2.3.3 und 2.3.4 wurde die Kinematik der Fermionen entwickelt. Ihre Dynamik wurde im letzten Abschnitt besprochen. Es fehlt also noch die Wirkung für die Kinematik und - da eine nichtabelsche Eichtheorie betrachtet wird - die Selbstwechselwirkung der Eichfelder.

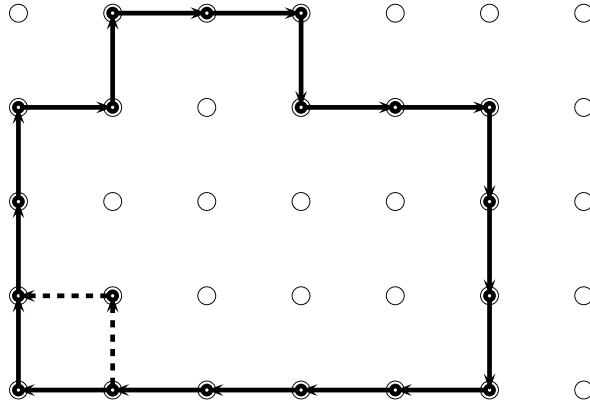


Abbildung 2.3.: Beispiel zweier geschlossener Linkketten.

Grundvoraussetzung einer Wirkung für die Eichfelder ist natürlich Eichinvarianz, weswegen zunächst ein aus Links aufgebautes Objekt gefunden werden muss, das eichinvariant ist. Aufgrund des Transformationsverhaltens der Links bieten sich hierbei Ketten von Linkvariablen an. Die einzelnen Transformationsmatrizen zwischen den Kettengliedern heben sich gegenseitig auf und somit bleiben lediglich die Matrizen an den Enden der Kette bestehen. Formal lässt sich eine n -komponentige Kette also durch

$$P = U_{\mu_1}(x_1) U_{\mu_2}(\underbrace{x_1 + \mu_1}_{x_2}) U_{\mu_3}(\underbrace{x_2 + \mu_2}_{x_3}) \cdots U_{\mu_n}(x_n) \stackrel{!}{=} \prod_{(x,\mu) \in \mathcal{P}} U_{\mu}(x) \quad (2.3.49)$$

definieren und ihre Transformation gemäß

$$P \rightarrow P' = \Omega(x_1) P \Omega^\dagger(x_n). \quad (2.3.50)$$

Für den Fall, dass die Linkkette geschlossen ist, kann durch Spurbildung das Objekt

$$L = \text{tr} \left(\prod_{(x,\mu) \in \mathcal{L}} U_{\mu}(x) \right) \quad (2.3.51)$$

erzeugt werden, welches eichinvariant ist:

$$L[U'] = \text{tr} \left(\Omega(x_1) \prod_{(x,\mu) \in \mathcal{L}} U_{\mu}(x) \Omega^\dagger(x_1) \right) = \text{tr} \left(\prod_{(x,\mu) \in \mathcal{L}} U_{\mu}(x) \right) = L[U]. \quad (2.3.52)$$

Durch die Spurbildung verschwinden die Eichtransformationen, weil die Operatoren innerhalb des Spuoperators zyklisch vertauscht werden dürfen und sich dadurch die Eichmatrizen gegenseitig aufheben. Das so entstehende Objekt ist von allgemeiner Bedeutung. Später werden die sogenannten *Wilson-Loops*, welche zentral für die Bestimmung

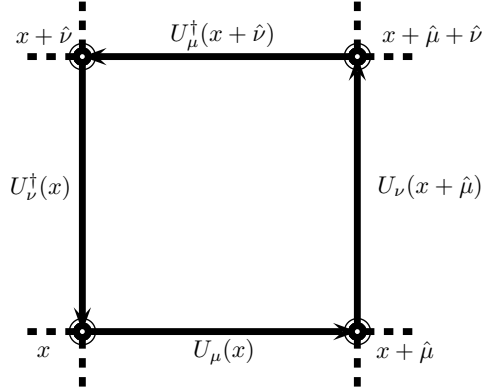


Abbildung 2.4.: Kleinste geschlossene Linkkette: die Plaquette. Es sei auf den Umlaufsinn hingewiesen.

des statischen Quarkpotentials sind, durch eine solche Schleife dargestellt. Im Moment ist allerdings ein anderer Nutzen von Interesse: Wilsons Ansatz für eine Wirkung der Eichfelder nutzt die kleinsten nicht-trivialen Schleifen als Ausgangspunkt. Diese sogenannten *Plaquetten* sind wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
 U_{\mu\nu}(x) &= U_{\mu}(x)U_{\nu}(x + \mu)U_{-\mu}(x + \mu + \nu)U_{-\nu}(x + \nu) \\
 &\stackrel{(2.3.47)}{=} U_{\mu}(x)U_{\nu}(x + \mu)U_{\mu}^{\dagger}(x + \nu)U_{\nu}^{\dagger}(x).
 \end{aligned}
 \tag{2.3.53}$$

Mit ihr lautet Wilsons Ansatz für die Wirkung der Eichfelder

$$S_G = \frac{2}{g^2} \sum_{x \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} \text{Re tr} (\mathbb{1} - U_{\mu\nu}(x)),
 \tag{2.3.54}$$

wobei der Vorfaktor lediglich eine Normierung darstellt, um im Limes $a \rightarrow 0$ mit der Kontinuumsstheorie übereinzustimmen. Prinzipiell ergibt sich die Wirkung als Summe über alle Plaquetten, wobei wegen der Summierungsbedingung $\mu < \nu$ jede Plaquette unabhängig vom Durchlaufsinns nur einmal gezählt wird.

Diese Wirkung ist per Definition bereits eichinvariant und besitzt tatsächlich das korrekte Kontinuumslimit.⁷

2.3.7. Die vollständige Wirkung des benutzten Modells

Nachdem in den letzten Abschnitten die Kinematik und Dynamik der Fermion- und Eichfelder entwickelt wurde, ist eine Formulierung der vollständigen Wirkung des benutzten supersymmetrischen Modells auf dem Gitter nun möglich. Sie ergibt sich einfach als

⁷Eine kurze Rechnung hierzu findet sich in [GL10, S. 38].

Summe über den fermionischen und bosonischen Anteil, wobei jeweils Kinematik und Dynamik beachtet werden müssen. Symbolisch folgt also

$$S_{\text{Gesamt}} = S_{\text{F}} + S_{\text{G}}. \quad (2.3.55)$$

Bei Benutzung von (eichinvarianten) Wilson-Fermionen ergibt sich

$$S_{\text{Gesamt}} = \underbrace{\frac{1}{2}a^4 \sum_{x,y \in \Lambda} \sum_{\alpha,\beta,a,b} \bar{\lambda}_\alpha(x) D(x,y)_{\alpha\beta,ab} \lambda_\beta(y)}_{S_{\text{F}}} + \underbrace{\frac{2}{g^2} \sum_{x \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} \text{Re tr}(\mathbb{1} - U_{\mu\nu}(x))}_{S_{\text{G}}} \quad (2.3.56)$$

mit dem Gitter-Dirac-Operator

$$D(x,y)_{\alpha\beta,ab} = \left(m_{\tilde{g}} + \frac{4}{a}\right) \delta_{\alpha\beta} \delta_{ab} \delta_{xy} - \frac{1}{2a} \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} (\mathbb{1} - \gamma_\mu)_{\alpha\beta} V_\mu(n)_{ab} \delta_{x+\mu,y}. \quad (2.3.57)$$

Dabei sollte beachtet werden, dass die in die letzte Summe eingeführten Felder $V_\mu(n)_{ab}$ Links in der *adjungierten* Darstellung sind. Sie sind durch

$$V_\mu(n)_{ab} = 2 \text{tr} (U_\mu^\dagger(n) T^a U_\mu(n) T^b) \quad (2.3.58)$$

gegeben [Dem09, S. 23].

Insgesamt werden in der Wirkung also die Links in zwei unterschiedlichen Darstellungen benutzt.

2.3.8. Eigenschaften und Anwendungen der reinen Eichtheorie

Die reine Eichtheorie lässt die Fermionen komplett außen vor und betrachtet lediglich die Eichfelder. Für den Fall einer abelschen Eichsymmetrie, zum Beispiel im Fall der Quantenelektrodynamik, ist die reine Eichtheorie eine freie Theorie, die recht einfach auszuwerten ist. Die Photonen der QED wechselwirken nicht miteinander und lediglich ihre Kinematik muss beschrieben werden. Liegt hingegen eine nichtabelsche Eichsymmetrie vor, wie zum Beispiel in der Quantenchromodynamik oder bei der $N = 1$ -SYM-Theorie, so kann diese Beschreibung bereits sehr komplex sein, weil hier zusätzlich die Wechselwirkung der Gluonen untereinander betrachtet werden muss.

Dabei ist die reine Eichtheorie keine „akademische Spielwiese“, viele Eigenschaften der vollen Theorie lassen sich ohne Hinzunahme von Fermionen bereits hier erfassen. Beispielsweise kann das für diese Arbeit zentrale statische Quark-Antiquark-Potential durch Objekte der reinen Eichtheorie berechnet werden. Das aus der Phänomenologie bekannte Confinement lässt sich hier ebenfalls beobachten - wenn auch ohne das sogenannte *string breaking*.

Für den Eichfeldanteil der Theorie auf dem Gitter müssen noch einige Anmerkungen gemacht werden. In den letzten Abschnitten wurden Wirkung und Typus der Eichfelder zwar bereits ermittelt; ihre konkrete Auswertung ist hingegen noch unklar. Hierauf soll zunächst eingegangen werden.

2.3.8.1. Haarsches Maß

Die Ermittlung von Observablen wurde bisher im Funktionalintegralformalismus besprochen. Erwartungswerte sind dementsprechend durch

$$\begin{aligned}\langle O \rangle &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[U] \exp(-S_G[U]) O[U] \\ Z &= \int \mathcal{D}[U] \exp(-S_G[U])\end{aligned}\quad (2.3.59)$$

gegeben. Das Integrationsmaß im Fall fermionischer Felder bedurfte keines Kommentars. Dort sind die Felder $\phi(x, t)$ nicht-matrixwertige Größen, über die mit bekannten Regeln integriert werden kann, sofern ihre Eigenschaften als Grassmann-Zahlen berücksichtigt werden. Für die Eichfelder ist allerdings zunächst unklar, wie überhaupt integriert werden soll. Ein möglicher Ansatz ist die folgende Integration:

$$\int \mathcal{D}[U] = \prod_{x \in \Lambda} \prod_{\mu=1}^4 \int dU_\mu(x). \quad (2.3.60)$$

Da die Eichfelder $U_\mu(x)$ aber Elemente der (kompakten) Lie-Gruppe selbst sind, handelt es sich bei ihnen in der Regel nicht um Skalare. Wie aber soll über solche Objekte integriert werden?

Zunächst kann festgestellt werden, dass das Integrationsmaß $dU_\mu(x)$ wie auch die Eichfelder selbst eine Invarianz unter Eichtransformationen besitzen muss:

$$dU'_\mu(x) = d(\Omega(x)U_\mu(x)\Omega^\dagger(x+\mu)) = dU_\mu, \quad (2.3.61)$$

wobei $\Omega(\cdot)$ ein Element der zugrundeliegenden (kompakten) Lie-Gruppe G darstellt. Dass diese Relation gilt, kann zum Beispiel anhand des Transformationsverhaltens der Zustandssumme Z gezeigt werden. Diese muss invariant unter Eichtransformationen sein, sodass

$$Z = \int \mathcal{D}[U] \exp(-S_G[U]) = \int \mathcal{D}[U'] \exp(-S_G[U']) = \int \mathcal{D}[U'] \exp(-S_G[U]) \quad (2.3.62)$$

gilt.⁸

Hieraus folgt die Eichinvarianz des Integrationsmaßes selbst, also

$$\mathcal{D}[U'] = \mathcal{D}[U] \quad (2.3.63)$$

und damit Gleichung (2.3.61). Diese Bedingung kann - übertragen auf die einzelnen Integrationselemente - allgemein als

$$dU = d(VU) = d(UV), \quad V \in G \quad (2.3.64)$$

⁸Der erste Schritt in (2.3.62) kann entweder als Invarianz unter Eichtransformation oder aber als einfache Substitution verstanden werden. Der zweite Schritt ergibt sich aus der Eichinvarianz der Wirkung, welche grundlegend gefordert ist.

geschrieben werden. Prinzipiell folgt dies direkt aus (2.3.61), weil $\Omega(\cdot)$ aufgrund der lokalen Eichsymmetrie für den Punkt frei gewählt werden kann. Zusätzlich darf noch eine Normierungsbedingung an die Felder $dU_\mu(x)$ gestellt werden, weil die Lie-Gruppe G , um die es gehen soll, kompakt ist. Die Bedingung soll

$$\int dU_\mu \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.3.65)$$

lauten. Diese beiden Bedingungen - (2.3.64) und (2.3.65) - definieren gerade das sogenannte *Haarsche Maß*.⁹ Dieses Maß erlaubt die Integration über reelle Parameter. Das Maß dU_μ kann dann durch

$$dU = c \cdot \sqrt{\det[g(\omega)]} \prod_k d\omega^{(k)} \quad (2.3.66)$$

dargestellt werden.¹⁰

$g(\omega)$ ist dabei der metrische Tensor, dessen einzelne Komponenten durch

$$g(\omega)_{nm} = \text{tr} \left(\frac{\partial U(\omega)}{\partial \omega^{(n)}} \frac{\partial U^\dagger(\omega)}{\partial \omega^{(m)}} \right) \quad (2.3.67)$$

gegeben sind. Diese Betrachtungen sollen hier genügen; wichtig ist vor allem, dass nun eine Integration über die Eichfelder durch bekannte Regeln möglich ist und die Funktionalintegrale prinzipiell auswertbar sind.

⁹Vgl. hierzu auch [Smi02, S. 95ff.].

¹⁰Eine Herleitung hierzu findet sich in [GL10, S. 45]. Die Parametrisierung der Gruppenelemente durch reelle Zahlen ist durch die allgemeine Exponentialdarstellung von $SU(N)$ -Elementen,

$$\Omega = \exp \left(i \sum_{n=1}^{N^2-1} \omega^{(n)} T_n \right)$$

möglich. T_n sind hierbei die Generatoren der Gruppe.

2.3.8.2. Wilson- und Polyakov-Loops

Zentral für die Bestimmung des statischen Potentials auf dem Gitter sind Wilson-Loops. Wie in vorherigen Abschnitten bereits angedeutet, sind dies spezielle geschlossene Schleifen von Links. Durch Spurbildung werden diese Schleifen zu eichinvarianten Objekten und sind somit prinzipiell für die Benutzung als Observable geeignet.

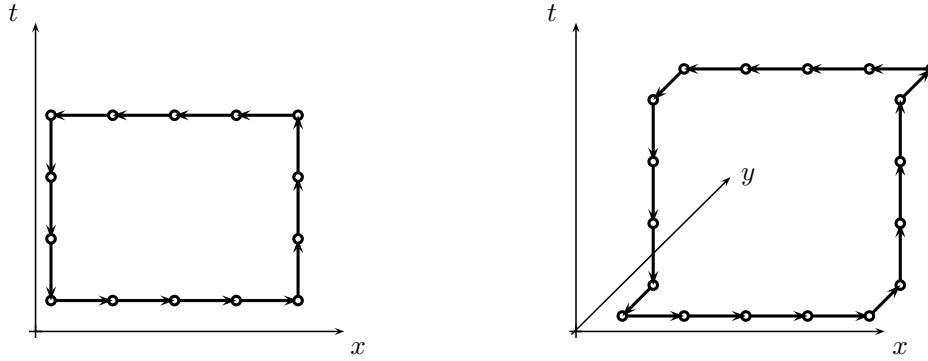


Abbildung 2.5.: Beispiel für eine *planare* (links) und ein *nicht-planare* (rechts) Wilson-Loop.

Definitionsgemäß besteht ein Wilson-Loop aus vier einzelnen Teilen. Dies sind zwei sogenannte *Wilson lines* S , Linkketten, welche zwei Raumpunkte zur jeweils gleichen Zeit verbinden, und zwei Linkketten T , die *temporal transporter* genannt werden und zwei Zeitpunkte am jeweils gleichen Ort miteinander verbinden. Startpunkt ist ein Raumzeitpunkt, von dem eine Wilson-Line zu einem anderen Raumpunkt zeigt. Von dort zeigt ein temporaler Transporter zu einer anderen Zeit am gleichen Ort. Darauf folgt noch einmal eine Wilson-Line zurück zum räumlichen und ein temporaler Transporter zum zeitlichen Startpunkt. Im allgemeinen Fall müssen die Wilson-Lines keine geraden Ketten in nur einer Dimension sein. Es wird zwischen planaren und nicht-planaren Wilson-Loops unterschieden, die in Abb. 2.5 dargestellt sind.

Formal ergibt sich für die Wilson-Loops eine geschlossene Schleife bestehend aus Links, die durch

$$\mathcal{L} : (x, t_2) \xrightarrow{S} (y, t_2) \xrightarrow{T^\dagger} (y, t_1) \xrightarrow{S^\dagger} (x, t_1) \xrightarrow{T} (x, t_2) \quad (2.3.68)$$

beschrieben werden kann. Die Wilson-Lines werden hierfür formal durch

$$S(x, y, t) = \prod_{U_i(j,t) \in \mathcal{C}} U_i(j, t) \quad (2.3.69)$$

definiert. Das Produkt ist so zu verstehen, dass alle Linkvariablen entlang des Weges \mathcal{C} zwischen den Raumpunkten x und y miteinander multipliziert werden.

Die temporalen Transporter ergeben sich ganz ähnlich durch

$$T(x, n_t) = \prod_{t=t_1}^{t_1+(n_t-1)} U_4(x, t), \quad (2.3.70)$$

wobei n_t die Anzahl der nötigen zeitlichen Links darstellt. Ein Wilson-Loop ergibt sich dann allgemein durch den Ausdruck

$$W_{\mathcal{L}} = \text{tr} \left(S(x, y, t_2) T^\dagger(y, t_2) S^\dagger(x, y, t_1) T(x, t_1) \right). \quad (2.3.71)$$

Damit ist die zentrale Observable zur Bestimmung des statischen Potentials gegeben. Diese kurze Einführung soll an dieser Stelle reichen, später wird noch einmal explizit auf die Begründung dieses Zusammenhangs eingegangen werden.

Am Rande seien hier Polyakov-Loops erwähnt, die vereinfachte Versionen der Wilson-Loops sind. Werden periodische Randbedingung in Zeitrichtung auf dem Gitter angenommen und werden die temporalen Transporter auf die gesamte Zeitachse ausgedehnt, so bilden diese selbst zwei über die Zeit geschlossene Schleifen an unterschiedlichen Raumpunkten. Diese temporalen Transporter selbst bilden durch Spurbildung eichinvariante Objekte auf dem Gitter. Wie die Wilson-Loops können sie zur Bestimmung des statischen Potentials dienen.

2.4. Numerische Methoden in Gittereichtheorien

Bisher ist lediglich auf die Formulierung des theoretischen Unterbaus wie zum Beispiel auf die Entwicklung der Wirkungen eingegangen worden. Für die tatsächliche Berechnung der Observablen wurde hier zunächst nur die Auswertung des Funktionalintegrals

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[U] \mathcal{D}[\lambda] \exp[-(S_G + S_F)] O[U, \lambda] \quad (2.4.1)$$

vorgeschlagen. Die Integration lässt sich für ein Gitter auch als

$$\int \mathcal{D}[U] \mathcal{D}[\lambda] = \int \prod_{x \in \Lambda} \prod_{\mu=1}^4 dU_\mu(x) \prod_{x \in \Lambda} \prod_{\alpha, a} d\lambda_\alpha(x) \quad (2.4.2)$$

schreiben, wobei α Spinorindex und a Farbindex bezeichnen. Der Prozess der Integration bedeutet hier anschaulich, dass die freien Parameter - hier also Fermion- und Eichfelder - alle möglichen Wertkombinationen annehmen, über die dann summiert wird und für diese die Observable dann berechnet wird. Bei einer typischen Gittergröße, zum Beispiel $32^3 \times 64$, sind dies allerdings

$$32^3 \cdot 64 \cdot 4 \cdot 32^3 \cdot 64 \cdot 4 \cdot 3 \quad (2.4.3)$$

freie Parameter.¹¹ Bei einer Theorie mit einem Gluino-Flavor und drei Farben, wie bei der hier benutzten, wären das etwa 211 Billionen Parameter. Selbst wenn die Integrale alle analytisch gelöst werden könnten, was im Allgemeinen nicht möglich ist, dann müssten 211 Billionen Integrale gelöst werden. Da die Integrale aber numerisch gelöst werden müssen, muss jede mögliche Parameterkombination beachtet werden. Selbst wenn ein Parameter nur zwei verschiedene Zustände annehmen könnte, ergäben sich kombinatorisch mehr als $2^{211 \cdot 10^{12}}$ Zustände, für welche jedes Mal die Observable bestimmt werden müsste. Dies ist zur Zeit unmöglich und wird es wohl auch in näherer Zukunft bleiben. Es ist also eine andere Rechenmethode von Nöten, um die Erwartungswerte der Observablen zu bestimmen: die Monte-Carlo-Simulation.

Dieser Abschnitt orientiert sich an den Darstellungen zur numerischen Simulation auf dem Gitter in [GL10].

2.4.1. Monte-Carlo-Simulation

Bei Monte-Carlo-Simulationen handelt es sich um Rechenmethoden, mit denen Aussagen durch statistische Verteilungen getroffen werden können. Sie können sehr vielfältig

¹¹ $32^3 \times 64$ bedeutet eine räumliche Ausdehnung von 32 Gitterpunkten in jeder Raumdimension und eine zeitliche Ausdehnung von 64 Punkten.

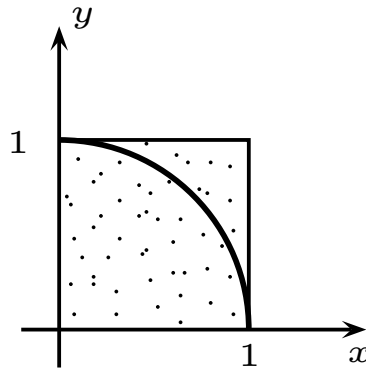


Abbildung 2.6.: Typisches Beispiel der Anwendung des Monte-Carlo-Verfahrens: Die näherungsweise Bestimmung von π .

eingesetzt werden und sind nicht auf statistische Systeme beschränkt: Ein beliebtes Beispiel für eine Anwendung der Monte-Carlo-Methode ist die näherungsweise Bestimmung von π . Hierzu werden in einem Quadrat der Kantenlänge Eins zufällig und gleichverteilt Punkte generiert. Die Skalierung wird zum Beispiel so gewählt, dass *links unten* der Ursprung liegt und das Quadrat gerade einen Ausschnitt des ersten Quadranten eines kartesischen Koordinatensystems darstellt (siehe dazu Abb. 2.6). Damit wird ein Viertel des Einheitskreises von diesem Quadrat eingeschlossen.

Auch ohne Kenntnis von π kann entschieden werden, ob die generierten Punkte innerhalb des Einheitskreises liegen, nämlich über die Gleichung

$$r = \sqrt{x^2 + y^2}. \quad (2.4.4)$$

Bei Werten $r \leq 1$ liegt der jeweilige Punkt innerhalb des Einheitskreises, sonst außerhalb. Werden die Punkte gleichverteilt im Quadrat platziert, so kann bei genügend vielen Punkten das Verhältnis der Anzahl von Punkten innerhalb und außerhalb des Einheitskreises sehr genau bestimmt werden. Die Gesamtanzahl der Punkte entspricht dabei gerade dem Flächeninhalt Eins, die Anzahl der Punkte innerhalb des Einheitskreises entspricht gerade der Fläche $\pi/4$. Damit kann die Kreiszahl durch

$$\pi \approx 4 \cdot \frac{\text{Anzahl im Einheitskreis}}{\text{Gesamtanzahl der Punkte}} \quad (2.4.5)$$

approximiert werden.

Dies ist nur ein Beispiel. Hauptanwendungsgebiet für Monte-Carlo-Simulationen sind Systeme mit sehr vielen Freiheitsgraden. Simulationen sind heutzutage sehr lukrativ, weil sie für diese analytisch nicht mehr zugänglichen Systeme mit vertretbarem Zeitaufwand zuverlässige Ergebnisse liefern können.

2.4.1.1. Grundlagen der Methode

Die Grundlagen des Monte-Carlo-Verfahrens sollen im Folgenden anhand der hier interessanten Anwendung in Gittereichtheorien präsentiert werden. Grundlage der Methode ist die Durchführung stichprobenartiger Rechnungen. Ausgangspunkt ist hierbei

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_n O[U_n]. \quad (2.4.6)$$

Die Variable O repräsentiert dabei die zu ermittelnde Observable und $O[U_n]$ ist ihr Wert in der sogenannten *Konfiguration* U_n , also eine Stichprobe. Damit ist der Erwartungswert $\langle O \rangle$ also näherungsweise durch die Mittelung über eine Stichprobe gegeben. Die *Konfiguration* beschreibt eine ganz bestimmte Einstellung der Eichfelder des gesamten Gitters.

Soll die Näherung in Gleichung (2.4.6) eine gute Näherung sein, so muss die Auswahl der Konfigurationen U_n in der Stichprobe an das verwendete theoretische Modell angepasst werden. Deshalb müssen Konfigurationen, die der Theorie nach mit höherer Wahrscheinlichkeit realisiert sind, auch bevorzugt in der Stichprobe auftreten. Im Pfadintegralformalismus zeichnen sich solche Konfigurationen dadurch aus, dass sie durch den Boltzmann-Faktor $\exp(-S)$ mit stärkerer Gewichtung in das Integral eingehen. Gleichzeitig muss die betrachtete Stichprobe für eine gute Näherung natürlich groß genug sein.

Im Prinzip reduziert sich das Problem dann darauf, dass stichprobenartig Konfigurationen von Eich- und Fermionfeldern erstellt werden, die eine passende Verteilungsfunktion besitzen. Für diese müssen die Observablen einzeln berechnet werden und eine anschließende Mittelung ergibt daraufhin näherungsweise den Erwartungswert.

Um bei der Erstellung der Konfigurationen die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten bestimmter Konfigurationen zu berücksichtigen, ist ein spezieller Algorithmus notwendig. Die Konfigurationen müssen ausgehend von einer beliebigen Startkonfiguration sukzessive erstellt werden. Jede Konfiguration wird dabei durch das sogenannte *Update* aus der Vorhergehenden erzeugt. Diese so entstehende Abfolge von Konfigurationen, die das Update je nach deren Wahrscheinlichkeit erzeugt, nennt sich Markow-Kette:

$$U_0 \rightarrow U_1 \rightarrow U_2 \rightarrow \dots \rightarrow U_N. \quad (2.4.7)$$

Der Update-Prozess muss einige Bedingungen erfüllen, um die korrekte Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Konfiguration zu reproduzieren:

- Die Wahrscheinlichkeit für den Übergang zu einer neuen Konfiguration U' hängt lediglich von der vorhergehenden Konfiguration U und sonst von keiner anderen Größe - wie beispielsweise der Position in der Kette - ab. Die so entstehende Kette nennt sich Markow-Kette erster Ordnung.

- Im Equilibrium (siehe unten) muss die Gesamtwahrscheinlichkeit zum Übergang in die Konfiguration U' genauso groß sein, wie die Wahrscheinlichkeit, diese Konfiguration wieder zu verlassen. Mathematisch drückt sich dies durch

$$\sum_U T(U'|U)P(U) = \sum_U T(U|U')P(U') \quad (2.4.8)$$

aus. Dabei ist $T(U'|U)$ die Übergangswahrscheinlichkeit und $P(U)$ die Wahrscheinlichkeit, nach der U in diesem Prozess momentan vorliegt. $P(U)$ stellt damit die Verteilungsfunktion der Konfigurationen dar, die abhängig von der verwendeten Wirkung gemäß

$$P(U) = \exp(-S[U]) \quad (2.4.9)$$

festgelegt wird.

Die rechte Seite von Gleichung (2.4.8) lässt sich noch vereinfachen, weil die Gesamtwahrscheinlichkeit zum Übergang in eine andere oder zum Verbleiben in der jetzigen Konfiguration, $\sum_U T(U|U')$, gleich Eins ist:

$$\sum_U T(U'|U)P(U) = P(U'). \quad (2.4.10)$$

- Jede Konfiguration muss vom Update-Prozess in einer endlichen Anzahl von Schritten erreicht werden können. Eine Voraussetzung hierfür ist, dass $T(U'|U)$ für alle Kombinationen $(U'|U)$ echt größer als Null ist.

Dabei stellt die sogenannte *detailed balance condition*,

$$T(U'|U)P(U) = T(U|U')P(U'), \quad (2.4.11)$$

eine mögliche Realisierung dar, um Gleichung (2.4.8) zu erfüllen. Diese Bedingung findet häufig Verwendung.

Es kann gezeigt werden, dass der Update-Prozess nach mehrfacher Anwendung ein sogenanntes *Equilibrium* erreicht [Rot05, S. 284ff.]. Dieses zeichnet sich durch eine stationäre Wahrscheinlichkeit $P_{\text{equi}}(U)$ aus, die angibt mit welcher Wahrscheinlichkeit die momentane Konfiguration U vorliegt. Befindet sich das System einmal im sogenannten thermalisierten Zustand, verweilt es dort. Werden Konfigurationen vor Erreichen des Equilibriums für die Auswertung verwendet, so ist dadurch bedingt eine Korrelation zu erwarten. Doch auch wenn nur thermalisierte Konfigurationen verwendet werden, ist eine Korrelation nicht vollständig zu vermeiden. Dies ist dadurch begründet, dass jede Konfiguration mithilfe ihres Vorgängers in der Markow-Kette erstellt wird.

Nach wie vielen Iterationen das Equilibrium erreicht ist, ist nicht einfach zu beantworten. Eine Möglichkeit stellt die Berechnung der Autokorrelationszeit dar, die angibt,

wie stark die Korrelation nachfolgender Konfigurationen ist. Zu beachten ist dabei allerdings, dass die Autokorrelationszeit nicht nur dadurch bestimmt ist, ob thermalisierte Konfigurationen verwendet werden oder nicht. Auf die Autokorrelation wird in einem folgenden Abschnitt noch eingegangen werden.

Eine andere Möglichkeit, um das Erreichen des Equilibriums festzustellen, bietet die Untersuchung des Wertes der Plaquette. Mit Erreichen des Equilibriums zeigt ihr Wert kein systematisches Ansteigen oder Absinken mehr, sondern lediglich noch eine Fluktuation um einen bestimmten Wert herum.

Die wichtigsten Größen der Monte-Carlo-Simulation auf dem Gitter sind der vorhergehenden Darstellung nach $P(U)$ (Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von U) und $T(U|U')$ (Übergangswahrscheinlichkeit für $U \rightarrow U'$). Dabei sollte $P(U)$ das physikalische Modell möglichst gut beschreiben. Dementsprechend muss gemäß (2.4.9) eine passende Wirkung gewählt werden.

Konkret wurde für die Erstellung der Konfigurationen der PHMC-Algorithmus [FJ97] genutzt. Eine Darstellung dieses Algorithmus würde den Rahmen dieser Arbeit sprengen - insbesondere in Hinblick darauf, dass die Erstellung der Konfigurationen für die Analyse nicht von Nöten war. Nichtsdestotrotz wurden hier nun einige Grundlagen des Monte-Carlo-Verfahrens dargestellt, weil einige Tatsachen der Konfigurationserstellung, wie beispielsweise das Erreichen des Equilibriums, auch für die spätere Analyse nützlich sein werden.

2.4.2. Methoden zur Datenanalyse

Sind die Konfigurationen erstellt, so können die Observablen prinzipiell durch

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_n O[U_n] \quad (2.4.12)$$

berechnet werden. Es wird bei diesem Simulationsprozess auch oft von einer *Messung* gesprochen. In der Praxis werden oft sogenannte Resampling-Methoden verwendet, um den statistischen Fehler der berechneten Observable zu schätzen. Hier soll im Folgenden näher auf die Jackknife-Methode eingegangen werden. Zunächst soll allerdings noch der Fehler für die durch die Monte-Carlo-Simulation ermittelten Observablen geschätzt werden und die sogenannte *Autokorrelation* der Daten besprochen werden.

2.4.2.1. Fehlerabschätzung und Autokorrelation

Durch die Monte-Carlo-Simulation an sich resultiert natürlich bereits eine Unsicherheit allein dadurch, dass nur eine Stichprobe untersucht wird. Zunächst soll der Fall unkorrelierter Konfigurationen betrachtet werden. Der durch die Simulation berechnete Wert

für die Observable ergibt sich gemäß der Monte-Carlo-Methode durch eine Mittelung über die Werte der einzelnen Markow-Kettenglieder:

$$\hat{O} = \frac{1}{N} \sum_n O_n. \quad (2.4.13)$$

Für den berechneten Wert \hat{O} ergibt sich ein Stichprobenfehler, der durch

$$\hat{\sigma}_O^2 = \text{Var}(\hat{O}) = \frac{1}{N-1} \sum_n (O_n - \hat{O})^2 \quad (2.4.14)$$

gegeben ist. Dieser ergibt sich allein aus der Tatsache, dass für nur endlich viele Konfigurationen gemessen wird. Auf der anderen Seite ergibt sich eine Abweichung aber auch dadurch, dass gerade diese oder jene Menge von Konfigurationen genutzt wurde. Damit ist \hat{O} selbst eine Zufallsgröße, für die $\langle \hat{O} \rangle = \langle O \rangle$ gilt. $\langle \hat{O} \rangle$ ist in diesem Fall der Wert, der sich bei Mittelung aller möglicher Mengen von N Konfigurationen ergeben würde. Dieser Wert stimmt mit dem tatsächlichen, ohne die Monte-Carlo-Methode bestimmten Wert $\langle O \rangle$ überein. Per Definition gilt für die Varianz

$$\begin{aligned} \sigma_{\hat{O}}^2 &= \left\langle (\hat{O} - \langle O \rangle)^2 \right\rangle \stackrel{(2.4.13)}{=} \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_n O_n - \langle O \rangle \right)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2 + \frac{1}{N^2} \sum_{m \neq n} \langle O_m O_n \rangle. \end{aligned} \quad (2.4.15)$$

Im Fall unkorrelierter Konfigurationen gilt

$$\langle O_m O_n \rangle = \langle O_m \rangle \langle O_n \rangle = \langle O \rangle^2, \quad (2.4.16)$$

der Gesamterwartungswert entspricht also dem Produkt der einzelnen Erwartungswerte. Dadurch kann die Varianz als

$$\begin{aligned} \sigma_{\hat{O}}^2 &= \frac{1}{N} \langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2 + \frac{1}{N^2} \sum_{m \neq n} \langle O \rangle^2 = \frac{1}{N} \langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2 + \frac{N(N-1)}{N^2} \langle O \rangle^2 \\ &= \frac{1}{N} \underbrace{(\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2)}_{\text{Var}(O) = \sigma_O^2} \end{aligned} \quad (2.4.17)$$

geschrieben werden. Damit gilt letztendlich

$$\sigma_{\hat{O}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma_O \quad (2.4.18)$$

bzw.

$$\sigma_{\hat{O}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{\sigma}_O, \quad (2.4.19)$$

wenn das unbekannte σ_O approximativ durch das in (2.4.14) berechnete $\hat{\sigma}_O$ ersetzt wird.

Nun gelten diese Ergebnisse nur für den Fall unkorrelierter Messdaten. Sind die Daten korreliert, so sind die Ergebnisse für σ in Gleichung (2.4.19) nicht anwendbar, weil die statistische Unabhängigkeit der Konfiguration eine wichtige Voraussetzung darstellt. Anschaulich ist dies verständlich, weil bei korrelierten Daten im Prinzip weniger Statistik vorhanden ist; die Varianz bzw. σ sollte hier also größer sein als bei unkorrelierten Daten.

Selbst wenn die Messung nur auf Konfigurationen geschieht, die im Equilibrium sind, ist eine Korrelation der auf den einzelnen Konfigurationen gemessenen Observablen kaum zu verhindern. Dies nennt sich *Autokorrelation* und ist eine (weitere) Fehlerquelle, weil die einzelnen Konfiguration statistisch unabhängig sein sollten, es in der Regel aber nicht sind. Ausgangspunkt, um diesen Umstand zu berücksichtigen, ist die Autokorrelationsfunktion

$$C_O = \langle O_i O_{i+t} \rangle - \langle O_i \rangle \langle O_{i+t} \rangle. \quad (2.4.20)$$

Für Konfigurationen im Equilibrium - was hier vorausgesetzt sein soll - hängt diese nur von t ab und ist unabhängig davon, welche Konfigurationen für die Berechnung vorliegen, es ist also $C_O(t) = C_O(O_n, O_{n+t})$. $C_O(0)$ ist gerade σ_O^2 und für den Fall unkorrelierter Daten verschwindet C_O wegen Gleichung (2.4.16) für alle $t \neq 0$.

Die normalisierte Korrelationsfunktion $\Gamma_O(t) := \frac{C_O(t)}{C_O(0)}$ zeigt einen exponentiellen Abfall in t , wobei der Term mit dem größten Einfluss durch

$$\Gamma_O(t) \propto \exp(-t/\tau_{O,\text{exp}}) \quad (2.4.21)$$

gegeben ist. $\tau_{O,\text{exp}}$ ist demnach ein Maß dafür, wie „schnell“ die Korrelation zwischen den Konfigurationen in der Markow-Kette verschwindet. Wichtig wird $\Gamma_O(t)$, wenn die Varianz aus Gleichung (2.4.15) für den Fall korrelierter Daten berechnet werden soll. Es ergibt sich dann

$$\sigma_{O,c}^2 \approx \frac{\sigma_O^2}{N} 2 \left(\frac{1}{2} + \sum_{t=1}^N \Gamma_O(t) \right). \quad (2.4.22)$$

Hierbei wird

$$\frac{1}{2} + \sum_{t=1}^N \Gamma_O(t) =: \tau_{O,\text{int}} \quad (2.4.23)$$

integrierte Autokorrelationszeit genannt. Damit kann der Fehler im Fall korrelierter Daten geschätzt werden. Insgesamt ergibt sich aus den beiden letzten Gleichungen also

$$\sigma_{O,c}^2 = \frac{2\tau_{O,\text{int}}}{N} \sigma_O^2 \quad (2.4.24)$$

im Vergleich zur Abweichung bei unkorrelierten Daten. Es sollte betont werden, dass $\sigma_O^2 = \frac{1}{N} \sigma_O^2$ gilt. Interessant ist hier vor allem, dass der zusätzliche Korrekturfaktor im

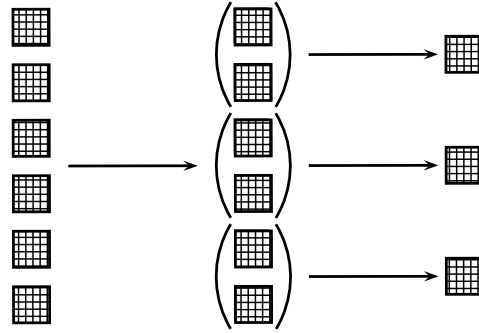


Abbildung 2.7.: Vereinfachte Darstellung des Binning-Vorgangs: Daten mehrerer Konfigurationen (hier zwei) werden zu einem Bin zusammengefasst und gemittelt. Die gemittelten Werte werden dann als neue Zufallsgrößen für die weitere Rechnung verwendet.

Vergleich zu Gleichung (2.4.19) so wirkt, als würde er die Anzahl der Konfigurationen verringern:

$$N_c = \frac{N}{2\tau_{O,\text{int}}}. \quad (2.4.25)$$

Wird dieses N_c statt N in Gleichung (2.4.19) für die Abweichung unkorrelierter Daten benutzt, so ergibt sich gerade $\sigma_{O,c}^2$. Dies passt zur oben gegebenen anschaulichen Erklärung, dass korrelierte Daten im Prinzip eine kleinere Statistik besitzen als es unkorrelierte Daten tun.

2.4.2.2. Data binning

Im vorherigen Abschnitt wurde dargestellt, wie sich der Fehler unter Verwendung korrelierter Daten verändert. Dabei wurde davon ausgegangen, dass die Daten selbst nicht weiter verändert werden, um die Korrelation zu verringern. Durch das sogenannte *data binning*[GL10, S. 96f.] ist dies jedoch möglich. Das Prinzip dieser Methode ist einfach: die für die einzelnen Konfigurationen berechneten Observablen werden in Blöcke von jeweils N Messwerten aufgeteilt. Die Mittelwerte dieser Blöcke werden dann als die neuen Zufallsgrößen betrachtet. Dabei muss die Größe N der Blöcke gerade so gewählt sein, dass die Korrelation zwischen ihnen nicht mehr messbar ist. Je nach Autokorrelationszeit wird die Anzahl der nutzbaren Observablen dadurch stark reduziert. Eine symbolische Darstellung findet sich in Abb. 2.7.

2.4.2.3. Jackknife-Methode

Der in Gleichung (2.4.22) bestimmte Fehler bietet *eine* Möglichkeit den Fehler zu bestimmen. Teilweise ist diese Art der Bestimmung jedoch nicht einfach. Sollen zudem aus den gemessenen Observablen zusammengesetzte Größen ermittelt werden - dies können

zum Beispiel Fits von gemittelten Observablen sein -, so muss die Fehlerfortpflanzung beachtet werden, was ebenfalls Probleme mit sich bringt.

Die statistische Methode des Jackknifing[GL10, S. 97] bietet hier eine einfache und effiziente Alternative, um unabhängig vom angenommenen Fehler der Observable einen Fehler zu bestimmen. Voraussetzung für die folgende Darstellung ist die Benutzung unkorrelierter Daten. Unkorrelierte Daten können hier auch durch Binning erzeugt werden. In diesem Fall wird wie folgt vorgegangen:

Es seien N Messwerte gegeben. Aus diesen werden N Datensätze $D_i = \{d_n\}$ gebildet, in denen alle Messwerte bis auf den i -ten Messwert enthalten sind. Für jeden dieser Datensätze wird dann der Mittelwert \hat{D}_i bestimmt, also

$$\hat{D}_i = \frac{1}{N-1} \sum_{n \neq i} d_n. \quad (2.4.26)$$

In Abb. 2.8 ist der Vorgang symbolisch dargestellt. Die Größe \hat{D}_i kann nun als Zufallsgröße verstanden werden, für die die Varianz berechnet werden kann:

$$\sigma_{\hat{D}}^2 = \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{D}_i - \hat{D})^2 \quad (2.4.27)$$

Der Erwartungswert \hat{D} , der sich hier durch Mittelung über alle \hat{D}_i ergibt, ist mit dem ohne die Jackknife-Methode berechneten Erwartungswert für die N Messwerte identisch. Je kleiner die Varianz, desto näher liegen die Ergebnisse der einzelnen Datensätze beieinander und desto weniger weichen die weggelassenen Messwerte von den anderen Werten ab.

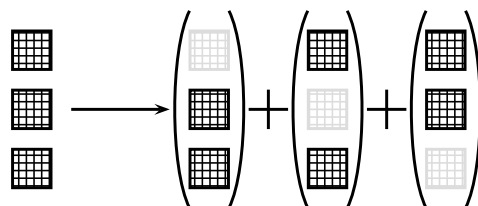


Abbildung 2.8.: Jackknifing: Aus den Daten werden durch Weglassen jeweils eines Datenpunktes sogenannte Jackknives erzeugt. Die Datenpunkte können auch durch bereits durch das Binning gemittelte Daten gegeben sein.

Prinzipiell ist $\sigma_{\hat{D}}^2$ demnach sehr einfach zu berechnen und liefert unabhängig von der Ermittlung der Observable eine Vorstellung vom Fehler der Messwerte. Im Analyseprogramm ist der durch das Jackknifing bestimmte Fehler teilweise die einzige Größe, die ein Maß für die Unsicherheit eines Wertes angibt.

3. Die Bestimmung des statischen Quark-Antiquark-Potentials

Dieses Kapitel soll sich der Begründung des statischen Potentials und den Techniken zu dessen Bestimmung widmen. Ebenso soll der für diese Arbeit zentrale *Sommer-Parameter* eingeführt werden. Zunächst soll deshalb genauer auf die theoretischen Grundlagen des statischen Potentials und des Sommer-Parameters eingegangen werden, bevor die im Analyseteil dieser Arbeit benutzten Methoden explizit präsentiert und erläutert werden. Der erste Abschnitt zum Potential basiert dabei teilweise auf der Darstellung in [GL10].

3.1. Einführung des Potentials

Das statische Quark-Antiquark-Potential beschreibt das Potential der starken Wechselwirkung eines unbeweglichen (statischen) Quark-Antiquark-Paares. Dieses Potential ist mithilfe von Wilson-Loops, welche in Abschnitt 2.3.8.2 als die zentralen Objekte der reinen Eichtheorie vorgestellt wurden, bestimmbar. Diese Objekte der reinen Eichtheorie dienen interessanterweise der Bestimmung einer Wechselwirkung zwischen zwei *Fermionen*, den Quarks. Der Grund dafür ist darin zu finden, dass fermionische Observablen auf dem Gitter ebenfalls durch Linkketten beschrieben werden können.

Das Potential ist eine wichtige Größe der Gittereichtheorien und kann dazu dienen, den Sommer-Parameter zu bestimmen, der eine zentrale Rolle bei der Bildung einer einheitlichen Skala und der Verknüpfung von Gitter- und physikalischen Größen spielt. Daneben zeigt es in der reinen Eichtheorie das Phänomen des Confinements, das sich in einem mit der Entfernung ansteigenden Potential äußert.

Der erste Abschnitt erläutert den Zusammenhang zwischen Wilson-Loops und dem Quark-Antiquark-Potential. Hierdurch soll dargestellt werden, warum diese Objekte der reinen Eichtheorie zur Ermittlung des Potentials dienen können und über welche Gleichungen die Wilson-Loops und das Potential verbunden sind. Anschließend soll die formale Gestalt des Potentials in der reinen Eichtheorie hergeleitet werden, bevor dann der Sommer-Parameter eingeführt werden soll.

3.1.1. Zusammenhang mit den Wilson-Loops

Die folgende Darstellung soll die QCD als zugrundeliegende Theorie nutzen. Dieser Weg wurde gewählt, weil hier der Zusammenhang zwischen Quarks und Wilson-Loops erläutert werden soll und das eigentlich betrachtete supersymmetrische Modell keine Quarks enthält.

Allgemein lassen sich die Erwartungswerte der Wilson-Loops durch

$$\langle W_{\mathcal{L}} \rangle = \langle \text{tr} (S(x, y, t_2) T^\dagger(y, t_2 - t_1) S^\dagger(x, y, t_1) T(x, t_2 - t_1)) \rangle \quad (3.1.1)$$

schreiben. Ein erster Schritt, um den Zusammenhang zwischen Wilson-Loops und Potential zeigen zu können, ist durch die Fixierung der Eichung möglich, welche aufgrund der vorausgesetzten lokalen Eichsymmetrie physikalisch keine Änderung bringt.

3.1.1.1. Wilson-Loops in temporaler Eichung

In der temporalen Eichung sind die Eichfelder so gewählt, dass für alle $x \in \Lambda$

$$U_4(x) = \mathbb{1} \quad (3.1.2)$$

gilt. Die Links in Zeitrichtung und mit ihnen alle temporalen Transporter sind damit trivial und obiger Ausdruck (3.1.1) vereinfacht sich zu

$$\langle W_{\mathcal{L}} \rangle_T = \langle \text{tr} (S(x, y, t_2) S^\dagger(x, y, t_1)) \rangle_T. \quad (3.1.3)$$

Der Index T deutet dabei die durchgeführte temporale Eichung an und soll im Folgenden weggelassen werden. Im Grenzfall einer sehr großen zeitlichen Ausdehnung des Gitters ergibt sich [GL10, S. 56]

$$\langle W_{\mathcal{L}} \rangle = \sum_k \langle 0 | \hat{S}(x, y)_{ab} | k \rangle \langle k | \hat{S}^\dagger(x, y)_{ba} | 0 \rangle \exp(-tE_k), \quad (3.1.4)$$

wobei über die Indizes a und b summiert wird. Hier geben nur diejenigen Summanden einen Beitrag, für die $\hat{S}^\dagger(x, y)_{ba} | 0 \rangle$ einen Überlapp mit $| k \rangle$ hat.

Wie im Folgenden noch gezeigt werden wird, beschreiben solche Zustände aber gerade ein statisches Quark-Antiquark-Paar an den Stellen x und y . Die zugehörigen Energien E_k sollten demnach die Energien des Quark-Antiquark-Paares darstellen, wobei die kleinste Energie E_1 dabei die reine potentielle Energie zwischen beiden Teilchen repräsentiert. Höhere Energien repräsentieren angeregte Zustände des Systems.

Das statische Quark-Antiquark-Potential $V(r) = E_1$ kann also aus den Wilson-Loops bestimmt werden, weil folgende Proportionalität gilt:

$$\langle W_{\mathcal{L}} \rangle \propto \exp(-tV(r)) \cdot (1 + \mathcal{O}(\exp(-t\Delta E))). \quad (3.1.5)$$

Dabei ist ΔE die Differenz zwischen Grundzustandsenergie E_1 und erstem angeregten Zustand E_2 . Hier können nun unterschiedliche Methoden ansetzen, um $V(r)$ aus den vorhandenen Daten zu ermitteln, welche später in diesem Kapitel beschrieben werden sollen. Die r -Abhängigkeit des Potentials ist so zu verstehen, dass es vom Abstand zwischen Quark und Antiquark abhängt. Dieser Abstand ist durch den Wilson-Loop selbst gegeben, weil $r = a|x - y|$ gilt.

3.1.1.2. Hopping expansion

Es bleibt noch zu zeigen, dass $\hat{S}^\dagger(x, y)_{ba} |0\rangle$ nun wirklich einen Überlapp mit den Zuständen des Quark-Antiquark-Paares besitzt. Dazu wird die sogenannte *hopping expansion* benötigt. Durch sie können fermionische Observablen durch Linkketten, die sogenannten *fermion lines* beschrieben werden. Die Wilson-Lines \hat{S} sind ebenso solche Ketten und im Fall unendlich schwerer Quarks reduzieren sich Fermion- bzw. Quark-Propagatoren auf eine solche Wilson-Line. Ausgangspunkt, um dies zu zeigen, ist der Dirac-Operator für die Beschreibung von Wilson-Fermionen, der in Gleichung (2.3.57) im Fall der $N = 1$ -SYM-Theorie dargestellt ist. Dieser kann in der QCD auch durch [GL10, S. 115]

$$D(x, y) = C(\mathbb{1} - \kappa H(x, y)), \quad \kappa = \frac{1}{2(am + 4)}, \quad C = m + \frac{4}{a} \quad (3.1.6)$$

dargestellt werden. Die Größe H wird als *hopping matrix* bezeichnet, weil sie nur dann einen Wert ungleich Null besitzt, wenn x und y nächste Nachbarpunkte sind. Der Term enthält in diesem Fall den beide Punkte verbindenden Link $U_\mu(x)$:

$$H(x, y) = \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} (\mathbb{1} - \gamma_\mu) U_\mu(x) \delta_{x+\mu, y}, \quad (3.1.7)$$

wobei hier der Einfachheit halber die Dirac-, Farb- und Flavor-Indizes weggelassen wurden. Der Term μ im Kronecker-Delta stellt den Einheitsvektor in μ -Richtung dar. Die Konstante C in Gleichung (3.1.6) lässt sich in die Normierung der Fermionfelder $\bar{\psi}(x)$ bzw. $\psi(y)$ einbeziehen, also

$$\psi \rightarrow \sqrt{C}\psi \text{ und } \bar{\psi} \rightarrow \sqrt{C}\bar{\psi}, \quad (3.1.8)$$

weshalb der hier zu betrachtende Dirac-Operator zu

$$D(x, y) = (\mathbb{1} - \kappa H(x, y)) \quad (3.1.9)$$

vereinfacht werden kann. Von Interesse ist wie eingangs erwähnt der Quarkpropagator, also das Inverse des Dirac-Operators

$$D^{-1}(x, y) = (\mathbb{1} - \kappa H(x, y))^{-1}. \quad (3.1.10)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist dabei der Grenzwert einer (konvergenten) geometrischen Reihe

$$D^{-1}(x, y) = \sum_{i=0}^{\infty} \kappa^i H^i(x, y) \quad (3.1.11)$$

mit den Koeffizienten

$$H^i(x, y) = \sum_{\mu_j=\pm 1}^{\pm 4} \left(\prod_{j=1}^i (\mathbb{1} - \gamma_{\mu_j}) \right) P(x, y) \delta_{x+\mu_1+\dots+\mu_i, y}, \quad (3.1.12)$$

wobei die Linkkette P durch

$$P(x, y) = U_{\mu_1}(x) U_{\mu_2}(x + \mu_2) \dots U_{\mu_j}(x + \mu_1 + \mu_2 \dots \mu_{i-1}) \quad (3.1.13)$$

gegeben ist. Der Koeffizient $H^i(x, y)$ bedarf einer Erläuterung. Summe und Produkt sind so zu verstehen, dass über alle Linkketten der Länge i summiert wird. Das Kronecker-Delta reduziert diese Terme dann auf Ketten, die die Punkte x und y miteinander verbinden. Gleichzeitig fallen Linkketten weg, in denen direkt aufeinander folgende Links zwischen den gleichen Gitterpunkten aber mit unterschiedlicher Orientierung existieren. In diesem Fall würde das Produkt

$$(\mathbb{1} - \gamma_{\mu_j})(\mathbb{1} + \gamma_{\mu_j}) = 0 \quad (3.1.14)$$

auftauchen und der Term würde Null ergeben. Für den Fall der kürzesten Verbindung zwischen zwei Punkten enthält der Term $H^i(x, y)$ gerade die Linkkette der zugehörigen Wilson-Line.

Wird nun der Fall schwerer Quarks betrachtet, so strebt $\kappa \rightarrow 0$ für $m \rightarrow \infty$. Damit werden höhere Terme - also Terme mit längeren Linkketten - in Gleichung 3.1.11 unterdrückt. Der kleinste nicht-verschwindende Terme entspricht gerade einer Wilson-Line, womit der Dirac-Operator in erster Näherung für schwere Quarks im Großen und Ganzen aus dieser aufgebaut ist.

Damit ist der Zusammenhang zwischen den Wilson-Loops und dem statischen Quarkpotential hergestellt. Die Wilson-Loops lassen sich in temporaler Eichung durch zwei Wilson-Lines darstellen und diese wiederum bilden den essentiellen Baustein für den Quarkpropagator im Fall schwerer Quarks. Für diesen gilt¹²

$$\frac{1}{a^4} D^{-1}(x, y) = \langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle_F. \quad (3.1.15)$$

¹²Vgl. hierzu [GL10, S. 114]. Der Index F des Erwartungswerts der Gleichung bedeutet die Nutzung des fermionischen Erwartungswertes unter Vernachlässigung der Eichfelder.

3.1.2. Verlauf des Potentials in der reinen Eichtheorie

Die reine Eichtheorie ist hier deshalb so interessant, weil das betrachtete supersymmetrische Modell keine Quarks enthält und deshalb zumindest für das Potential ähnliche Ergebnisse wie in der reinen Eichtheorie erwartet werden.

Die erwartete Form des statischen Quark-Antiquark-Potentials in der reinen Eichtheorie ist relativ einfach nachzuweisen. Sie lautet dort

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + \sigma r. \quad (3.1.16)$$

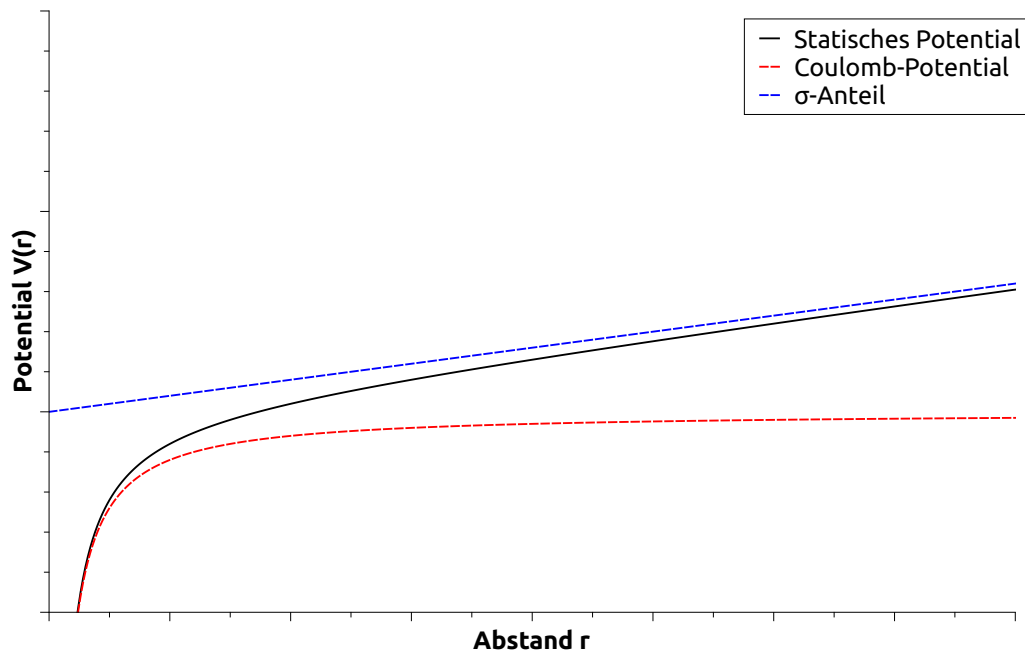


Abbildung 3.1.: Willkürlich skalierte Darstellung des statischen Potentials: Die rote Kurve stellt dabei den Coulomb-artigen Anteil des Potentials dar, wogegen die blaue Kurve den Confinement-Term repräsentiert. Mit dieser Darstellung soll das Grenzwertverhalten des statischen Potentials angedeutet werden, nachdem der Coulomb-artige Anteil bei kleinen Abständen dominiert und das Potential bei großen Abständen linear ansteigt.

Hierbei ist A eine Potentialverschiebung, welche für physikalisch messbare Größen wegfällt und damit nicht weiter von Interesse ist. Der zweite Term beschreibt den Coulomb-artigen Anteil des Potentials und der dritte Term σ ist der für das Confinement verantwortliche Term, welcher linear mit dem Abstand ansteigt. Dieser nennt sich *string*

tension. Eine schematische Darstellung des Potentials kann in Abb. 3.1 gefunden werden.

Zunächst soll hier das Vorherrschen des Coulomb-artigen Terms bei schwacher Kopplung g , also großem β ($\beta = \frac{6}{g^2}$) gezeigt werden. Anschließend soll darauf eingegangen werden, dass sich das Potential im Fall starker Kopplung g durch den dritten, linear ansteigenden Term nähern lässt. Die Rechnung soll in der reinen Eichtheorie durchgeführt werden und orientiert sich an der Rechnung in [GL10, S. 58ff.].

3.1.2.1. Grenzfall schwacher Kopplung

Der Verlauf des Potentials im Fall schwacher Kopplung lässt sich bereits in der Kontinuumsstheorie analytisch auswerten. Betrachtet wird zunächst die bosonische Wirkung¹³

$$S_G[A] = \frac{1}{4g^2} \sum_{a=1}^8 \int d^4x F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a, \quad (3.1.17)$$

wobei

$$F_{\mu\nu}^a(x) = \partial_\mu A_\nu^a(x) - \partial_\nu A_\mu^a(x) - f_{abc} A_\mu^b A_\nu^c(x) \quad (3.1.18)$$

den komponentenweisen Feldstärketensor darstellt. Durch Reskalierung der Eichfelder gemäß $\frac{1}{g} A_\mu \rightarrow A_\mu$ kann der Kopplungsfaktor aus Gleichung (3.1.17) herausgezogen und in der Gleichung für die Eichfelder absorbiert werden. Die obigen Gleichungen werden in diesem Fall zu

$$S_G[A] = \frac{1}{4} \sum_{a=1}^8 \int d^4x F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a \quad (3.1.19)$$

mit

$$F_{\mu\nu}^a(x) = \partial_\mu A_\nu^a(x) - \partial_\nu A_\mu^a(x) - g f_{abc} A_\mu^b A_\nu^c(x). \quad (3.1.20)$$

Der Vorteil dieser Darstellung liegt auf der Hand. Es ist leicht ersichtlich, dass bei schwächer und schwächer werdender Kopplung lediglich der für die Selbstwechselwirkung verantwortliche Term $f_{abc} A_\mu^b A_\nu^c(x)$ verschwindet. Übrig bleibt dann der Feldstärketensor in einer Form, wie er sie auch in der Quantenelektrodynamik besitzt. Da in der Quantenelektrodynamik die Form des Potentials vom Coulomb-Typ ist, ist sie das dementsprechend im Grenzfall schwacher Kopplungen in der reinen Eichtheorie ebenso.

3.1.2.2. Grenzfall starker Kopplung

Für den Nachweis des linearen Potentialanstiegs im Fall starker Kopplung muss mehr Aufwand betrieben werden. Ausgangspunkt ist hier die Betrachtung von

$$\langle W_C \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[U] \exp \left(-\frac{\beta}{3} \sum_P \text{Re tr} [\mathbb{1} - U_P] \right) \text{tr} \left[\prod_{l \in \mathcal{C}} U_l \right], \quad (3.1.21)$$

¹³Die Stellung der Lorentz-Indizes erklärt sich durch die Darstellung in euklidischer Metrik und die Obergrenze der Summe ist 8, weil SU(3)-Eichsymmetrie hier vorausgesetzt wird.

wobei die Zustandssumme durch

$$Z = \int \mathcal{D}[U] \exp \left(-\frac{\beta}{3} \sum_P \operatorname{Re} \operatorname{tr}[\mathbb{1} - U_P] \right) \quad (3.1.22)$$

gegeben ist. Die genutzte Wirkung ist die der reinen Eichtheorie aus Gleichung (2.3.54), wobei hier eine vereinfachte Konvention genutzt wurde. Der Erwartungswert ist in dieser Form durch den Pfadintegralformalismus gegeben und nutzt keinerlei Näherungen der Monte-Carlo-Methode. In gewisser Weise findet die folgende Rechnung also analytisch statt.

Die durchgeführte Näherung zur Betrachtung des Grenzfalls einer starker Kopplung betrifft die Exponentialfunktion, weil schließlich nur diese mit der kopplungsabhängigen Größe β verknüpft ist. Dafür sollte der Exponent zunächst umformuliert werden.

Der konstante Term im Exponenten mit $\sum_P \operatorname{tr}[\mathbb{1}]$ kann zuallererst aus dem Integral herausgezogen werden. Eben dieser Term tritt auch in der Zustandssumme Z auf; beide Terme kürzen sich dann weg. Der Exponent selbst lässt sich zudem noch gemäß der Definition des Realteils verändern¹⁴, was im Folgenden noch wichtig sein wird. Es bleibt damit:

$$\langle W_C \rangle = \frac{1}{Z'} \int \mathcal{D}[U] \exp \left(\frac{\beta}{6} \sum_P (\operatorname{tr}[U_P] + \operatorname{tr}[U_P^\dagger]) \right) \operatorname{tr} \left[\prod_{l \in C} U_l \right], \quad (3.1.23)$$

wobei die *neue* Zustandssumme durch

$$Z' = \int \mathcal{D}[U] \exp \left(\frac{\beta}{6} \sum_P (\operatorname{tr}[U_P] + \operatorname{tr}[U_P^\dagger]) \right) \quad (3.1.24)$$

gegeben ist. Der wahre Näherungsschritt kann nun durchgeführt werden. Bezüglich beider Summanden wird die Exponentialfunktion als Taylorreihe entwickelt. Starke Kopplung zeichnet sich durch ein großes g und damit kleines β aus, weshalb die Taylorreihe nach ihrem ersten nichtverschwindenden Term abgebrochen werden darf.

Die Taylorreihe kann allgemein durch

$$\exp \left(\frac{\beta}{6} \sum_P (\operatorname{tr}[U_P] + \operatorname{tr}[U_P^\dagger]) \right) = \sum_{i,j=0}^{\infty} \frac{1}{i!j!} \left(\frac{\beta}{6} \right)^{i+j} \left(\sum_P \operatorname{tr}[U_P] \right)^i \left(\sum_P \operatorname{tr}[U_P^\dagger] \right)^j \quad (3.1.25)$$

¹⁴Es wurde dabei

$$\operatorname{Re} \operatorname{tr}[U_P] = \frac{1}{2} (\operatorname{tr}[U_P] + \operatorname{tr}[U_P^\dagger])$$

ausgenutzt. Anschaulich wird die Plaquette U_P in dieser Rechnung in ihre beiden Orientierungen aufgeteilt, wodurch sich der Faktor $\frac{1}{2}$ erklärt.

geschrieben werden [GL10, S. 60]. Für die Zustandssumme reicht die nullte Ordnung der Taylorreihe aus. Werden nur die Terme mit $i = j = 0$ in Gleichung (3.1.25) genutzt, so wird die Exponentialfunktion zu Eins genähert und es ergibt sich:

$$Z' = \int \mathcal{D}[U] (1 + \mathcal{O}(\beta)) = 1 + \mathcal{O}(\beta^2). \quad (3.1.26)$$

Die Berechnung des gesamten Erwartungswerts in (3.1.23) erweist sich als weitaus weniger trivial. Problematisch ist hier, dass der erste nichtverschwindende Term nicht wieder durch die nullte Ordnung gegeben ist.¹⁵ Es gilt also, die kleinste nichtverschwindende Ordnung der Taylorentwicklung zu finden.

Die essentiellen Bestandteile des Integrals sind in der Taylorentwicklung Produkte von Spuren über Elemente der Eichgruppe. Hier besitzen lediglich Integrale der Form

$$\int \mathcal{D}[U] \operatorname{tr}[VU] \operatorname{tr}[U^\dagger W] = \frac{1}{3} \operatorname{tr}[VW] \quad (3.1.27)$$

einen nichtverschwindenden Wert [GL10, S. 48, S. 60]. Der kleinste nichtverschwindende Term der Taylorreihe muss U und U^\dagger , also einen Link in beiden Orientierungen enthalten, damit Gleichung (3.1.23) mit eingesetzter Taylorentwicklung einen von Null verschiedenen Wert aufweist. Dies kann dadurch realisiert werden, dass der Wilson-Loop mit Plaquettes *aufgefüllt* wird. Sind diese Plaquettes entgegengesetzt zum Wilson-Loop orientiert, so ist genau Bedingung (3.1.27) erfüllt. Hier wird klar, warum die Aufteilung der Plaquettes der gluonischen Wirkung in beide Umlaufrichtungen sinnvoll ist. Diejenigen Plaquettes mit gleichem Umlaufsinn wie die Wilson-Loops brauchen für die Taylor-Entwicklung nicht betrachtet zu werden, weil diese keinen Beitrag zum Integral liefern. Von den anderen Plaquettes werden $n_A = n_R \cdot n_T$ viele benötigt, wobei n_R die räumliche und n_T die zeitliche Ausdehnung des Wilson-Loops beschreiben. Dadurch kann der Wilson-Loop *aufgefüllt* werden.

Entsprechend muss die Taylorentwicklung bis zur n_A -ten Ordnung durchgeführt werden, weil dann gemäß Gleichung (3.1.25) n_A Plaquettes vorhanden sind. Eingesetzt in das Integral aus Gleichung (3.1.23) ergibt sich damit¹⁶

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}[U] \frac{1}{n_A!} \left(\frac{\beta}{6}\right)^{n_A} \left(\sum_P \operatorname{tr}[U_P^\dagger]\right)^{n_A} \operatorname{tr} \left[\prod_{l \in \mathcal{C}} U_l \right] \\ &= \operatorname{tr}[\mathbb{1}] \left(\frac{\beta}{6}\right)^{n_A} \left(\frac{1}{3}\right)^{n_A} \\ &= 3 \cdot \exp \left(n_A \ln \left(\frac{\beta}{18} \right) \right). \end{aligned} \quad (3.1.28)$$

¹⁵Das Integral, welches in dieser Näherung lediglich durch den Wilson-Loop $\operatorname{tr} [\prod_P U_P]$ bestimmt wird, ist vom Typ $\int \mathcal{D}[U] U_{ab}$ und verschwindet deshalb [GL10, S. 47]

¹⁶Die Darstellung als Exponentialfunktion im letzten Schritt wurde der Vergleichbarkeit mit $\langle W_C \rangle \propto \exp(-an_T V(r))$ wegen angestrebt.

Zusammen mit dem Ergebnis für die Zustandssumme Z' folgt dann schlussendlich

$$\langle W_C \rangle = 3 \exp \left(n_R n_T \ln \left(\frac{\beta}{18} \right) \right) (1 + \mathcal{O}(\beta)), \quad (3.1.29)$$

wobei der Vergleich mit dem Erwartungswert der Wilson-Loops $\langle W_C \rangle \propto \exp(-an_T V(r))$ im Fall großer n_T tatsächlich zeigt, dass das Potential bei starker Kopplung einen linear ansteigenden Charakter besitzt:

$$V(r) \propto an_R = r. \quad (3.1.30)$$

3.1.2.3. Confinement und string breaking

Confinement bezeichnet das Phänomen, dass in der Natur keine freien Farbladungen existieren. Phänomenologisch kann dies durch ein immer stärker werdendes Potential bei steigendem Abstand erklärt werden. Wird also versucht, ein einzelnes Quark zum Beispiel aus einem Meson oder einem Proton zu separieren, so steigt die Kraft zwischen Quark und dem zurückgebliebenen Rest immer weiter an.

In der Natur kann es dabei zum sogenannten *string breaking* kommen, bei dem das Quark unter Neubildung von Teilchen separiert werden kann. Die letztendlich entstandenen Teilchen sind allerdings insgesamt wieder farbneutral. Dementsprechend müssen also farbgeladene Teilchen entstanden sein, die insgesamt aber farbneutral sind. Zwischen Mesonen, die in Quark und Antiquark separiert werden, kann sich zum Beispiel ein Meson bilden, das zum *string breaking* führt.

Dieses Verhalten zeigt sich auch in der Betrachtung der vollen QCD bei Berücksichtigung dynamischer Fermionen auf dem Gitter. Im Potential äußert sich dieses Phänomen darin, dass das Potential nach einer Phase des Anstiegs in einen konstanten Wert übergeht - also ein Plateau erreicht.

Im Gegensatz zur Quantenchromodynamik wird in dieser Arbeit aber ein Modell benutzt, in dem keine Quarks beschrieben werden. Dementsprechend sollte hier das in den letzten Abschnitten gezeigte Verhalten der reinen Eichtheorie reproduziert werden.

Anschaulich kann das Confinement auch am Feldlinienverlauf eines Quark-Antiquark-Paares gezeigt werden. Im Gegensatz zur Elektrodynamik, in der die Feldlinien zweier entgegengesetzt gleicher Ladungen im Raum als Dipolfeld realisiert sind, sind die Feldlinien des Quark-Antiquark-Paares in einem engen *Schlauch* zwischen den Ladungen konzentriert.

3.1.3. Einführung des Sommer-Parameters

Bisher wurde hier noch nicht detailliert auf die benutzten Einheiten in den Rechnungen eingegangen. Eine genaue Unterscheidung war nicht notwendig. In Gitterrechnungen

werden die Größen zunächst immer auch in Gittereinheiten berechnet. Natürlich ist aber eine Darstellung in physikalischen Einheiten - oder zumindest in einer einheitlichen, vom jeweiligen Gitter unabhängigen Skala - erwünscht. Mithilfe des Sommer-Parameters und dem mit diesem verbundenen Verfahren kann diese Verbindung

$$\text{Gittereinheiten} \leftrightarrow \text{physikalische Einheiten}$$

hergestellt werden [Som94]. Voraussetzung für dieses Verfahren ist das Vorliegen der Parameter des statischen Potentials. Es sei hier angemerkt, dass die folgende Methode nur *eine* Möglichkeit zum Übergang in physikalische Einheiten darstellt. Beispielsweise kann die Skala auch durch Vergleich von gemessenen und simulierten Massen bestimmt werden [GL10, S. 63].

Die zu bestimmende Größe in dieser Methode ist der Gitterabstand a , also die Entfernung zwischen zwei direkten Gitternachbarn, denn prinzipiell sind Gitterabstände und physikalische Abstände durch

$$r = n_r a, \quad t = n_t a \quad (3.1.31)$$

miteinander verknüpft. n_i sind hier die Gitterkoordinaten. Dementsprechend können aus den Wilson-Loops ohne den Gitterabstand a eigentlich gar keine physikalischen Größen gewonnen werden, weil

$$\langle W_{\mathcal{L}} \rangle = C \exp(-tV(r)) = C \exp(-n_t a \cdot V(n_r a)) \quad (3.1.32)$$

gilt und damit auf dem Gitter die Größe $a \cdot V(n_r a)$ extrahiert wird.

Ein möglicher Ansatz zur Bestimmung von a ist der Vergleich zwischen einer in Experimenten gemessenen und auf dem Gitter bestimmten Größe. Geeignet ist dabei die dimensionslose Größe

$$F(r) \cdot r^2 \quad \text{mit} \quad F(r) = \frac{dV}{dr}, \quad (3.1.33)$$

die in Experimenten mit schweren Mesonen quasi aus der Kraft zwischen Quark und Antiquark gewonnen werden kann. Es ergibt sich

$$F(r_0) \cdot r_0^2 = 1.65 \quad \text{für} \quad r_0 = 0.5 \text{ fm}. \quad (3.1.34)$$

Der Abstand r_0 ist der Sommer-Parameter. Er entspricht also einem bestimmten physikalischen Abstand zwischen Quark und Antiquark. Diese Entfernung ist über $r_0 = 0.5 \text{ fm}$ definiert, wird aber gleichzeitig mit dem Potential bzw. der resultierenden Kraft über die Größe $F(r)r^2$ verbunden. Durch diese Verbindung kann r_0 auch auf dem Gitter, $r_{0,\text{lat}}$, ermittelt werden, indem dasjenige $r_{0,\text{lat}}$ gefunden wird, welches

$$F(r_{0,\text{lat}} a) \cdot r_{0,\text{lat}}^2 a^2 = 1.65 \quad (3.1.35)$$

erfüllt. Für diese Gleichung wurde lediglich $r_0 = r_{0,\text{lat}} \cdot a$ in Gleichung (3.1.34) eingesetzt. Es liegt damit ein gleicher Abstand in Gitter- und physikalischen Einheiten vor und der Parameter a ist dementsprechend durch

$$a = \frac{r_0}{r_{0,\text{lat}}} = \frac{0.5 \text{ fm}}{r_{0,\text{lat}}} \quad (3.1.36)$$

berechenbar.

Mit dem in Abschnitt 3.1.2 gezeigten Potentialverlauf kann $F(n_r a)$ auf dem Gitter bestimmt werden:

$$F(n_r a) = \frac{dV}{dn_r a} = \frac{d}{dn_r a} \left(A + \frac{B}{(n_r a)} + \sigma(n_r a) \right) = -\frac{B}{n_r^2 a^2} + \sigma. \quad (3.1.37)$$

Durch die Bedingung in (3.1.35) folgt dann

$$F(r_{0,\text{lat}} a) \cdot r_{0,\text{lat}}^2 a^2 = 1.65 = -B + \sigma r_{0,\text{lat}}^2 a^2 \quad (3.1.38)$$

bzw. algebraisch umgestellt

$$r_{0,\text{lat}} = \sqrt{\frac{1.65 + B}{\sigma a^2}}. \quad (3.1.39)$$

Auf den ersten Blick erscheint es so, als ob zur Bestimmung von a durch $r_{0,\text{lat}}$ in Gleichung (3.1.39) eben gerade a^2 bekannt sein muss. Aus den Wilson-Loops wird allerdings $aV(n_r a)$ bestimmt und nicht $V(r)$. Damit wird effektiv

$$aV(n_r a) = aA + \frac{B}{n_r} + \sigma a^2 n_r \quad (3.1.40)$$

gemessen. Die durch einen Fit bestimmbaren Parameter sind dann aA , B und σa^2 . Der Gitterabstand a muss für die $r_{0,\text{lat}}$ -Bestimmung somit nicht bekannt sein, weil σa^2 als Fitparameter vorliegt.

Diese Darstellung bezieht sich auf die Quantenchromodynamik. Bei dem in dieser Arbeit benutzten supersymmetrischen Modell werden aber eigentlich gar keine Quarks beschrieben und die Verbindung von Experiment und Simulation ist prinzipiell gar nicht möglich. Der Sommer-Parameter kann *in Analogie* zur QCD dennoch genau so benutzt werden, weil lediglich eine Skala von Interesse ist, mit der auf den jeweiligen Gittern berechnete Größen miteinander verglichen werden können.

Somit dient das Verfahren des Sommer-Parameters hier nicht der Ermittlung von Ergebnissen in physikalischen Einheiten, sondern lediglich der Definition einer einheitlichen Skala.

3.2. Methoden zur Bestimmung des statischen Potentials

Im Folgenden soll explizit auf die Berechnungsmethoden für das statische Quark-Antiquark-Potential und des sich daraus ergebenden Sommer-Parameters eingegangen werden.¹⁷ Die Programme, welche diese Methoden programmiertechnisch umsetzen, wurden speziell für diese Arbeit auf der Basis vorhandener Quelltexte von Dirk Sandbrink erstellt. Dabei werden zwei Programme benötigt: eines für die Messung und eines für die Analyse der Wilson-Loops.

Das eine Programm dient der *Messung* der Observablen, bei der diese für die einzelnen vorliegenden Linkkonfigurationen berechnet werden. Hier sind dies die Wilson-Loops mit verschiedenen Ausdehnungen in Zeit- und Raumrichtung. Nach der Messung müssen die Observablen vom anderen Programm gemäß der Monte-Carlo-Methode (siehe hierzu 2.4.6) über die einzelnen Konfigurationen gemittelt werden, um näherungsweise den statistischen Erwartungswert zu erhalten. Die Mittelung wird bei den Wilson-Loops durch das Verfahren des Jackknifings durchgeführt. Hierdurch kann zusätzlich der statistische Fehler abgeschätzt werden. Wie in Abschnitt 2.4.2.3 beschrieben, wird die eigentliche Rechnung dann auf den zu mittelnden Jackknifes durchgeführt. Diese besteht in der Berechnung des Potentials und seiner Parameter durch verschiedene Fitmethoden. Anschließend kann der Sommer-Parameter bestimmt werden.

Der zweigeteilte Ablauf dieses Prozesses ebenso wie die Anwendung des Jackknifings ist auch für andere Messgrößen typisch. Im Folgenden soll zunächst auf die Messung der Wilson-Loops genauer eingegangen werden.

Hier sollen lediglich planare Wilson-Loops betrachtet werden, weil das für diese Arbeit benutzte Messprogramm auch eben nur solche unterstützt. Die Einbeziehung nichtplanarer Wilson-Loops könnte die Anzahl der berechneten Wilson-Loops erhöhen (siehe 2.3.8.2) und damit die Datengrundlage verfeinern. Damit wäre allerdings auch mehr Rechenzeit und größere Programmkomplexität notwendig.

3.2.1. Messung der Wilson-Loops

Ausgangspunkt ist eine Linkkonfiguration des Gitters. Von Interesse sind alle Wilson-Loops bis zu einer räumlichen Ausdehnung von $S_{\max}/2$ und einer zeitlichen Ausdehnung von $T_{\max}/2$, wobei S_{\max} und T_{\max} die Ausdehnung des Gitters beschreiben. Noch größere Wilson-Loops können bei Verwendung periodischer Randbedingungen nicht genutzt werden. Die maximal mögliche Ausdehnung der Wilson-Loops muss zudem nicht unbedingt voll ausgeschöpft werden; insbesondere solche mit großen zeitlichen Ausdehnungen

¹⁷Der Übersichtlichkeit wegen sollen dabei die auf dem Gitter berechneten Größen in Gitterkoordinaten dargestellt werden, ohne jedesmal mit einem Index „lat“ darauf hinzuweisen. Aus gleichem Grund soll auch zum Beispiel $V(r)$ *statisches Potential* und nicht *statisches Potential in Gitterkoordinaten* genannt werden.

können bei ausreichend großen Gittern vernachlässigt werden, weil das Signal der Wilson-Loops im oberen Zeitbereich oft starken statistischen Schwankungen unterworfen ist. Die Schleifen bestehen aus zwei Wilson-Lines und zwei temporalen Transportern. Jede der vier Komponenten ist eine Linkkette, also ein Produkt mehrerer Links. Diese müssen zunächst berechnet werden. Ihre Längen definieren dabei spatiale bzw. temporale Ausdehnung der Schleife. Je größer diese Ausdehnung also ist, desto größer ist auch der Rechenaufwand, weil mehr Links miteinander multipliziert werden müssen. Dementsprechend benötigen größere Schleifen auch mehr Rechenzeit.

Im Programm werden die für die Wilson-Loops verwendeten Linkketten im ersten Schritt berechnet. Der zweite Schritt fügt sie durch

$$W_{\mathcal{L}} = \text{tr} \left(S(x, y, t_2) T^\dagger(y, t_2 - t_1) S^\dagger(x, y, t_1) T(x, t_2 - t_1) \right) \quad (3.2.1)$$

zu Schleifen zusammen.

Für eine bestimmte räumliche bzw. zeitliche Länge existieren auf einem Gitter viele Möglichkeiten, um einen solchen Wilson-Loop zu realisieren. Die Entfernungen zwischen x und y bzw. zwischen t_1 und t_2 sind durch ihre Ausdehnung festgelegt; die Wahl eines Raumzeitpunktes - zum Beispiel von (x, t_1) - ist jedoch frei. Gleichzeitig dürfen die räumlichen Punkte x und y nur auf einer Achse gegeneinander verschoben sein, weil nur planare Wilson-Loops betrachtet werden sollen. Welche Achse dies ist, ist aber wiederum frei. Das heißt, für jeden Raumzeitpunkt und für jede (räumliche) Achse, auf der x und y voneinander entfernt sind, existiert ein anderer Wilson-Loop. Es sei darauf hingewiesen, dass für die Analysen im nachfolgenden Kapitel periodische Randbedingungen benutzt werden. Damit kann eine Linkkette auch über den Definitionsbereich des Gitters hinauszeigen; sie wird dann an der entgegengesetzten Seite weiter fortgesetzt.

Zur Veranschaulichung der zu bearbeitenden Datenmenge sei hier ein typisches Gitter als Beispiel gegeben. Für ein $32^3 \times 64$ -Gitter ergeben sich für eine bestimmte zeitliche und räumliche Ausdehnung

$$N_1 = (S_{\max})^3 \cdot T_{\max} \cdot 3 = 6.291.456 \quad (3.2.2)$$

Wilson-Loops. Von Interesse ist nur ein Wert für eine bestimmte Ausdehnung, weil Schleifen gleicher Größe an unterschiedlichen Positionen aus Symmetriegründen die gleiche Observable darstellen. Berechnet wird also der Mittelwert dieser äquivalenten Größen. Bei typischer maximaler Ausdehnung der Schleifen muss dieser Mittelwert somit für

$$N_2 = S_{\max}/2 \cdot T_{\max}/2 = 512 \quad (3.2.3)$$

unterschiedliche Längen berechnet werden. Effektiv müssen damit für ein typisches Gitter $N = N_1 \cdot N_2 = 3.221.225.472$ Wilson-Loops berechnet werden, um Daten für eine Konfiguration zu erhalten. Gemäß der Monte-Carlo-Methode ist allerdings erst der Mittelwert über viele Konfiguration eine aussagekräftige Größe, weshalb für verwertbare Ergebnisse viele Konfigurationen notwendig sind.

Diese riesige Datenmenge verdeutlicht, warum eine effiziente Umsetzung der Messung von Nöten ist. Gleichzeitig liefert sie auch Anlass dazu, besonderes Augenmerk auf die Verbesserung der Datenqualität zu legen, denn eine bessere Datenqualität bedeutet, dass weniger Konfigurationen notwendig sind, um verlässliche Ergebnisse zu erhalten. Der Begriff *bessere Datenqualität* ist natürlich abhängig von der Fragestellung. Im Fall der Untersuchung des statischen Potentials bedeutet eine bessere Qualität, dass Terme höherer Ordnung in den Werten der Wilson-Loops unterdrückt sind. Dadurch kann der niedrigste Term - das Potential - besser extrahiert werden. Die in dieser Arbeit zentrale Methode zur Verbesserung der Daten ist das sogenannte *Smearing*, welches im nächsten Abschnitt besprochen werden soll.

3.2.1.1. Smearing-Verfahren

Bei der Extraktion des statischen Potentials auf dem Gitter wird dieses nicht in seiner reinen Form gewonnen, sondern enthält zusätzlich Einflüsse angeregter Zustände. Diese angeregten Zustände entsprechen kurzreichweitigen Fluktuationen der Links auf dem Gitter. Sie überlagern natürlich das langreichweitige Verhalten des Systems und wirken sich bei einer Messung des statischen Potentials störend aus. *Störend* bedeutet in diesem Fall, dass die Observablen unerwünschte Einflüsse höherer Zustände beinhalten und dass damit das Potential weniger genau bestimmt werden kann.

Smearing- oder auch *Smoothing*-Methoden versuchen, eben diese kurzreichweitigen Fluktuationen zu vermindern, indem die einzelnen Links durch Mittelungen von Links aus ihrer Umgebung ersetzt werden.¹⁸ Die vorher in einem Link lokalisierten Informationen werden dadurch auf mehrere Links verteilt, was so aufgefasst werden kann, als bekämen die Links eine Art Ausdehnung.

Das jeweilige Smearing-Verfahren kann mehrfach hintereinander angewandt werden; die Links werden dabei mit jedem Schritt sozusagen immer weiter „verschmiert“. Natürlich muss beachtet werden, dass nicht auch das langreichweitige Verhalten des Systems und damit in diesem Fall die Messung des Potentials beeinträchtigt wird.

Weiterhin wichtige Voraussetzung für alle Smearing-Verfahren ist die Erhaltung der Eichsymmetrie des Systems, weshalb nicht einfach über die Links in einer beliebigen Umgebung gemittelt werden kann, sondern spezielle Links gefunden werden müssen, damit die Voraussetzung erfüllt ist.

Im Folgenden sollen hier zwei bekannte Smearing-Verfahren vorgestellt werden: APE- und HYP-Smearing, welche beide im Programm implementiert sind. Danach soll die Technik des sogenannten *Variational Smearing* beschrieben werden.

Am Rande sei noch erwähnt, dass Smearing-Verfahren ebenfalls den Einfluss sogenannter *exceptional configurations* vermindern können, was allerdings nur bei der Betrachtung von Fermionen relevant ist und hier deshalb nicht weiter ausgeführt werden soll[GL10, S. 141f.].

¹⁸Die sich durch das Smearing ergebenden Links werden in der Literatur oft als *fat links* („dicke Links“) bezeichnet. Die ursprünglichen Links werden dann *thin links* („dünne Links“) genannt.

APE-Smearing

Beim APE-Smearing [Alb87] wird jeder Link durch eine Mittelung über ihn selbst und über die ihn umgebenden sogenannten *staples* berechnet. *Staples* sind im Prinzip Plaquetten, denen ein Link fehlt. Eine symbolische Darstellung ist in Abb. 3.2 zu finden.

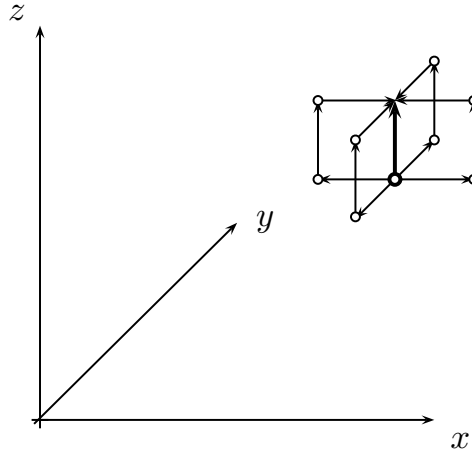


Abbildung 3.2.: Schematische Darstellung des APE-Smearing-Verfahrens (ohne zeitliches Smearing). Der *dicke* Link in der Mitte repräsentiert den geschmierten Link, der durch sich selbst und die umgebenden *staples* berechnet wird.

Der Vorgang des Smearings kann dabei als Transformation der Links gemäß

$$U_\mu(n) \rightarrow U_\mu^{\text{APE}}(n) = \text{Proj}_G \left[U_\mu(n) + \varepsilon \sum_{\nu \neq \mu} (C_{\mu\nu}^l(n) + C_{\mu\nu}^r(n)) \right] \quad (3.2.4)$$

verstanden werden, wobei Proj_G angedeutet, dass die geschmierten Links auf die Eichgruppe projiziert werden müssen. Der Parameter ε legt dabei fest, wie stark die den alten Link umgebenden *staples* in die Berechnung des neuen Links eingehen sollen. Die beiden Größen $C_{\mu\nu}(n)$ repräsentieren die *staples* und können durch

$$C_{\mu\nu}^l(n) = U_\nu(n) U_\mu(n + \nu) U_\nu^\dagger(n + \mu) \quad (3.2.5)$$

und

$$C_{\mu\nu}^r(n) = U_\nu^\dagger(n - \nu) U_\mu(n - \nu) U_\nu(n - \nu + \mu) \quad (3.2.6)$$

berechnet werden. Die hochgestellten Indizes sollen hier die „Orientierung“ *links* bzw. *rechts* der *staples* in Bezug zum Link $U_\mu(n)$ verdeutlichen. Für ein vierdimensionales Raumzeitgitter existieren damit maximal sechs *staples*, die in die Berechnung einfließen. Allerdings werden solche, die sich in zeitlicher Richtung erstrecken, oft vernachlässigt,

was auch in dem für diese Arbeit benutzten Programm der Fall ist. Damit müssen vier *staples* pro Link berechnet werden. Voruntersuchungen in der Arbeitsgruppe zeigten durch temporales Smearing ausgelöste, unerwünschte Ergebnisse. Zudem besitzt das Smearing in räumlichen Dimensionen eine physikalische Interpretation: Die Informationen, die in den Links enthalten sind, sind nicht fest in einem Link lokalisiert, sondern über einen größeren Bereich *ausgeschmiert*. Beim Smearing in zeitlicher Richtung ist die physikalische Interpretation nicht derart eindeutig.

Die durch Gleichung (3.2.4) transformierten Felder sind im Allgemeinen keine Elemente der zugrundeliegenden Eichgruppe mehr. Im Falle der SU(2) ist diese Projektion eine einfache Reskalierung. Wird hingegen eine Theorie genutzt, die eine SU(3)-Eichsymmetrie besitzt, so ist eine komplexere Projektion notwendig [GL10, S. 142].

Wie oben erwähnt wurde, ist es möglich und üblich, Smearing-Verfahren mehrfach auszuführen. Das Smearing geschieht dabei iterativ für die gesamte Konfiguration, alle Links einer Konfiguration werden also gemäß (3.2.4) transformiert - und das so oft, wie es erwünscht ist. Welche Anzahl von Smearing-Schritten optimal ist, hängt vom Gitter und der zu messenden Observable ab. Dabei wird die Anzahl der benutzten Smearing-Schritte üblicherweise als Smearing-Level bezeichnet.

Dass die transformierten Links ihr Eichtransformationsverhalten behalten, lässt sich ohne viel Aufwand zeigen. Von Nöten sind lediglich die Transformationsvorschriften für die Felder $U_\mu(n)$ und $U_\mu^\dagger(n)$. Die eichtransformierten Felder sind durch

$$U_\mu(n)' = \Omega(n)U_\mu(n)\Omega(n+\mu)^\dagger \quad (3.2.7)$$

$$(U_\mu^\dagger(n))' = \Omega(n+\mu)U_\mu^\dagger(n)\Omega^\dagger(n) \quad (3.2.8)$$

gegeben. Die beiden Terme $C_{\mu\nu}$, welche die Staples repräsentieren, zeigen damit das folgende Transformationsverhalten:

$$\begin{aligned} C_{\mu\nu}^l(n) &\rightarrow C_{\mu\nu}^l(n)' \\ &= \Omega(n)U_\nu(n)U_\mu(n+\nu)U_\nu^\dagger(n+\mu)\Omega^\dagger(n+\mu) \\ &= \Omega(n)C_{\mu\nu}^l(n)\Omega^\dagger(n+\mu) \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

$$\begin{aligned} C_{\mu\nu}^r(n) &\rightarrow C_{\mu\nu}^r(n)' \\ &= \Omega(n)U_\nu^\dagger(n-\nu)U_\mu(n-\nu)U_\nu(n-\nu+\mu)\Omega^\dagger(n+\mu) \\ &= \Omega(n)C_{\mu\nu}^r(n)\Omega^\dagger(n+\mu). \end{aligned} \quad (3.2.10)$$

Aus Platzgründen wurden hier die zwischen den Eichfeldern eingefügten Transformationsabbildungen direkt weggelassen, weil sich diese zu $\mathbb{1}$ kürzen. Das sich für beide $C_{\mu\nu}$ ergebene Transformationsverhalten ist identisch mit dem eines einzelnen Links, weshalb eichinvariante Objekte auf Konfigurationen ohne Smearing auch auf geschmierten Konfigurationen diese Eigenschaft behalten.

Für das APE-Smearing lässt sich eine effektive Reichweite des Verfahrens in Abhängigkeit der Iterationsanzahl und des Parameters ermitteln[Bon02][BD99]. Der sogenannte Smearing-Radius kann durch

$$R_{\text{smear}} = \sqrt{\frac{\varepsilon n}{3}} \quad (3.2.11)$$

in Gittereinheiten definiert werden. ε ist dabei der Smearing-Parameter und n die Anzahl der Iterationen. Der Begriff *dicke Links* gewinnt hierdurch zusätzlich an Bedeutung; der Smearing-Radius stellt ein Maß für die mittlere *Ausdehnung* dieser Links dar.

Es sei hier angemerkt, dass auch andere Definitionen für den Smearing-Radius existieren. Beispielsweise kann ebenfalls

$$R'_{\text{smear}} = \varepsilon n \quad (3.2.12)$$

als Radius dienen[Dem09, S. 48].

HYP-Smearing

Das sogenannte HYP-Smearing oder *hypercubic* Smearing [HK01] wird im allgemeinen Fall in drei Schritten ausgeführt, bei denen jeweils eine abgewandelte Form des APE-Smearings angewandt wird. Wichtig ist, dass nur die *staples* berücksichtigt werden, die sich innerhalb der Hyperkuben befinden, die an den zu transformierenden Link angrenzen. Hieraus ergibt sich auch der Name dieses Verfahrens.

Im Folgenden sollen die einzelnen Berechnungsschritte dargestellt werden. Dabei soll nicht in chronologischer Berechnungsreihenfolge vorgegangen werden, sondern die hierarchische Reihenfolge dargestellt werden, so wie es in der eingangs zitierten Quelle der Fall ist. In dieser Form ist das Verfahren besser darzustellen.

1. Die Links werden wie beim APE-Smearing für ein vierdimensionales Raumzeitgitter aus sechs bzw. vier *staples* berechnet:

$$U_\mu(n) \rightarrow U_\mu^{\text{HYP}}(n) = \text{Proj}_G \left[U_\mu(n) + \varepsilon_1 \sum_{\nu \neq \mu} (C_{\mu\nu}^l(n) + C_{\mu\nu}^r(n)) \right]. \quad (3.2.13)$$

In diesem Fall bestehen die *staples* $C_{\mu\nu}(n)$ jedoch wiederum aus dicken Links, also aus Links, die bereits durch Smearing verändert wurden:

$$\begin{aligned} C_{\mu\nu}^l(n) &= \tilde{U}_{\nu;\mu}(n) \tilde{U}_{\mu;\nu}(n + \nu) \tilde{U}_{\nu;\mu}^\dagger(n + \mu) \\ C_{\mu\nu}^r(n) &= \tilde{U}_{\nu;\mu}^\dagger(n - \nu) \tilde{U}_{\mu;\nu}(n - \nu) \tilde{U}_{\nu;\mu}(n - \nu + \mu). \end{aligned} \quad (3.2.14)$$

Wie bereits im Abschnitt zum APE-Smearing erwähnt, müssen die geschmierten Links auf die Eichgruppe projiziert werden. Diese Operation wird wieder durch Proj_G angedeutet.

2. Die dicken Links $\tilde{U}_{\mu;\nu}(n)$ werden durch Mittelung über angrenzende *staples* und sich selbst berechnet. Sie besitzen neben Richtung μ und Position n jedoch einen weiteren Parameter ν , der angibt, dass in dieser Richtung liegende *staples* vernachlässigt werden sollen. Aus diesem Grund werden für diese Links nicht sechs bzw. vier *staples* berechnet, sondern vier bzw. zwei - je nachdem, ob das Smearing-Verfahren auch in zeitlicher Richtung durchgeführt werden soll. Diese Einschränkung hat den Zweck, dass nur solche *staples* bzw. Links berücksichtigt werden, die sich innerhalb der oben genannten Hyperkuben befinden.

Formal lassen sich diese dicken Links $\tilde{U}_{\mu;\nu}(n)$ durch

$$\tilde{U}_{\mu;\nu}(n) = \text{Proj}_G \left[U_\mu(n) + \varepsilon_2 \sum_{\rho \neq \mu, \nu} (C_{\mu\rho\nu}^l(n) + C_{\mu\rho\nu}^r(n)) \right] \quad (3.2.15)$$

beschreiben, wobei die *staples* in diesem Schritt durch

$$\begin{aligned} C_{\mu\rho\nu}^l(n) &= \tilde{\tilde{U}}_{\rho;\nu\mu}(n) \tilde{\tilde{U}}_{\mu;\nu\rho}(n+\rho) \tilde{\tilde{U}}_{\rho;\nu\mu}^\dagger(n+\mu) \\ C_{\mu\rho\nu}^r(n) &= \tilde{\tilde{U}}_{\rho;\nu\mu}^\dagger(n-\rho) \tilde{\tilde{U}}_{\mu;\nu\rho}(n-\rho) \tilde{\tilde{U}}_{\rho;\nu\mu}(n-\rho+\mu) \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

gegeben sind.

3. Im allgemeinen Fall sind die $\tilde{\tilde{U}}_{\mu;\nu\rho}(n)$ wiederum dicke Links, die sich ähnlich wie in den vorherigen Schritten ergeben:

$$\tilde{\tilde{U}}_{\mu;\nu\rho} = \text{Proj}_G \left[U_\mu(n) + \varepsilon_3 \sum_{\eta \neq \mu, \nu, \rho} (C_{\mu\eta}^l(n) + C_{\mu\eta}^r(n)) \right]. \quad (3.2.17)$$

Hier sind die *staples* identisch mit denen des APE-Smearings.

Soll das Smearing lediglich räumlich durchgeführt werden - so wie es im vorliegenden Programm der Fall ist -, dann sind die Links dieses Schritts durch

$$\tilde{\tilde{U}}_{\mu;\nu\rho}(n) = U_\mu(n) \quad (3.2.18)$$

gegeben. Dies wird offensichtlich, wenn die Summationsbedingung in Gleichung (3.2.17) betrachtet wird: $\eta \neq \mu, \nu, \rho$. Da μ , ν und ρ aufgrund der vorangegangenen Schritte paarweise verschieden sein müssen, kann die Bedingung nur erfüllt sein, wenn das Smearing in vier Raumzeitrichtungen betrachtet wird.

Anschaulich werden sukzessive alle Links durch *staples* berechnet, sofern sich diese in einem passenden Hyperkubus befinden und noch nicht für einen anderen Link berechnet wurden. Beim Originallink, der transformiert werden soll, sind das im Fall des räumlichen Smearings vier *staples*. An jeden der Links, aus denen diese *staples* bestehen,

grenzen dann zwei noch nicht berechnete *staples*, welche sich im erlaubten Volumen befinden. Jene *staples* besitzen nun keinen Link mehr, der an einen noch nicht berechneten *staple* grenzt. Es sind damit quasi alle Flächen der Hyperkuben berücksichtigt. Im Fall, dass nur in Raumrichtung geschmiert wird, stellen die Hyperkuben normale dreidimensionale Würfel dar, weshalb die Bezeichnung *hypercubic smearing* eigentlich nicht mehr ganz passend ist. Wie in [HK01] beschrieben, eignet sich dieses Smearing-Verfahren im Besonderen auch zur Verbesserung der Messergebnisse des statischen Potentials, wobei der statistische Fehler stark verringert werden kann.

Die Eichsymmetrie bleibt auch beim HYP-Smearing erhalten, da letztlich nur *staples* berechnet werden und diese, wie im vorherigen Abschnitt gezeigt, das gleiche Transformationsverhalten wie normale Links zeigen.

Variational Smearing

Das sogenannte *Variational Smearing* ist kein Smearing-Verfahren an sich. Es beschreibt die Verbindung von Variations- mit Smearing-Methoden. Ansatzpunkt der Variationsmethoden ist im Allgemeinen eine Korrelationsmatrix, die durch

$$C_{ij}(t) = \langle O_i(t) O_j(0) \rangle \quad (3.2.19)$$

gegeben ist [Dem09, S. 50]. Dabei lässt sich der Korrelator spektral aufspalten,

$$C_{ij}(t) = \langle O_i(t) O_j(0) \rangle = \sum_n \langle 0 | \hat{O}_i | n \rangle \langle n | \hat{O}_j^\dagger | 0 \rangle \exp(-tE_n), \quad (3.2.20)$$

wobei E_n die Energieeigenwerte der Zustände $|n\rangle$ darstellen. Die Operatoren \hat{O}_i müssen dabei das gleiche physikalische Objekt mit identischen Quantenzahlen beschreiben, dürfen sich aber zum Beispiel in Eigenschaften wie dem Smearing-Level unterscheiden. In die Einträge der Korrelationsmatrix $C(t)$ gehen aufgrund des Vorfaktors $\langle 0 | \hat{O}_i | n \rangle \langle n | \hat{O}_j^\dagger | 0 \rangle$ die Zustände $|n\rangle$ verschieden stark ein. Je größer der Überlapp von einerseits $\hat{O}_i^\dagger |0\rangle$ und andererseits $\hat{O}_j^\dagger |0\rangle$ mit dem Zustand $|n\rangle$ ist, desto stärker geht dieser auch in die Einträge der Korrelationsmatrix ein. Werden die variierten Operatoren so gewählt, dass sie allesamt einen großen Überlapp mit einem bestimmten Energieniveau haben, so gehen die zugehörigen Zustände demnach stärker in die Einträge der Korrelationsmatrix ein. Im speziellen Fall des Variational Smearing unterscheiden sich die variierten Operatoren \hat{O}_i^\dagger im Smearing-Level. Der Zustand, mit dem beide Zustände der Form $\hat{O}_i |0\rangle$ den größten Überlapp haben, ist hier der Grundzustand, weil das Smearing-Verfahren die höheren Zustände tendenziell unterdrückt, und damit zwei verschieden oft geschmierte Observablen den größten gemeinsamen Überlapp beim Grundzustand besitzen. Das heißt, die Einträge der Korrelationsmatrix bauen sich zu einem großen Teil aus dem gewünschten Grundzustand - dem Zustand mit der Energie des statischen Potentials - auf.

Es kann gezeigt werden, dass die Eigenwerte λ_n der Korrelationsmatrix $C(t)$ zur Bestimmung der einzelnen Energieniveaus genutzt werden können. Es gilt dabei folgender nicht auf das Variational Smearing beschränkte Zusammenhang[LW90]:

$$\lambda_n(t) = c_n \exp(-tE_n) [1 + \mathcal{O}(\exp(-t\Delta E_n))]. \quad (3.2.21)$$

Zur Bestimmung der Eigenwerte wurde in der soeben zitierten Arbeit vorgeschlagen, das generalisierte Eigenwertproblem

$$C(t)\psi = \lambda(t, t_0)C(t_0)\psi \quad (3.2.22)$$

zu lösen, anstatt lediglich die *normalen* Eigenwerte von $C(t)$ zu finden.¹⁹ Durch dieses Verfahren werden die Terme höherer Ordnung in Gleichung (3.2.21) unterdrückt und der Vorfaktor c_n lässt sich nun näherungsweise schreiben als

$$c_n \approx \exp(t_0 E_n). \quad (3.2.23)$$

Die dadurch errechneten Eigenwerte weisen dann in etwa den Zusammenhang

$$\lambda_n(t, t_0) = \exp(-(t - t_0)E_n) \quad (3.2.24)$$

auf. Aus diesen Werten lässt sich im Fall des Variational Smearing das gewünschte E_0 durch Methoden bestimmen, die in nachfolgenden Abschnitten beschrieben werden sollen. Hervorzuheben ist, dass die Eigenwerte $\lambda_0(t, t_0)$ in (3.2.24) das gleiche approximative Verhalten zeigen, wie es die Wilson-Loops tun: Beide Größen erfüllen in Bezug zum statischen Potential die gleiche Proportionalität. Dadurch können alle im Abschnitt zur Analyse der Wilson-Loops 3.2.2 beschriebenen Methoden nicht nur auf Wilson-Loops, sondern in gleicher Weise auch auf die hier berechneten Eigenwerte angewendet werden.

Zur praktischen Berechnung der Eigenwerte im Programmcode wurden zwei Methoden verwendet. Zum Einen wurde die *t-eigenvector*-Methode benutzt, bei der das generalisierte Eigenwertproblem für jeden Zeitpunkt gelöst wird. Die jeweils größten Eigenwerte λ_0 werden dann zur Berechnung des Potentials herangezogen. Die andere verwendete Methode ist die sogenannte *fixed vector*-Methode, bei der das Eigenwertproblem für lediglich einen festen Zeitpunkt gelöst wird. Der dadurch erhaltene Eigenvektor wird genutzt, um das statische Potential berechnen zu können. Effektiv verhält sich dann die Größe

$$\sum_{i,j} v_i v_j C_{ij}(t) \quad (3.2.25)$$

näherungsweise wie der in der ersten Methode berechnete Eigenwert, wobei v_i die Komponenten des Eigenvektors \vec{v} darstellen. Hier werden also nicht die Eigenwerte, sondern

¹⁹In der Literatur wird der *normale* Vorgang oft als Diagonalisierung bezeichnet, weil die Diagonalisierung einer Matrix im Allgemeinen mit der Bestimmung der Eigenwerte einhergeht.

die Größen in (3.2.25) genutzt, um das Potential bestimmen zu können. Eine genauere Beschreibung findet sich in [Dem09, S. 51].

Es liegt zunächst nahe, die beiden Größen O_n in (3.2.20) so zu implementieren, dass sie für sich gesehen bereits Wilson-Loops mit unterschiedlichen Smearing-Levels darstellen. Stattdessen stellen aber beide Größen zusammen *einen* Wilson-Loop dar. Die beiden Operatoren \hat{O}_i und \hat{O}_j repräsentieren die beiden (unterschiedlich geschmierten) Wilson-Lines der Schleife. Wie in Abschnitt 3.1.1 dargestellt wurde, lassen sich Wilson-Loops in temporaler Eichung auf Wilson-Lines reduzieren. Der Korrelator ist dann durch die Gleichungen (3.1.3) und (3.1.4) gegeben. Genau genommen besitzt der Korrelator deshalb für Wilson-Loops die Form

$$\langle \text{tr} [O_i(t) O_j(0)] \rangle = \sum_n \langle 0 | \hat{O}_i | n \rangle_{ab} \langle n | \hat{O}_j^\dagger | 0 \rangle_{ba} \exp(-tE_n). \quad (3.2.26)$$

An der hier dargestellten Vorgehensweise ändert sich durch den Spuroperator im Farbraum und die zusätzlichen Indizes allerdings nichts: die relevanten Daten werden, wie oben beschrieben, durch die Lösung des generalisierten Eigenwertproblems gewonnen.

Es sei hier noch darauf hingewiesen, dass das Variational Smearing-Verfahren weitaus rechenintensiver ist. Die Zahl der Observablen, die berechnet werden müssen, steigt quadratisch mit der Größe der Korrelationsmatrix, wodurch auch der Rechenaufwand in etwa quadratisch steigt.

3.2.2. Analyse der Wilson-Loops

Sind die Wilson-Loops bzw. die Korrelatoren berechnet, so müssen die gewünschten physikalischen Parameter wie das Potential noch durch Analyse der vorliegenden Daten ermittelt werden. Beim Monte-Carlo-Verfahren ist der Erwartungswert des Wilson-Loops durch

$$\langle W \rangle = \frac{1}{N} \sum_n W[U_n] \quad (3.2.27)$$

gegeben, also wie in Gleichung (2.4.6) beschrieben. In diesem Fall ist die Observable - also der Wilson-Loop W - nur von den Links U_n abhängig und der Wert für $\langle W \rangle$ gilt dabei natürlich nur näherungsweise und umso besser, je größer die Anzahl N der Konfigurationen ist.

Bei der Analyse der Wilson-Loops ist aber nicht ihr Erwartungswert von Interesse. Berechnet werden sollen die Erwartungswerte von aus ihr zusammengesetzten Größen. Für diese Größen wäre dann eine Mittelung im Sinne von Gleichung (3.2.27) möglich. Sie müssten dafür separat auf jeder Konfiguration einzeln berechnet werden und ihr Erwartungswert würde sich dann durch Mittelung ergeben. Gleichzeitig sollen aber auch die statistischen Fehler durch das Jackknifing-Verfahren berechnet werden. Aus diesem Grund werden die Größen von Interesse auf den einzelnen Jackknifes bestimmt; ihr Erwartungswert ergibt sich dann entsprechend durch die Mittelung über alle Jackknifes.

Allgemein ist das Vorgehen beim Jackknifing-Verfahren im Programmcode so realisiert, dass es sich durch folgende Schritte beschreiben lässt:

1. Zunächst werden die eingelesenen Wilson-Loops in N_{bins} -viele Bins aufgeteilt. Die einzelnen Bins lassen sich dabei symbolisch durch

$$\text{bin}_i = \{W_{i \cdot \text{binsize}}, \dots, W_{(i+1) \cdot \text{binsize}}\} \quad (3.2.28)$$

darstellen. Weitere Rechnungen finden dann mit dem Mittelwert bin'_i über die in einem Bin enthaltenen Daten statt.

2. Aus diesen Bins werden Jackknife-Datensätze $J_i = \{\text{bin}'_n\}_{n \neq i}$ gebildet und durch Mittelung ihrer Elemente die Jackknifes:

$$\hat{J}_i = \frac{1}{N_{\text{bins}} - 1} \sum_{n \neq i} \text{bin}'_n. \quad (3.2.29)$$

Wenn nun die statistischen Erwartungswerte der Wilson-Loops und ihre Fehler von Interesse wären, so müsste lediglich über alle Jackknifes gemittelt werden und die Varianz gemäß (2.4.27) berechnet werden.

3. Von Interesse sind nun aber Größen, die aus den Wilson-Loops ermittelt werden: Parameter, die das Potential charakterisieren, der Sommer-Parameter und das Potential selbst. Diese werden nun für jedes Wilson-Loop-Jackknife berechnet:

$$O_i = O_i(\hat{J}_i). \quad (3.2.30)$$

4. Die Mittelung aller so berechneten O_i ergibt - wie in Abschnitt 2.4.2.3 beschrieben - den Erwartungswert dieser Größen:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N_{\text{bins}}} \sum_i O_i. \quad (3.2.31)$$

5. Die Varianz ist dann analog zu Gleichung (2.4.27) durch

$$\sigma_{\langle O \rangle}^2 = \frac{N_{\text{bins}} - 1}{N_{\text{bins}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{bins}}} (O_i - \langle O \rangle)^2 \quad (3.2.32)$$

zu berechnen.

Die Berechnung der Größen O_i auf den einzelnen Jackknifes in Schritt 3 ist durch verschiedene Methoden realisiert. Diese Methoden und ihre Motivation sollen nun in den folgenden Abschnitten dargestellt werden. Betrachtet werden sollen hier lediglich sogenannte *Two-Fit-Methoden*, bei denen Potential und Potentialparameter in zwei Schritten jeweils durch Anpassung einer Fitfunktion an die Daten berechnet werden.

3.2.2.1. Methoden zur Bestimmung des Potentials $V(r)$

Wilson-Loops verhalten sich in erster Ordnung proportional zum exponentiellen Zerfall des statischen Potentials $V(r)$:

$$\langle W \rangle \propto \exp(-tV(r))(1 + \mathcal{O}(\exp(-t\Delta E))). \quad (3.2.33)$$

Wie im Abschnitt zum Variational Smearing dargelegt wurde, erfüllen auch die dort anstatt der Wilson-Loops gemessenen Größen diesen Zusammenhang. Die nachfolgend dargelegten Methoden lassen sich also auf *normale* Wilson-Loops wie auch auf ihre geschmierten Korrelatoren anwenden. Um diesem Umstand Rechnung zu tragen, sollen die verwendeten Datenpunkte in diesem Abschnitt allgemein durch $y(r, t)$ repräsentiert werden. Im Fall des Standard-Smearing-Verfahrens ist $y(r, t)$ also durch die Wilson-Loops gegeben.

Im Programmcode nutzen alle Methoden zum Fitten die Methode der kleinsten Quadrate.²⁰ Das Programm versucht also, die Größe χ^2 durch Abändern der Fitparameter zu minimieren.

Das Intervall, das beschreibt, welche Daten durch die Fitfunktion angepasst werden sollen, ist im Programm veränderbar. Im Folgenden soll deshalb $[t_{\min}, t_{\max}]$ das in den jeweiligen Methoden verwendete zeitliche und $[r_{\min}, r_{\max}]$ das räumliche Intervall darstellen.

Naiver Ansatz

Der naheliegende, naive Ansatz nutzt in direkter Weise Gleichung (3.2.33) aus. Dafür werden die Terme höherer Ordnung als klein angenommen und in der Rechnung nicht berücksichtigt. Die Daten werden dann durch die Funktion

$$y(r, t) = c \exp(-tV(r)) \quad (3.2.34)$$

gefittet. Damit höhere Terme tatsächlich vernachlässigt werden können, sollten die Datenpunkte mit sehr kleinem t - beim Ansatz ohne Variational Smearing sind dies die Wilson-Loops mit sehr kleinen temporalen Längen - nicht zum Fitten herangezogen werden. Terme höherer Ordnung sind gegenüber dem Term $\exp(-tV(r))$ noch einmal exponentiell unterdrückt und werden somit für größere t im Rauschen untergehen.

Ein für den Erfolg des Fits entscheidender Faktor liegt in den übergebenen Startparametern. Beim Fitvorgang werden diese Parameter von der Fitroutine leicht variiert, um χ^2 zu minimieren. Dabei wird jedoch kein globales, sondern ein lokales Minimum gesucht. Sind nun die Startparameter suboptimal gewählt, so kann es sein, dass die Fitroutine nicht das bestmögliche Ergebnis liefert.

Bei dieser Methode erweisen sich an die Daten angepasste Startparameter als vorteilhaft. Dabei werden einzelne Datenpunkte in die Fitfunktion eingesetzt, um so Schätzwerte für

²⁰Genutzt wird eine Variante des Levenberg-Marquardt-Algorithmus, der von der GNU Scientific Library (GSL) zur Verfügung gestellt wird.

die Parameter zu erhalten. Zur Schätzung des Potentials $V(r)$ werden zwei Datenpunkte benötigt:

$$\begin{aligned}
 y(r, 2) &= c \exp(-2 \cdot V(r)) & \text{(I)} \\
 y(r, 3) &= c \exp(-3 \cdot V(r)) & \text{(II)} \\
 \Rightarrow \frac{\text{I}}{\text{II}} &= \frac{y(r, 2)}{y(r, 3)} = \frac{c \exp(-2 \cdot V(r))}{c \exp(-3 \cdot V(r))} \\
 \Rightarrow V^0(r) &= \log \left(\frac{y(r, 2)}{y(r, 3)} \right). & (3.2.35)
 \end{aligned}$$

Welche zwei Datenpunkte hier gewählt werden, ist zunächst unerheblich. Sie sollten nur nicht bei zu großen Zeiten t liegen, weil diese Daten verrauscht sein können.

Für den Fitparameter c ist ein Datenpunkt erforderlich. Der Schätzwert ergibt sich durch Umstellen von (3.2.34) und Einsetzen eines Datenpunktes, also durch

$$c^0 = y(r, 1) \cdot \exp(1 \cdot V^0(r)), \quad (3.2.36)$$

wobei für das eigentlich noch unbekannte Potential $V(r)$ sein berechneter Schätzwert eingesetzt wird.

Nicht immer sind diese datenabhängigen Schätzwerte die beste Wahl. Bei unzureichender Datenqualität können die Startparameter dann völlig unpassende Werte annehmen.

Erweiterter naiver Ansatz

Die Berücksichtigung eines Terms höherer Ordnung verfeinert den naiven Ansatz. Das Modell für die Daten kann dann durch

$$y(r, t) = c_1 \exp(-tV(r)) + c_2 \exp(-tc_3) \quad (3.2.37)$$

oder

$$y(r, t) = c_1 \exp(-tV(r))(1 + c_2 \exp(-tc_3)) \quad (3.2.38)$$

beschrieben werden. Formal korrekt ist dabei die letzte Darstellung; für den Fit von $V(r)$ bringen beide Gleichungen allerdings theoretisch das gleiche Ergebnis. In der Praxis existieren hier lediglich Unterschiede in der Stabilität des Fits.

Mögliche Startparameter können zum Beispiel durch

$$\begin{aligned}
 V^0(r) &= \log \left(\frac{y(r, 3)}{y(r, 4)} \right) \\
 c_1^0 &= 1.0 \\
 c_2^0 &= 0.1 \\
 c_3^0 &= 1.0 & (3.2.39)
 \end{aligned}$$

gegeben sein. Diese Methode beschreibt die Daten in gleicher Ordnung, wie es die Methode des exponentiellen Zerfalls (siehe unten) tut. Im Gegensatz zu dieser benötigt die Fitfunktion jedoch einen zusätzlichen Fitparameter, weshalb die Stabilität dieser Methode geringer ausfallen sollte.

Exponentieller Zerfall von $V(r,t)$ zu $V(r)$

Ausgangspunkt dieser Methode [BSS95][Des99] ist die Bestimmung von $V(r, t)$ durch

$$V(r, t) = \log \left(\frac{y(r, t)}{y(r, t+1)} \right) \quad (3.2.40)$$

und der anschließende Fit der Daten durch die Funktion

$$V(r, t) = V(r) + c_1 \exp(-c_2 t), \quad (3.2.41)$$

in der $V(r, t)$ exponentiell auf ein Plateau $V(r)$ zerfällt. Diese Methode berücksichtigt einen Term höherer Ordnung des Wilson-Loops bzw. der zum Korrelator gehörenden Größe aus Gleichung (3.2.33). Dabei kann der letzte Datenpunkt des zeitabhängigen Potentials $V(r, t = t_{\max})$ bedingt durch die Definition von $V(r, t)$ nicht bestimmt werden. In der Regel spielt dies jedoch keine Rolle, weil diese Punkte ohnehin stark verrauscht sind.

Vollständig datenabhängige Startparameter erweisen sich für diese Methode als sehr instabil. Lediglich eine Angabe für den Startparameter $V^0(r)$ in Abhängigkeit der Daten ist hier sinnvoll. Als funktionierende Parameter erweisen sich zum Beispiel

$$\begin{aligned} V^0(r) &= y(r, t_{\max}/2) \\ c_1^0 &= 1.0 \\ c_2^0 &= 1.0. \end{aligned} \quad (3.2.42)$$

Plateau-Fit für $V(r,t)$

Die Methode der Plateau-Fits lässt sich aus der Methode des exponentiellen Zerfalls von $V(r, t)$ zu $V(r)$ ableiten. Das zeitabhängige Potential wird wiederum durch

$$V(r, t) = \log \left(\frac{y(r, t)}{y(r, t+1)} \right) \quad (3.2.43)$$

bestimmt. Im Gegensatz zur genannten Methode wird hier aber der exponentielle Zerfall vernachlässigt und es wird angenommen, dass

$$V(r, t) = V(r) \text{ für große } t \quad (3.2.44)$$

gilt. Ausschlaggebend für verhältnismäßig gute Ergebnisse dieser Methode ist dabei das Fitintervall. Es sollte nicht bei zu kleinen Zeiten t beginnen, weil die benutzte Näherung dort nicht gilt. Andererseits führt die Betrachtung der Daten bei großen Zeiten zu unzuverlässigen Ergebnissen, weil dort das Rauschen stark ist. Bei dieser einfachen Methode muss dafür also ein guter Kompromiss gefunden werden.

Der einzige Startparameter ist hier das Potential selbst, das datenabhängig zum Beispiel durch

$$V^0(r) = y(r, t_{\max}/2) \quad (3.2.45)$$

angegeben werden kann.

Inverser Zerfall von $V(r, t)$ zu $V(r)$

Diese Methode [Dem09, S. 52] nutzt dasselbe Modell für die Daten wie der naive Ansatz (3.2.34). Da aber eine andere Fitfunktion genutzt wird, sollten die Ergebnisse beider Methoden leicht voneinander abweichen. Für den zeitlichen Verlauf des Potentials wird folgende Form definiert:

$$V(r, t) = -\frac{1}{t} \log(y(r, t)). \quad (3.2.46)$$

Durch Ausnutzen des Modells in (3.2.34) ergibt sich

$$\begin{aligned} \Rightarrow V(r, t) &= -\frac{1}{t} \log(c \exp(-tV(r))) \\ \Rightarrow V(r, t) &= -\frac{1}{t} (\log c - tV(r)) \\ \Rightarrow V(r, t) &= V(r) - \frac{\log c}{t}. \end{aligned} \quad (3.2.47)$$

Da der Parameter c im weiteren Verlauf nicht benötigt wird und lediglich als Hilfsgröße fungiert, kann dieser dementsprechend redefiniert werden, so dass der handliche Ausdruck

$$V(r, t) = V(r) + \frac{c}{t} \quad (3.2.48)$$

folgt, der einen inversen Zerfall von $V(r, t)$ auf das Plateau $V(r)$ aufzeigt. Als verhältnismäßig stabile Startparameter können zum Beispiel die folgenden datenabhängigen Größen verwendet werden:

$$\begin{aligned} V^0(r) &= y(r, t_{\max}/2) \\ c_1^0 &= 2 [y(r, 2) - y(r, 3)]. \end{aligned} \quad (3.2.49)$$

3.2.2.2. Methoden zur Bestimmung der Potentialparameter

Ist das statische Potential bestimmt, so können die Parameter des Potentials genutzt werden, um den Sommer-Parameter zu bestimmen. In Abschnitt 3.1.2 wurde der allgemeine Verlauf des statischen Potentials dargestellt:

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + \sigma r. \quad (3.2.50)$$

Entscheidend sind dabei die Parameter B für den Coulomb-artigen Anteil des Potentials und σ für die *string tension*, aus denen der Sommer-Parameter nach Gleichung (3.1.39) durch

$$r_0 = \sqrt{\frac{1.65 + B}{\sigma}} \quad (3.2.51)$$

bestimmt werden kann.²¹ Dieses Potentialmodell soll hier als „Einfaches Potential“ bezeichnet werden. Erweiterte Modelle für das auf dem Gitter simulierte Potential berücksichtigen zusätzliche Gitterterme, die im Modell des einfachen Potentials vernachlässigt werden.

Die Parameter können nun wie bei den Methoden zur Bestimmung von $V(r)$ durch Anpassung einer Fitfunktion an die Daten bestimmt werden. Dabei erweisen sich beim einfachen Potential die Startparameter

$$\begin{aligned}\sigma^0 &= y(r_{\max} - 2) - y(r_{\max} - 3) \\ A^0 &= y(r_{\max} - 1) - \sigma \cdot (r_{\max} - 1) \\ B^0 &= y(1) - A^0 - \sigma^0\end{aligned}\tag{3.2.52}$$

als vorteilhaft. Die vorhandenen Daten y , an die die Fitfunktion angepasst wird, sind die Werte des Potentials $V(r)$.

Erweitertes Potential

Das Modell für das statische Potential ist bei dieser Methode durch

$$V(r) = A + B \left[\frac{1}{r} \right] + \sigma r + F \left(\left[\frac{1}{r} \right] - \frac{1}{r} \right)\tag{3.2.53}$$

gegeben [Dem09, S. 53], wobei der Parameter $\left[\frac{1}{r} \right]$ im Coulomb-Term durch

$$\left[\frac{1}{r} \right] = 4\pi \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{\prod_{i=1}^3 \cos(r_i k_i)}{4 \left(\sum_{j=1}^3 \sin^2(k_j/2) - 4c_1 \sum_{j=1}^3 \sin^4(k_j/2) \right)}\tag{3.2.54}$$

gegeben ist. Der Parameter c_1 ist abhängig vom verwendeten Modell und der Diskretisierung. Im Fall der vom Programm genutzten Technik ist er durch $c_1 = -\frac{1}{12}$ gegeben. Die Anpassung an die Fitfunktion kann zum Beispiel mithilfe der Startparameter

$$\begin{aligned}\sigma^0 &= y(r_{\max} - 2) - y(r_{\max} - 3) \\ A^0 &= y(r_{\max} - 1) - \sigma \cdot (r_{\max} - 1) \\ B^0 &= y(1) - A - \sigma \\ F^0 &= 0.4\end{aligned}\tag{3.2.55}$$

erfolgen.

Dieser Ansatz für das Potential enthält einen besser an das Gitter angepassten Coulomb-Anteil [Mic92].

²¹Das so berechnete r_0 in Gittereinheiten entspricht dem physikalischen $r_0 = 0.5$ fm. Beide Parameter werden der Übersichtlichkeit wegen gleich genannt, weil hier keine Verwechslungsgefahr besteht.

Ähnlich wie beim erweiterten naiven Ansatz zur Bestimmung von $V(r)$ ist es auch hier nicht unproblematisch, dass die Fitfunktion vier freie Parameter besitzt. Aus diesem Grund kann $B = -\frac{\pi}{12}$ fest definiert werden, weil B diesem Wert wegen theoretischer Überlegungen ohnehin entsprechen sollte. Dadurch werden wieder lediglich drei Parameter für den Fit benötigt.

3.2.2.3. Bestimmung des Sommer-Parameters ohne Potential

Neben den in den letzten beiden Abschnitten dargestellten Methoden zu Ermittlung des Sommer-Parameters über die Potentialparameter existiert auch die Möglichkeit, den Sommer-Parameter ohne Kenntnis des Potentials zu bestimmen. Dazu werden die sogenannten Creutz-Ratios

$$\chi(r, t) = -\log \left(\frac{\langle W(r, t) \rangle \langle W((r-1), (t-1)) \rangle}{\langle W(r, (t-1)) \rangle \langle W((r-1), t) \rangle} \right) \quad (3.2.56)$$

betrachtet. Die Betrachtung findet hier für die Wilson-Loops statt, allerdings gilt das Verfahren in gleicher Weise auch für die Daten des Variational Smearing.

Da die Wilson-Loops für große t durch

$$\langle W(r, t) \rangle = c \exp(-tV(r)) \quad (3.2.57)$$

und das Potential für große r durch

$$V(r) = \sigma r \quad (3.2.58)$$

gegeben sind, gilt für große r, t näherungsweise

$$\langle W(r, t) \rangle = c \exp(-tr\sigma). \quad (3.2.59)$$

Eingesetzt in die Creutz-Ratios ergibt sich für diesen Fall

$$\chi(r, t) = \sigma, \quad r, t \text{ groß}. \quad (3.2.60)$$

Dieses Verhalten ermöglicht gemäß der Rechnung in [Dem09, S. 55] die Ermittlung des Sommer-Parameters durch

$$r_0 = \sqrt{\frac{(1.65 - r_I'^2 \chi(r, t))(r_I^2 - r_I'^2)}{r_I^2 \chi(r, t) - r_I'^2 \chi(r+1, t)} + r_I'^2}, \quad (3.2.61)$$

wobei

$$r_I^2 = - \left(\left[\frac{1}{r} \right] - \left[\frac{1}{r-1} \right] \right)^{-1}, \quad r_I'^2 = - \left(\left[\frac{1}{r+1} \right] - \left[\frac{1}{r} \right] \right)^{-1} \quad (3.2.62)$$

gilt. Der Parameter $\left[\frac{1}{r}\right]$ ist in Gleichung (3.2.54) gegeben. Es kann ein beliebiges r gewählt werden, es darf aber gemäß der geltenden Bedingung für die Creutz-Ratios nicht zu klein gewählt werden. Diese Methode hat den grundsätzlichen Vorteil, dass keine Fits getätigt werden müssen.

Diese Methode wird zur Analyse im nächsten Kapitel allerdings nicht genutzt, weil sie sich bei Voruntersuchungen als außergewöhnlich instabil erwiesen hat.

4. Analyse und Auswertung

Die zentrale Frage dieser Arbeit ist, welche Methoden sich gut und welche sich eher nicht so gut zur Bestimmung des statischen Potentials und damit des Sommer-Parameters eignen. Der Begriff *Methoden* soll hier nicht allein im Sinne der in Abschnitt 3.2.2 beschriebenen Techniken verstanden werden, sondern vielmehr als Überbegriff für die unterschiedlichen Verfahren, mit denen das Potential bestimmt werden kann. Untersucht werden sollen dazu in dieser Arbeit folgende Größen und Verfahren:

- **Methoden zur Bestimmung des Potentials** (beschrieben in Abschnitt 3.2.2)
- **Smearing-Methode** (APE- und HYP-Smearing)
- **Smearing-Parameter**
- **Smearing-Level** (Insbesondere in Hinblick auf die Benutzung des Variational Smearing ist ein möglichst passendes Smearing-Level von Nöten.)
- **Variational Smearing**

Besonderes Augenmerk soll auch dem Vergleich zwischen Standard- und Variational Smearing zukommen; insbesondere soll untersucht werden, inwiefern dieses Verfahren bei der Bestimmung des statischen Potentials Vorteile gegenüber den *Standard-Methoden* bringt.

In diesem Kapitel sollen nun die Messergebnisse präsentiert, analysiert und diskutiert werden. Dementsprechend sollen die einzelnen Untersuchungen generell in drei Schritte unterteilt werden:

1. Auflistung der benutzten Parameter
2. Präsentation und Analyse der Messergebnisse
3. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse.

Die zuerst präsentierte Untersuchung soll den Einfluss der Bin-Größe auf die Ergebnisse analysieren. Dies ist wichtig, weil für alle folgenden Untersuchungen eine möglichst passende Bin-Größe gewählt sein sollte, um Autokorrelationseffekte zu vermeiden. Darauf folgend soll untersucht werden, welche allgemeinen Effekte bei der Anwendung

des Smearing-Verfahrens beobachtbar sind und wie sich die einzelnen Methoden zur r_0 -Bestimmung im Detail verhalten.

Da zunächst nur mit dem APE-Verfahren geschmierte Daten untersucht wurden, soll dann ein Vergleich zwischen APE- und HYP-geschmierten Ergebnissen folgen, mit dem Unterschiede und eventuelle Vorteile eines Verfahrens herausgearbeitet werden sollen.

Ebenfalls interessant ist, wie sich der Smearing-Parameter beim APE-Verfahren auf die Daten auswirkt. Hier soll insbesondere auf die Relation zwischen *Smearing-Level* und *Smearing-Parameter* eingegangen werden.

Abschließend soll dann das Variational Smearing-Verfahren beim Sommer-Parameter genauer untersucht und mit den Standard-Smearing-Verfahren verglichen werden.

Für die Messung der Wilson-Loops war sehr viel Rechenleistung nötig, insbesondere weil der Sommer-Parameter auch bei sehr hohen Smearing-Levels unerwarteterweise noch sehr stabil berechnet werden konnte und dementsprechend eine große Anzahl verschieden stark geschmierter Datenpunkte von Nöten war. Auch die Daten des Variational Smearing-Verfahrens benötigten eine sehr große Rechenzeit.

Aus diesem Grund fand die Messung der Wilson-Loops auf PALMA statt, dem Computercluster der Westfälischen Wilhelms-Universität. Er verfügt bei mehr als 3000 Prozessorkernen über etwa 30 Teraflops Rechenleistung und bietet damit zumindest auf dem betrachteten, relativ kleinen Gitter die Möglichkeit einer verhältnismäßig schnellen Berechnung.

Die Analyse der gemessenen Wilson-Loops konnte hingegen mit vertretbarem Zeitaufwand auf einem handelsüblichen Achtkern-System durchgeführt werden. Bei den Variational Smearing-Daten musste hier mit einer Messdauer von einigen Stunden pro Datenpunkt gerechnet werden.

Sofern nicht explizit anders beschrieben, repräsentieren die dargestellten Fehlerbalken in den folgenden Untersuchungen den beim Jackknifing ermittelten statistischen Fehlern. Der Begriff *relativer Fehler* soll dabei den Quotienten aus Fehler und Wert bezeichnen.

Bevor nun die eigentlichen Untersuchungen präsentiert werden, sollen noch die im Folgenden benutzten Methoden dargestellt und nummeriert werden.

4.1. Zur Auswertung genutzte Methoden

Die Untersuchungen sollen mit den in Abschnitt 3.2.2.1 genauer beschriebenen Methoden durchgeführt werden. Die Sommer-Parameter-Bestimmung geschieht bei allen Methoden grundsätzlich durch Fit von zwei Größen: Potential und darauf folgend Potentialparameter. Das Programm, mit dem alle Untersuchungen durchgeführt wurden, ermöglicht die Kombination der verschiedenen Verfahren für deren Bestimmung. Bei den nachfolgenden Untersuchungen wurden dabei die folgenden Kombinationen zur Bestimmung benutzt. Damit eine einfache Benennung im Weiteren möglich ist, sollen die Methoden in spezieller Weise nummeriert werden:

Methode 1.1a

- Berechnung von $V(r, t)$ durch $V(r, t) = \log \left(\frac{\langle W(r, t) \rangle}{\langle W(r, t+1) \rangle} \right)$
- Bestimmung von $V(r)$ durch Fit von $V(r, t) = V(r) + c_1 \exp(-c_2 \cdot t)$
- (Standard-)Potentialparameter-Bestimmung durch Fit von $V(r) = A + \frac{B}{r} + \sigma r$

Methode 1.1b

- Berechnung von $V(r, t)$ durch $V(r, t) = \log \left(\frac{\langle W(r, t) \rangle}{\langle W(r, t+1) \rangle} \right)$
- Bestimmung von $V(r)$ durch Fit von $V(r, t) = V(r) + c_1 \exp(-c_2 \cdot t)$
- Potentialparameter-Bestimmung durch Fit von²²

$$V(r) = A + B \left[\frac{1}{r} \right] + \sigma r + F \left(\left[\frac{1}{r} \right] - \frac{1}{r} \right)$$

Methode 1.1c

- Berechnung von $V(r, t)$ durch $V(r, t) = \log \left(\frac{\langle W(r, t) \rangle}{\langle W(r, t+1) \rangle} \right)$
- Bestimmung von $V(r)$ durch Fit von $V(r, t) = V(r) + c_1 \exp(-c_2 \cdot t)$
- Potentialparameter-Bestimmung durch Fit von

$$V(r) = A + B \left[\frac{1}{r} \right] + \sigma r + F \left(\left[\frac{1}{r} \right] - \frac{1}{r} \right),$$

wobei hier lediglich ein Drei-Parameter-Fit durchgeführt wird, indem $B = -\frac{\pi}{12}$ gesetzt wird

Methode 1.2

- Berechnung von $V(r, t)$ durch $V(r, t) = \log \left(\frac{\langle W(r, t) \rangle}{\langle W(r, t+1) \rangle} \right)$

²²Die Größe $\left[\frac{1}{r} \right]$ ist in (3.2.54) beschrieben.

- Bestimmung von $V(r)$ durch Plateau-Fit von $V(r, t) = V(r)$. Das betrachtete Fitintervall ist durch $[4, 8]$ gegeben.
- Standard-Potentialparameter-Bestimmung

Methode 2.1

- Bestimmung von $V(r)$ durch Fit von $\langle W(r, t) \rangle = c \exp(-tV(r))$
- Standard-Potentialparameter-Bestimmung

Methode 2.2

- Bestimmung von $V(r)$ durch Fit von

$$\langle W(r, t) \rangle = c_1 \exp(-tV(r))(1 + c_2 \exp(-tc_3))$$

- Standard-Potentialparameter-Bestimmung

Methode 3

- Berechnung von $V(r, t)$ durch $V(r, t) = -\frac{1}{t} \log(\langle W(r, t) \rangle)$
- Bestimmung von $V(r)$ durch Fit von $V(r, t) = V(r) + \frac{c}{t}$
- Standard-Potentialparameter-Bestimmung

Die erste Zahl der Methodennummer gibt dabei den grundsätzlichen Ansatz an, die zweite Zahl soll einer weiteren Differenzierung dienen. Beispielsweise nutzen die Methoden 1.1x und 1.2 zur Bestimmung des zeitabhängigen Potentials $V(r, t)$ die gleiche Rechnung, unterscheiden sich allerdings in der Extraktion des Potentials $V(r)$. Der Buchstabe, der hier bei den ersten drei Methoden 1.1a bis 1.1c auftaucht, soll die Methode Potentialparameter-Bestimmung anzeigen.

Der Sommer-Parameter wird bei allen Methoden mithilfe der Potentialparameter berechnet:

$$r_0 = \sqrt{\frac{1.65 + B}{\sigma}}. \quad (4.1.1)$$

Für das Variational Smearing können dabei nicht direkt die Wilson-Loops zur Bestimmung genutzt werden, wie in Abschnitt 3.2.1.1 genauer dargelegt.

4.2. Untersuchung verschiedener Bin-Größen

Zur Vermeidung von Effekten, die durch die Autokorrelation der Konfigurationen auftreten können, wurde das Binning-Verfahren angewendet. Die Anzahl der Konfigurationen pro Bin - die Bin-Größe oder *bin size* - muss groß genug sein, um eben diese Effekte zu vermeiden und sollte klein genug sein, um die Statistik nicht allzu stark zu beeinträchtigen.

Von Interesse ist hier deshalb eine Untersuchung, welche Bin-Größe für die folgenden Messung am Besten geeignet ist. Allgemein ist zu erwarten, dass Messgrößen in Abhängigkeit der Bin-Größe auf ein Plateau ansteigen oder absinken sollten. Abhängig von den Daten und der Anzahl der Konfigurationen, muss dieses Plateau nicht immer gut erkennbar sein. Sehr schnell kann es zu verrauschten Werten kommen.

Im Folgenden wird diese Untersuchung durch Messung des Sommer-Parameters bei verschiedenen Bin-Größen realisiert.

4.2.1. Benutzte Parameter

Folgende Parameter wurden für die Ergebnisse dieses Abschnitts genutzt:

Gitter	$16^3 \times 36$, $\beta = 1.75$, $\kappa = 0.1490$
Anzahl ausgewerteter Konfigurationen	9798
Größe der Jackknife-Bins	variabel
Smearing-Methode	APE
Smearing-Parameter	0.5^{23}

Tabelle 4.1.: Benutzte Parameter für die Daten.

Grundsätzlich wurden von Tobias Berheide 10000 Konfigurationen für dieses Gitter erstellt[Ber12], die ersten zweihundert Konfigurationen wurden allerdings nicht berücksichtigt, um sicherzustellen, dass lediglich solche im Equilibrium benutzt werden.

Der Parameter κ ist in Gleichung (3.1.6) als *Hopping-Parameter* bezeichnet worden. β ist aus der Eichfeldwirkung bekannt und durch $\frac{2}{g^2}$ gegeben.

Wenn einzelne Betrachtungen abweichende Parameter nutzen, so wird explizit darauf hingewiesen.

4.2.2. Abhängigkeit des Sommer-Parameters von der Bin-Größe

In diesem Abschnitt soll der Sommer-Parameter gegen die Bin-Größe aufgetragen werden. Der Übersichtlichkeit wegen soll diese Darstellung separat für einige ausgewählte Smearing-Level erfolgen. Zudem soll zunächst lediglich Methode 1.1a betrachtet werden.

²³Dieser Parameter ist nach Tests von Dirk Sandbrink beim Smearing zur Bestimmung der Glueball-Massen eine gute Wahl und dient deshalb als Ausgangspunkt.

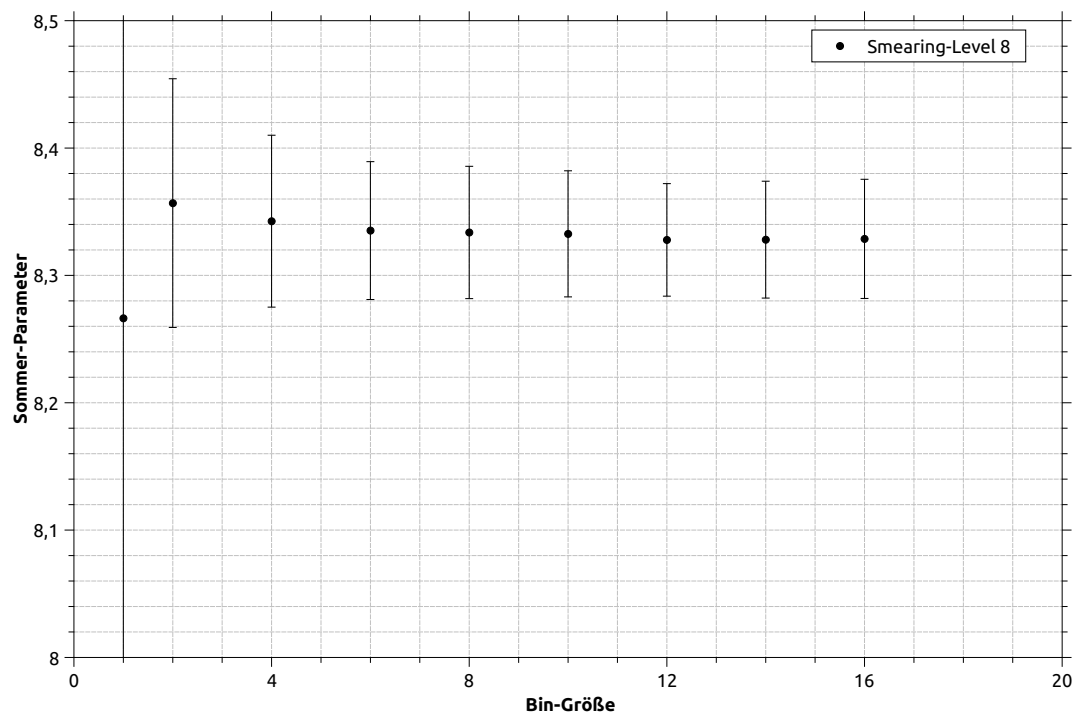


Abbildung 4.2.1.: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe. Dargestellt ist Methode 1.1a.

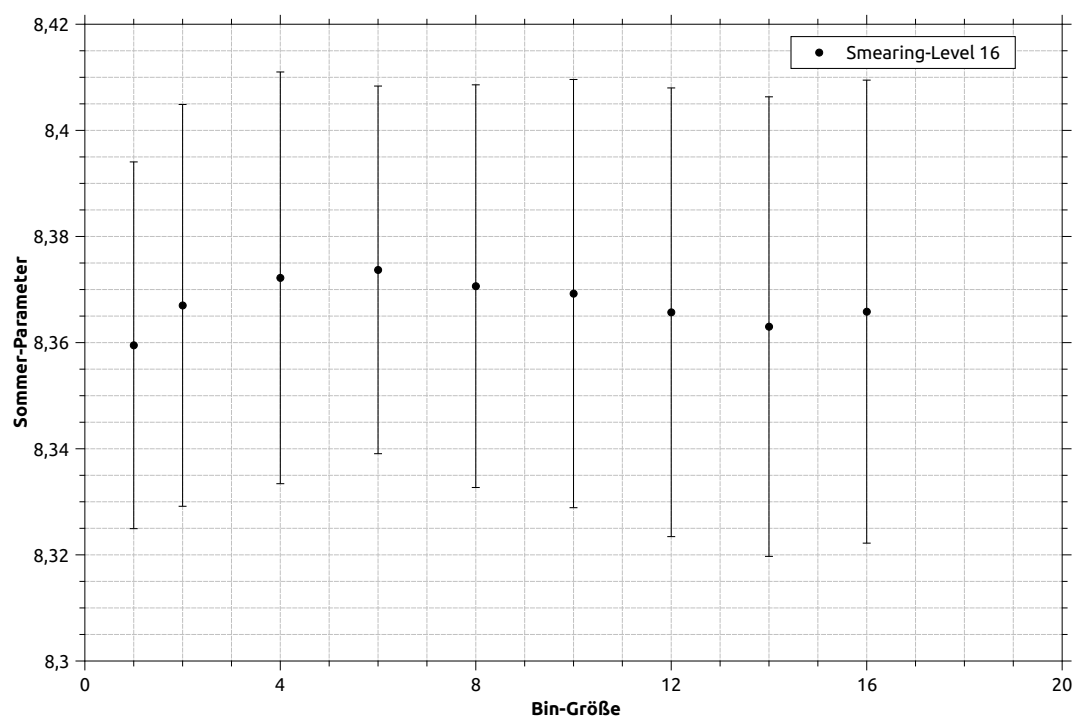


Abbildung 4.2.2.: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

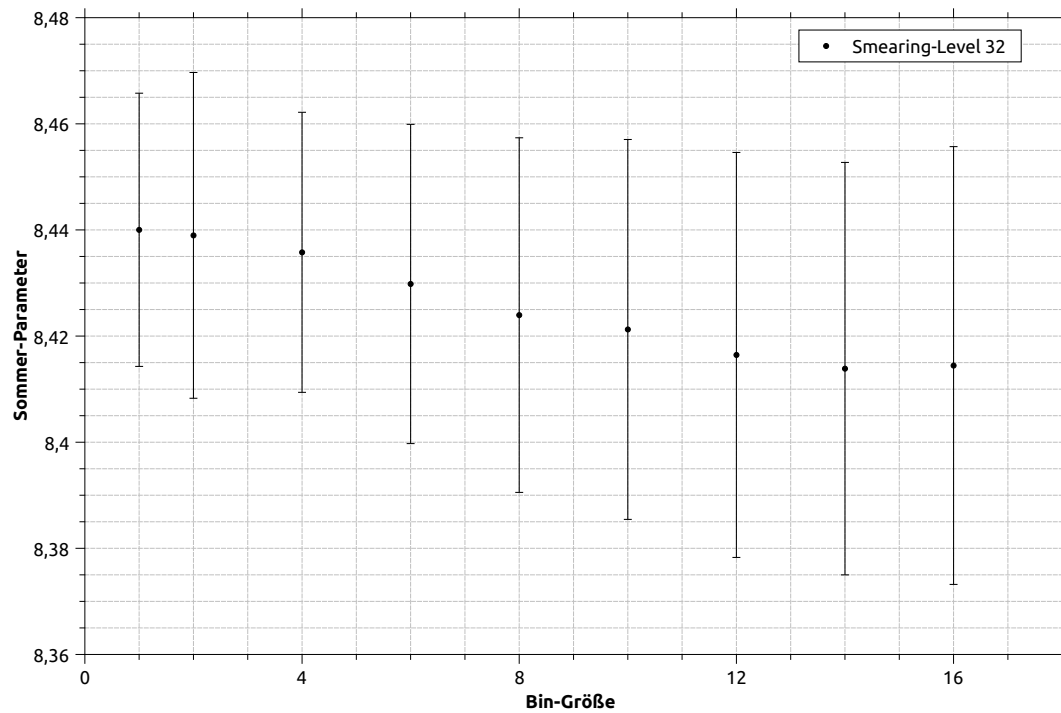


Abbildung 4.2.3.: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

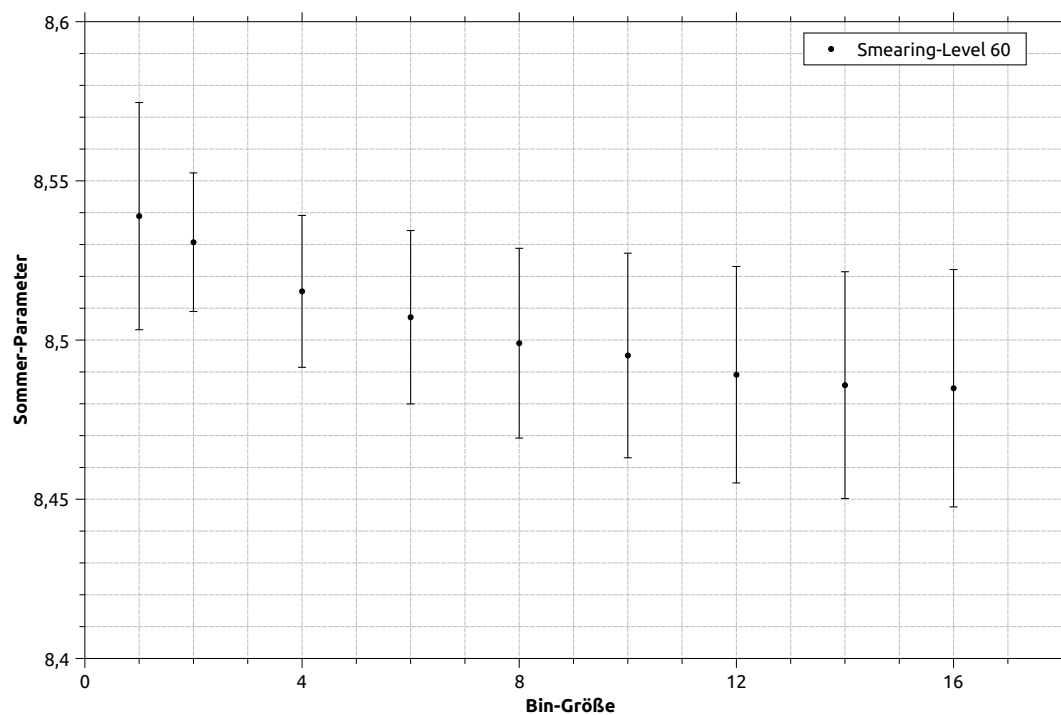


Abbildung 4.2.4.: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

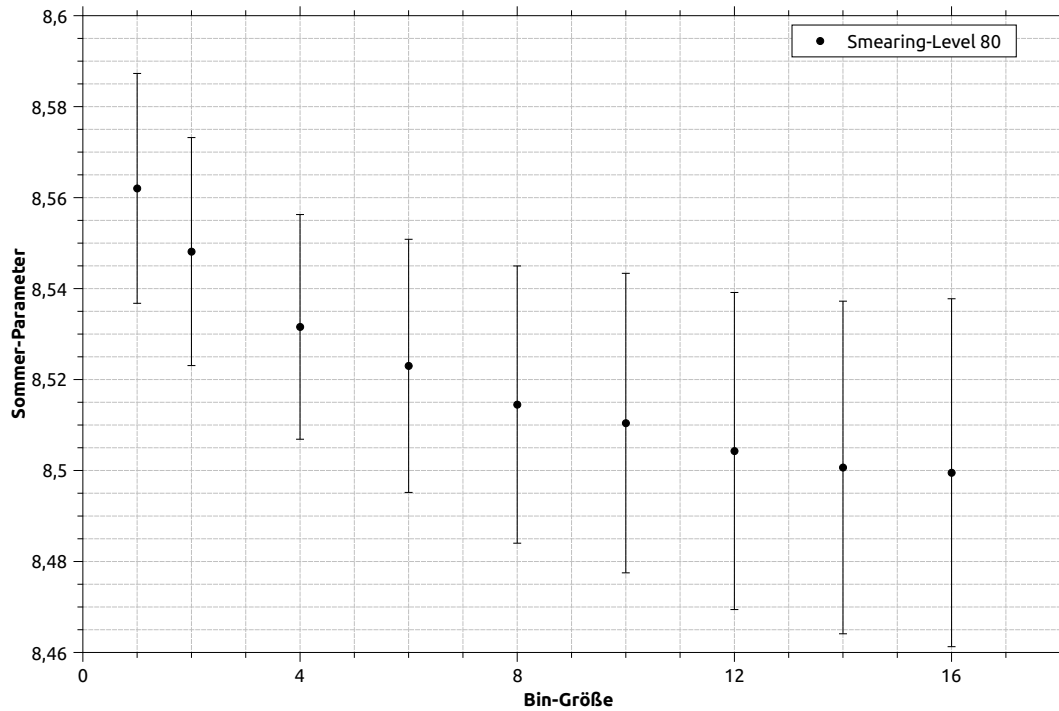


Abbildung 4.2.5.: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

Die Abbildungen 4.2.1 und 4.2.2 für die Smearing-Levels 8 und 16 zeigen in etwa das erwartete Verhalten: Korrelationseffekte verschwinden mit zunehmender Bin-Größe und r_0 erreicht ein Plateau.

Überraschenderweise ist in den Abbildungen 4.2.4 und 4.2.5 für die Smearing-Levels 60 und 80 ein anderes Verhalten zu beobachten: Das Plateau ist im Bereich der dargestellten Bin-Größen nicht erkennbar.

Die Daten des Smearing-Levels 32 in Abbildung 4.2.3 zeigen unsichere Ergebnisse; möglicherweise beginnt hier das Plateau bei Bin-Größe 14.

4.2.3. Genauere Untersuchung für Smearing-Level 80

Eine genauere Untersuchung des Einflusses der Bin-Größe für ein hohes Smearing-Level ist erforderlich, weil die Korrelationseffekte dort auch für eine verhältnismäßig große Bin-Größe von 16 vorzuliegen scheinen, wie in den Abb. 4.2.3 bis 4.2.5 zu erkennen ist. Deshalb sollen nun auch die anderen Methoden exemplarisch für Smearing-Level 80 untersucht werden.

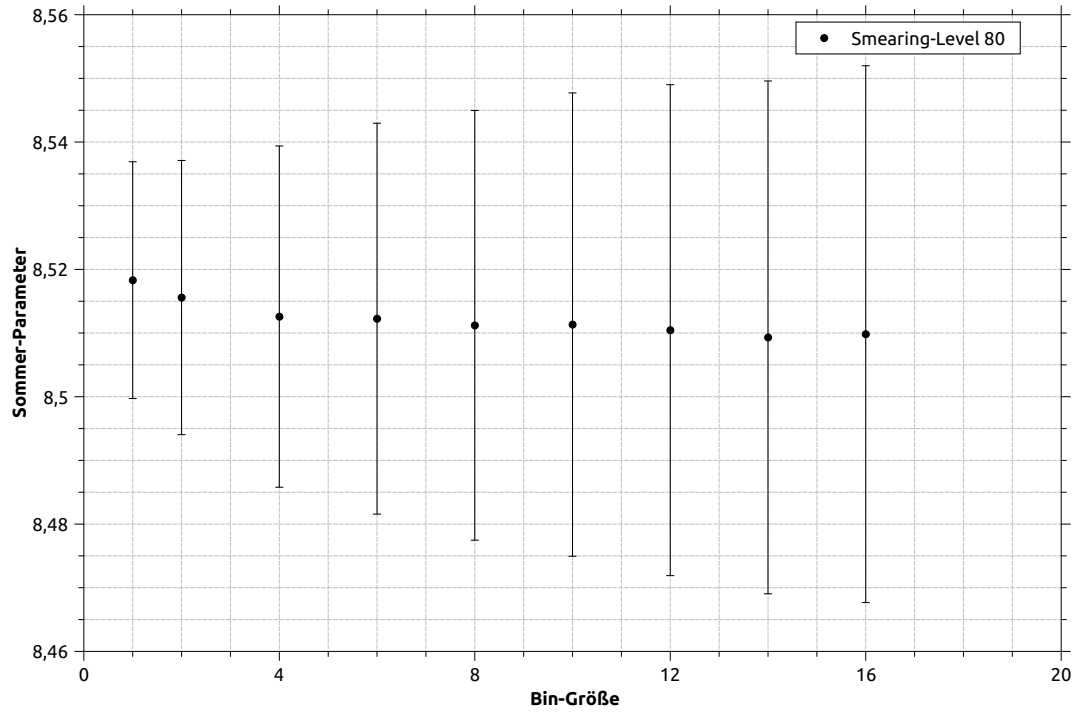


Abbildung 4.2.6.: Methode 1.1b: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

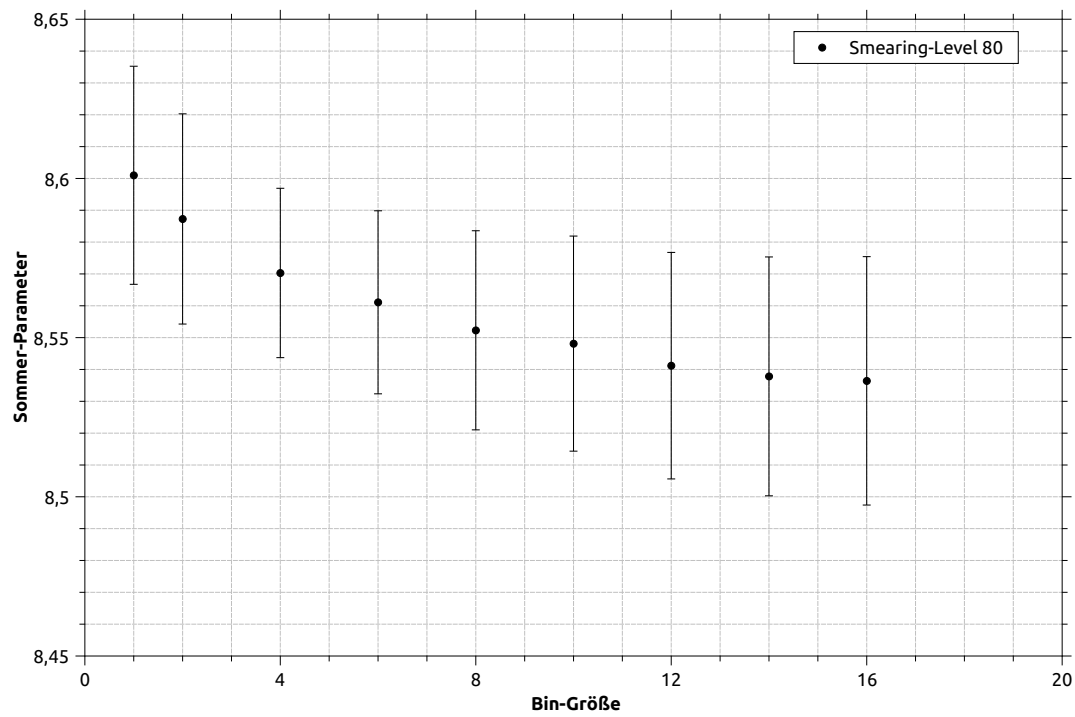


Abbildung 4.2.7.: Methode 1.1c: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

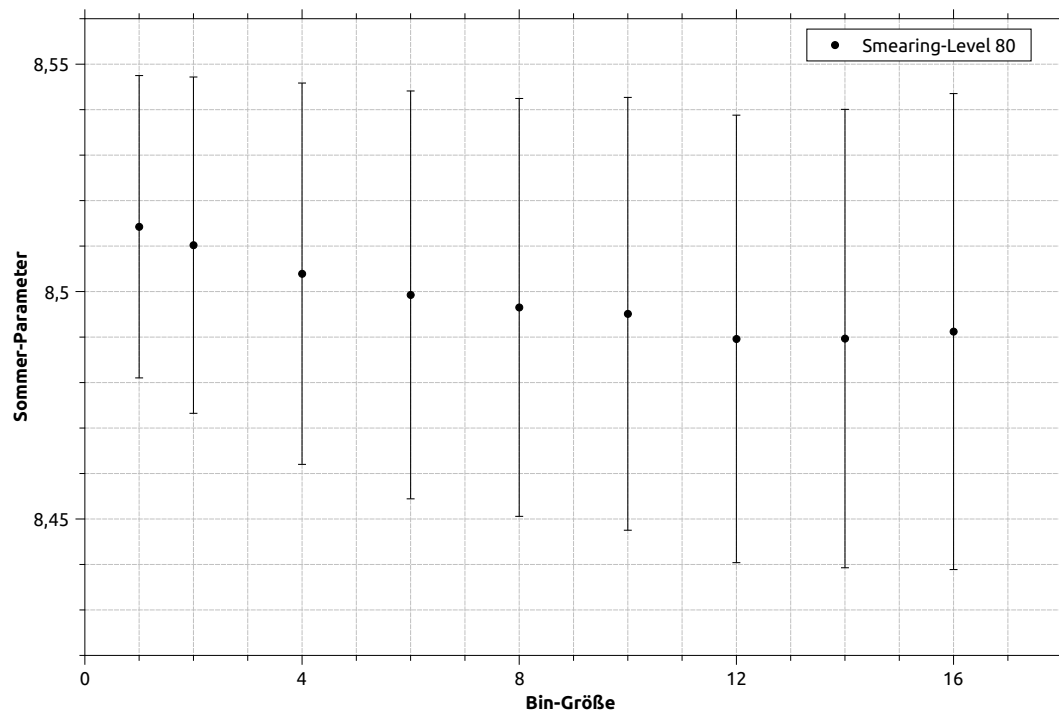


Abbildung 4.2.8.: Methode 1.2: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

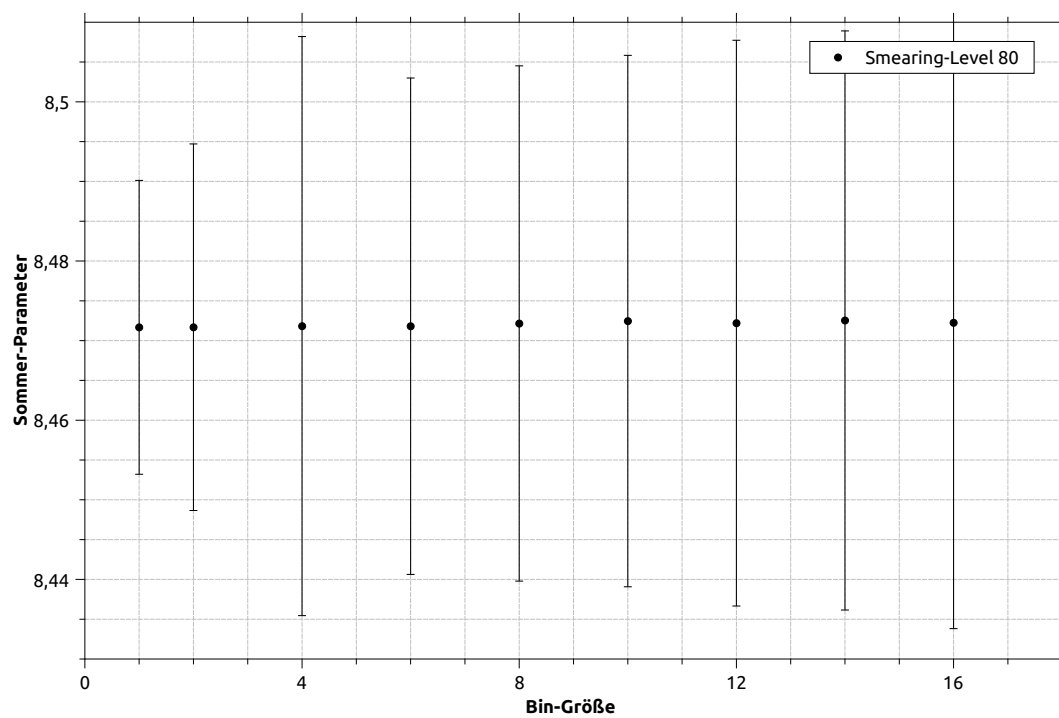


Abbildung 4.2.9.: Methode 2.1: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

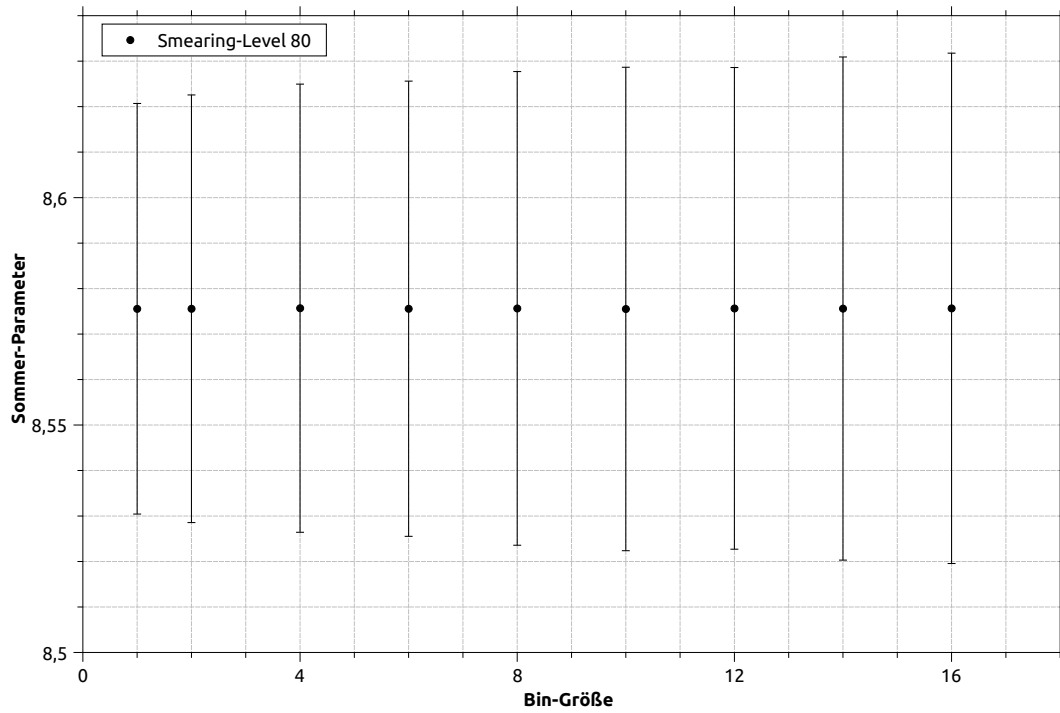


Abbildung 4.2.10.: Methode 2.2: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

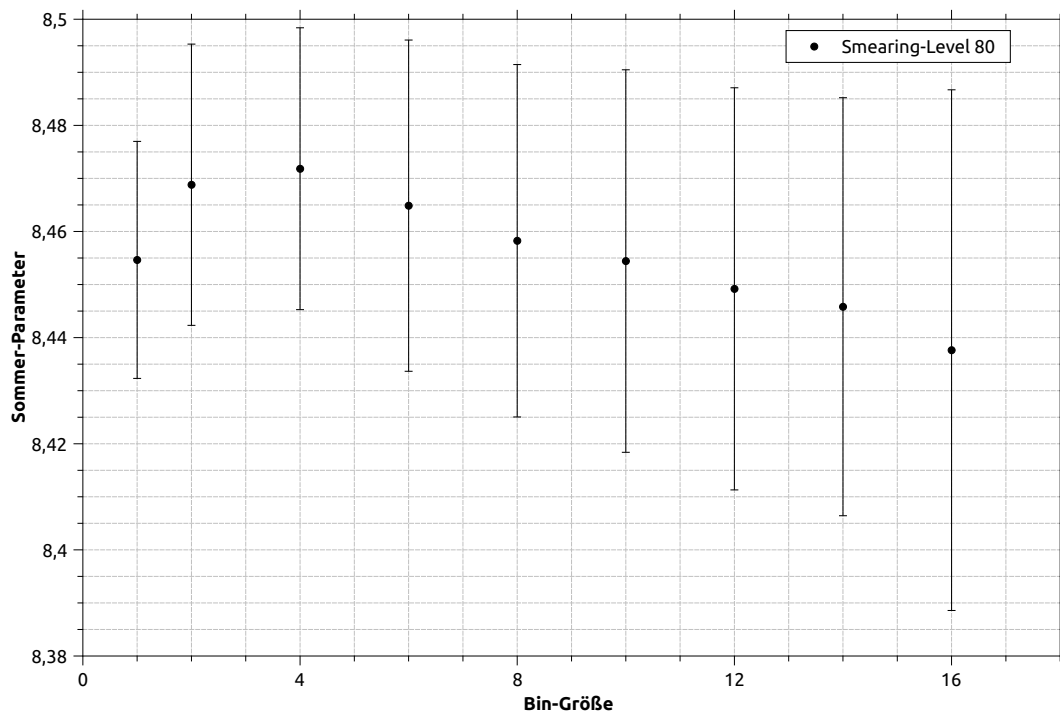


Abbildung 4.2.11.: Methode 3: Verlauf des Sommer-Parameters aufgetragen gegen die Bin-Größe.

Die Methoden 1.1b, 2.1 und 2.2 zeigen nur geringe Schwankungen in Abhängigkeit der Bin-Größe. Dabei sinken die Daten der Methode 1.1b zwar stetig herab, allerdings lediglich in einem Rahmen von 0.01, was etwa sechsmal kleiner ist, als das Herabsinken der Methode 1.1a. Vor allem die Methoden 2.1 und 2.2 scheinen selbst für eine Bin-Größe von 1 keine spürbare Beeinflussung zu erfahren.

Methode 1.1c zeigt einen zu Methode 1.1a sehr ähnlichen Verlauf.

Das Verhalten von Methode 1.2 ist in Abbildung 4.2.8 nicht eindeutig zu erkennen. Dort ist ein kontinuierliches Absinken erkennbar, welches allerdings kleiner als jenes der Methode 1.1a ist. Zudem könnte dort ein Plateau bei Bin-Größe 12 erreicht sein.

Methode 3 zeigt ab einer Bin-Größe von 4 ein kontinuierliches Absinken.

Zusammengefasst ausgedrückt, ist das Verhalten der Methoden also durchaus verschieden. Wichtig dabei ist, dass die Methoden 1.1b, 2.1, 2.2 und vielleicht auch Methode 1.2 das Verhalten von Methode 1.1a - das stetige, starke Absinken - nicht reproduzieren.

Weiterhin interessant ist nun auch das Verhalten der Methoden für sehr große Bin-Größen. Dieses soll im Folgenden für die Methoden 1.1a, 1.1b, 1.2 und 2.1 dargestellt werden.

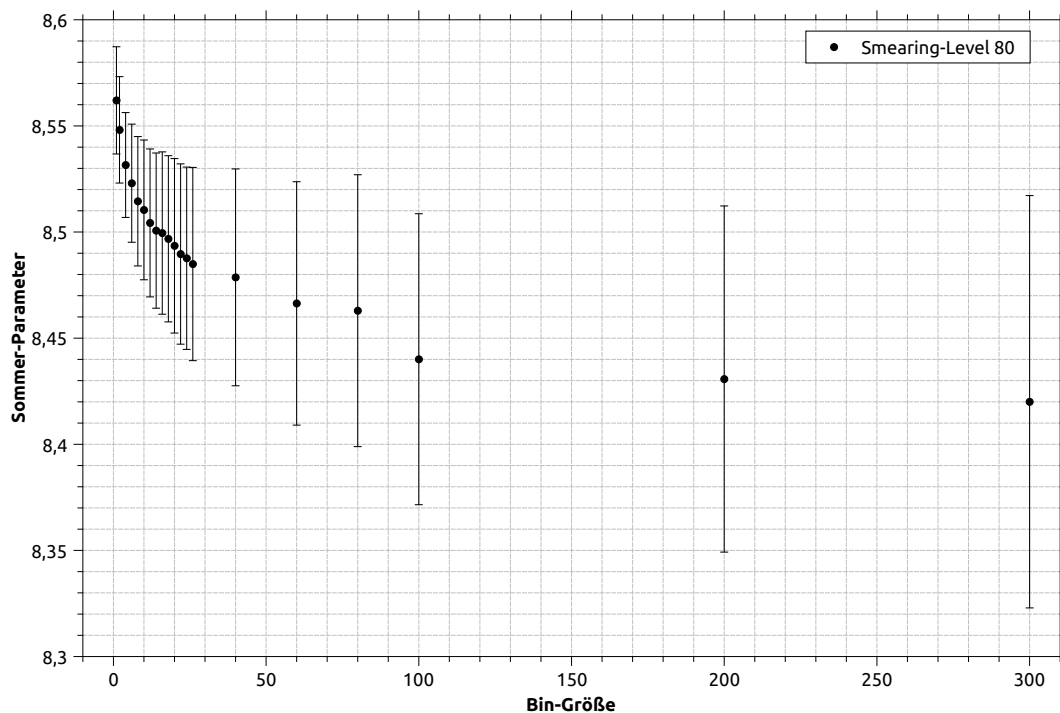


Abbildung 4.2.12.: Methode 1.1a: Verlauf des Sommer-Parameters für sehr große Bin-Größen.

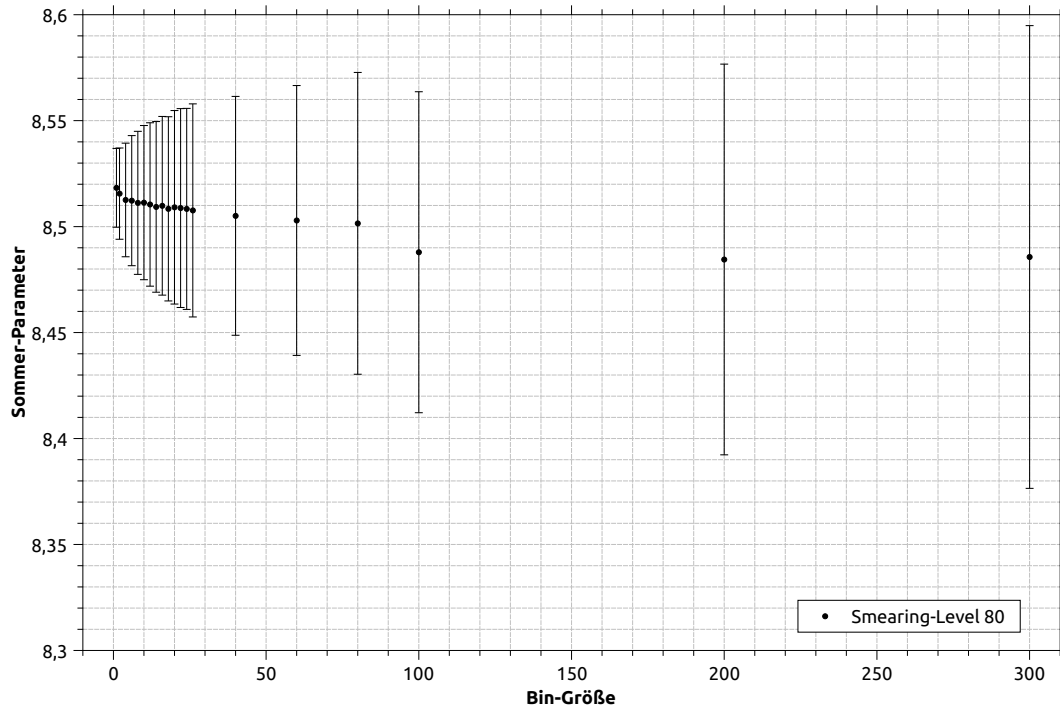


Abbildung 4.2.13.: Methode 1.1b: Verlauf des Sommer-Parameters für sehr große Bin-Größen.

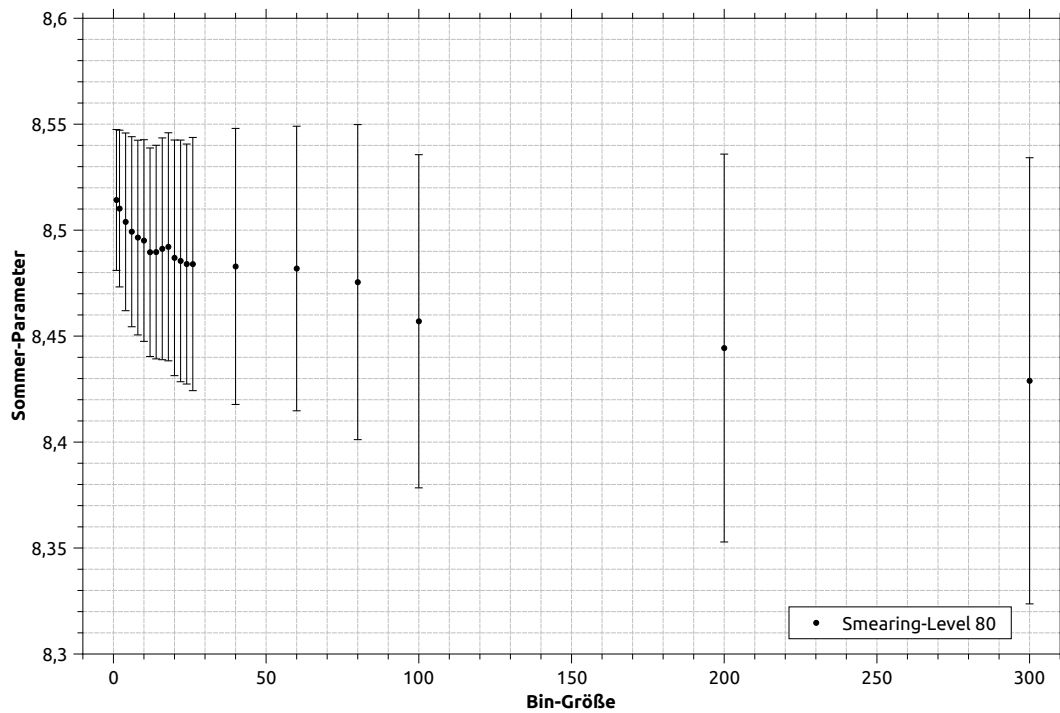


Abbildung 4.2.14.: Methode 1.2: Verlauf des Sommer-Parameters für sehr große Bin-Größen.

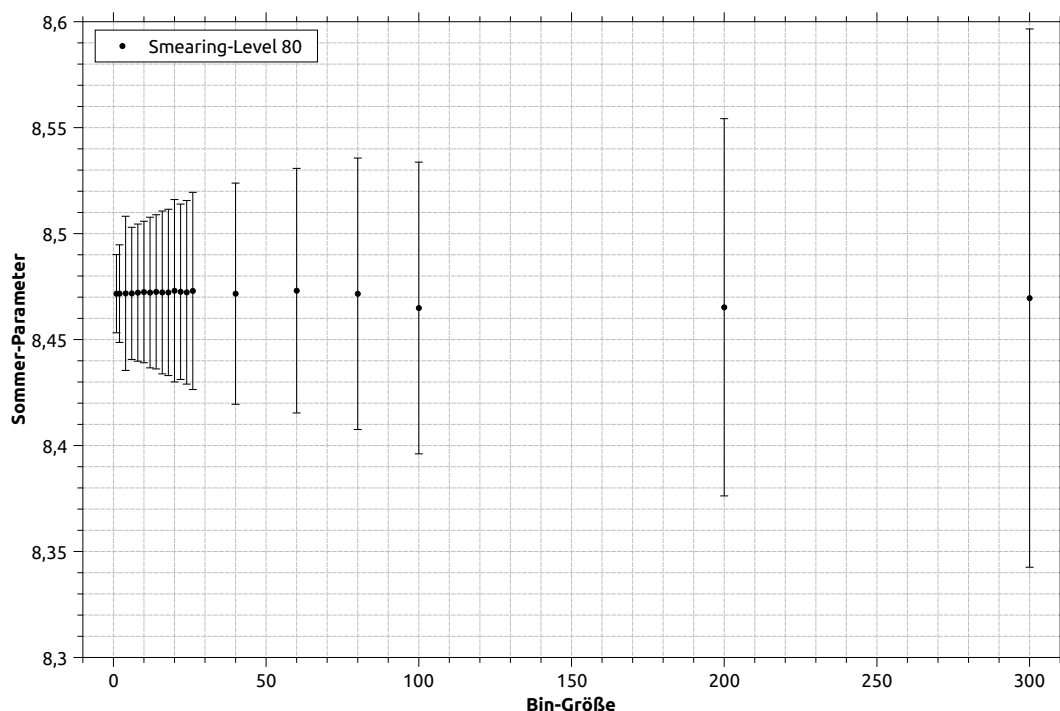


Abbildung 4.2.15.: Methode 2.1: Verlauf des Sommer-Parameters für sehr große Bin-Größen.

Methode 1.1a zeigt auch bis zu einer Bin-Größe von 300 noch ein stetiges Absinken. Ebenso ist auch das Absinken von Methode 1.1b über den gesamten betrachteten Bereich erkennbar. Beide Methoden sinken jedoch mit einer anderen „Geschwindigkeit“, wie oben bereits beschrieben.

Im Gegensatz zu den gerade genannten Methoden folgt Methode 2.1 keinem systematischen Trend.

Methode 1.2 zeigt einen unstetigen Verlauf. Das, was in Abb. 4.2.8 wie ein Plateau wirkt, setzt sich für höhere Smearing-Levels nicht fort (siehe Abb. 4.2.14).

Gemeinsam haben alle hier betrachteten Methoden einen Sprung bei einer Bin-Größe von 100.

4.2.4. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse

Anscheinend wirkt sich die Wahl der Bin-Größe abhängig vom verwendeten Smearing-Level unterschiedlich stark auf den erhaltenen Wert aus.

Bei kleinen Smearing-Levels konnte in den Daten mit großer Sicherheit ein Plateau erkannt werden. Die Daten einiger Methoden bei großen Smearing-Levels scheinen hin-

gegen immer weiter abzusinken.

Das stetige Absinken von r_0 bei einigen Methoden kann allerdings nicht auf einen Korrelationseffekt zurückzuführen sein, sondern muss andere Ursachen haben. Dies wurde durch die Betrachtung sehr hoher Bin-Größen ausgeschlossen, bei denen sicher keine Korrelation mehr zu erwarten ist. Zudem zeigt Methode 2.1 das systematische Verhalten der anderen Methoden bei hohen Bin-Größen nicht.

Grundsätzlich ist das Ergebnis dieser Untersuchung unschlüssig. Der Effekt, der den Wert des Sommer-Parameters immer weiter absinken lässt, kann eine - eventuell vom Smearing-Level abhängige - Verfälschung zur Folge haben kann. Das eigentlich erwartete Plateau ist in den Daten nicht zu erkennen und somit ist auch die optimale Bin-Größe unklar.

Auf eine weitergehende Untersuchung dieses Effekts wird hier verzichtet, weil der Fokus vorwiegend auf der Untersuchung der Smearing-Verfahren und ihrer Auswirkung auf den Sommer-Parameter gesetzt wurde und vermutlich weitreichende Analysen zur Aufklärung des Sachverhalts von Nöten wären. Deshalb sei an dieser Stelle lediglich auf die Beobachtung hingewiesen, dass unterschiedlich stark geschmierte Daten anders auf unterschiedliche Bin-Größen reagieren. Möglicherweise liegt bei höheren Smearing-Levels eine große Korrelation vor.

In den nachfolgenden Rechnungen soll durchgehend eine Bin-Größe von 10 genutzt werden. Diese Bin-Größe ist zumindest groß genug, um Effekte der Korrelation ungeschmierter Konfigurationen zu vermeiden. Zudem sind die Effekte relativ zu den statistischen Fehler recht klein, insbesondere für Bin-Größen im Bereich 2-16.

4.3. Allgemeines Verhalten und Analyse der Smearing-Effekte

Zur Unterdrückung der kurzreichweitigen Fluktuationen wird das Smearing in der Regel mehrmals hintereinander ausgeführt. Es ist zunächst unklar, bis zu welchem Smearing-Level die relevanten physikalischen Informationen erhalten bleiben. Deshalb soll hier in erster Linie untersucht werden, wie sich die Observablen bei steigendem Smearing-Level allgemein verhalten und wann das Smearing „unerwünschte Nebenwirkungen“ zeigt. Hierfür soll zunächst der Verlauf des Sommer-Parameters in Abhängigkeit des Smearing-Levels dargestellt werden. Die Ergebnisse sollen für alle Methoden zur Bestimmung von r_0 präsentiert und verglichen werden. Im Anschluss daran sollen die Observablen, aus denen der Sommer-Parameter bestimmt wird, genauer untersucht werden: Die beiden Potentiale $V(r)$ und $V(r, t)$ und die Potentialparameter. Eine Untersuchung zur Abhängigkeit des Sommer-Parameters von der Anzahl der Konfigurationen soll diesen Abschnitt dann abschließen.

4.3.1. Benutzte Parameter

Die in diesem Abschnitt präsentierten Daten nutzten im Allgemeinen die folgenden Parameter:

Gitter	$16^3 \times 36$, $\beta = 1.75$, $\kappa = 0.1490$
Anzahl ausgewerteter Konfigurationen	9798
Größe der Jackknife-Bins	10
Smearing-Methode	APE
Smearing-Parameter	0.5

Tabelle 4.2.: In dieser Untersuchung genutzte Parameter.

4.3.2. Verhalten des Sommer-Parameters

Im Folgenden soll der Verlauf des Sommer-Parameters in Abhängigkeit des Smearing-Levels dargestellt werden. Dafür sollen zunächst einige grundlegende Plots gezeigt werden, die einen Überblick über das allgemeine Verhalten vermitteln.

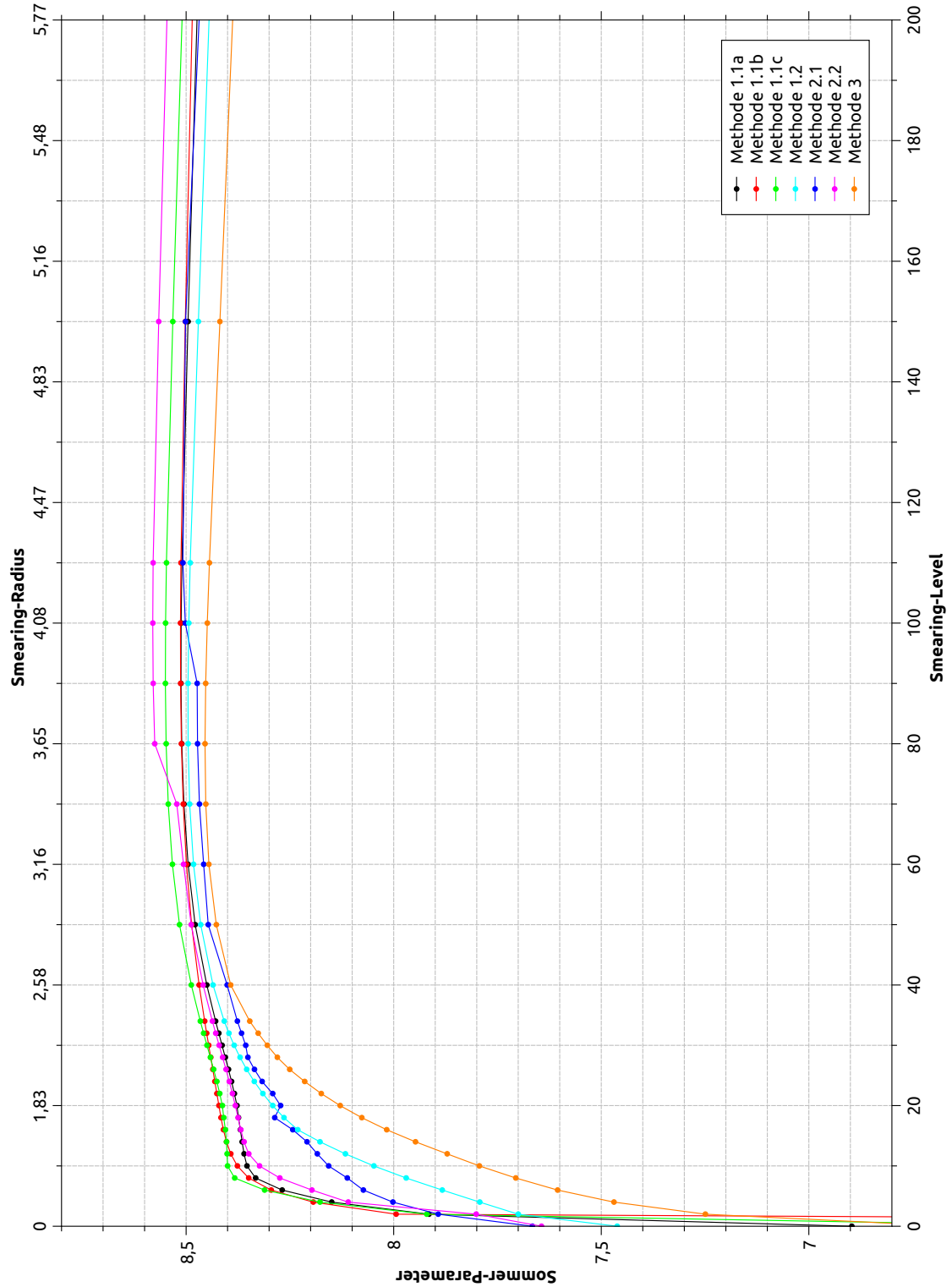


Abbildung 4.3.1.: Darstellung des durch die verschiedenen Methoden ermittelten Sommer-Parameters in Abhängigkeit vom Smearing-Level. Der Übersichtlichkeit wegen wurden die Punkte durch Linien verbunden und Fehlerbalken weggelassen.

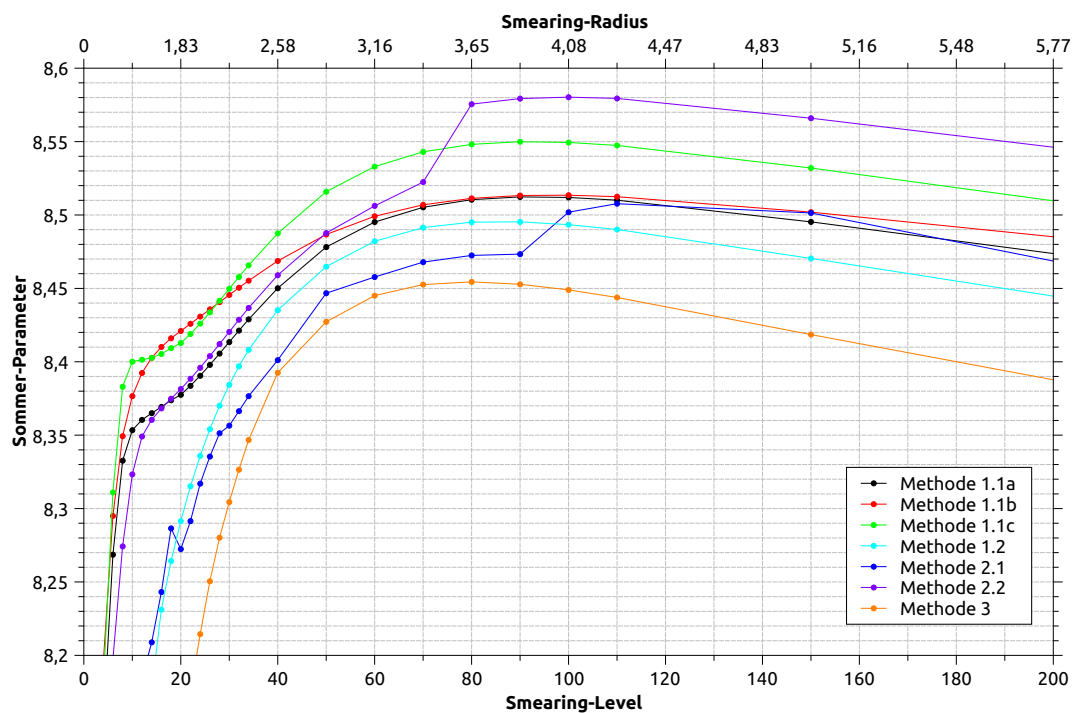


Abbildung 4.3.2.: Anders skalierte Darstellung der letzten Abbildung, die das Maximum des Sommer-Parameter-Verlaufs hervorhebt.

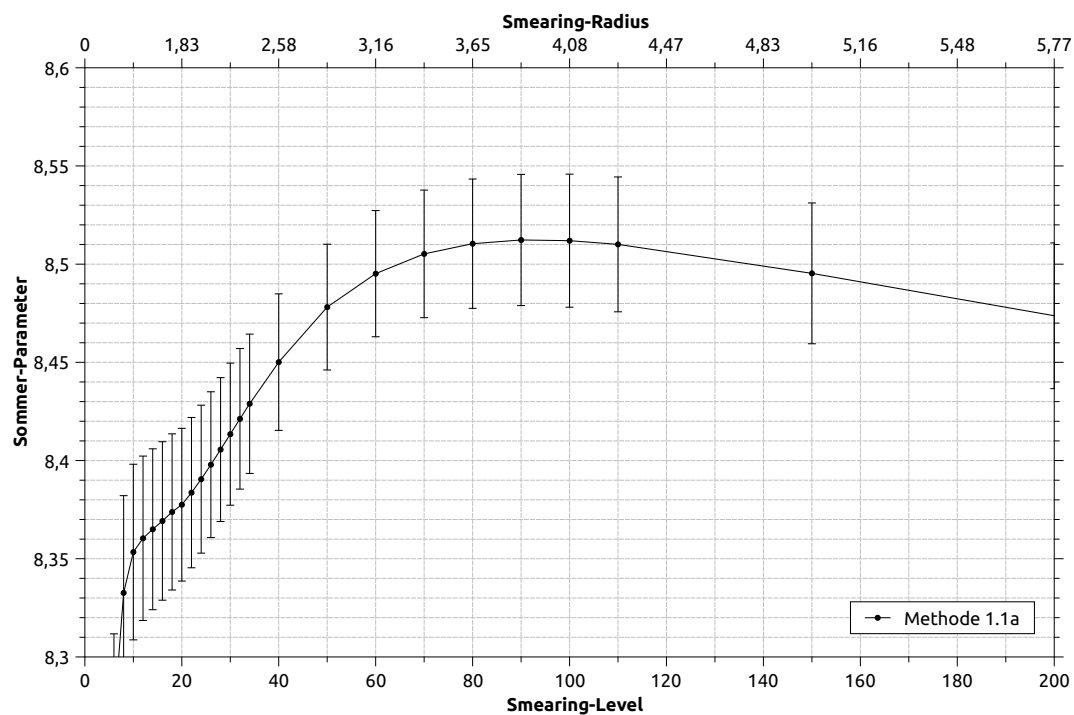


Abbildung 4.3.3.: Hier ist das Maximum exemplarisch für Methode 1.1a mit Fehlerbalken dargestellt, um einen Eindruck über die Fehlergrößenordnung zu vermitteln.

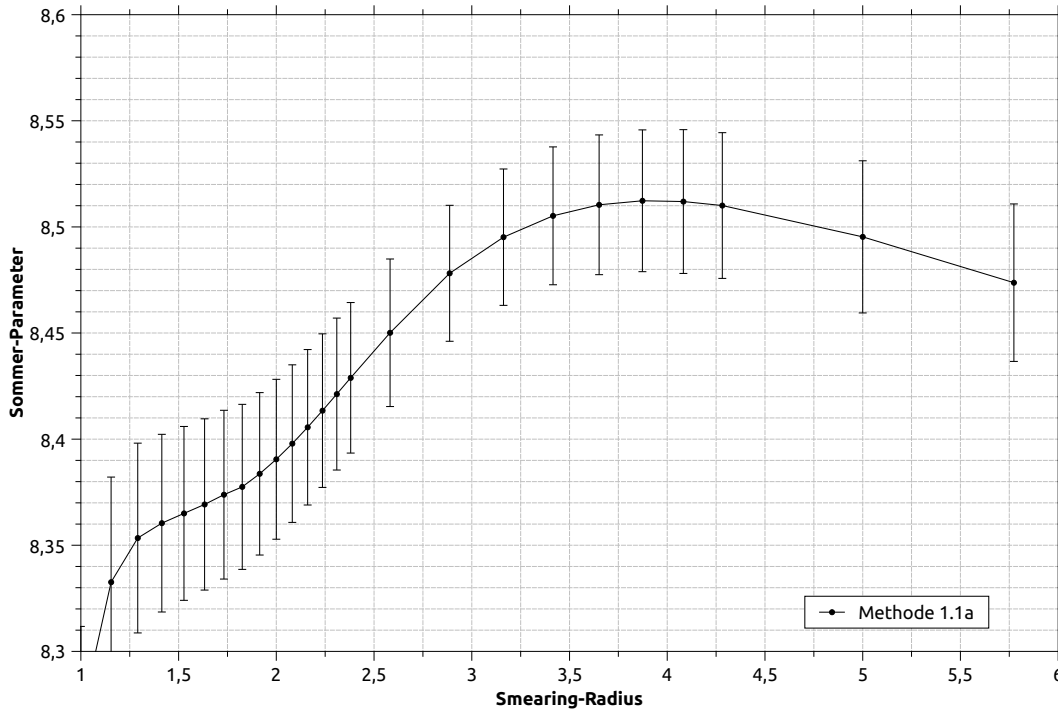


Abbildung 4.3.4.: Darstellung der Ergebnisse von Methode 1.1a in anderer Skalierung. Die benutzte Skala entspricht dem bereits vorgestellten Smearing-Radius ($R_{\text{smear}} = \sqrt{\varepsilon N/3}$).

Auf den ersten Blick ist in Abbildung 4.3.1 erkennbar, dass alle Methoden ein mehr oder minder schnelles „Konvergenzverhalten“ gegenüber steigendem Smearing-Level zeigen. Die dort dargestellten Methoden zeigen im Bereich niedriger Smearing-Levels einen starken Anstieg, der im weiteren Verlauf immer weiter abflacht und schließlich nach Erreichen eines Maximums, welches sich je nach Methode etwa bei den Levels 70 bis 110 befindet, in ein Absinken übergeht.

Die Methoden 1.1a bis 1.1c sowie Methode 2.2 erreichen etwa bei Smearing-Level 10 einen Bereich besonderer Steigung und zeigen danach einen nur noch sehr kleinen Anstieg des Sommer-Parameters. Dieser Bereich soll im Folgenden auch als „Plateau“ bezeichnet werden und beschreibt etwa den Bereich zwischen den Levels 10 und 20. Methode 2.2 zeigt zusätzlich einen sprunghaften Anstieg zwischen den Levels 70 und 80.

Die offensichtliche Ähnlichkeit der Verläufe für die Methoden 1.1a, 1.1b und 1.1c ist nicht weiter verwunderlich, weil die Potentialbestimmung für alle Methoden identisch ist und lediglich der Fit der Potentialparameter variiert. Diesen Methoden gegenüber wachsen die Methoden 1.2, 2.1 und 3 grundsätzlich langsamer und scheinen sich für höhere Levels den anderen Methoden anzupassen.

Abbildung 4.3.2 zeigt das genannte Maximum in passender Skalierung. Dort sind auch die verschiedenen Steigungen im Verlauf des Sommer-Parameters für niedrige bzw. hohe Smearing-Levels bei den Methoden 1.1a bis 1.1c sowie Methode 2.2 sichtbar. Die anderen Methoden zeigen dabei dieses Verhalten nicht. Eine Vorstellung von der Größenordnung des Fehlers bietet Abbildung 4.3.3, in welcher die sehr stabile Methode 1.1a dargestellt ist. Es sei darauf hingewiesen, dass der Sommer-Parameter für das *Plateau* bei niedrigen Smearing-Levels im Rahmen des Fehlers nicht mit dem hoher Smearing-Levels übereinstimmt.

Die Abbildung 4.3.4 zeigt den Verlauf für Methode 1.1a in anderer Skalierung. Benutzt wurde hier der Smearing-Radius $R_{\text{smear}} = \sqrt{\varepsilon N/3}$ anstelle des Smearing-Levels. Das Maximum liegt in dieser Skalierung bei $R_{\text{smear}} \approx 3.8$.

Für die weiteren Untersuchungen werden die Smearing-Levels, bei denen die Maxima auftauchen, noch von Interesse sein. Sie sind in folgender Tabelle beschrieben:

Methode	N_{max}
1.1a	90
1.1b	100
1.1c	90
1.2	90
2.1	110
2.2	100
3	80

Tabelle 4.3.: Auflistung derjenigen Smearing-Levels, bei denen die r_0 -Verläufe der einzelnen Methoden ihren maximalen Wert annehmen.

Ein detaillierterer Vergleich der einzelnen Methoden soll nun folgen.

4.3.3. Vergleich der einzelnen Methoden

In diesem Abschnitt sollen die Ergebnisse der einzelnen Methoden zunächst präsentiert und dann miteinander verglichen werden. Neben der Betrachtung der Sommer-Parameter-Werte, soll den relativen Fehlern der Methoden besondere Beachtung geschenkt werden. Untereinander verglichen werden sollen ausgewählte Methoden. Zusätzlich sollen im Anschluss ausgewählte Untersuchungen präsentiert werden, die bei der späteren Interpretation der Ergebnisse von Interesse sein werden.

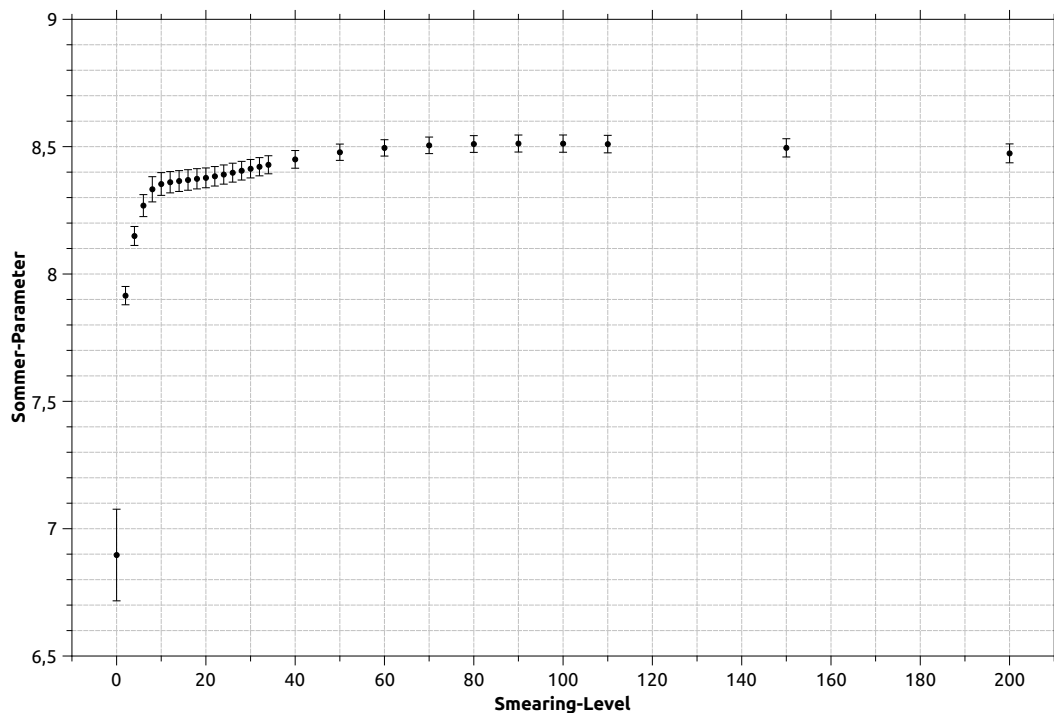


Abbildung 4.3.5.: Verlauf des Sommer-Parameters für Methode 1.1a.

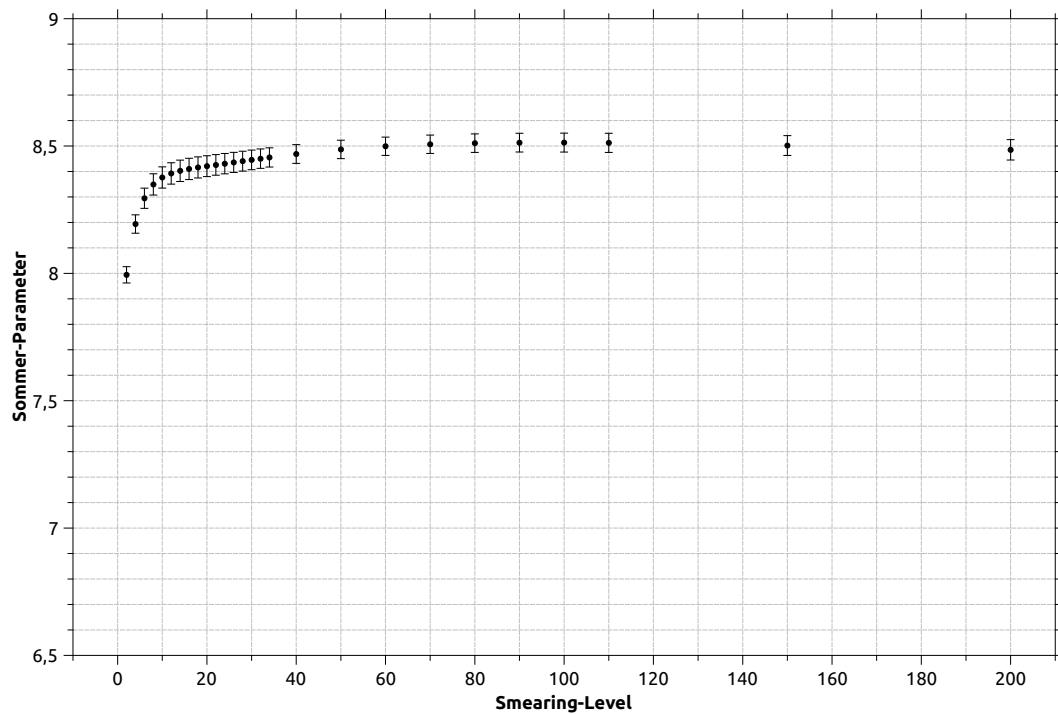


Abbildung 4.3.6.: Verlauf des Sommer-Parameters für Methode 1.1b.

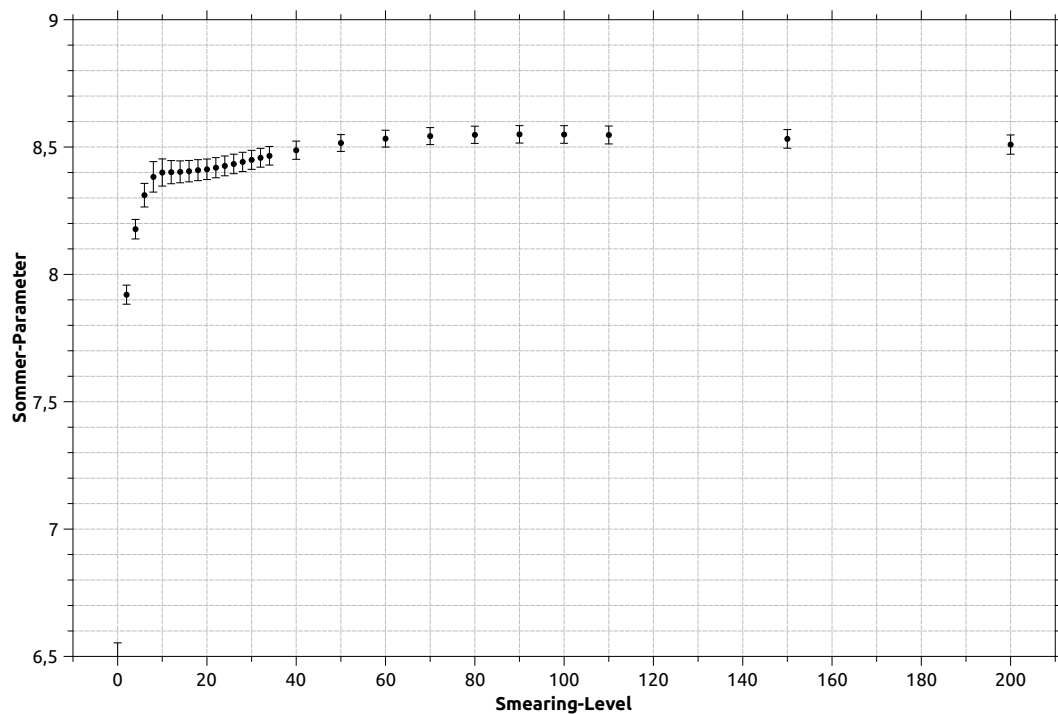


Abbildung 4.3.7.: Verlauf des Sommer-Parameters für Methode 1.1c.

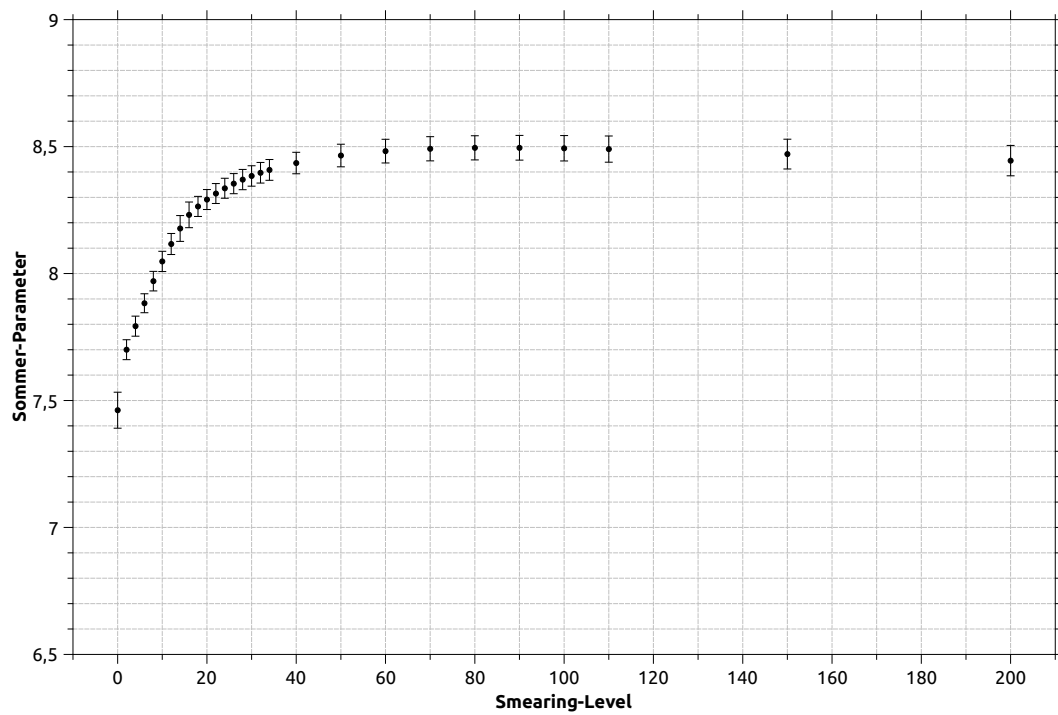


Abbildung 4.3.8.: Verlauf des Sommer-Parameters für Methode 1.2.

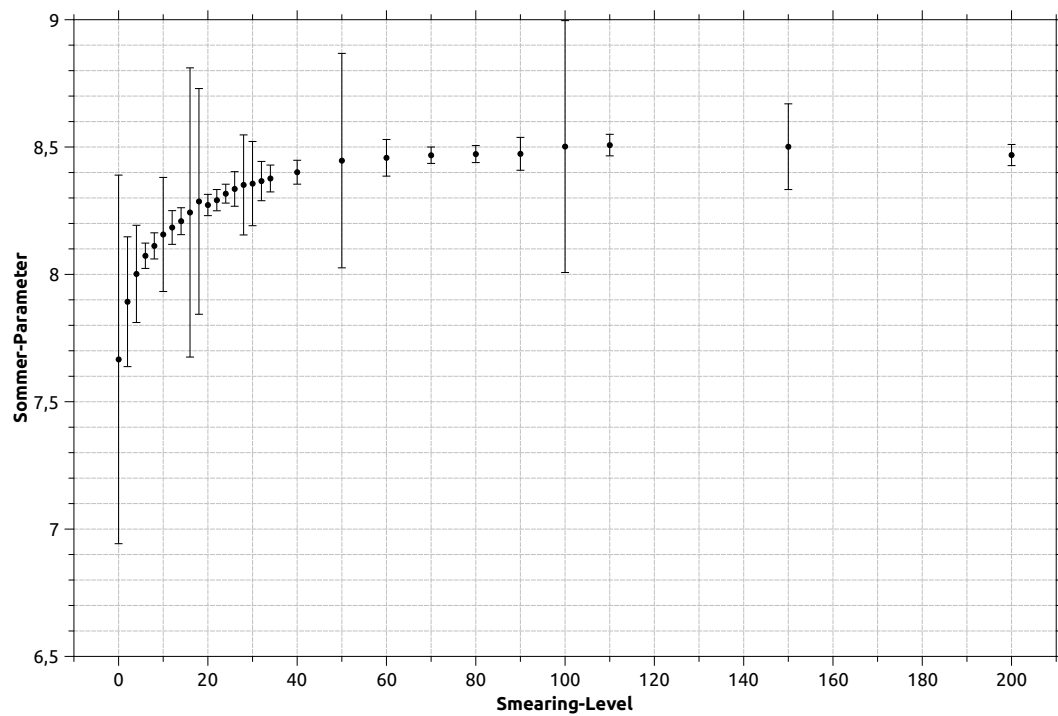


Abbildung 4.3.9.: Verlauf des Sommer-Parameters für Methode 2.1.

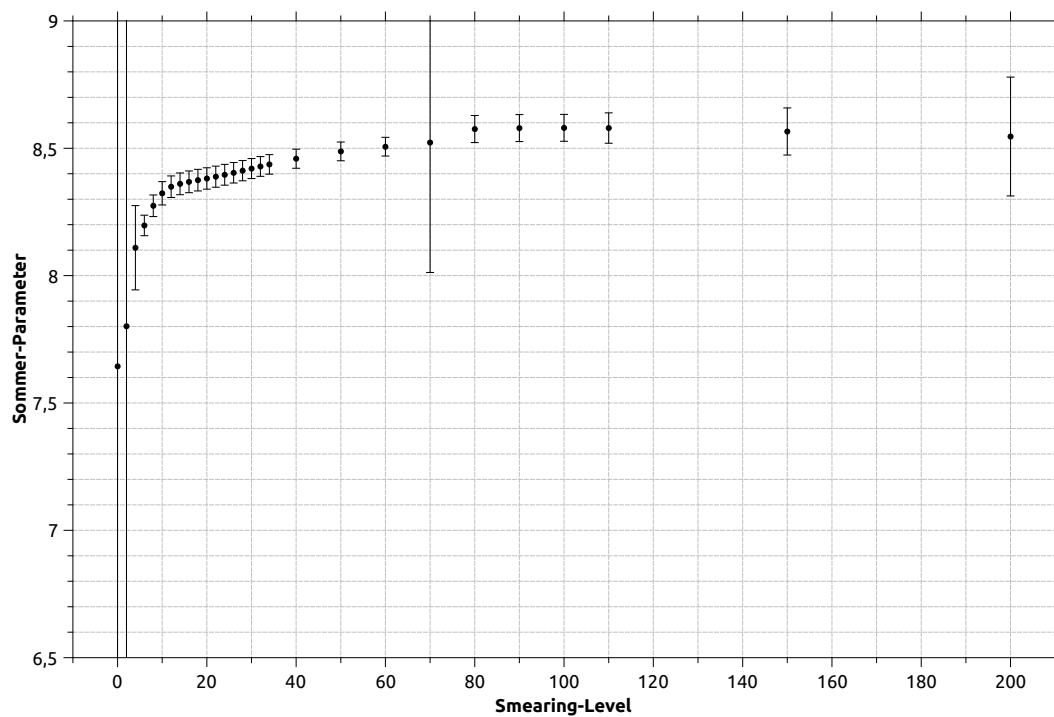


Abbildung 4.3.10.: Verlauf des Sommer-Parameters für Methode 2.2.

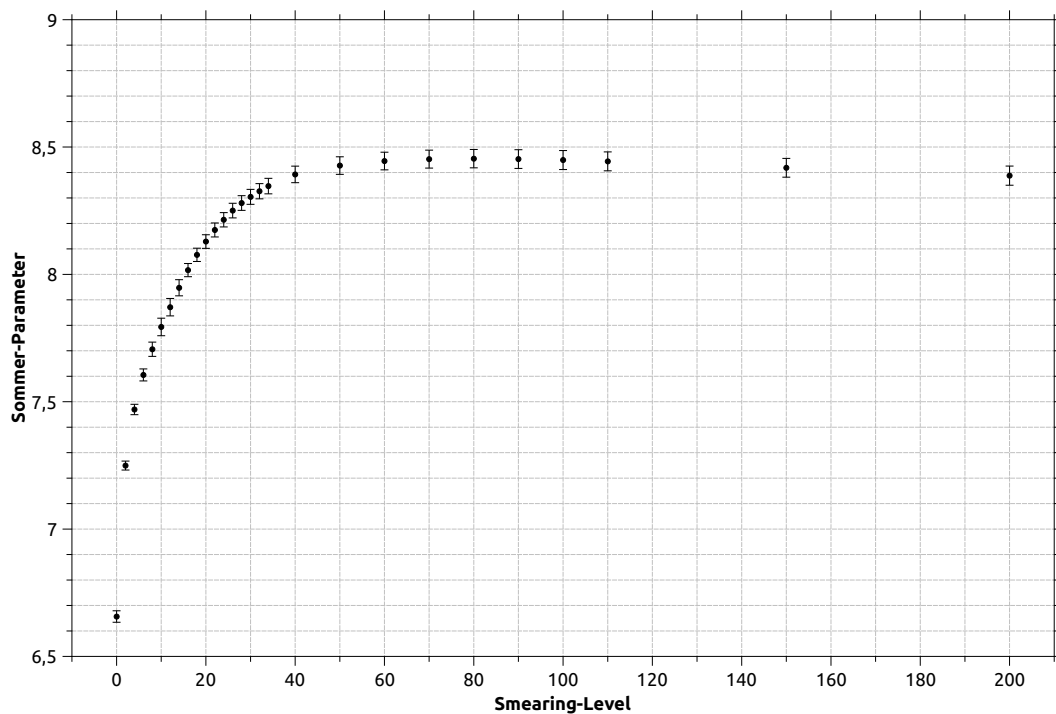


Abbildung 4.3.11.: Verlauf des Sommer-Parameters für Methode 3.

4.3.3.1. Methoden 1.1a, 1.1b und 1.1c

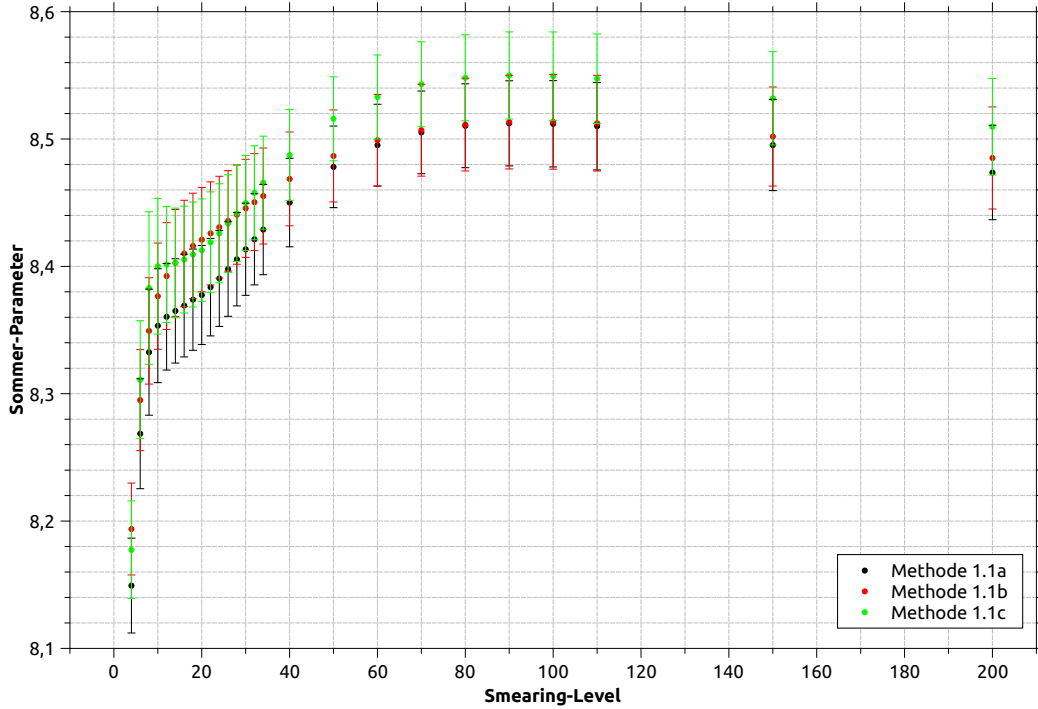


Abbildung 4.3.12.: Verlauf des Sommer-Parameters für die Methoden 1.1a bis 1.1c.

Die Methoden 1.1a bis 1.1c (Abb. 4.3.12) liefern erwartungsgemäß sehr ähnliche Ergebnisse: ab Smearing-Level 4 stimmen die einzelnen Werte innerhalb des Fehlers überein. Dennoch gibt es systematische Unterschiede zwischen diesen Methoden. Bei kleinen Smearing-Levels zeigen die Methoden 1.1b und 1.1c ein ähnliches Verhalten, beide Verläufe sind sich sehr ähnlich und liefern gegenüber Methode 1.1a systematisch erhöhte Werte. Für höhere Levels gleichen sich die Werte der Methoden 1.1a und 1.1b an (bei Smearing-Level 60 zeigt r_0 dort eine relative Differenz von weniger als einem halben Promille), die Werte von Methode 1.1c hingegen bleiben erhöht. Insgesamt erscheint Methode 1.1b in ihrem Verlauf besonders stabile Werte zu liefern.

Interessant sind bei diesen Methoden die sehr hohen Unterschiede zwischen geschmierten und ungeschmierten Werte. Diese konnten in den voranstehenden Plots teilweise nicht dargestellt werden, weil sonst Details aufgrund der Skalierung nicht mehr zu erkennen gewesen wären.

Methode	r_0 , ungeschmiert	r_0 , 2-fach geschmiert
1.1a	6.897 ± 0.180	7.915 ± 0.036
1.1b	2.345 ± 0.693	7.994 ± 0.032
1.1c	6.306 ± 0.247	7.920 ± 0.037

Tabelle 4.4.: Sommer-Parameter-Werte der Methoden 1.1a bis 1.1c für ungeschmierte und 2-fach geschmierte Daten.

Insbesondere Methode 1.1b liefert hier einen stark von den Ergebnissen geschmierter Daten abweichenden Wert.

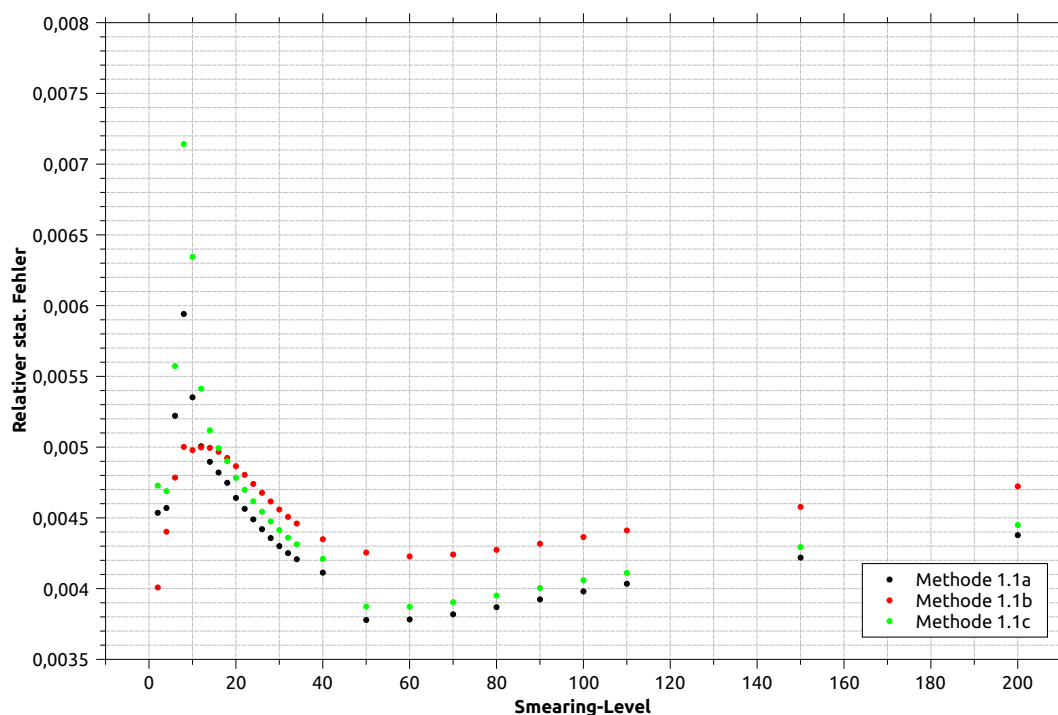


Abbildung 4.3.13.: Darstellung der relativen statistischen Fehler der ersten drei Methoden im direkten Vergleich.

Die Fehlerverläufe (Abb. 4.3.13) zeigen wie die Daten selbst untereinander ein ähnliches Verhalten. Allgemein zeigt sich hier zunächst ein Maximum in den Daten des relativen Fehlers, das für alle drei Methoden bei Smearing-Level 8 liegt.

Methode	Relativer Fehler für r_0 bei Level 8
1.1a	5.94‰
1.1b	5.00‰
1.1c	7.14‰

Tabelle 4.5.: Relative Fehler der Sommer-Parameter-Werte für die Methoden 1.1a bis 1.1c bei achtfach-geschmierten Daten.

Nach dem Maximum folgt ein Absinken zu einem Minimum, worauf die Daten wieder leicht ansteigen. Methode 1.1b zeigt dabei den kleinsten Fehler für das Maximum und den klarsten Fehlerverlauf. Insgesamt ist dieser Fehler ab Level 18 jedoch systematisch größer als die der beiden anderen Methoden. Von diesen zeigt Methode 1.1a den kleinsten relativen Fehler.

4.3.3.2. Methode 2.2

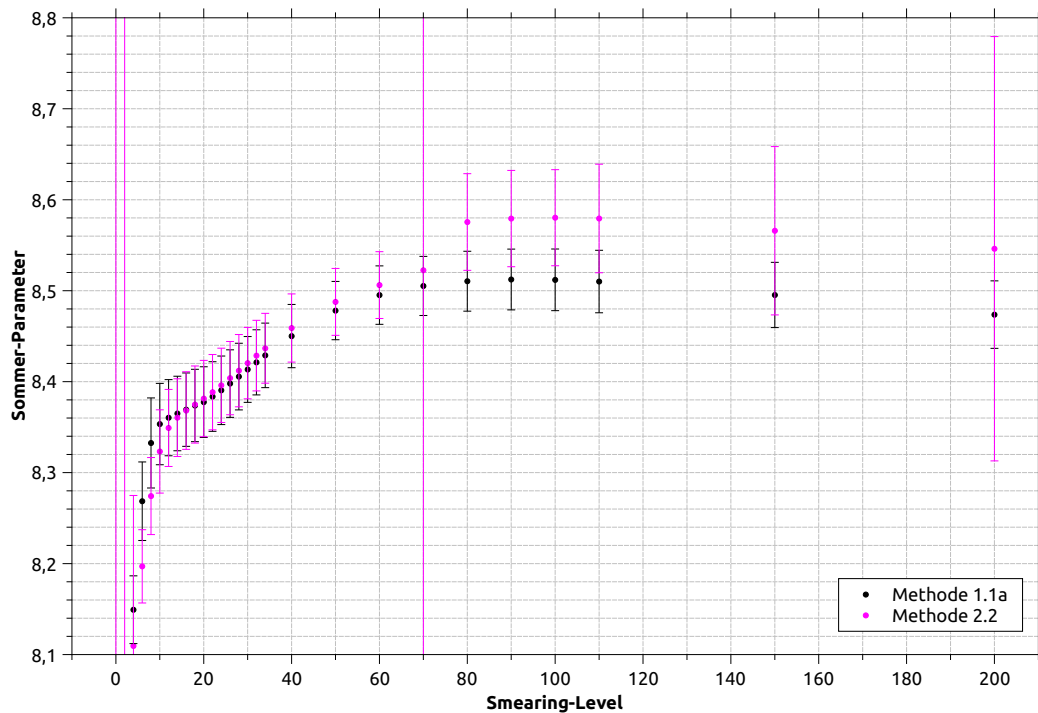


Abbildung 4.3.14.: Verlauf des Sommer-Parameters für die Methoden 1.1a und 2.2.

Methode 2.2 zeigt im Rahmen des Fehlers eine Übereinstimmung mit Methode 1.1a für alle Smearing-Levels. Allerdings sind die Abweichungen bei kleinen Smearing-Levels relativ groß, sodass die Übereinstimmung dort nur durch den sehr großen Fehler von

Methode 2.2 für einige Datenpunkte zustande kommt. Im Bereich der Levels 12 bis 70 sind sich die Werte aber sehr ähnlich. Dies ist insbesondere für den Bereich der Levels 10 bis 40 interessant, weil dort beide Methoden eine ähnliche Steigung aufweisen, die sonst nur noch die Methoden 1.1b und 1.1c besitzen (das „Plateau“).

Zusätzlich ist in den Daten von Methode 2.2 ein Sprung zwischen den Levels 70 und 80 erkennbar. Dieser Sprung deutet sich bei Level 70 bereits durch einen übermäßig großen Fehler an.

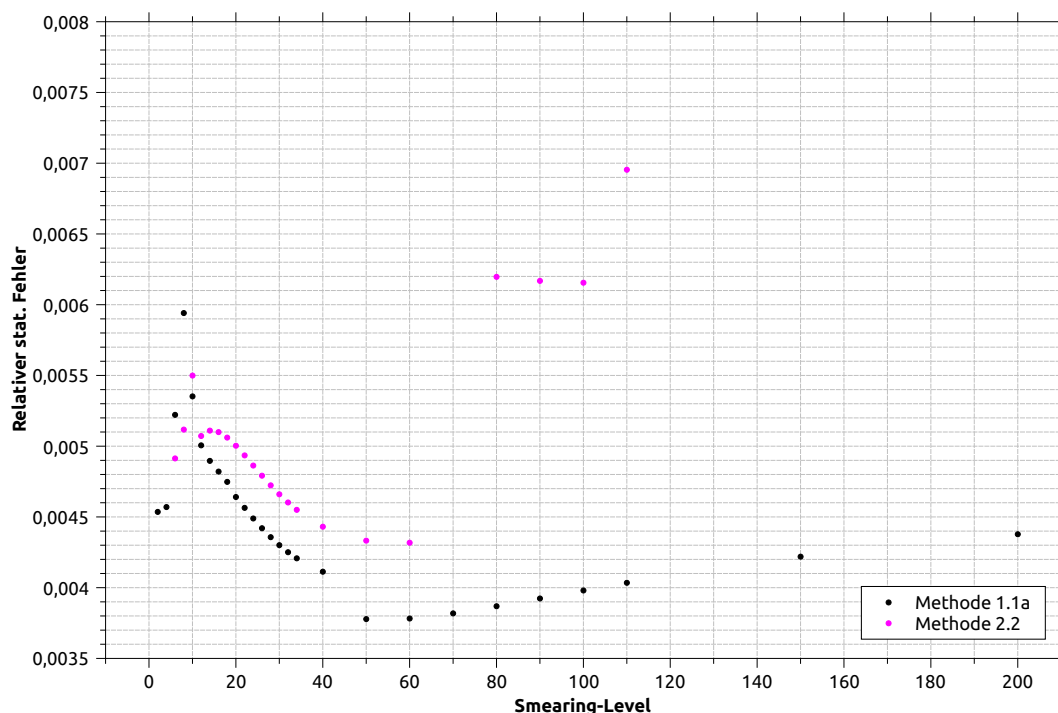


Abbildung 4.3.15.: Darstellung der relativen statistischen Fehler der Methoden 1.1a und 2.2 im direkten Vergleich.

Der relative Fehler von Methode 2.2 liegt in derselben Größenordnung wie der von Methode 1.1a. Methode 2.2 besitzt für die meisten Datenpunkte einen höheren Fehler als Methode 1.1a, zeigt dabei aber bei kleinen Smearing-Levels ein weniger ausgeprägtes Maximum. Der Sprung, den der Sommer-Parameter bei Methode 2.2 zeigt, ist auch im Verlauf des relativen Fehlers zu erkennen. Dabei ist der Fehler für Level 70 aufgrund seines sehr großen Wertes in obiger Abbildung nicht zu erkennen.

Aus demselben Grund sind die relativen Fehler beider Methoden bei den Levels 150 und 200 in der Abbildung nicht dargestellt worden, weil diese relativ groß sind.

4.3.3.3. Methoden 1.2 und 3

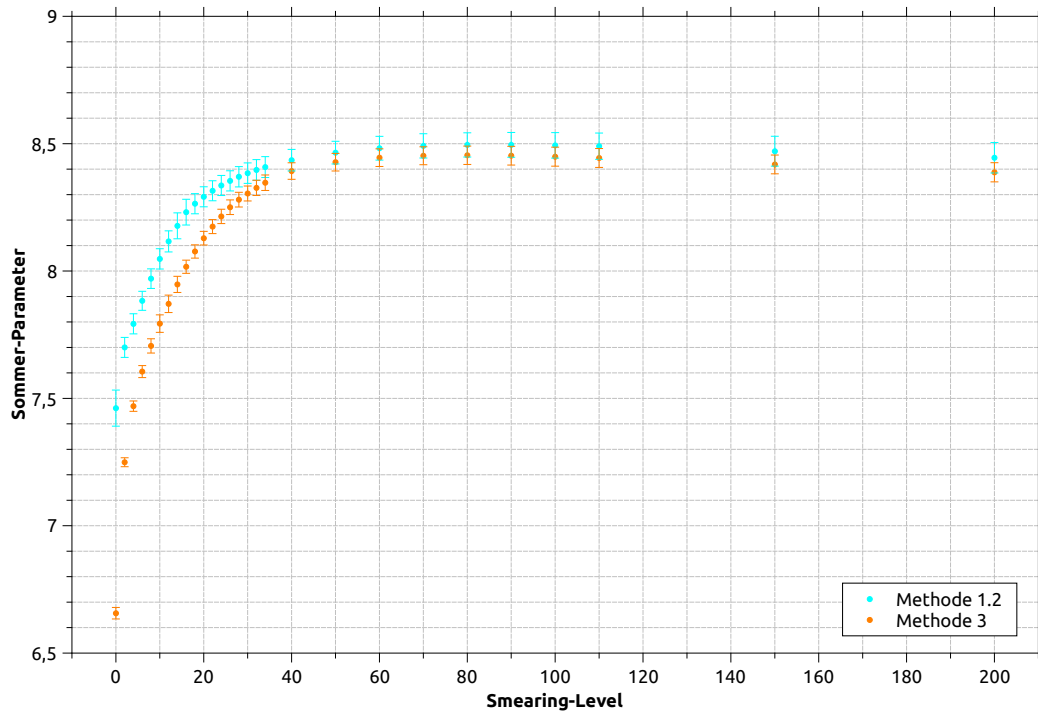


Abbildung 4.3.16.: Verlauf des Sommer-Parameters für die Methoden 1.2 und 3.

Die Methoden 1.2 und 3 zeigen ein qualitativ ähnliches Verhalten. In beiden Fällen zeigt der r_0 -Verlauf ein sehr monotonen und stabiles Verhalten. Methode 3 liefert dabei systematisch tiefere Ergebnisse als Methode 1.2 und beide stimmen ab Level 32 im Rahmen des Fehlers überein, wobei die Übereinstimmung beider Methoden ab Smearing-Level 50 besonders groß erscheint.

Bei Voruntersuchungen fiel insbesondere bei Methode 1.2 - die Plateau-Fits zur Bestimmung des Potentials $V(r)$ nutzt - auf, dass der qualitative Verlauf von r_0 in Abhängigkeit des Smearing-Levels sehr davon abhängt, in welchem Bereich das Plateau gefittet wird. Im später folgenden Abschnitt 4.3.3.6 wird dies genauer dargestellt werden.

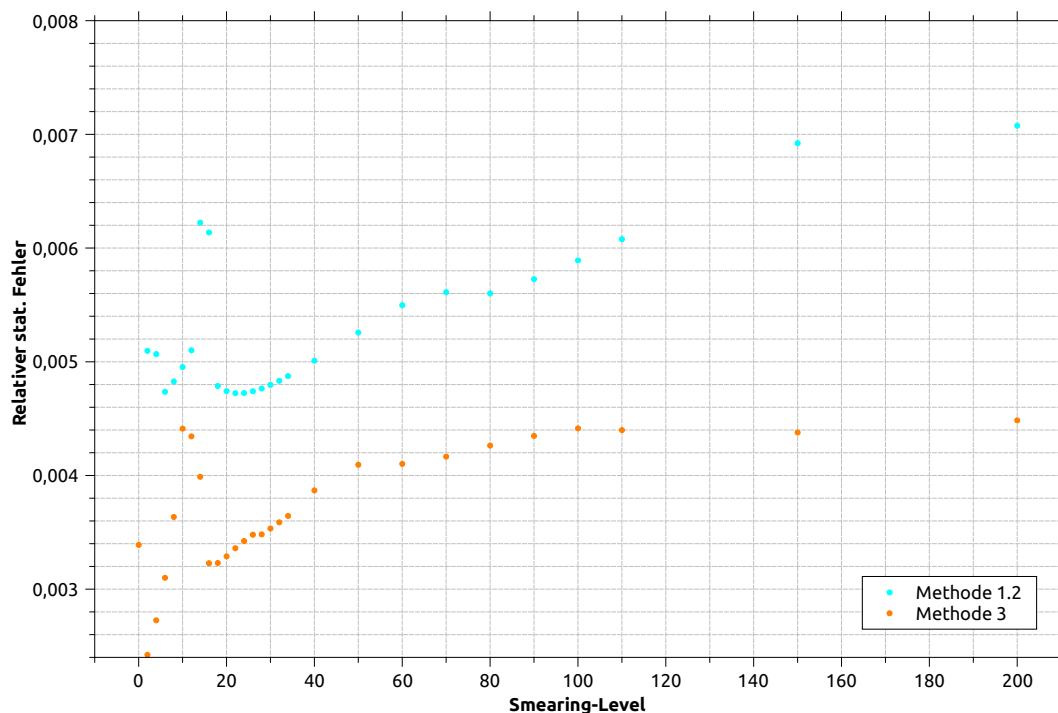


Abbildung 4.3.17.: Darstellung der relativen statistischen Fehler der Methoden 1.2 und 3 im direkten Vergleich.

Der Verlauf der relativen Fehler in obiger Abbildung ist im Vergleich zu den bisher dargestellten Methoden eher ungewöhnlich. Auch hier wird wie bei Methode 1.1a ein lokales Minimum erreicht, nach welchem der relative Fehler dann wieder ansteigt. Allerdings ist dieses Minimum hier sehr früh erreicht.

Methode 1.2 zeigt dabei einen insgesamt sehr viel größeren relativen Fehler als Methode 3, obwohl der Wert des Sommer-Parameters selbst bei Methode 1.2 sehr viel schneller gegen seinen maximalen Wert *konvergiert*.

Für niedrige Smearing-Levels ist der relative Fehler bei Methode 3 zudem auch im Vergleich mit den anderen Methoden außergewöhnlich klein.

Es sollte an dieser Stelle betont werden, dass kleinere statistische Fehler nicht zwangsweise auch bessere Ergebnisse bedeuten. Ausschlaggebend wäre eigentlich der Gesamtfehler, der noch eine systematische Komponente miteinbezieht. Letzterer kann lediglich abgeschätzt werden, indem beispielsweise das Konvergenzverhalten verglichen wird. Dieses ist für Methode 3 hier durchaus als schlechter zu bewerten: Beide Methoden erreichen zwar in etwa das gleiche Maximum bei hohen Smearing-Levels, aber Methode 1.2 tut dies weitaus schneller. Eine schnellere Konvergenz bedeutet dann, dass weniger Smearing-Iterationen und damit auch weniger Rechenzeit benötigt werden, um densel-

ben Wert zu produzieren.

Zusätzlich stellt eine Untersuchung von χ^2 eine weitere Möglichkeit dar, um die *Güte* einer Methode abzuschätzen. Da hier allerdings viele weitere Faktoren eine Rolle spielen und sich diese Größe bei den durchgeführten Analysen als sehr unzuverlässig herausgestellt hat, wurde hier darauf verzichtet.

4.3.3.4. Methode 2.1

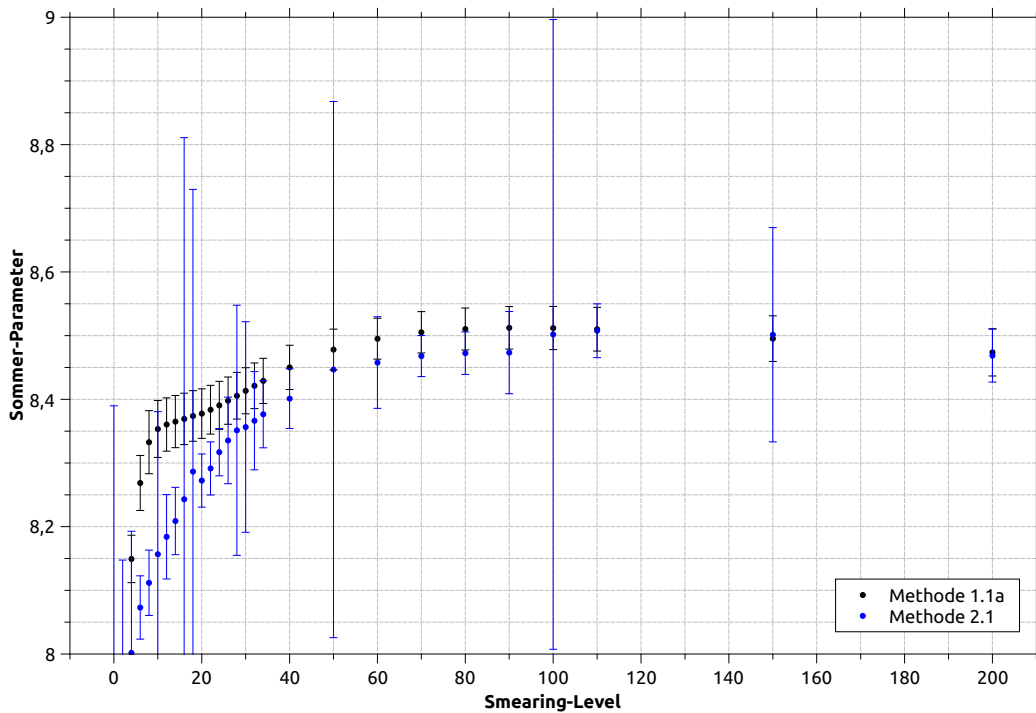


Abbildung 4.3.18.: Verlauf des Sommer-Parameters für die Methoden 1.1a und 2.1.

Die von Methode 2.1 berechneten Werte für r_0 (Abb. 4.3.18) zeigen grob dasselbe Verhalten wie die anderen Methoden. Dabei sind die einzelnen Werte verhältnismäßig großen Schwankungen unterworfen. Der statistische Fehler schwankt sogar noch stärker, wie eingangs bereits erwähnt. Ab Level 24 stimmen hier die für r_0 berechneten Werte im Rahmen des Fehlers mit denen der Methode 1.1a überein und die Abweichungen sind nicht allzu groß.

Wie Methode 2.2 zeigt auch diese Methode bei einem hohen Smearing-Level einen Sprung im Sommer-Parameter (Smearing-Level 100).

Der relative Fehler der Ergebnisse von Methode 2.1 wurde hier nicht untersucht, weil dieser sehr groß ist und starken Schwankungen unterliegt (siehe Abbildung 4.3.9). Inter-

essant ist hier allerdings, dass der Sommer-Parameter selbst scheinbar stabilere Werte aufweist, als es der Fehler vermuten lassen würde.

4.3.3.5. Untersuchung des Einflusses von Standard- und erweitertem Potential

Für Methode 1.1b wurde gezeigt, dass diese abgesehen vom ungeschmierten Datenpunkt im Vergleich zu Methode 1.1a stabilere Ergebnisse brachte. Beide Methoden unterscheiden sich lediglich durch das Modell, welches für das Potential $V(r)$ angenommen wird. Methode 1.1a nutzt dabei das einfache Standard-Potential und Methode 1.1b nutzt das erweiterte Modell zur besseren Beschreibung des Coulomb-artigen Anteils.

Welche Unterschiede durch die Benutzung des erweiterten Potentials hervorgerufen werden, soll für die restlichen Methoden 1.2, 2.1, 2.2 und 3 genauer untersucht werden.²⁴ Dafür sollen nun die Sommer-Parameter-Verläufe in Abhängigkeit des Smearing-Levels für Standard- und erweitertes Potential bei diesen Methoden dargestellt werden.

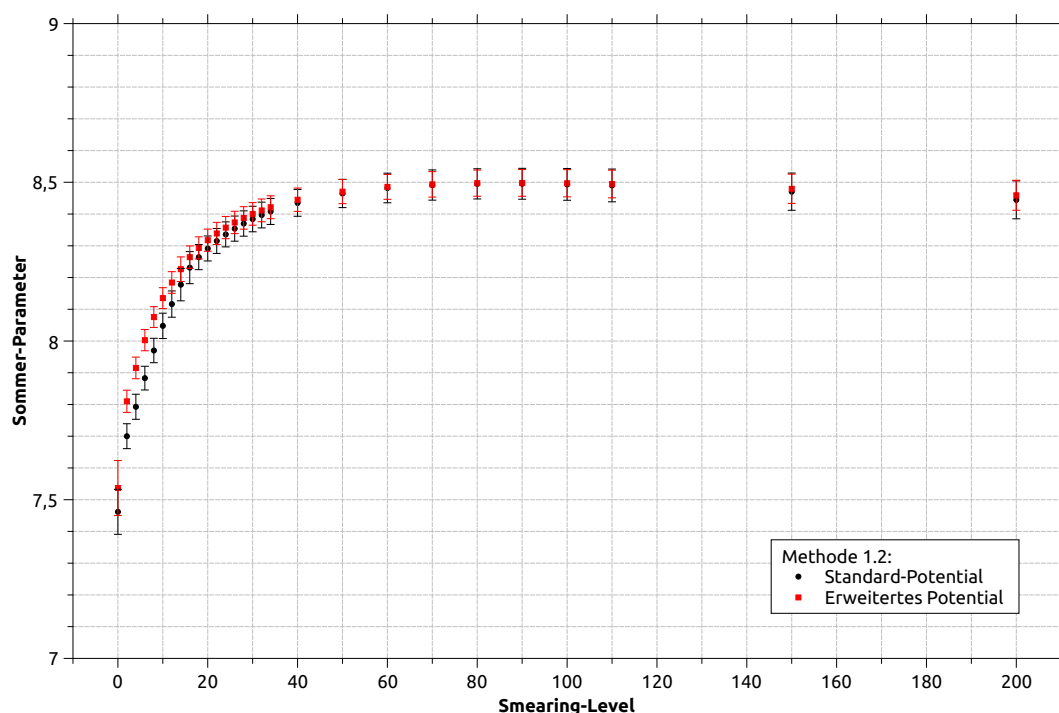


Abbildung 4.3.19.: Vergleich der r_0 -Verläufe bei Benutzung von Standard- und erweitertem Potential für Methode 1.2.

²⁴Die Ergebnisse für die Methoden 1.1a und 1.1b finden sich in den Abbildungen 4.3.12 und 4.3.13.

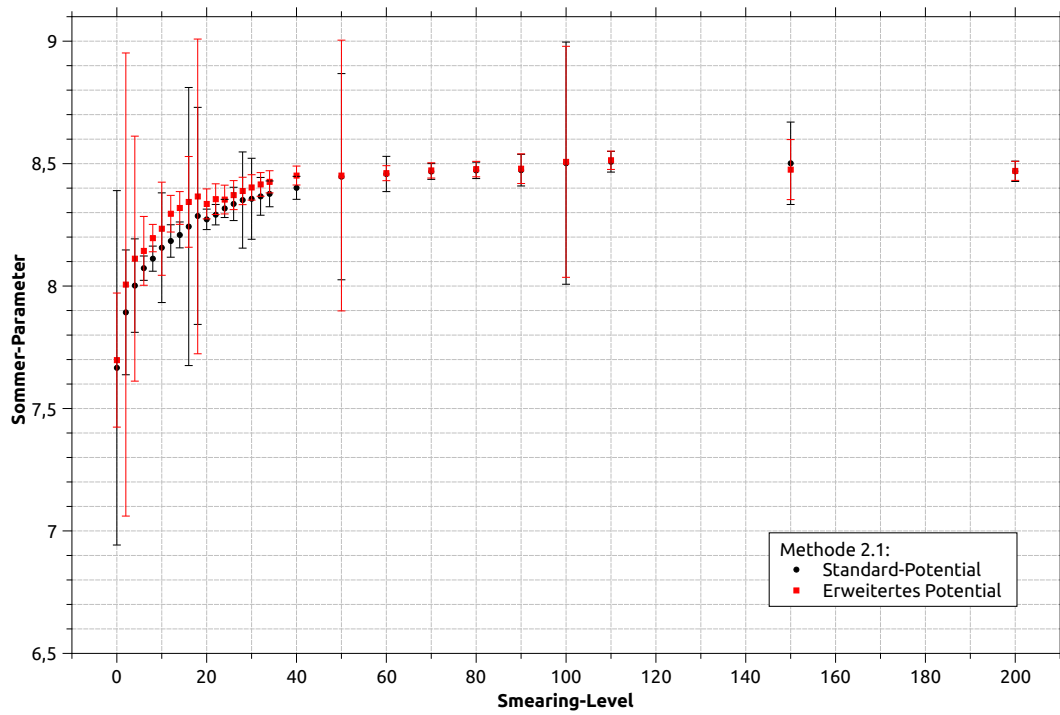


Abbildung 4.3.20.: Vergleich der r_0 -Verläufe bei Benutzung von Standard- und erweitertem Potential für Methode 2.1.

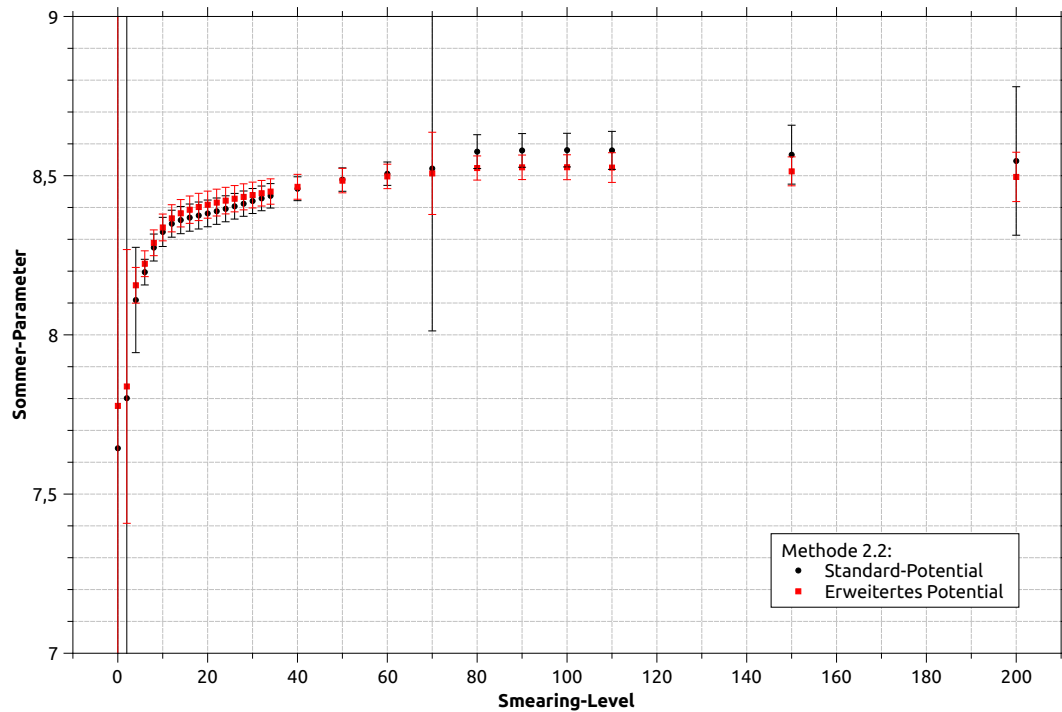


Abbildung 4.3.21.: Vergleich der r_0 -Verläufe bei Benutzung von Standard- und erweitertem Potential für Methode 2.2.

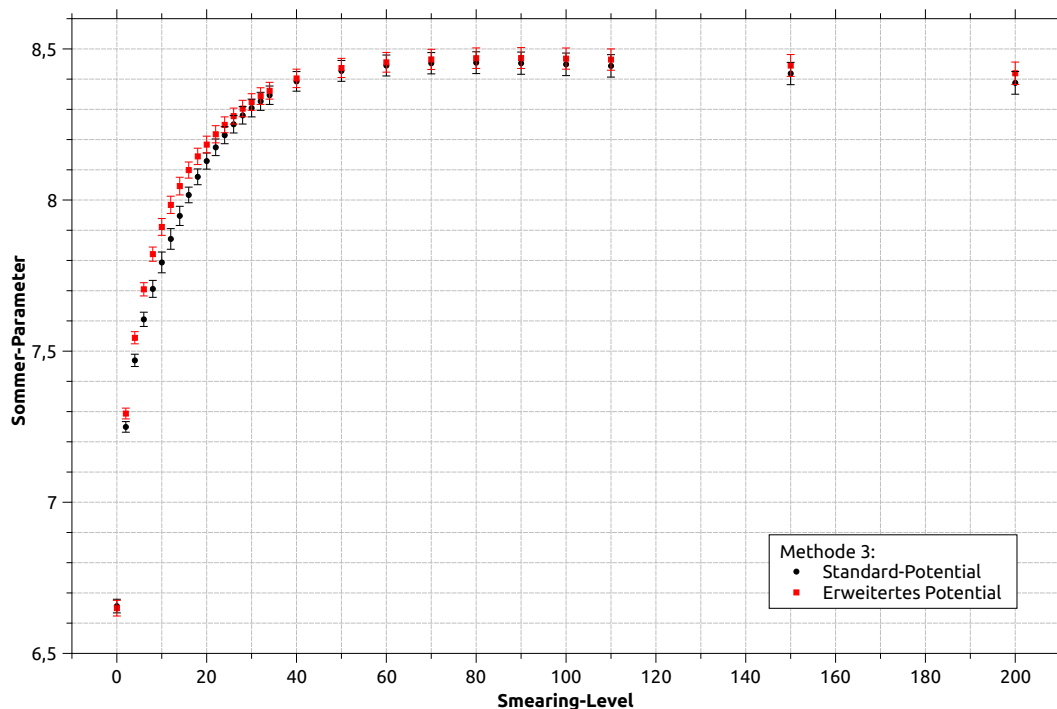


Abbildung 4.3.22.: Vergleich der r_0 -Verläufe bei Benutzung von Standard- und erweitertem Potential für Methode 3.

Generell zeigen alle betrachteten Methoden das schon für die Methoden 1.1a und 1.1b beobachtete Verhalten: Für höhere Smearing-Levels nähern sich beide Sommer-Parameter-Verläufe stark an und für niedrige Levels ist beim erweiterten Potential ein etwas höherer r_0 -Wert erkennbar, wobei letzterer Effekt jedoch relativ klein ausfällt. Es scheint, als würden die Methoden mit erweitertem Potential bezüglich des Smearing-Levels schneller konvergieren.

Erwähnenswert ist, dass Methode 2.2 zwischen den Smearing-Levels 70 und 80 beim erweiterten Potential wenn überhaupt nur einen sehr kleinen Sprung zeigt, was im Folgenden noch von Interesse sein wird.

4.3.3.6. Zusätzliche Untersuchungen

Es sollen nun einige zusätzliche Untersuchungen und anders skalierte Abbildungen präsentiert werden, die zur besseren Illustration und bei der Diskussion der Ergebnisse am Ende dieses Abschnitts hilfreich sein werden.

Vergleich aller Methoden im Bereich des Maximums

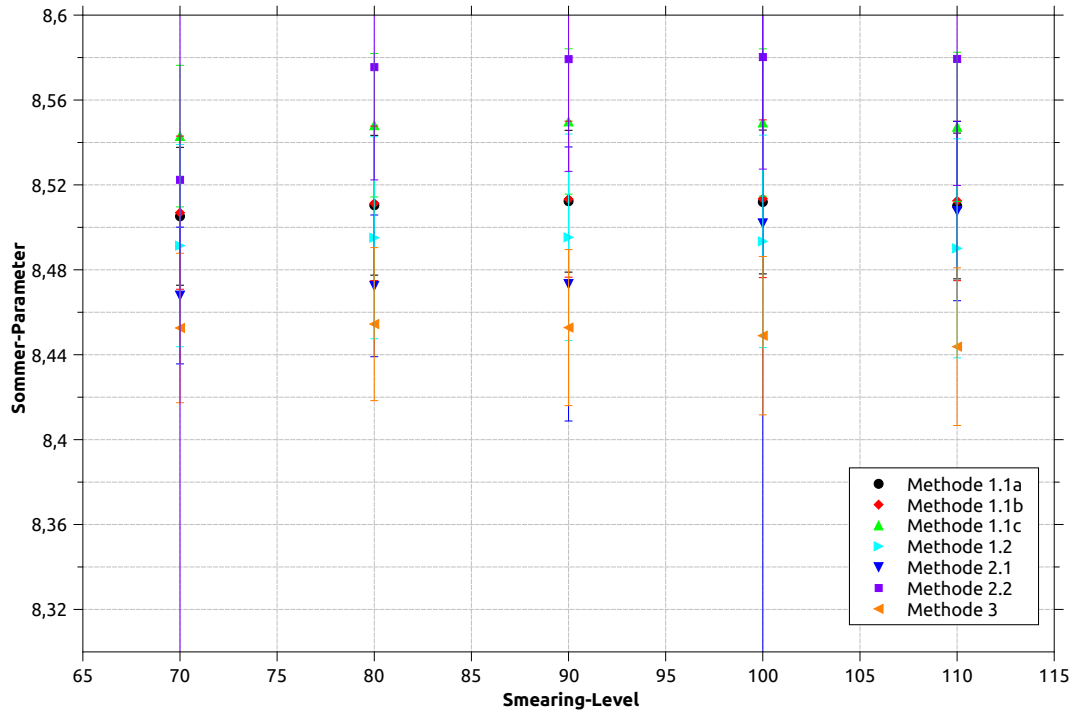


Abbildung 4.3.23.: Detaillierte Darstellung der einzelnen Methoden im Bereich des Maximums.

Obiger Abbildung ist zu entnehmen, wie ähnlich die Ergebnisse sind, die die Methoden für hohe Smearing-Level ermitteln. Mit Ausnahme von Methode 3 liefern dort alle Methoden im Rahmen des Fehlers miteinander compatible Ergebnisse. Die Ergebnisse von Methode 3 sind in dem betrachteten Bereich sogar durchgehend inkompatibel mit den Werten der Methoden 1.1c und 2.2.

Sprung bei Methode 2.2

Der Sprung bei einem hohen Smearing-Level, welcher (nur) bei den ähnlichen Methoden 2.1 und 2.2 auftritt, soll hier bei Methode 2.2 etwas genauer betrachtet werden (siehe zum Beispiel Abb. 4.3.14). Bei dieser Methode läge der erste Ansatzpunkt zunächst bei einem Vergleich des Potentials $V(r)$ vor und nach dem Sprung, um damit zu überprüfen, ob der Sprung bereits in den Daten des Potentials sichtbar ist, oder ob er ein Effekt der Potentialparameter-Bestimmung beim Fit des Potentials ist.²⁵ Da die Änderung des Potentials in diesem Bereich jedoch so gering ist, dass sie nicht dargestellt werden kann,

²⁵Eine Untersuchung von $V(r, t)$ ist hier nicht möglich, weil diese Größe von den Methoden 2.1 und 2.2 nicht genutzt wird.

soll hier ein anderer, aber äquivalenter Weg gewählt werden. In folgender Abbildung soll die *Differenz* der Potentiale $V_{\text{diff}}(r) = V_a(r) - V_b(r)$ bei verschiedenen Smearing-Levels dargestellt werden. Die $V_i(r)$ sind dabei die Potentiale beim Smearing-Level i . Dabei soll immer die Differenz zwischen zwei benachbarten Smearing-Levels in unterschiedlichen Kurven in der Abbildung geplottet werden.

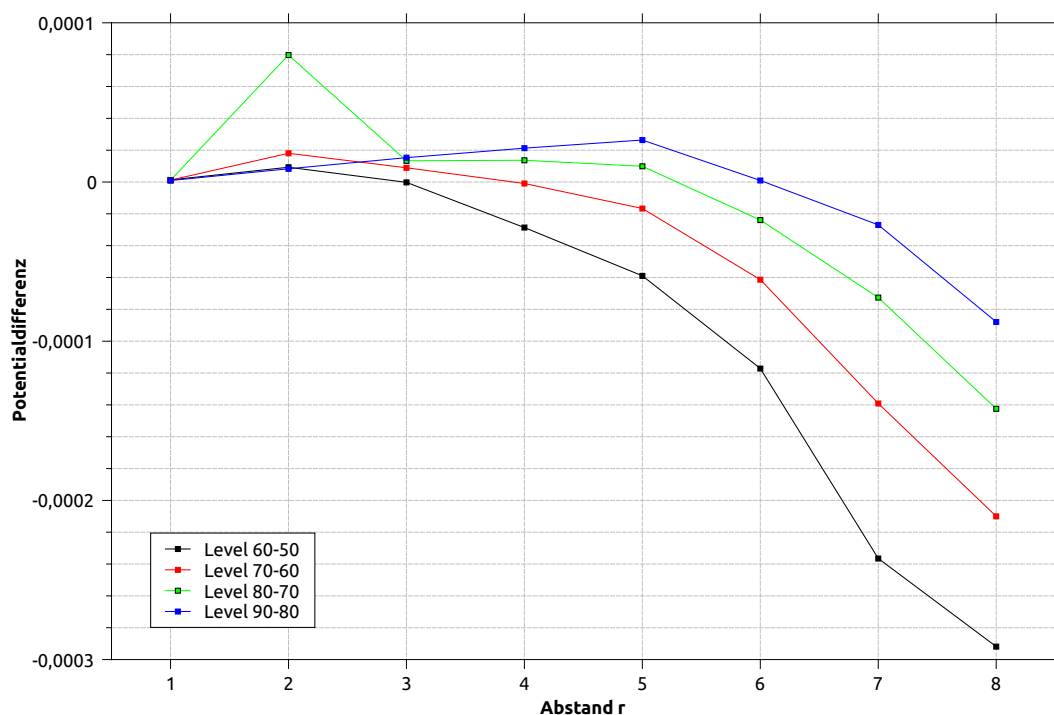


Abbildung 4.3.24.: Darstellung der Differenz zwischen jeweils zwei Potentialen $V(r)$ verschiedener Smearing-Level. Der Übersichtlichkeit wegen wurden die Datenpunkte mit Linien verbunden und Fehlerbalken weggelassen.

Sofort ersichtlich ist der abweichende Wert bei $r = 2$ für die Differenz zwischen den Potentialen V_{70} und V_{80} (grüne Kurve). In diesem Bereich befindet sich auch der fragliche Sprung. Dementsprechend kann der Sprung auf eine Abweichung im Potential zurückgeführt werden. Quantitative Aussagen sind hier allerdings nicht möglich, weil die (hier nicht gezeigten) Fehlerbalken sehr groß sind. Von Interesse war hier aber auch eher eine qualitative Aussage.

Es sei darauf hingewiesen, dass der Sprung bei Methode 2.2 bei Benutzung des erweiterten Potentialmodells kaum zu erkennen war (siehe Abb. 4.3.21) - obwohl auch in jenem Fall das gleiche Potential $V(r)$ genutzt wird, welches lediglich durch eine andere Funktion gefittet wird.

Unterschiedliche Fit-Intervalle bei Methode 1.2

Methode 1.2 extrahiert das Potential $V(r)$ durch linearen Fit des zeitabhängigen Potentials $V(r, t)$ in einem festgelegten Zeitintervall („Plateau-Fit“). Dieses Zeitintervall ist willkürlich gesetzt. Im Prinzip müsste es für jedes Potential $V(r, t)$ passend ermittelt werden. Statt jedoch einen Algorithmus zu entwickeln, wurde ein einfacherer Weg gewählt: Bei Voruntersuchungen wurden verschiedene Intervallgrenzen ausgetestet. Exemplarisch sollen hier nun die Ergebnisse der Methode 1.2 für zwei unterschiedliche Zeitintervalle dargestellt werden.

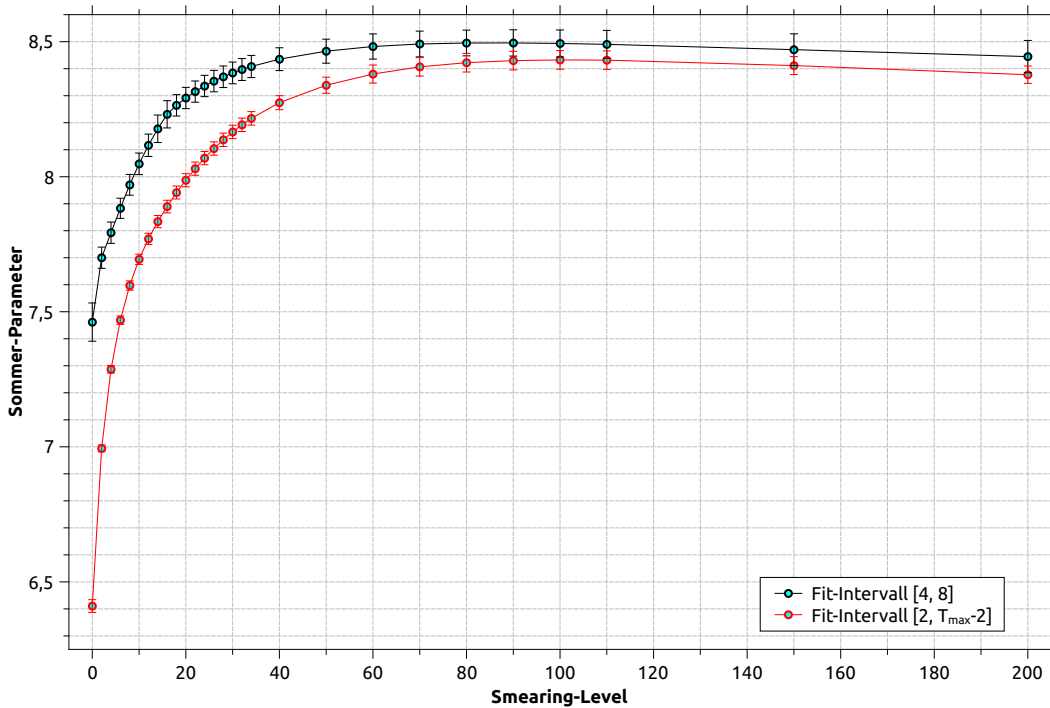


Abbildung 4.3.25.: Darstellung des Sommer-Parameters für Methode 1.2 bei Benutzung verschiedener Fit-Intervalle. Für die Auswertung der bisherigen und der folgenden Daten wurde und wird das Intervall $[4, 8]$ genutzt.

Wichtigste Beobachtung ist, dass der Sommer-Parameter bei Benutzung des Intervalls $[2, T_{\max} - 2]$ weitaus langsamer konvergiert und systematisch kleiner ist. Insbesondere für kleine Smearing-Levels liefert die Benutzung dieses Intervalls dann weitaus kleinere r_0 -Werte als bei den anderen Methoden.

4.3.4. Verhalten des Potentials $V(r)$

Das Potential $V(r)$ ist eine physikalische Messgröße, die von jeder Methode berechnet werden muss. Durch einen Fit können dann die Potentialparameter bestimmt werden, aus denen der Sommer-Parameter berechnet wird. Allein deshalb bietet sich schon eine genauere Untersuchung des Potentials $V(r)$ an.

Zusätzlich jedoch kann die Betrachtung des Potentials auch weitere Informationen erbringen, die durch den Fit zur Bestimmung der Potentialparameter verloren gehen. Andererseits können auch Effekte, die allein durch diesen Fit entstehen, als solche ausgemacht werden. Diese Effekte sind dann lediglich bei den Potentialparametern und dem Sommer-Parameter, nicht aber beim Potential sichtbar.

4.3.4.1. $V(r)$ für alle Methoden

Zunächst soll eine Darstellung der Potentiale aller Methoden folgen. Die Potentiale der ersten drei Methoden 1.1a, 1.1b und 1.1c werden vom Programm durch dasselbe Verfahren ermittelt, weshalb diese Methoden in einer Abbildung als Methode 1.1 zusammengefasst werden können. Damit die Abbildungen übersichtlich bleiben, werden nur Potentiale ausgewählter Smearing-Levels dargestellt. Eine Untersuchung einzelner Potentialpunkte für *alle* gemessenen Smearing-Levels folgt im nächsten Abschnitt. Die dargestellten Kurven in den Abbildungen stellen das Standard-Potential

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + \sigma r$$

dar. Die Werte für die Potentialparameter sind die gleichen, die auch vom Analyseprogramm zur Ermittlung des Sommer-Parameters genutzt wurden.

Zusätzlich soll zu jedem Potential auch der letzte Potentialpunkt bei $r = 8$ dargestellt werden, weil dort die Abweichungen der Potentiale verschiedener Smearing-Levels am deutlichsten sichtbar ist. Zudem kann an diesen Abbildungen die Größenordnung des statistischen Fehlers abgelesen werden. Dies ist in den Potential-Plots meist nicht möglich, weil die Fehler der Potentiale sehr klein sind.

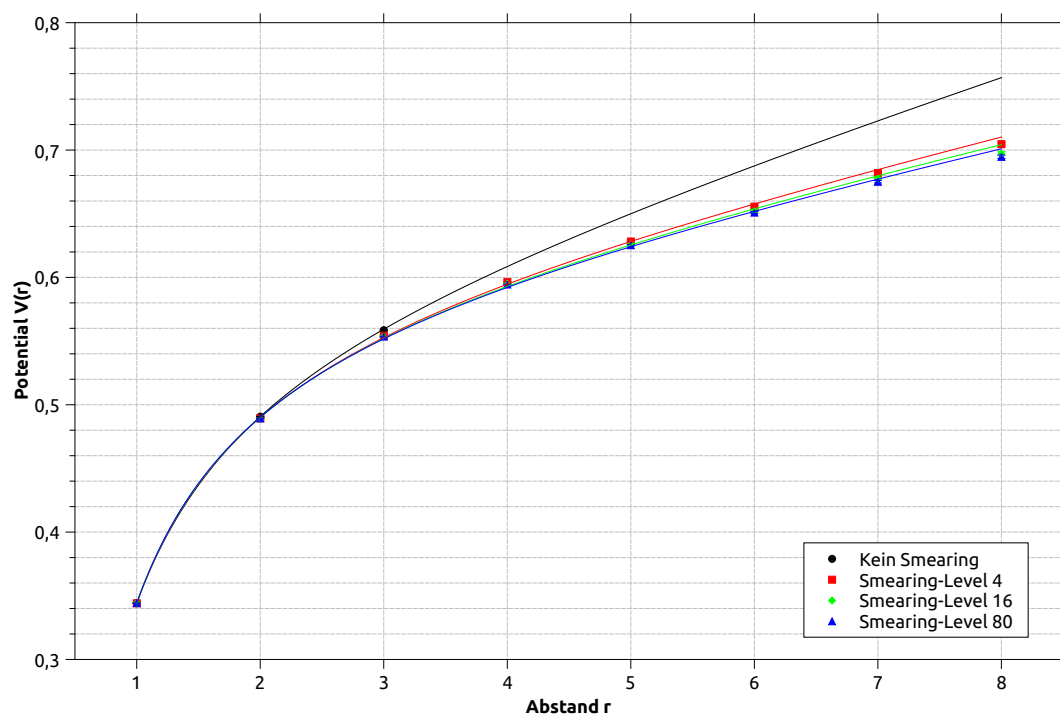


Abbildung 4.3.26.: Potentialverlauf der Methode 1.1.

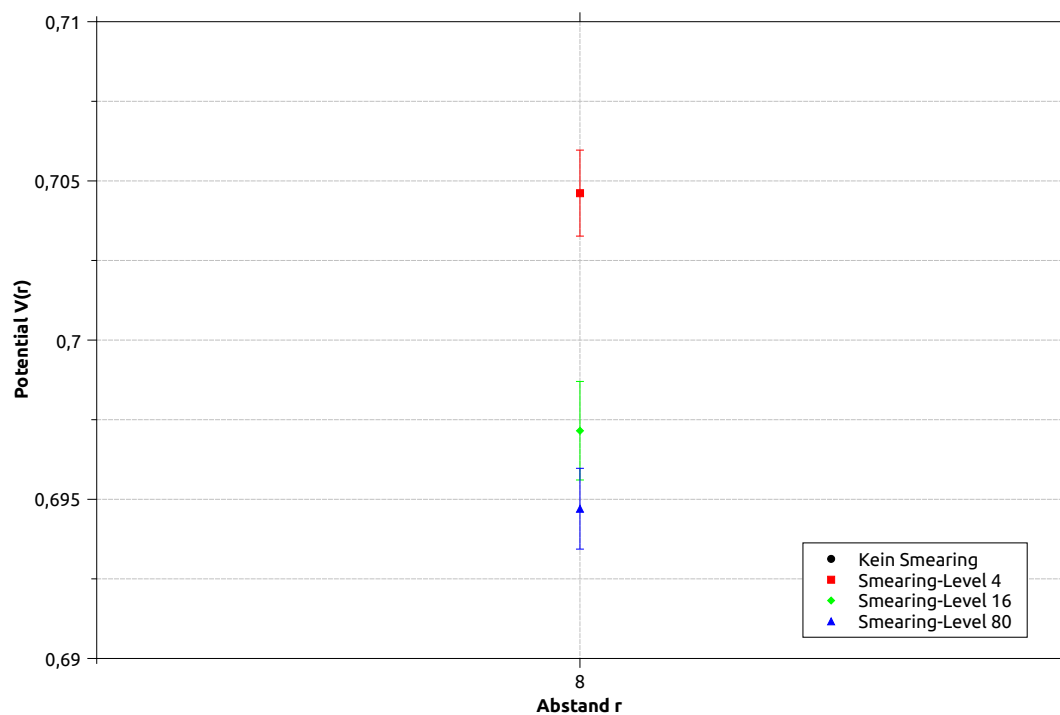


Abbildung 4.3.27.: Potential bei $r = 8$ für die Methode 1.1.

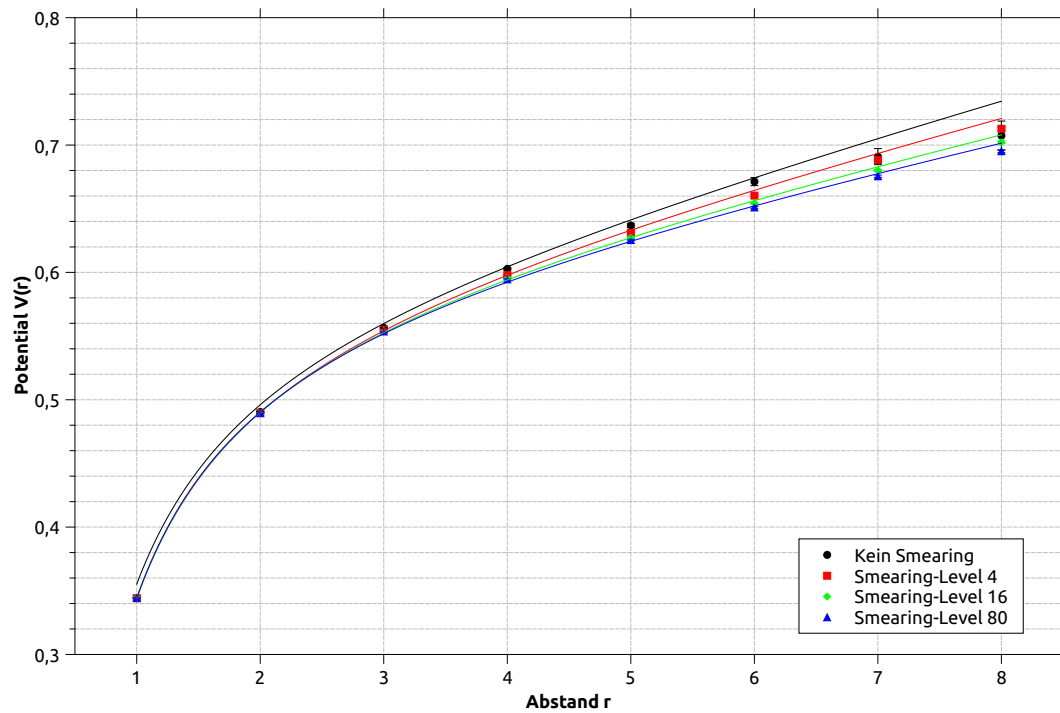


Abbildung 4.3.28.: Potentialverlauf für Methode 1.2.

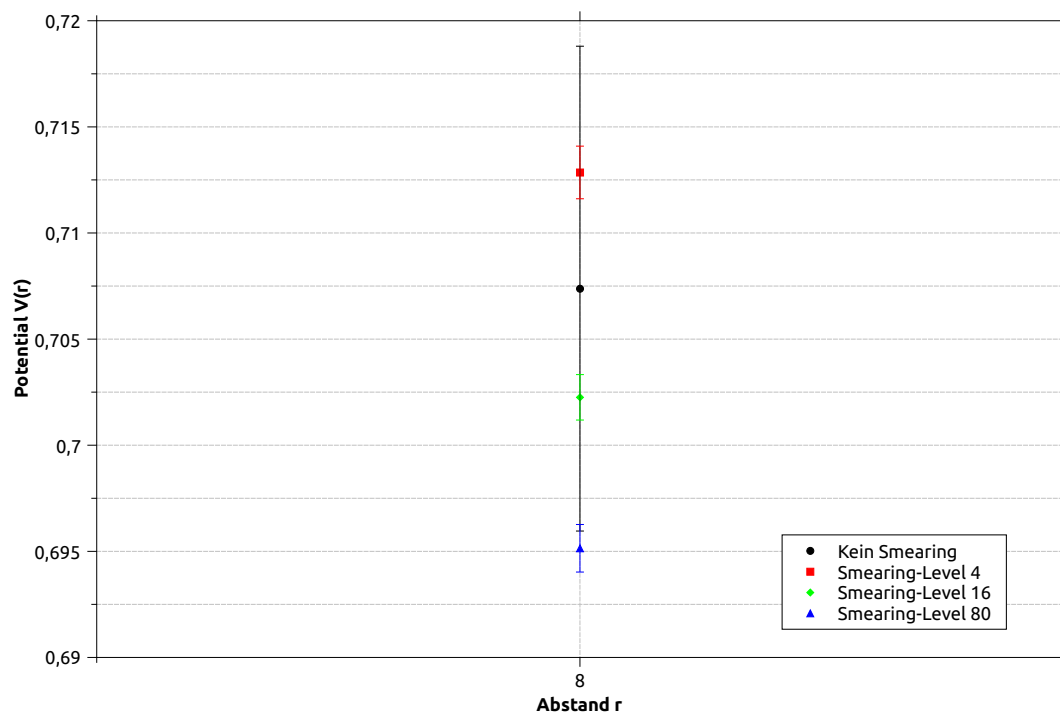


Abbildung 4.3.29.: Potential bei $r = 8$ für Methode 1.2.

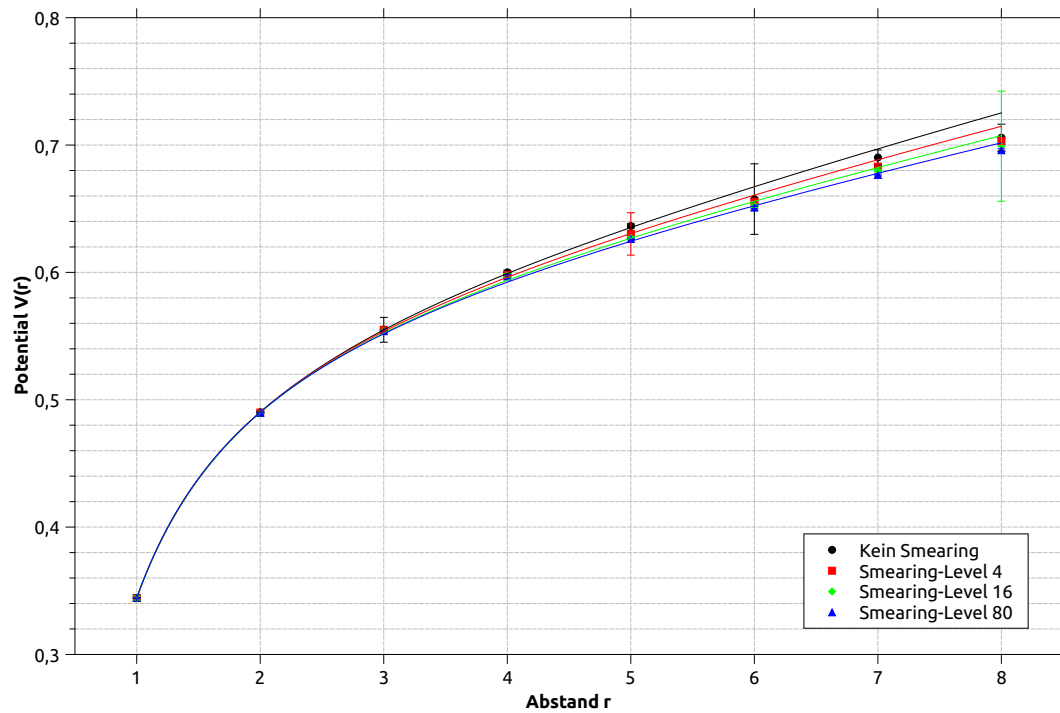


Abbildung 4.3.30.: Potentialverlauf für Methode 2.1.

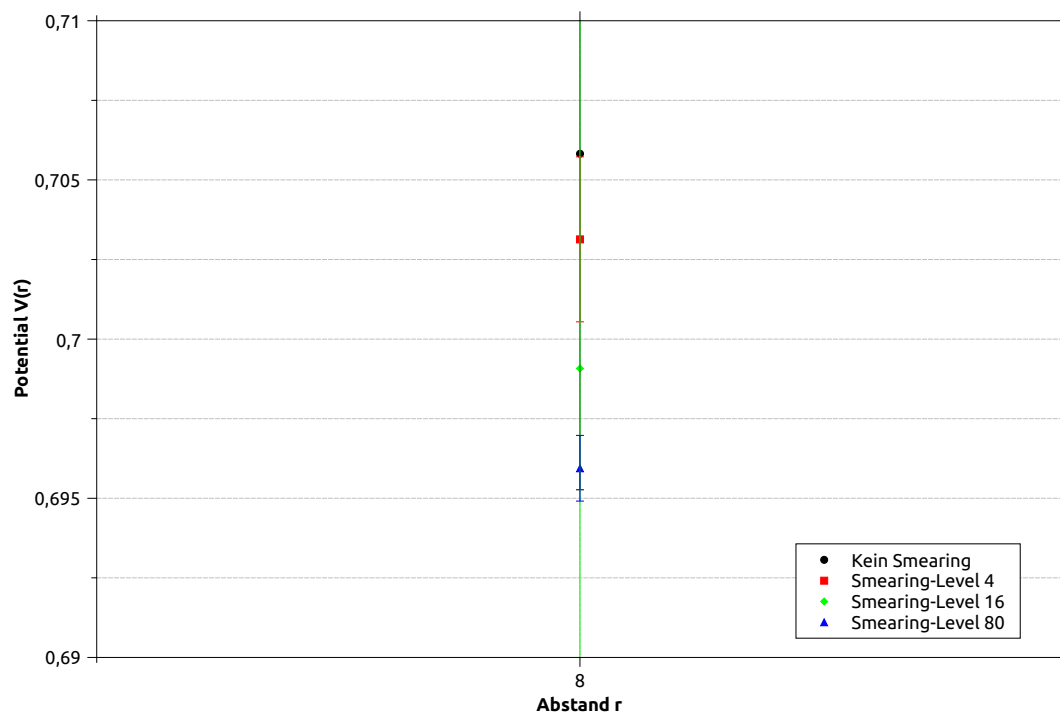


Abbildung 4.3.31.: Potential bei $r = 8$ für Methode 2.1.

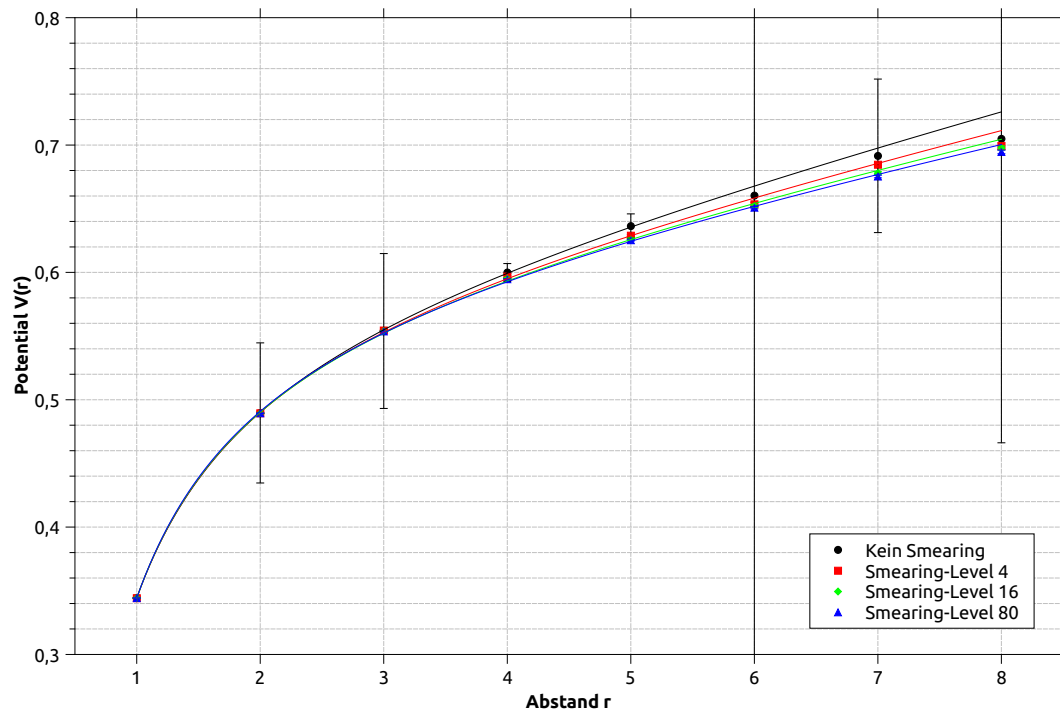


Abbildung 4.3.32.: Potentialverlauf für Methode 2.2.

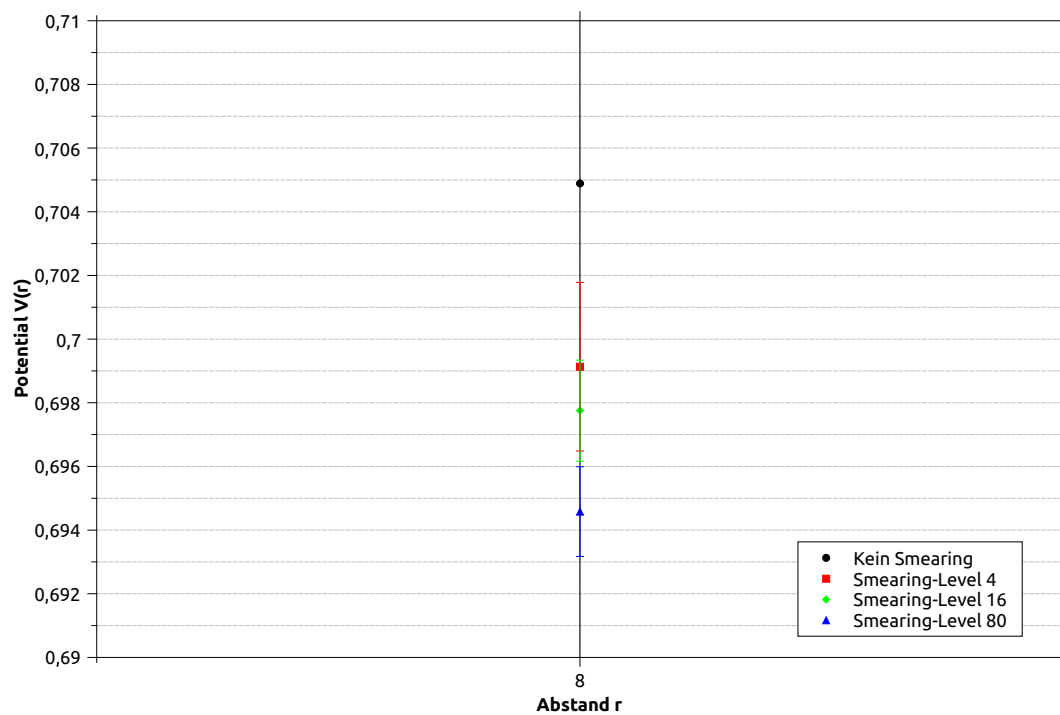


Abbildung 4.3.33.: Potential bei $r = 8$ für Methode 2.2.

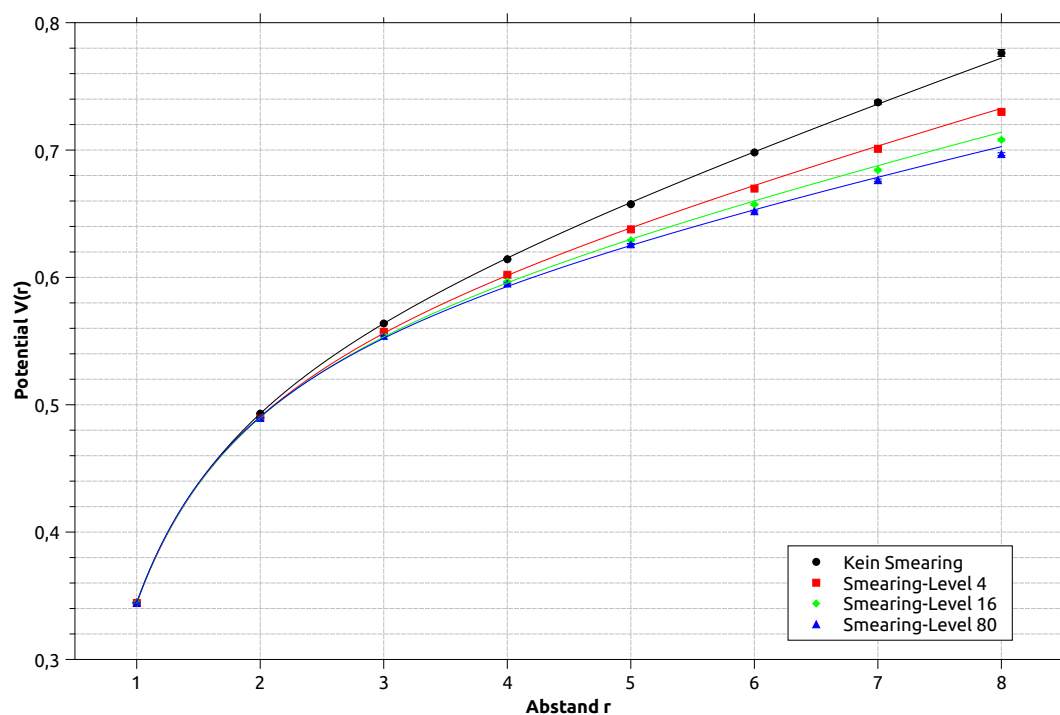
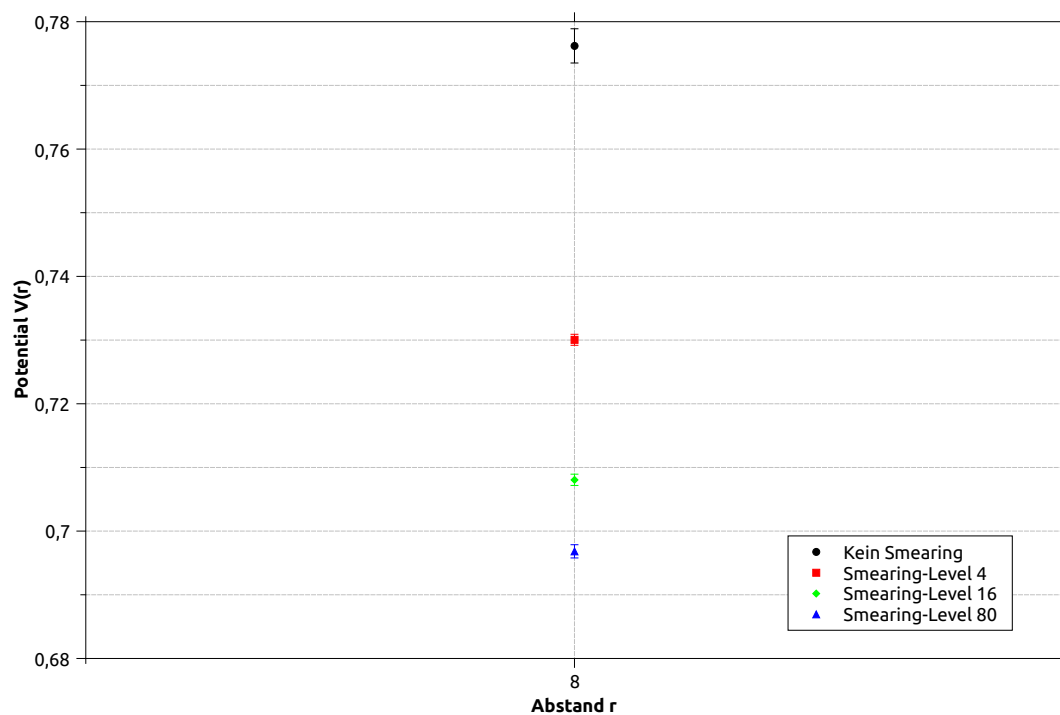


Abbildung 4.3.34.: Potentialverlauf für Methode 3.

Abbildung 4.3.35.: Potential bei $r = 8$ für Methode 3.

Mit Ausnahme des ungeschmierten Potentials der Methode 1.1 zeigen die Potentiale aller Methoden ein stabiles Verhalten. Die ungeschmierten Potentiale sind so instabil, dass diese ab $r = 4$ in der gegebenen Skalierung nicht dargestellt werden können. Auffällig ist, dass die gefittete Kurve des Potentials der Methode 1.1 mit den letzten Potentialpunkten keine sonderlich gute Übereinstimmung zeigt (siehe Abb. 4.3.26).

Der vordere Teil des Potentials, welcher stark durch den Coulomb-artigen Teil bestimmt ist, zeigt in Abhängigkeit des Smearing-Levels bei keiner Methode starke Änderungen. Die Abweichung durch das Smearing wird allerdings umso stärker, je größer der Abstand ist.

Für große Entfernungen und hohe Smearing-Levels sind die Potentiale dann stärker unterdrückt. Diese Systematik wird von allen Methoden reproduziert, was an den Kurven gut zu erkennen ist. Besonders stark zeigt sich dieses Verhalten für die Potentiale der Methode 3 in Abbildung 4.3.34, die zudem auch im ungeschmierten Fall stabile Ergebnisse produziert.

4.3.4.2. Einzelne Potentialpunkte $V(r)$ in Abhängigkeit von r

Zum genauen Verhalten der einzelnen Datenpunkte des Potentials in Abhängigkeit des Smearing-Levels konnte bisher aufgrund der Skalierung keine Aussage getroffen werden. Insbesondere an den Daten kleiner Abstände war keine Veränderung sichtbar. Deshalb soll nun eine Darstellung der einzelnen Potentialpunkte $V(r)$ in Abhängigkeit des Smearing-Levels für alle Abstände r folgen, bei der aufgrund einer anderen Skalierung Unterschiede besser ausgemacht werden können.

Die Untersuchung wird für alle Methoden durchgeführt. Da hier aber lediglich Resultate zum allgemeinen Verhalten des Potentials von Interesse sind, beschränkt sich die folgende Darstellung auf die Präsentation der Ergebnisse von Methode 1.1, weil sich diese bisher als besonders stabil erwies.

Die einzelnen Datenpunkte sollen zur besseren Erkennbarkeit des Verlaufs durch eine Interpolationskurve miteinander verbunden werden. Diese Kurve entspricht einem Fit durch ein Polynom dritten Grades (kubische Interpolation).

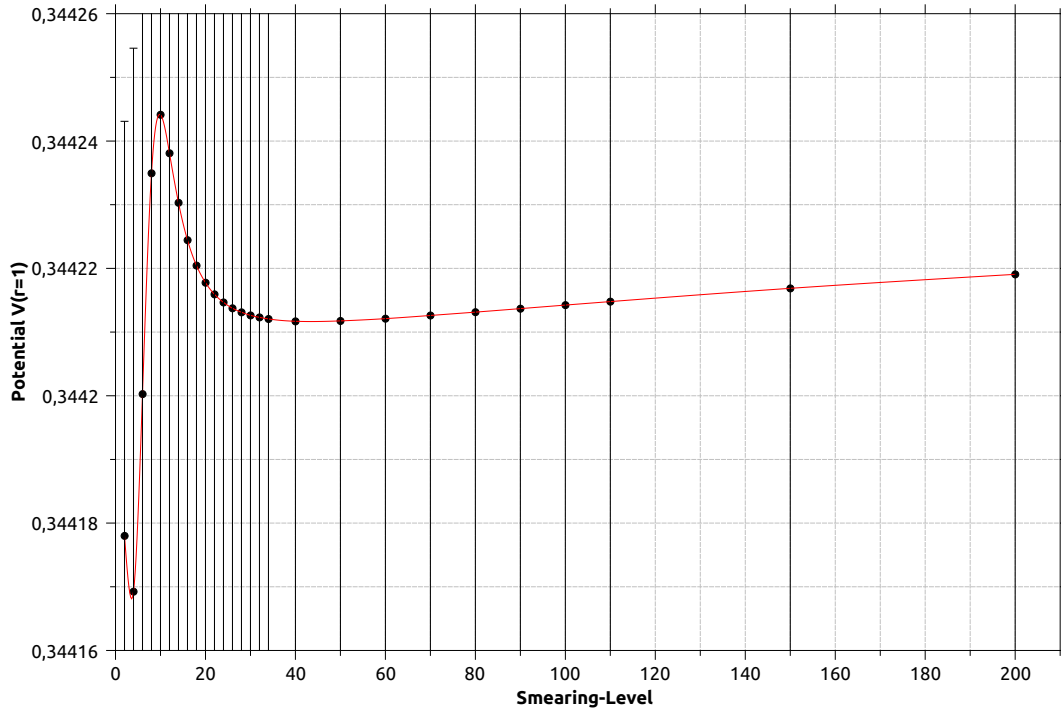


Abbildung 4.3.36.: Potentialpunkt $V(r = 1)$ für Methode 1.1.

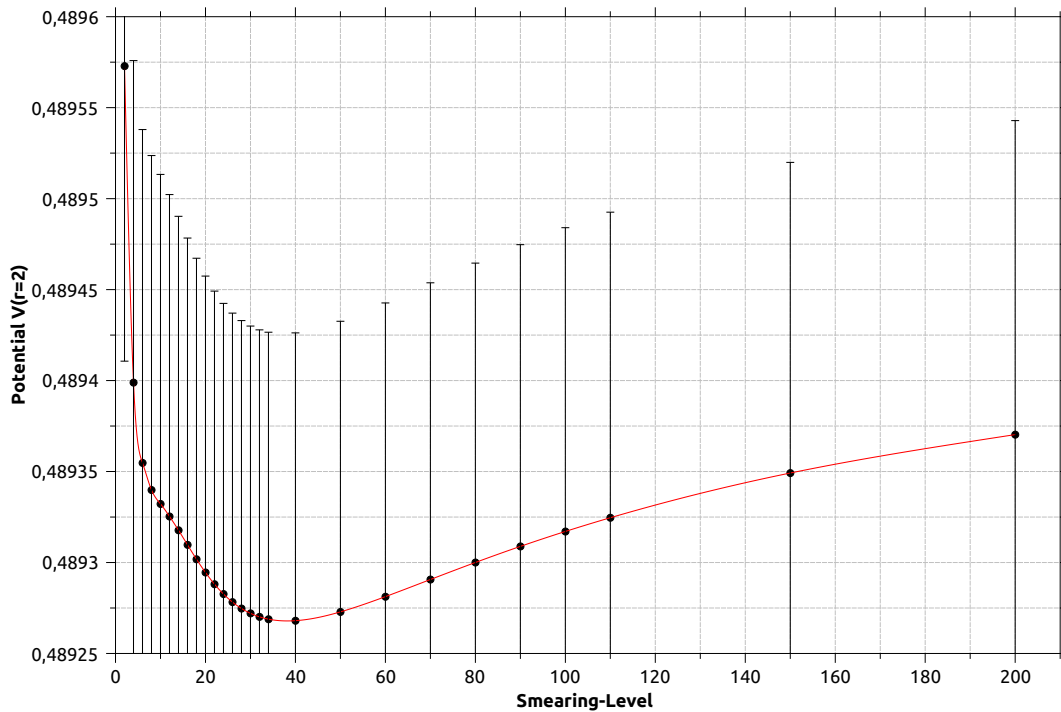


Abbildung 4.3.37.: Potentialpunkt $V(r = 2)$ für Methode 1.1.

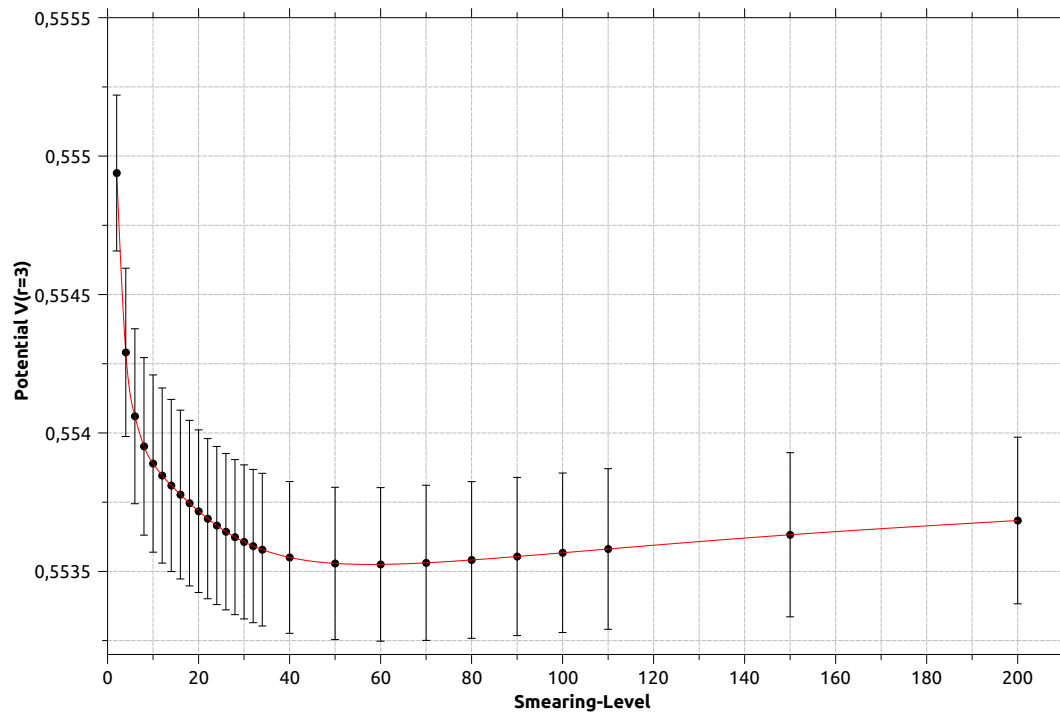


Abbildung 4.3.38.: Potentialpunkt $V(r = 3)$ für Methode 1.1.

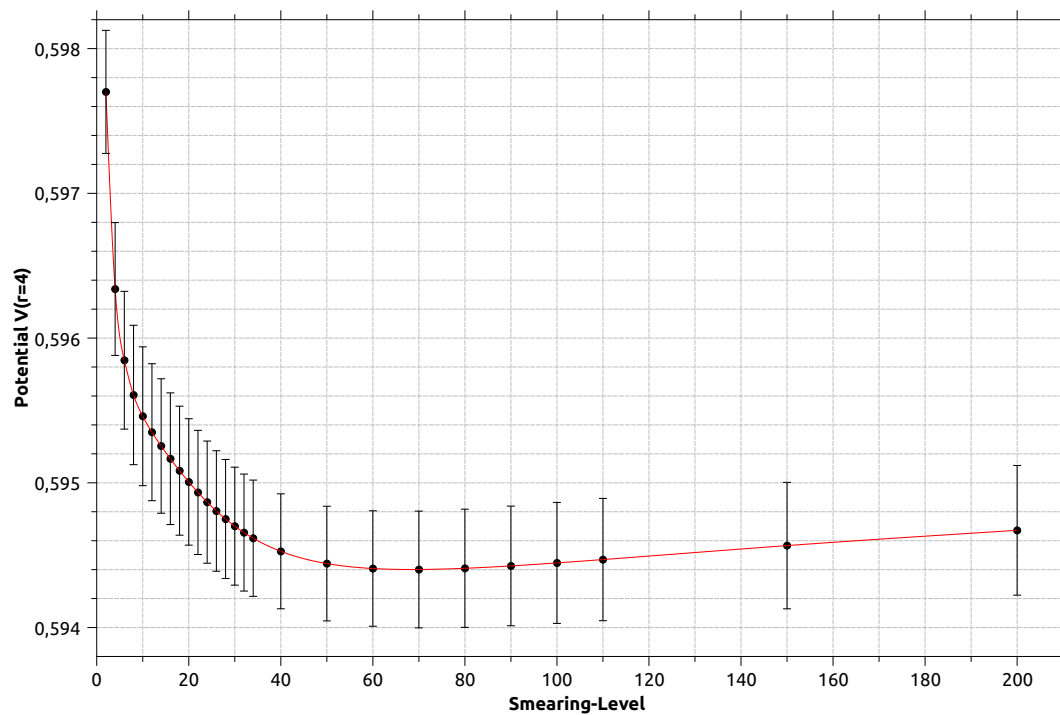


Abbildung 4.3.39.: Potentialpunkt $V(r = 4)$ für Methode 1.1.

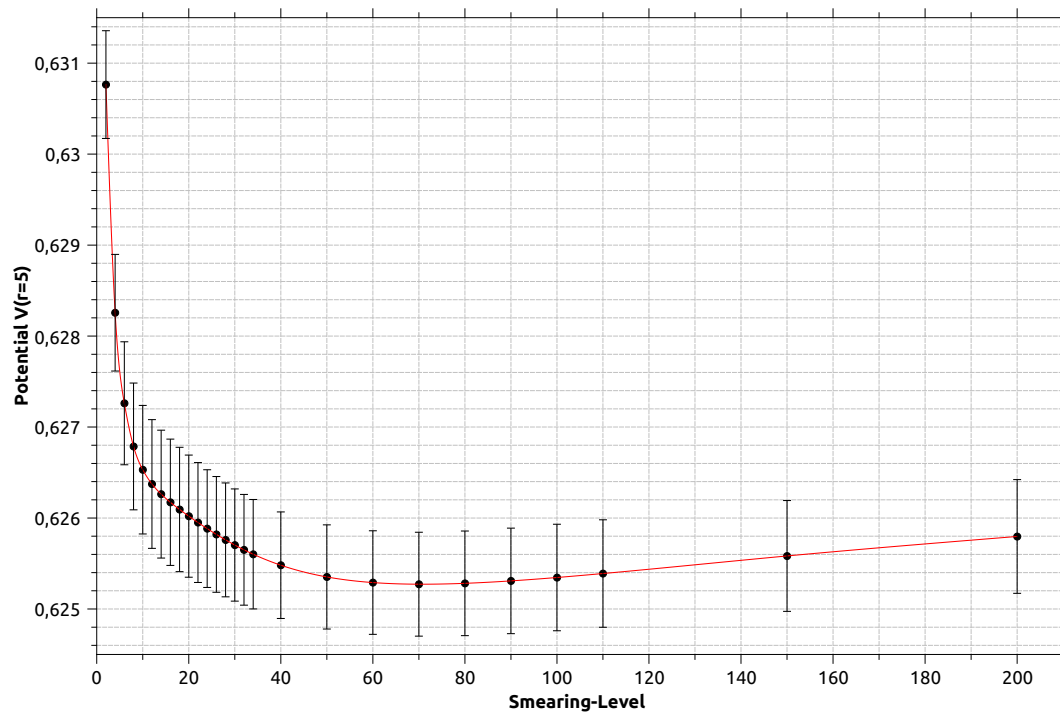


Abbildung 4.3.40.: Potentialpunkt $V(r = 5)$ für Methode 1.1.

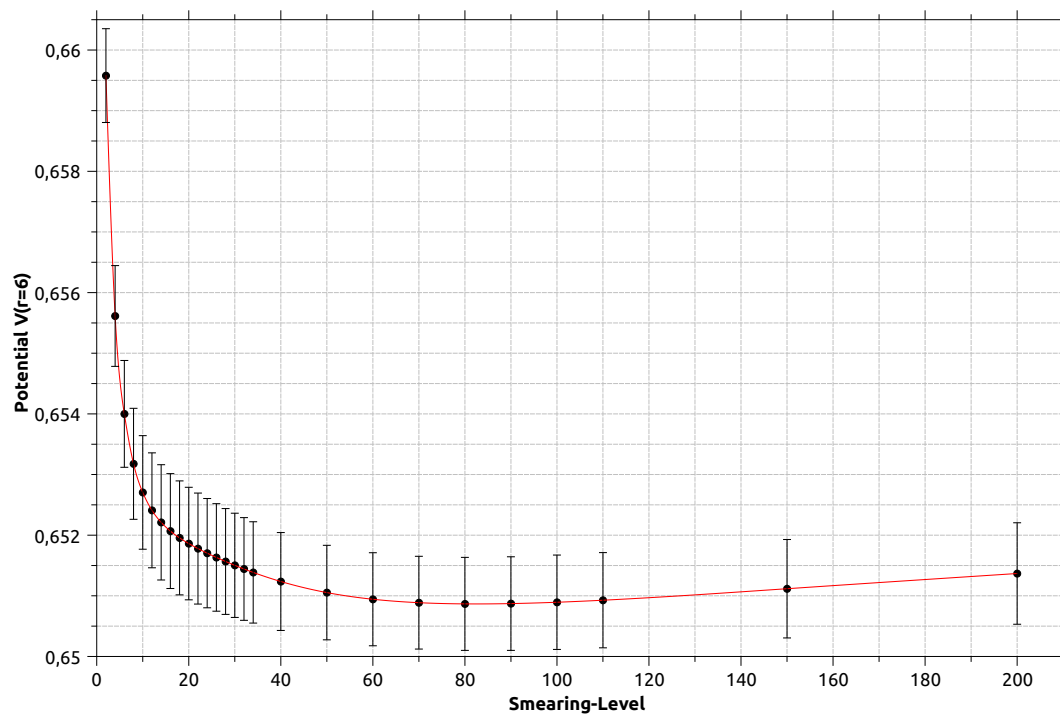
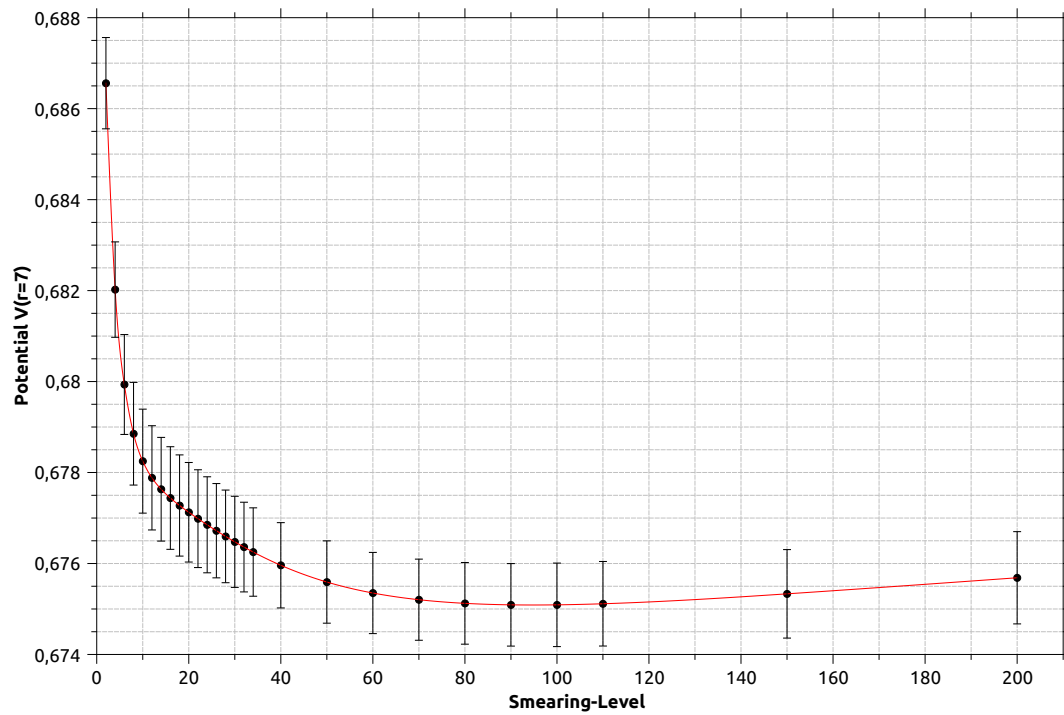
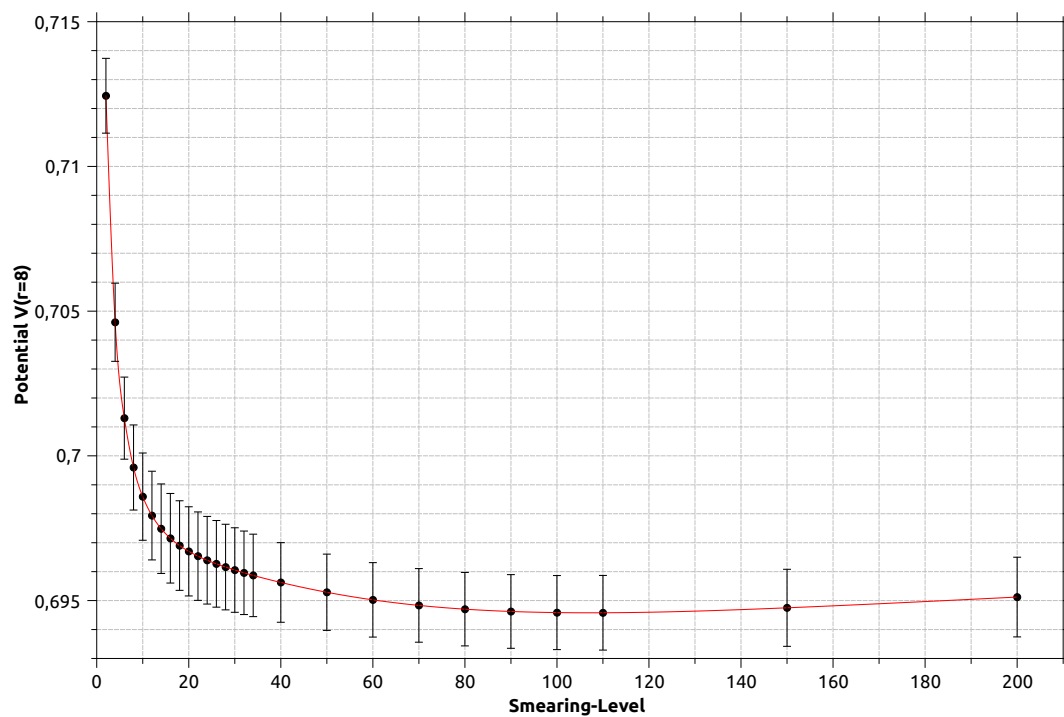


Abbildung 4.3.41.: Potentialpunkt $V(r = 6)$ für Methode 1.1.

Abbildung 4.3.42.: Potentialpunkt $V(r = 7)$ für Methode 1.1.Abbildung 4.3.43.: Potentialpunkt $V(r = 8)$ für Methode 1.1.

Gemeinsam ist allen Potentialpunkten die Tendenz, mit steigendem Smearing-Level zu einem Minimum herabzusinken und danach wieder anzusteigen. Vor allem für kleine Abstände r ist die Reaktion auf das Smearing jedoch äußerst gering, weshalb sie bei der vorherigen Untersuchung auch nicht erkannt werden konnte. Beim Potentialpunkt $V(r = 1)$ beispielsweise ändert sich das Potential lediglich in der fünften Nachkommastelle (siehe Abb. 4.3.36). Aus diesem Grund erscheinen die Fehlerbalken in den Plots für die kleineren Abstände auch weitaus größer als für die größeren Abstände.

Der Potentialpunkt bei $r = 1$ zeigt im Gegensatz zu den anderen Punkten für die kleinsten Smearing-Levels zunächst einen Anstieg bis zum Erreichen eines Maximums. Erst danach zeigt sich das oben beschriebene Verhalten.

Die anderen - hier nicht dargestellten - Methoden zeigen ein ähnliches, wenn auch teilweise instabileres Verhalten.

Zu erkennen ist in den Abbildungen bereits, dass die Minima der Potentialpunkte bei unterschiedlichen Smearing-Levels vorliegen. Interessant dabei ist dessen Lage:

Abstand \ Methode	Methode				
	1.1	1.2	2.1	2.2	3
1	43	14	37	26	16
2	28	31	31	23	31
3	58	46	46	41	46
4	68	57	-	54	58
5	71	66	-	60	67
6	83	75	80	72	78
7	95	85	88	81	86
8	107	93	101	89	97

Tabelle 4.6.: Eingetragen für jede Methode und jeden Abstand r ist das Smearing-Level, bei welchem das Potential $V(r)$ ein Minimum zeigt. Die Minima der Methode 1.1 sind in den Abb. 4.3.36 bis 4.3.43 erkennbar. Bestimmt wurden die Minima durch Ablesen der interpolierten Werte. Datenpunkte, die aufgrund starker Fluktuationen nicht ermittelt werden konnten, sind durch ein „-“ gekennzeichnet.

Ganz bewusst wurden für die Werte in der Tabelle keine Fehler angegeben. Die Fehler der einzelnen Datenpunkte sind an sich bereits so groß, dass keine sichere physikalische Aussage über die Lage des Minimums getroffen werden kann (siehe Abb. 4.3.36 bis 4.3.43).

Es sollte betont werden, dass die gefundenen Minima nur grobe Approximationen darstellen. Dass die Werte aus der interpolierten Kurve abgelesen wurden, also die Minima

bei Punkten gefunden wurden, die im Grunde nicht direkt gemessen wurden, ist mit der Hoffnung begründet, dass die Systematik der Minima hierdurch besser erkennbar ist. Dies ist natürlich nur dann der Fall, wenn die (kubische) Interpolationskurve eine gute Approximation des Verlaufs darstellt. Letztendlich sollen die aus dieser Betrachtung gewonnenen Daten jedoch nur als Idee zum Verhalten des Potentials bei verschiedenen Smearing-Levels verstanden werden.

Die Werte der Tabelle sind in Abb. 4.3.44 grafisch aufgetragen.

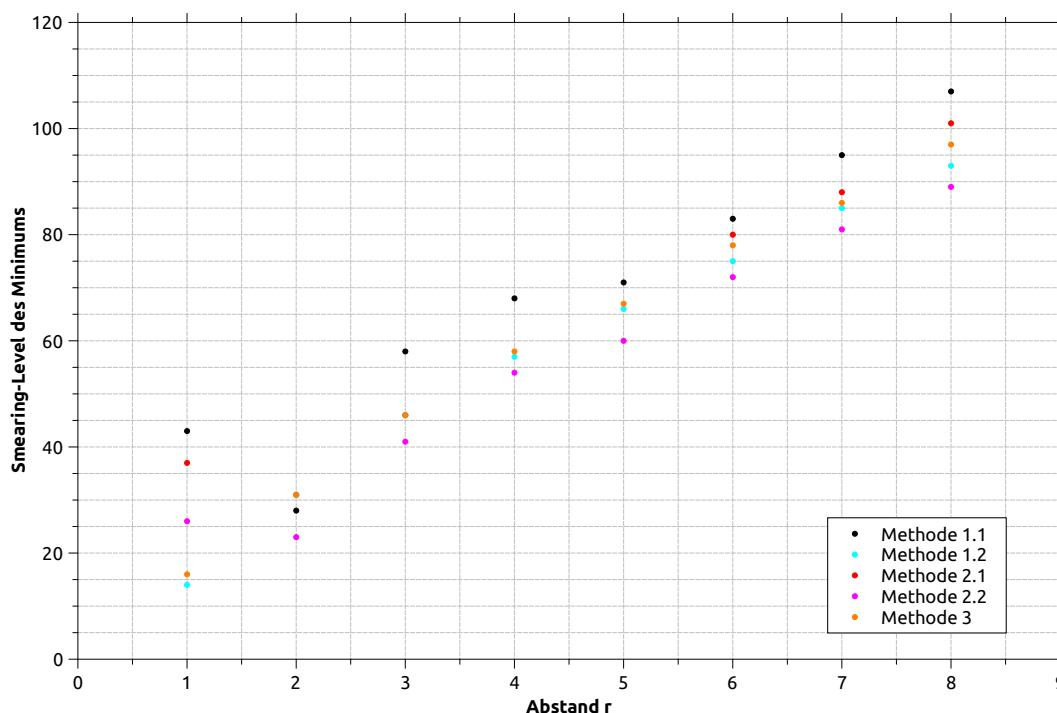


Abbildung 4.3.44.: Darstellung der Werte aus Tabelle 4.6. Aufgetragen sind also die Smearing-Levels, bei denen $V(r)$ bei gegebenem r minimal wird.

Besonders hervorzuheben ist dabei, dass das Potential in Abhängigkeit des Smearing-Levels *nicht* einheitlich sinkt bzw. steigt, wie es die Potentialplots vermuten ließen. Das Smearing-Level, bei welchem ein Potentialpunkt $V(r = \text{const})$ minimal wird, hängt vom Abstand r ab. Im nächsten Abschnitt wird dieses Verhalten am zeitabhängigen Potential $V(r, t)$ noch einmal genauer untersucht.

4.3.5. Verhalten des Potentials $V(r, t)$

Die Werte des zeitabhängigen Potentials $V(r, t)$ werden mit Ausnahme der Methoden 2.1 und 2.2 von allen Methoden zur Extraktion des zeitunabhängigen Potentials $V(r)$ benötigt. Es stellt damit eine noch grundlegendere Größe im Vergleich zu $V(r)$ dar und zeigt insbesondere die Wirkung des Smearings in sehr direkter Weise. Aus diesem Grund soll $V(r, t)$ nun für ausgewählte Smearing-Levels präsentiert werden. Dabei sind zwei verschiedene Verfahren zu untersuchen: jenes, das von den Methoden 1.1 und 1.2 genutzt wird und das, welches in Methode 3 Anwendung findet.

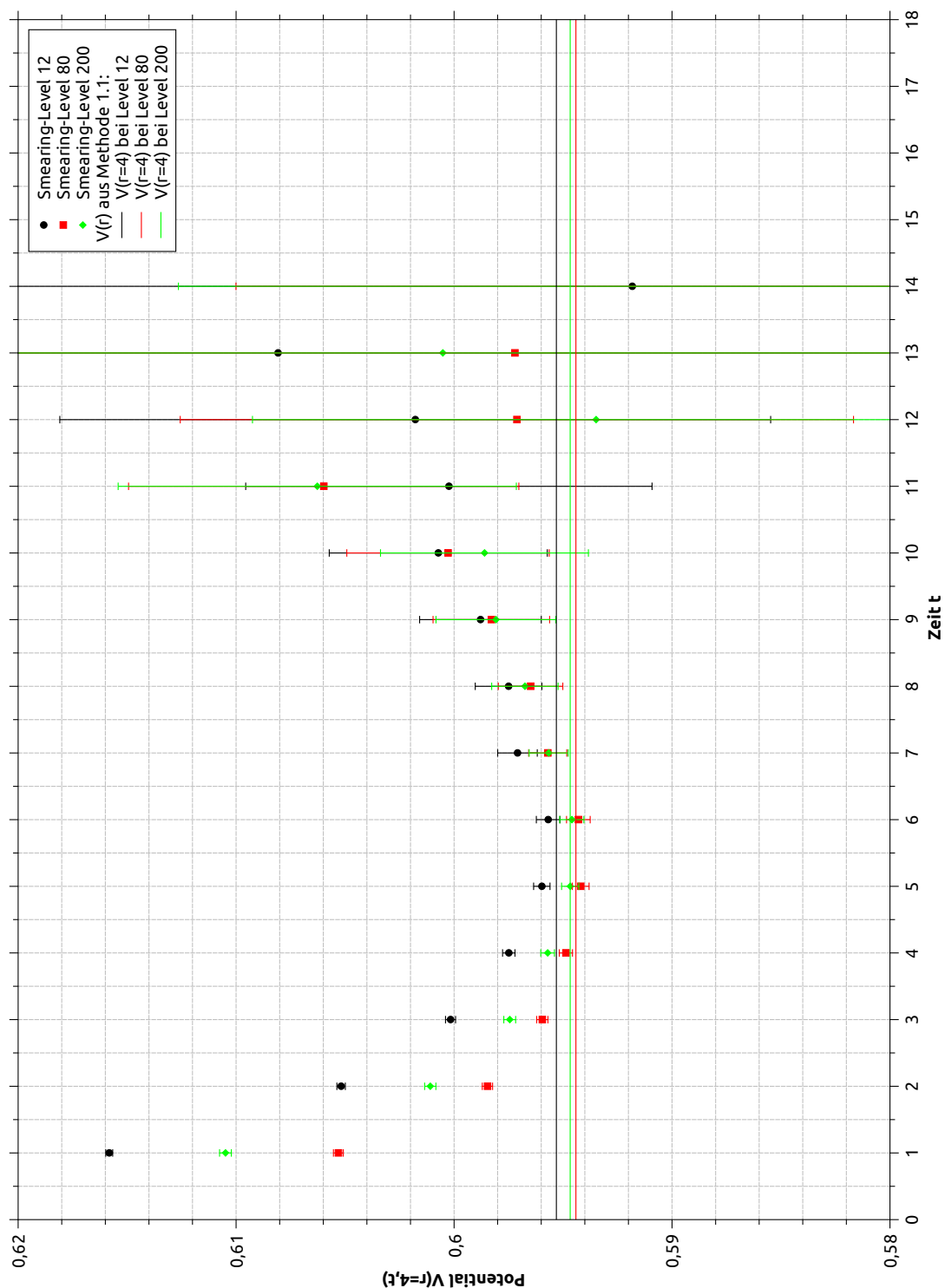


Abbildung 4.3.45.: Zeitabhängiges Potential $V(r, t)$ für $r = 4$, welches von den Methoden 1.1 und 1.2 genutzt wird. Die horizontalen Linien in den nachfolgenden Plots stellen den vom Analyseprogramm ermittelten Wert für das Potential $V(r)$ dar.

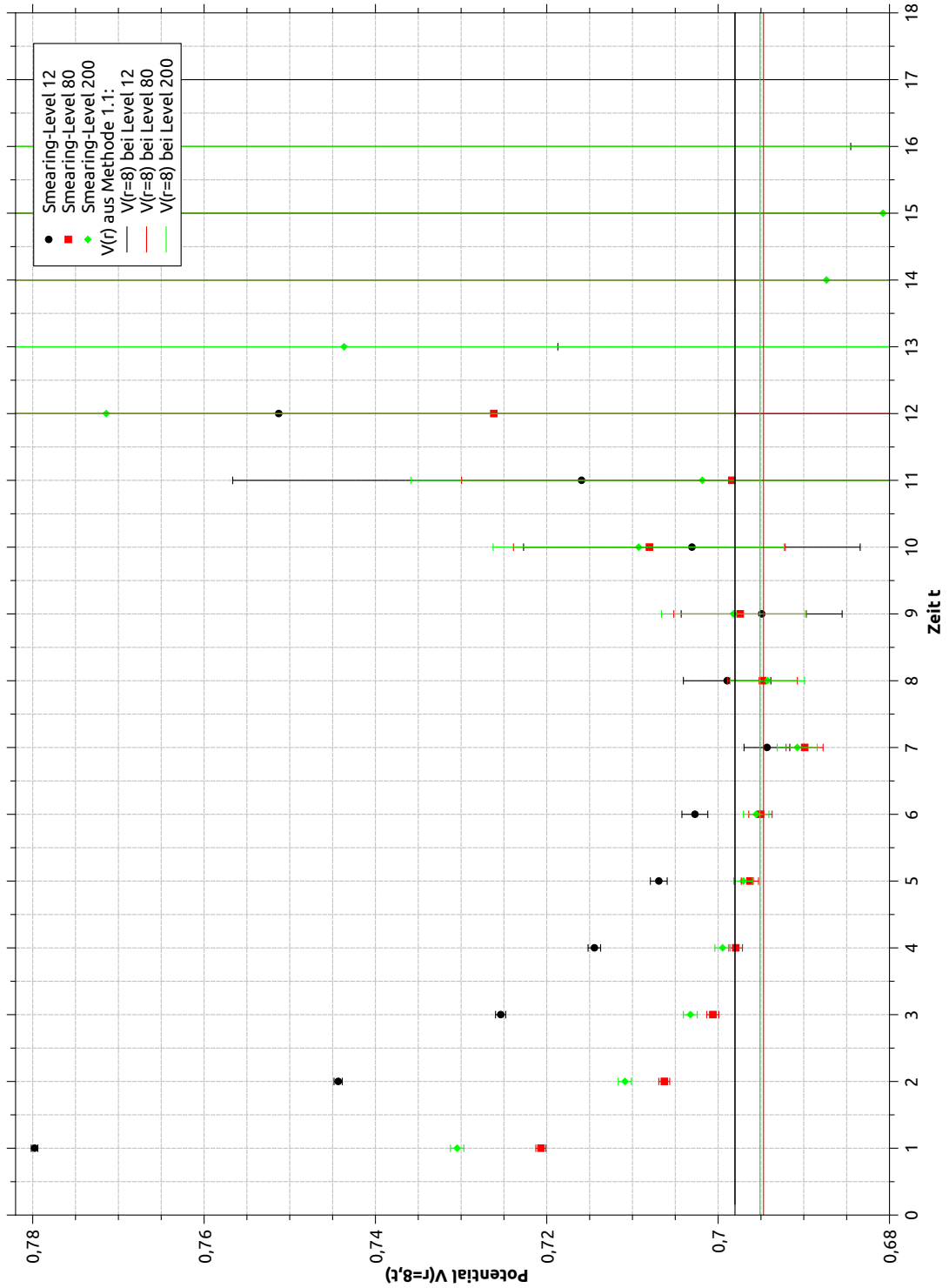


Abbildung 4.3.46.: Zeitabhängiges Potential $V(r, t)$ für $r = 8$, welches von den Methoden 1.1 und 1.2 genutzt wird.

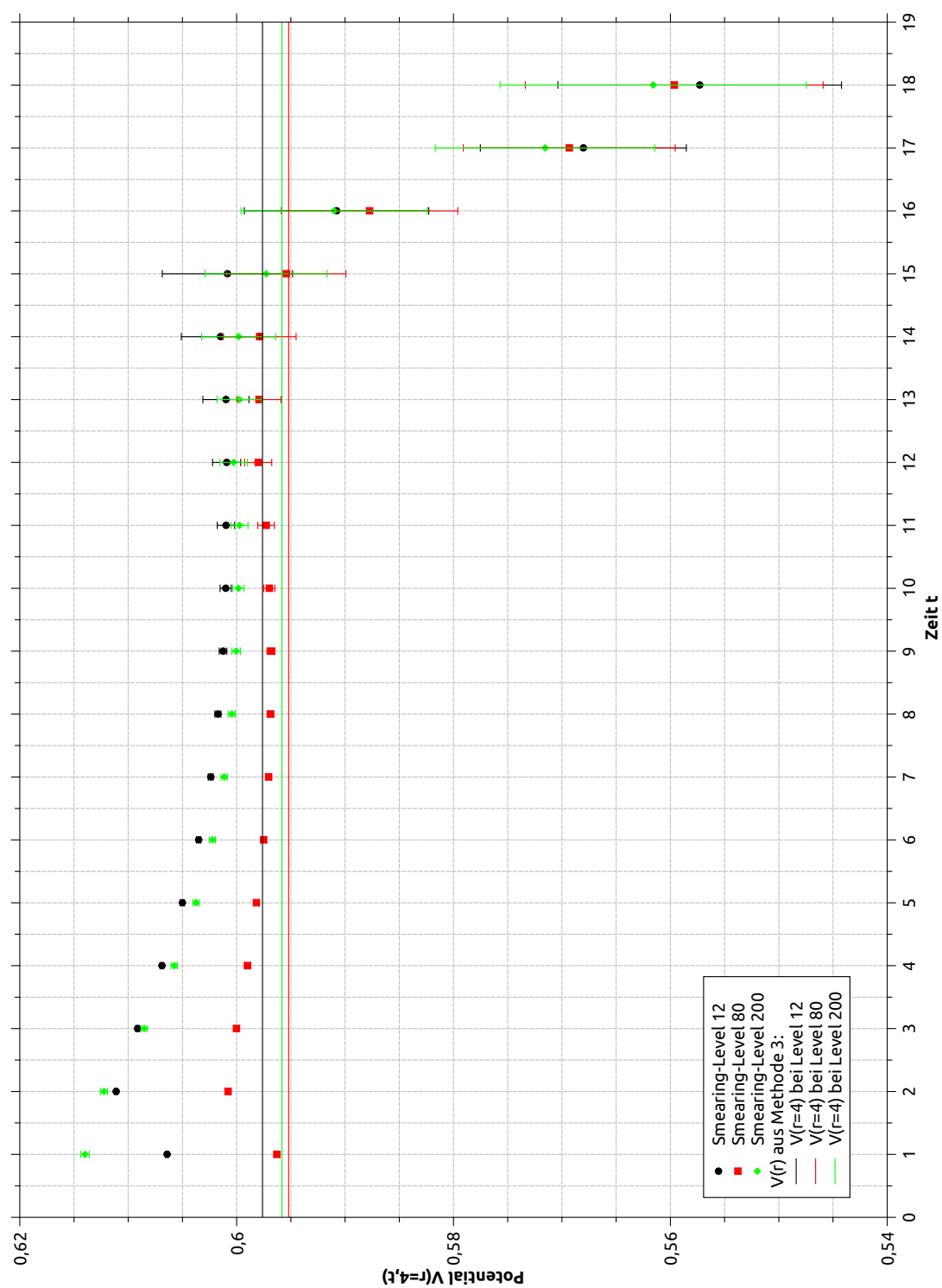


Abbildung 4.3.47.: Zeitabhängiges Potential $V(r, t)$ für $r = 4$, welches von Methode 3 genutzt wird.

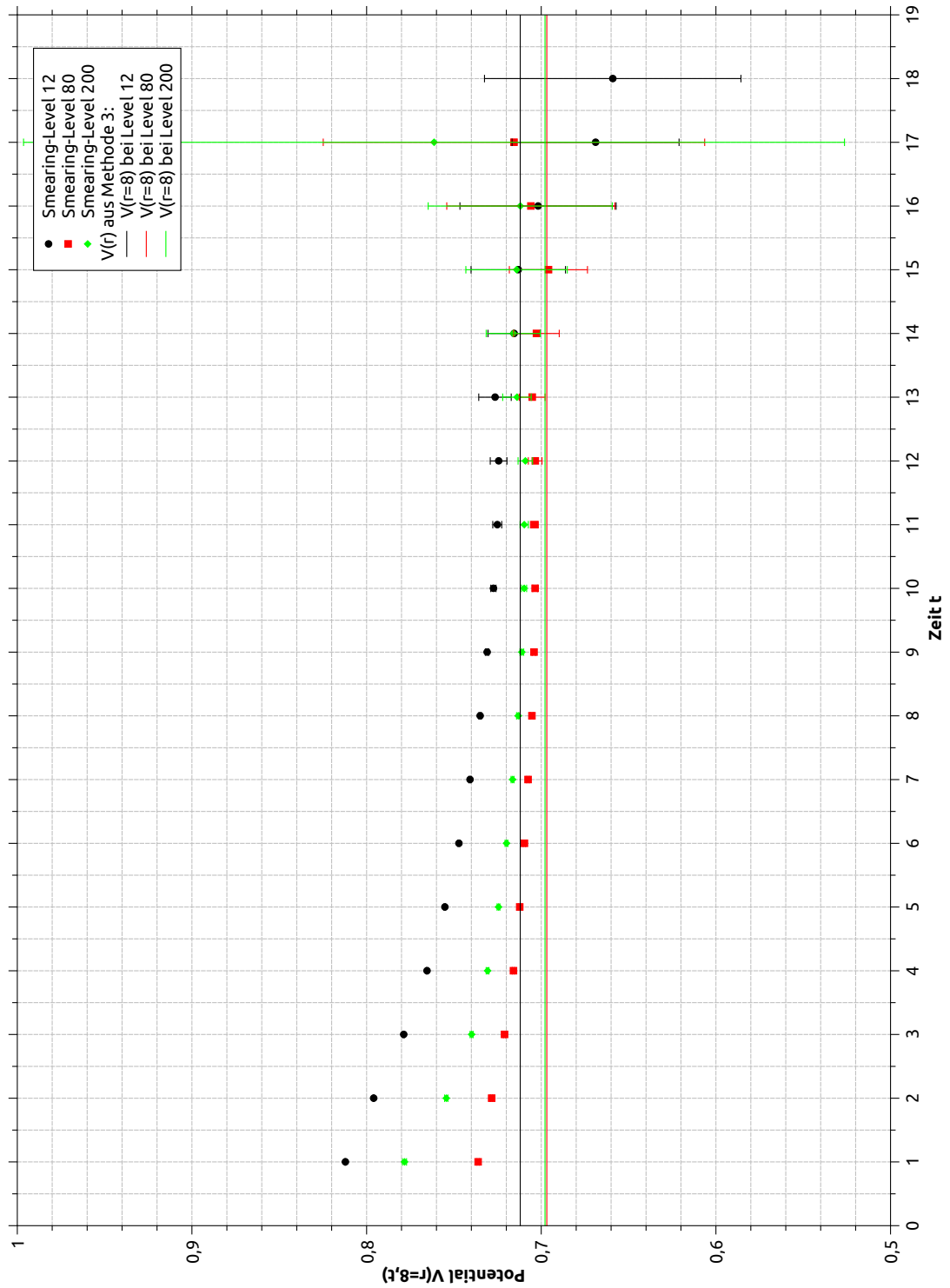


Abbildung 4.3.48.: Zeitabhängiges Potential $V(r, t)$ für $r = 8$, welches von Methode 3 genutzt wird.

In den Abbildungen 4.3.45 bis 4.3.48 ist zu erkennen, dass bei beiden $V(r, t)$ -Bestimmungsmethoden die Erhöhung des zeitabhängigen Potentials für kleine Zeiten zunächst bezüglich des Smearing-Levels absinkt und für sehr hohe Levels wieder ansteigt. Ein solches Absinken des Potentials bei kleinen Zeiten entspricht der Unterdrückung angeregter Zustände. Interessant ist deshalb eine genauere Untersuchung, bei welchem Smearing-Level die Erhöhung am Anfang des Potentials $V(r, t)$ minimal wird. Dieses Level sollte dann einer maximalen Unterdrückung angeregter Zustände entsprechen.

4.3.5.1. Einzelne Potentialpunkte $V(r, t)$ in Abhängigkeit von r

Bei der folgenden Untersuchung soll festgestellt werden, bei welchem Smearing-Level der erste Datenpunkt $V(r, t = 1)$ minimal wird. Dabei sollen separat alle Abstände r untersucht werden. Eine Analyse erfolgt beim ersten Datenpunkt $t = 1$, weil hier die Differenz zwischen den verschiedenen stark geschmierten Potentialen $V(r, t)$ maximal ist, wie in den Abbildungen zu erkennen war (siehe zum Beispiel Abb. 4.3.45).

Die Untersuchung ist ganz ähnlich der, die im letzten Abschnitt durchgeführt und in Tabelle 4.6 und Abbildung 4.3.44 präsentiert wurde. Dort wurde für jeden Potentialpunkt $V(r = \text{const})$ separat das Minimum bezüglich des Smearing-Levels gesucht.

Eine quantitative Untersuchung wird hier lediglich für jenes $V(r, t)$ durchgeführt, welches von den Methoden 1.1 und 1.2 verwendet wird. Qualitativ zeigt aber auch das von Methode 3 genutzte $V(r, t)$ ein ähnliches Ergebnis.

Die Untersuchung des zeitabhängigen Potentials $V(r = \text{const}, t = 1)$ in Abhängigkeit des Smearing-Levels zeigt qualitativ das gleiche Verhalten wie die Untersuchung von $V(r = \text{const})$. Auch hier zeigen die Potentialpunkte ein Absinken zu einem Minimum mit anschließendem Anstieg. Im Gegensatz zur $V(r)$ -Untersuchung zeigen die Datenpunkte des zeitabhängigen Potentials $V(r, t)$ allerdings einen bedeutend kleineren Fehler, was auf die grundlegendere Natur von $V(r, t)$ zurückzuführen ist. Deshalb ist die Bestimmung der Minima hier weitaus zuverlässiger als noch beim Potential $V(r)$.

Die Abbildungen der Potentialpunkte $V(r, t)$ sind der Übersichtlichkeit wegen nicht hier, sondern im Anhang zu finden (siehe A.1 auf S. 213ff.).

Die Minima wurden an den (kubischen) Interpolations-Kurven abgelesen. Die zugehörigen Abbildungen sind im Anhang durch A.1.1 bis A.1.8 gegeben.

Abstand	Methoden 1.1 und 1.2
1	9.3
2	24.0
3	35.4
4	44.6
5	52.3
6	59.1
7	65.3
8	71.5

Tabelle 4.7.: Eingetragen für jeden Abstand r ist das Smearing-Level, bei welchem das Potential $V(r, t = 1)$ ein Minimum zeigt.

Dieses Ergebnis ist ganz ähnlich dem, das in Tabelle 4.6 und Abb. 4.3.44 dargestellt wurde. Das zeitabhängige Potential $V(r, t)$ ist allerdings von weitaus grundlegenderer Natur, weil es im Gegensatz zum Potential $V(r)$ direkt aus den Wilson-Loops bestimmt wird und hängt dementsprechend von weniger vielen Faktoren ab. Dadurch ist diese Bestimmung hier weitaus genauer möglich.

Dennoch: Es sei auch hier wieder darauf hingewiesen, dass die Minima an der Interpolationskurve abgelesen wurden und dass dementsprechend die Qualität der Daten davon abhängt, wie gut die Interpolation der Daten den tatsächlichen Potentialverlauf approximiert. Da hier keine quantitativen Aussagen getätigt werden sollen, wurden hier sogar nicht-ganzzahlige Smearing-Level für die Positionen der Minima ermittelt.

Abhängig vom Grad, in dem die interpolierten Daten mit dem tatsächlichen Verlauf übereinstimmen, kann dadurch auf eine klarere Systematik der Positionen gehofft werden (siehe dazu auch Abb. 4.3.49).

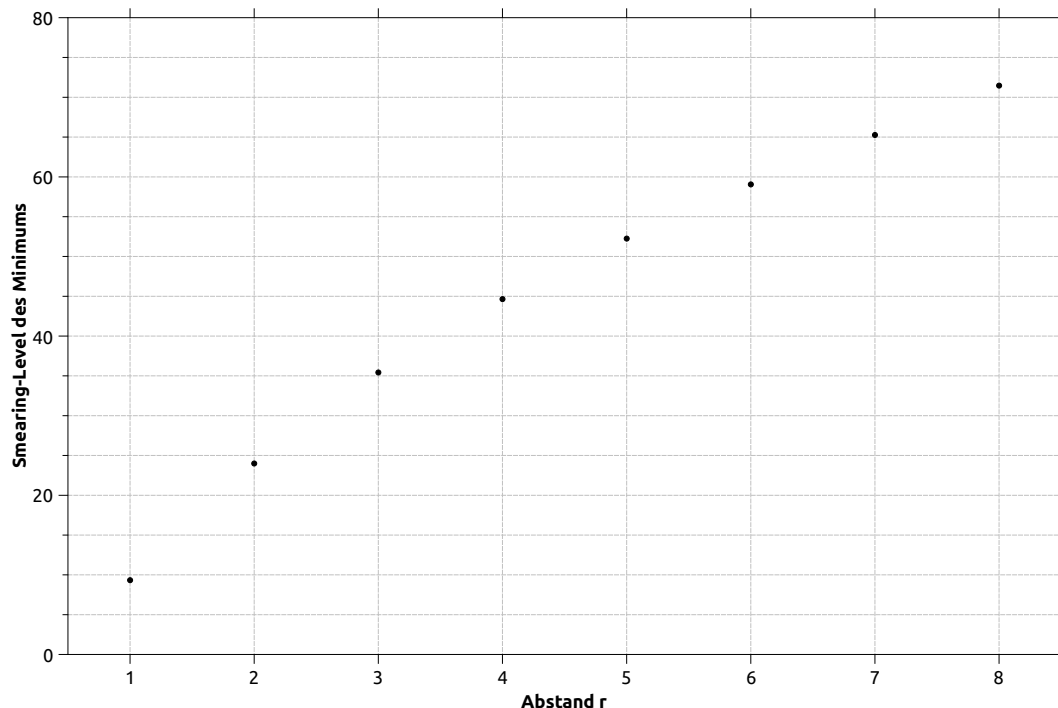


Abbildung 4.3.49.: Darstellung der Minima aus Tabelle 4.7.

Das zentrale Ergebnis dieser Untersuchung soll also die ungefähre Kenntnis derjenigen Smearing-Levels sein, bei denen die angeregten Zustände im Potential in Abhängigkeit des Abstandes r am stärksten unterdrückt sind.

4.3.6. Verhalten der Potentialparameter

Das allgemeine Verhalten des Potentials wurde in den beiden vorhergehenden Abschnitten dargelegt. Es ist in der einfachen Darstellung des Potentials bestimmt durch den Coulomb-artigen Anteil B und die String-Tension σ . Diese Parameter, aus denen sich der Sommer-Parameter direkt zusammensetzt, sollen nun in Abhängigkeit vom Smearing-Level dargestellt werden. Der Übersichtlichkeit wegen sollen lediglich die Ergebnisse von Methode 1.1a präsentiert werden. Die - sehr ähnlichen - Ergebnisse der anderen Methoden sind im Anhang zu finden (siehe A.1 auf S. 213ff.).

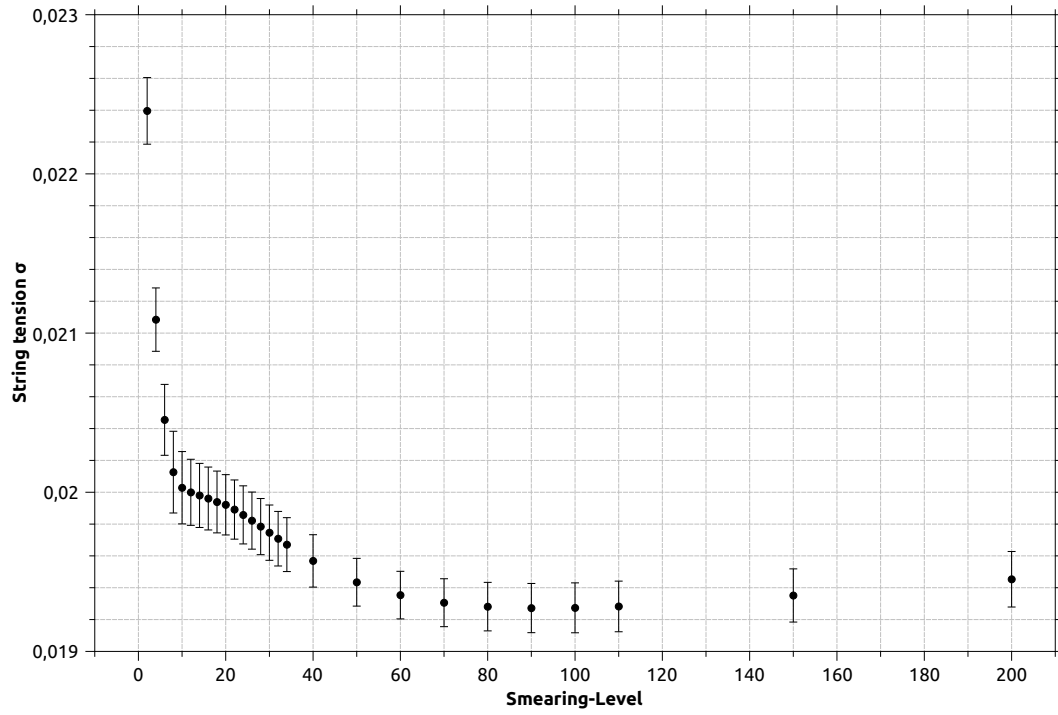


Abbildung 4.3.50.: Darstellung der String-Tension σ für Methode 1.1a.

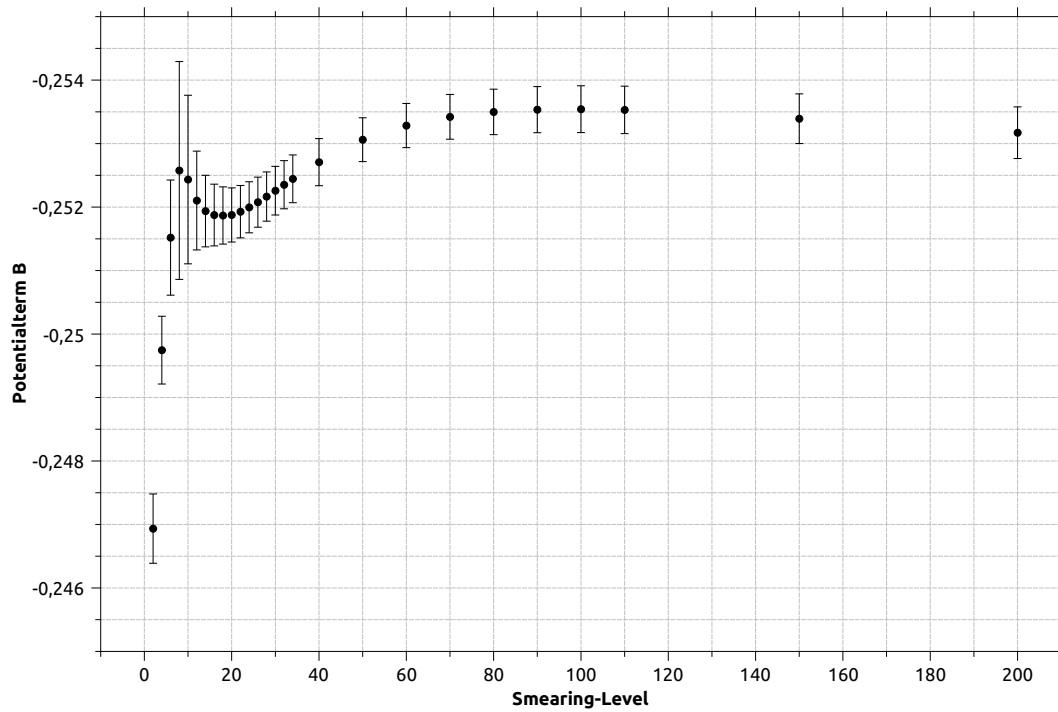


Abbildung 4.3.51.: Darstellung des Coulomb-artigen Parameters B für Methode 1.1a.

Es sei darauf hingewiesen, dass die Skala des (negativen) Parameters B invertiert dargestellt wurde. Das hat den Vorteil, dass intuitiv ersichtlich ist, ob B betragsmäßig absinkt oder ansteigt.

Alle Methoden zeigen ein ähnliches Verhalten wie die hier dargestellte Methode 1.1a. Mit steigendem Smearing-Level wächst der Coulomb-Anteil des Potentials an und der String-Tension-Anteil sinkt ab. Einzig der Verlauf des Parameters B für Methode 1.1b, die das erweiterte Potential verwendet, zeigt ein gegenläufiges Verhalten.

Für alle Methoden mit Ausnahme von Methode 2.1 weisen auch in dieser Untersuchung die betrachteten Größen - die beiden Parameter - ein Extremum bei hohen Smearing-Levels auf. Methode 2.1 liefert relativ instabile Parameter und es kann deshalb nicht mit Sicherheit angegeben werden, ob hier ein Extremum existiert.

Das lokale Minimum in obigem Plot von B bei niedrigen Smearing-Levels (Abb. 4.3.51) ist sonst nur noch in Methode 1.1b zu erkennen; die anderen Methoden weisen dieses Minimum nicht auf.

Diese Darstellung soll an dieser Stelle ausreichen. Da der bereits untersuchte Sommer-Parameter in direkter Weise aus den Potentialparametern ermittelt wird, sind hier fundamental neue Erkenntnisse eher nicht zu erwarten.

4.3.7. Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen

Die Erstellung von Konfigurationen für ein Gitter ist eine sehr rechenintensive Aufgabe. Aus diesem Grund ist es von Interesse, zu wissen, wie viele Konfigurationen in etwa benötigt werden, um einen zuverlässigen Wert für die Observable zu erhalten. Deshalb soll hier nun untersucht werden, wie sich die Berechnung des Sommer-Parameters in Abhängigkeit der Konfigurationsanzahl verhält.

Der Schwerpunkt soll dabei auf eine Abschätzung des allgemeinen Verhaltens der unterschiedlichen Methoden gelegt werden, um eine Vorstellung davon zu erhalten, wie schnell der Sommer-Parameter in Abhängigkeit der Konfigurationsanzahl und für die unterschiedlichen Methoden konvergiert.

In allen Untersuchungen, die eine Konfigurationsanzahl N nutzen, die kleiner als die Anzahl der insgesamt gemessenen Konfigurationen ist, wurden jeweils die ersten N Konfigurationen in der Reihenfolge, wie sie erstellt wurden, verwendet.

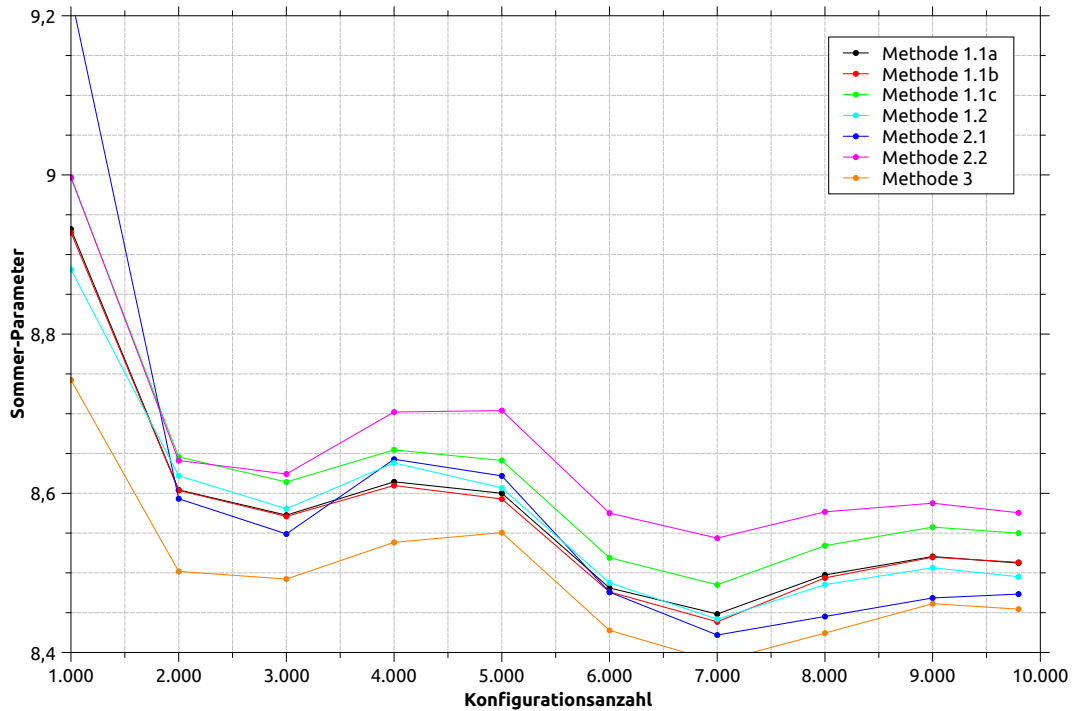


Abbildung 4.3.52.: Darstellung des Sommer-Parameters aller Methoden in Abhängigkeit von der Konfigurationsanzahl bei Smearing-Level 80.

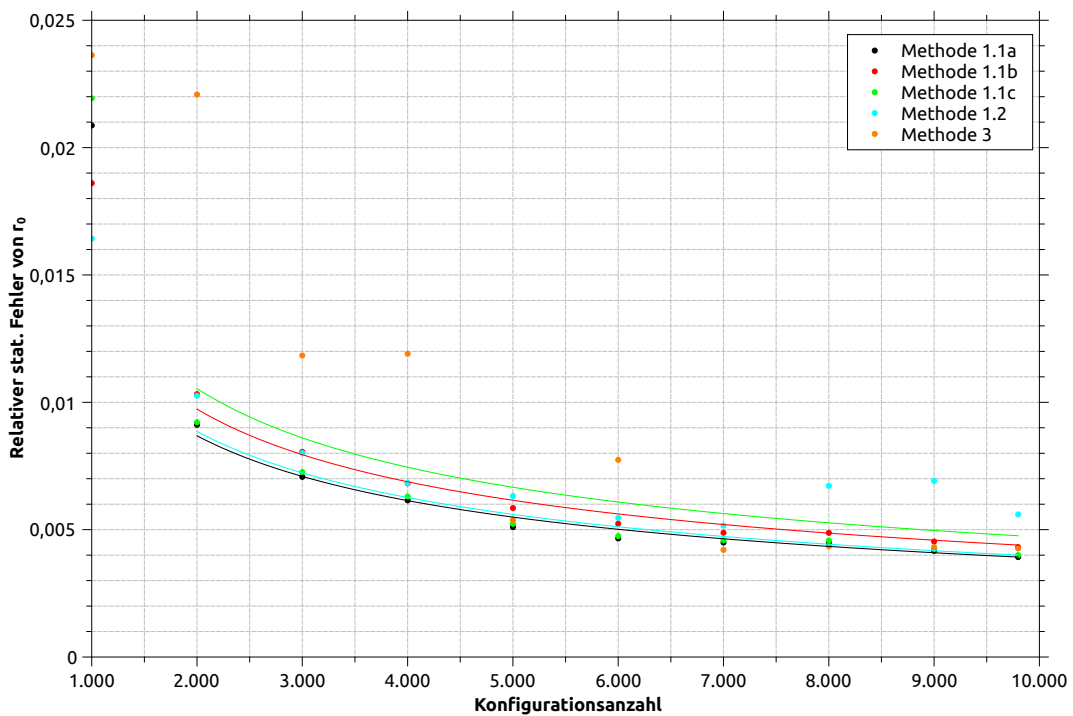


Abbildung 4.3.53.: Plot des relativen statistischen Fehlers von r_0 . Die dargestellten Kurven sind gefittete Funktionen der Form $y(x) = c\sqrt{N}^{-1}$.

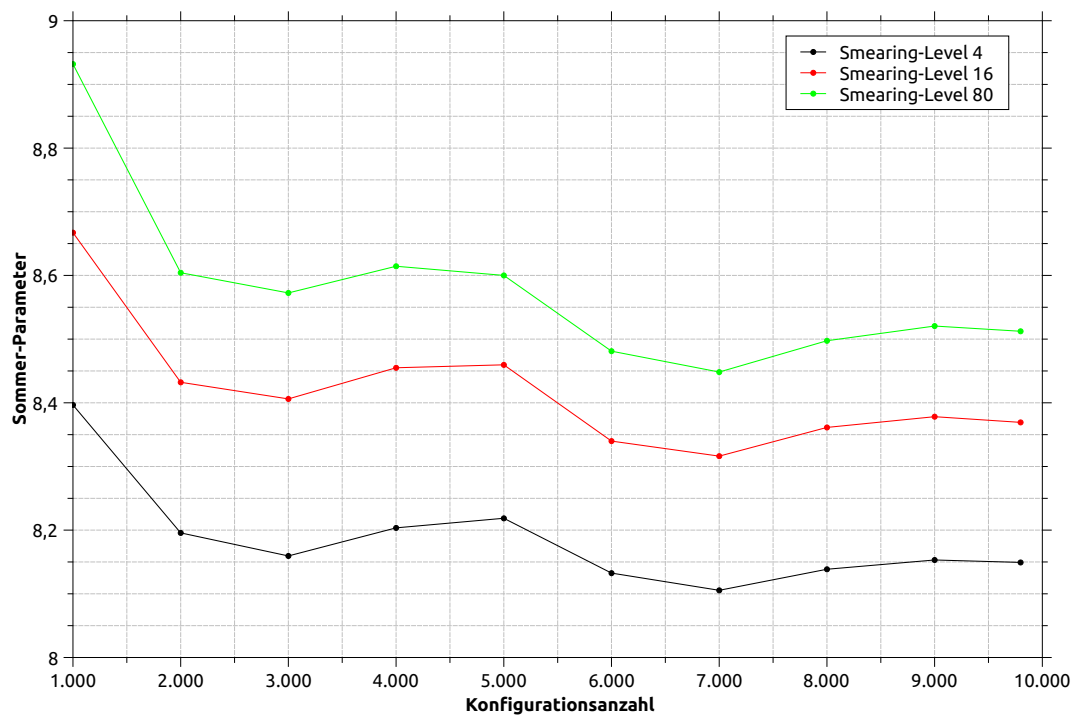


Abbildung 4.3.54.: Darstellung des Sommer-Parameters für Methode 1.1a gegen die Konfigurationsanzahl für verschiedene Smearing-Levels.

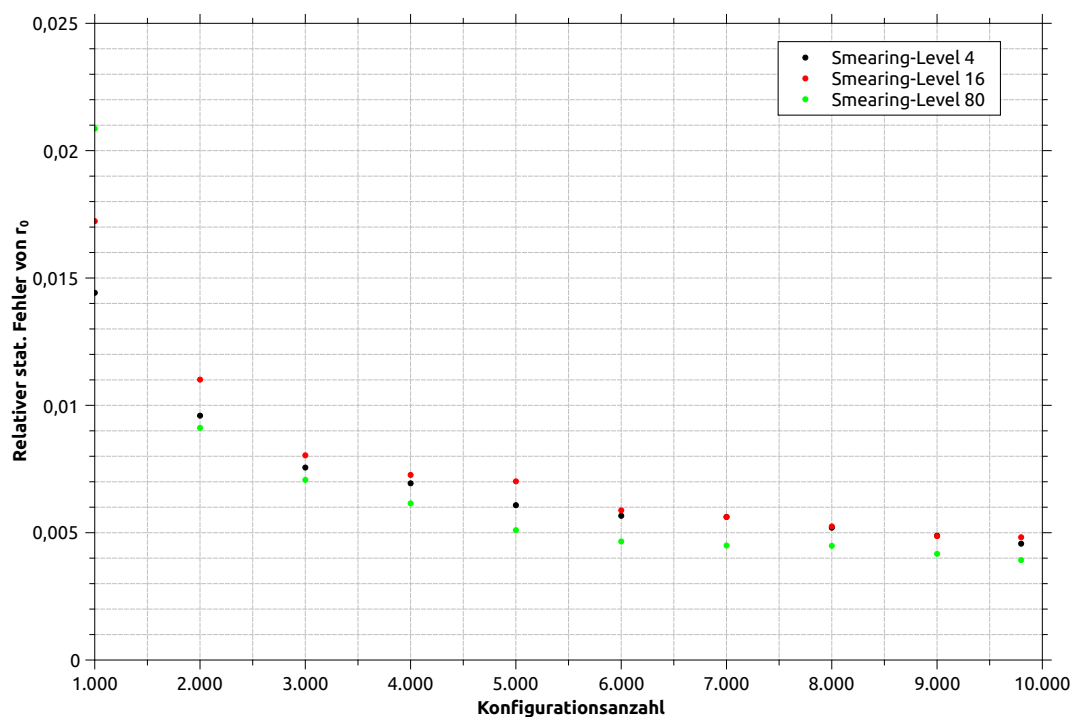


Abbildung 4.3.55.: Plot des relativen statistischen Fehlers von r_0 für Methode 1.1a für verschiedene Smearing-Levels.

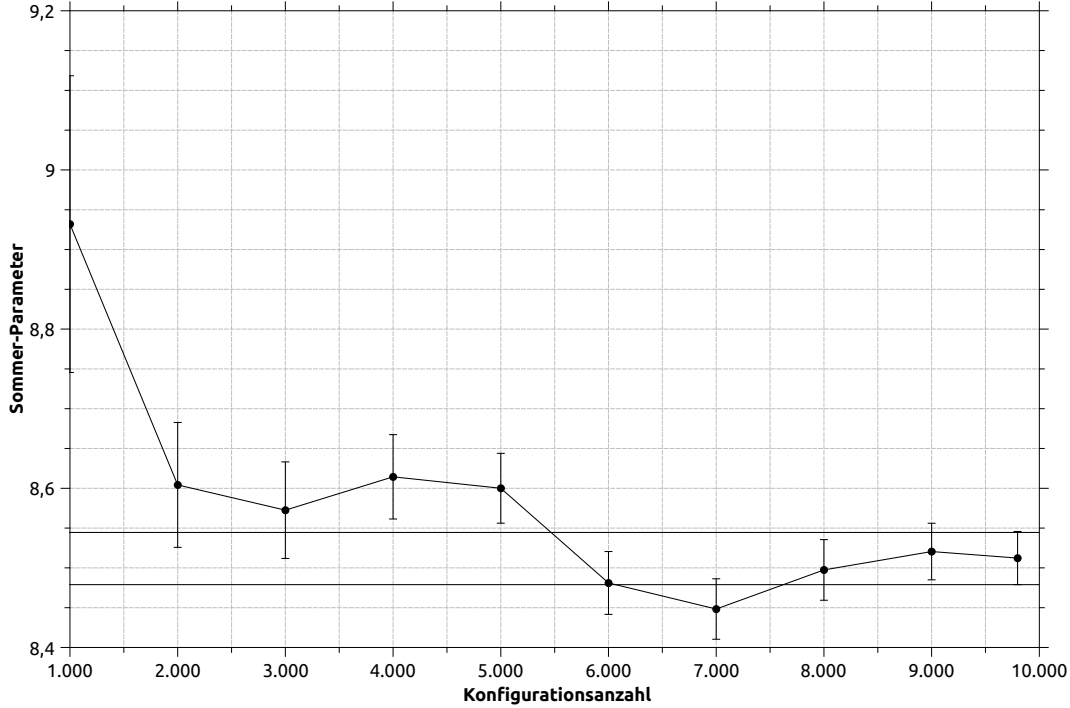


Abbildung 4.3.56.: Darstellung des Sommer-Parameters für Methode 1.1a gegen die Konfigurationsanzahl mit Fehlerbalken.

Alle Methoden zeigen im direkten Vergleich denselben Verlauf in Abhängigkeit der Konfigurationsanzahl und scheinen sich größtenteils lediglich systematisch zu unterscheiden (Abb. 4.3.52). Auffällig ist, dass alle Methoden bereits bei verhältnismäßig kleinen Konfigurationsanzahlen passable Ergebnisse produzieren. Exemplarisch wurde dazu in Abb. 4.3.56 Methode 1.1a mit Fehlern dargestellt. Abgesehen vom Ergebnis bei $N_{\text{conf}} = 1000$, befindet sich der am stärksten vom Endwert $r_0(N_{\text{conf}} = 9798)$ abweichende Wert bei $N_{\text{conf}} = 4000$. Selbst dieser zeigt lediglich eine Abweichung von etwa einem Prozent bezogen auf den Endwert.

Wie in Abb. 4.3.54 exemplarisch für Methode 1.1a dargestellt ist, hat das Smearing-Level selbst keinen bedeutenden Einfluss auf die Stärke der Schwankungen bezüglich der Konfigurationsanzahl: Es zeigen sich die gleichen Verläufe bei allen Levels, die zueinander lediglich systematisch verschoben sind.

Der relative Fehler für Daten verschiedener Smearing-Levels ist in Abb. 4.3.55 dargestellt. Dort ist sicher zu erkennen, dass der relative Fehler der Daten für Level 80 bei $N_{\text{conf}} > 1000$ systematisch unterhalb der Fehler der anderen Smearing-Levels liegt. Ebenso scheinen die Fehler bei Level 16 systematisch *über* den Fehlern der anderen

Smearing-Levels zu liegen. Es sei angemerkt, dass diese Effekte jedoch relativ klein sind.

Der relative Fehler der einzelnen Methoden im Vergleich ist in 4.3.53 dargestellt. Allgemein zeigen alle Methoden dort weitgehend denselben Verlauf, die Methoden 1.2 und 3 scheinen allerdings stark schwankende Werte zu produzieren. Die Fitkurven in diesem Diagramm weisen den erwarteten $\frac{1}{\sqrt{N}}$ -Fehlerverlauf nach, wobei allerdings die Datenpunkte bei $N_{\text{conf}} = 1000$ vernachlässigt werden mussten.

Weggelassen wurden hier die Darstellung der Methoden 2.1 und 2.2, die stark schwankende Ergebnisse produzieren.

4.3.8. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse

Konvergenz des Sommer-Parameters bzgl. des Smearing-Levels

Offensichtlich streben die Ergebnisse für den Sommer-Parameter bei allen Methoden mehr oder weniger schnell einem Wert entgegen. Die ersten Iterationen des Smearing-Verfahrens haben dabei die größten Auswirkungen. Besonders schnell *konvergieren* die Werte der Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 2.2.

Dass sich die durch die einzelnen Methoden berechneten Sommer-Parameter mit steigendem Smearing-Level einander annähern, ist bereits in der ersten Abbildung (4.3.1) erkennbar. Diese Beobachtung ist von zentraler Wichtigkeit, zeigt sie doch, dass das Smearing die Daten in Bezug auf die Ermittlung des Sommer-Parameters verbessert, weil Methoden unterschiedlicher Ansätze zunehmend besser übereinstimmende Ergebnisse ermitteln. Die dennoch unterschiedlichen r_0 -Verläufe der einzelnen Methoden liegen in eben diesen verschiedenen Ansätzen zur Bestimmung von r_0 begründet. Beispielsweise berücksichtigt Methode 1.1a einen Term höherer Ordnung, Methode 2.1 tut das nicht.

Auftreten eines Maximums bzgl. des Smearing-Levels

Wie in Abb. 4.3.2 zu sehen ist, erreicht der Sommer-Parameter in allen Methoden einen Maximalwert bei hohen Smearing-Levels und sinkt dann wieder herab. Grob liegt dieses Maximum für alle Methoden im selben Bereich. Das ist zunächst nur eine Beobachtung und die Position des Maximums lässt so noch keine Schlüsse zu. Allerdings kann dieses Verhalten eindeutig auf einen Effekt des Smearing-Verfahrens zurückgeführt werden, weil eben alle Methoden zunächst monoton zu diesem Maximum ansteigen und dann wieder absinken.

Die Anzahl der Smearing-Iterationen, bei denen das Maximum auftritt, erscheint sehr hoch. Die physikalische Information kann durch das Smearing allerdings nicht verloren gegangen sein, weil sich die Werte im betrachteten Smearing-Bereich trotz allem sehr ähnlich sind und nicht sehr stark von den Werten bei niedrigeren Levels abweichen. Zusätzlich ist der Smearing-Radius, der ein Maß für die effektive Reichweite des

Smearing-Verfahrens darstellt, für diese Iterationsanzahl in einem mit der Gittergröße verträglichen Bereich bei $R_{\text{smear}} < 4$.

Wirkung des Smearings auf die Potentiale $V(r)$ bzw. $V(r, t)$

Die Betrachtung des Potentials $V(r)$, aus dem der Sommer-Parameter bestimmt wird, erbrachte die Erkenntnis, dass die einzelnen Potentialpunkte bei verschiedenen Abständen r unterschiedlich auf das Smearing reagieren. Grundsätzlich zeigt sich an allen Potentialpunkten $V(r)$ ein Absinken des Potentials mit steigendem Smearing-Level, worauf nach Erreichen eines Minimums ein Ansteigen folgt. Die Positionen dieser Minima sind abhängig vom betrachteten Abstand r in Abb. 4.3.44 skizziert. Ergebnis dieser Untersuchung war, dass das Potential bei kleinen Abständen bereits bei weitaus weniger Smearing-Iterationen das Minimum erreicht, als es bei Potentialpunkten bei großen Abständen der Fall ist.

Die Abhängigkeit der Position des Minimums vom Abstand r des betrachteten Potentialpunkts liegt darin begründet, dass Potentialpunkte $V(r)$ von Linkketten der Länge r abhängen. Da das Smearing-Verfahren nach und nach die Unterschiede zwischen den Links *verschmiert*, also mit jeder Iteration Fluktuationen immer größerer Reichweite unterdrückt, sind dementsprechend bei gleichem Smearing-Level die enthaltenen Informationen *kurzer* Linkketten stärker verschmiert als die *langer* Linkketten. Deshalb wird das qualitative Verhalten der Potentialpunkte bei steigendem Smearing-Level viel eher bei den Punkten kleiner Abstände verändert.

Dennoch: Im Gegensatz zum qualitativen Verhalten zeigt das Smearing für kleine Abstände eine quantitativ weitaus geringere Wirkung als für große Abstände. Dies scheint zunächst widersprüchlich, wird bei genauerer Betrachtung jedoch klar. Auch wenn die Informationen kurzer Linkketten natürlich schneller ausgeschmiert sind, so ist der absolute Einfluss des Smearing-Verfahrens für große Abstände trotzdem größer, einfach weil die dortigen Potentialpunkte aus Linkketten aufgebaut sind, die aus *vielen* geschmierten Links bestehen und absolut demnach stärker auf das Smearing reagieren.

Da das Potential $V(r)$ bei den meisten Methoden aus dem zeitabhängigen Potential $V(r, t)$ bestimmt wird, wurde dieses ebenfalls untersucht. Die Information der in $V(r)$ auftretenden Minima muss natürlich auch im zeitabhängigen $V(r, t)$ vorhanden sein.

Dort wird auch die physikalische Bedeutung der Minima klar: Minimales $V(r)$ bedeutet in grober Näherung maximal unterdrückte angeregte Zustände in $V(r, t)$. Dies ist wie folgt nachzuvollziehen:

Die Werte in den Abbildungen 4.3.45 und 4.3.46 wurden durch

$$V(r, t) = \log \left(\frac{\langle W(r, t) \rangle}{\langle W(r, t + 1) \rangle} \right) \quad (4.3.1)$$

ermittelt. Die Extraktion von $V(r)$ aus $V(r, t)$ geschieht dann für die Methoden 1.1a bis

1.1c durch Fit eines exponentiellen Zerfalls

$$V(r, t) = V(r) + c_1 \exp(-c_2 t). \quad (4.3.2)$$

In dieser Gleichung steht der zweite Term für die Berücksichtigung höherer Zustände. Wie in den Abbildungen von $V(r, t)$ zu erkennen war, ist eben dieser Term für höhere Smearing-Levels unterdrückt. Er steigt allerdings wieder an, was in den Abbildungen exemplarisch für das sehr hohe Smearing-Level 200 demonstriert wird. Dieses Level befindet sich bereits weit hinter dem Sommer-Parameter-Maximum in Abb. 4.3.2.

Weil $V(r, t)$ eine grundlegendere Größe als $V(r)$ ist, ist hier eine Bestimmung des Minimums in Bezug zum Smearing-Level weitaus einfacher. Die in Abb. 4.3.49 dargestellten Minima repräsentieren das optimale Smearing-Level für die einzelnen Abstände. Dieser Abbildung folgend kann das für den Sommer-Parameter optimale Smearing-Level für dieses Gitter also höchstens bei etwa 75 Iterationen liegen - dies gilt zumindest für die Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2, die das zeitabhängige Potential $V(r, t)$ für ihre Berechnungen verwenden. $V(r, t)$ ist allerdings eine sehr grundlegende Größe, mit der die angeregten Einflüsse identifiziert werden können und somit sollte dieses Ergebnis prinzipiell auch für die anderen Methoden gelten.

Dass die Positionen der Minima in den Datenpunkten $V(r)$ (siehe Abb. 4.3.44) nicht genau mit denen von $V(r, t)$ (siehe Abb. 4.3.49) übereinstimmen, ist unproblematisch. Die Extraktion von $V(r)$ aus $V(r, t)$ geschieht durch einen Fit und ist somit vielen Einflüssen unterworfen. Zudem sind die Daten in Abb. 4.3.44 nur sehr ungenau zu bestimmen gewesen.

Angemerkt werden sollten an dieser Stelle noch zwei Probleme. Es fällt auf, dass das Potential in einigen Fällen nicht passend an die Datenpunkte gefittet wird. Exemplarisch sei hier der Potentialfit der Methode 1.1 in Abb. 4.3.26 genannt. Insbesondere für die Datenpunkte bei Smearing-Level 80 ist die Fitkurve für große Abstände systematisch zu hoch. Der Fit ist jedoch korrekt durchgeführt. Das χ^2 ist in diesem Fall minimal, weil so die ersten Datenpunkte von der Kurve am Besten approximiert werden. Da diese Datenpunkte auch den geringsten Fehler besitzen, werden sie vom Fitprogramm sozusagen *bevorzugt*. Abhilfe würde hier vielleicht die Einführung eines willkürlichen systematischen Fehlers schaffen, wovon hier allerdings abgesehen wurde.

Die zweite Auffälligkeit findet sich in der Extraktion von $V(r)$ aus dem zeitabhängigen Potential im Fall von Methode 3, dargestellt in den Abb. 4.3.47 und 4.3.48. Dort scheint der Fit systematisch oberhalb des Plateaus zu liegen.

Optimales Smearing-Level

Wie bereits erwähnt wurde, kann das optimale Smearing-Level gemäß der Untersuchung der Minima von $V(r, t)$ (siehe zum Beispiel Abb. 4.3.49) nicht über 75 Iterationen liegen. Noch höhere Smearing-Levels wirken dann auf das gesamte Potential wie eine Verstärkung der angeregten Zustände.

Die Smearing-Levels, bei dem die im Sommer-Parameter-Verlauf der einzelnen Methoden entdeckten Maxima auftauchen, sind etwas größer. Der Wert bei Level 75 und der, den die jeweiligen Maxima aufweisen, ist trotzdem sehr ähnlich, wie untenstehende Tabelle zeigt. Verglichen werden sollen hier die Werte, bei denen r_0 maximal wird und die bei Level 70, weil gemessene Daten von Level 75 selbst nicht vorliegen und diese Zahl ohnehin eher als Obergrenze für ein optimales Smearing-Level zu verstehen ist.

Methode	r_0 (Level 70)	r_0 (Maximum)
1.1a	8.505 ± 0.032	8.512 ± 0.033 (90)
1.1b	8.507 ± 0.036	8.513 ± 0.037 (100)
1.1c	8.543 ± 0.033	8.550 ± 0.034 (90)
1.2	8.491 ± 0.048	8.495 ± 0.049 (90)
2.1	8.468 ± 0.032	8.508 ± 0.042 (110)
2.2	8.522 ± 0.510	8.580 ± 0.053 (100)
3	8.453 ± 0.035	8.454 ± 0.036 (80)

Tabelle 4.8.: Vergleich der Sommer-Parameter bei Level 70 und dem Level des Maximums. Letzteres ist durch die in Klammern gesetzte Zahl angegeben.

Die vorliegenden Daten legen also nahe, dass die Smearing-Levels der Maxima schon einen relativ guten Richtwert für das optimale Level darstellen, auch wenn hier vermutlich schon *zuviel* geschmiert wurde.

Die Untersuchungen mit Standard-Smearing-Methoden lassen hier keine weiteren Schlussfolgerungen zu. Sicher ist nur, dass das Smearing-Level, bei dem eine optimale Unterdrückung der angeregten Zustände erfolgt, bei diesem Gitter unter 75 liegen sollte. Später bei der Untersuchung der Variational Smearing-Methode wird ein weiteres Werkzeug zu Verfügung stehen, um den Bereich der besten Smearing-Levels weiter einzugrenzen.

Besonderheiten der einzelnen Methoden

Selbst Methoden verschiedener Ansätze zeigen einige interessante Gemeinsamkeiten. Die Ähnlichkeit der Methoden 1.1a, 1.1b und 1.1c ist dabei nicht weiter verblüffend, weil diese das Potential $V(r)$ alle auf gleiche Art und Weise bestimmen. Methode 2.2 zeigt allerdings im Bereich kleiner Smearing-Levels ebenfalls eine große Übereinstimmung mit Methode 1.1a, was besonders in Hinblick darauf interessant ist, dass diese Methoden grundlegend verschiedene Ansätze benutzen. In diesem Bereich zeigen die Methoden

1.1a, 1.1b, 1.1c und 2.2 allesamt eine Art Plateau zwischen den Levels 10 und 20, für Methode 2.2 gut zu erkennen in Abb. 4.3.14. Dies deutet darauf hin, dass die Form des Verlaufs für kleine Smearing-Levels - also der schnelle Anstieg zu einer Art Plateau - durch die Berücksichtigung eines Terms höherer Ordnung zustande kommt, weil die genannten Methoden die einzigen sind, die eben diesen Term berücksichtigen.

Die Methoden 2.1 und 2.2, welche beide auf dem *naiven Ansatz* basieren, zeigen relativ wenige Ähnlichkeiten. Allerdings ist in beiden Fällen ein Sprung im Sommer-Parameter-Verlauf zu erkennen, der für Methode 2.2 genauer untersucht wurde. Er wurde hier auf eine relativ starke Änderung im Potential $V(r)$ zurückgeführt. Dieser Sprung ist kein Effekt des Smearings selbst, weil andere Methoden ihn nicht zeigen. Vermutlich ist er auf das „Umspringen“ der Parameter beim Fit, also auf die schlechte Fit-Stabilität zurückzuführen, was auch durch die Beobachtung gestützt wird, dass das r_0 der fraglichen Methoden 2.1 und 2.2 beim Messpunkt *vor* den jeweiligen Sprüngen einen sehr großen Fehler zeigt (siehe Abb. 4.3.9 und 4.3.10). Der Fehler kann dadurch zustande kommen, dass das „Umspringen“ dort auf einigen Jackknifes passiert, auf anderen wiederum nicht.

Interessant ist in diesem Zusammenhang jedoch, dass der Sprung in Methode 2.2 kaum oder gar nicht erkennbar ist, wenn das erweiterte Potentialmodell benutzt wird, welches durch

$$V(r) = A + B \left[\frac{1}{r} \right] + \sigma r + F \left(\left[\frac{1}{r} \right] - \frac{1}{r} \right) \quad (4.3.3)$$

bestimmt ist (siehe Abschnitt 3.2.2.2). Gleichgültig ob Standard- oder erweitertes Potentialmodell verwendet werden, um das Potential zu fitten: in beiden Fällen wird das gleiche Potential $V(r)$ benutzt, welches ebenfalls einen Sprung zeigt, wie in Abb. 4.3.24 zu erkennen ist.

Dort ist auch zu erkennen, dass der Sprung in $V(r)$ bei $r = 2$ liegt, also bei einem relativ kleinen Abstand, wo der Coulomb-artige Anteil eine größere Rolle spielt. Möglicherweise wird der Sprung im Fall des erweiterten Potentials also in eben diesem Anteil F absorbiert. Dieser spielt nämlich für die r_0 -Bestimmung keine Rolle, was das Fehlen des Sprungs erklären würde.

Eine weitere Auffälligkeit findet sich in den Fehlerverläufen der Methoden 1.2 und 3. Der Grund für diese Verläufe kann sehr viele Ursachen haben. Dass sich jedoch beide Fehlerverläufe ebenso wie die Verläufe des Sommer-Parameters ähnlich sind, kann dadurch erklärt werden, dass beide Methoden nur den Term kleinster Ordnung bei der Betrachtung der Wilson-Loops berücksichtigen und beide Methoden von relativ einfachen Annahmen ausgehen.

Für Methode 1.2 wurde zudem die besonders starke Abhängigkeit vom verwendeten Intervall untersucht, in welchem das Plateau gefittet wird. Die Ergebnisse für den Sommer-Parameter unterscheiden sich dort vor allem durch ein unterschiedliches Konvergenzverhalten in Abhängigkeit des Smearing-Levels. Es sei hier erwähnt, dass das standardmäßig

in dieser Arbeit benutzte Intervall $[4, 8]$ nicht allgemein gültig funktioniert, sondern lediglich für das betrachtete Gitter gute Ergebnisse liefert und dass bei anderen Gittern eventuell ein anderes optimales Intervall gefunden werden muss.

Die Gegenüberstellung der Methoden bei Benutzung von Standard- und erweitertem Potentialmodell zeigt, dass jene mit erweitertem Modell nur im Bereich kleiner Smearing-Levels eine Erhöhung zeigen und bei höheren Smearing-Levels dann im Vergleich zu solchen des Standard-Potentialmodells sehr ähnliche Ergebnisse liefern. Das erweiterte Potentialmodell besitzt realistischere Annahmen des Coulomb-Anteils des Potentials, welcher den Anfangsbereich des Potentials dominiert. Dies ist eine mögliche Erklärung dafür, warum die Methoden auch bei Benutzung unterschiedlicher Potentialmodelle bei hohen Smearing-Levels einander nahezu gleichen, denn je größer die Anzahl der Smearing-Iterationen, desto weniger spielen kurzreichweitige Effekte eine Rolle. Und da der Coulomb-Anteil des Potentials durch diese relativ kurzreichweitigen Effekte bestimmt ist, reicht dann vermutlich das einfache Modell für das Potential aus.

Vorteile bringt das erweiterte Potential dementsprechend vor allem bei kleinen Smearing-Levels.

Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen

Auf das Konvergenzverhalten bezüglich der Anzahl der Konfigurationen hat das APE-Smearing-Verfahren keinen Einfluss. Der Sommer-Parameter-Verlauf erfährt lediglich eine systematische Verschiebung (siehe Abb. 4.3.54). Auch die einzelnen Methoden zeigen qualitativ das gleiche Verhalten.

Die Untersuchung hat zudem erbracht, dass die Bestimmung des Sommer-Parameters auch für wenige Konfigurationen - hier etwa 2000 - zuverlässig möglich ist (siehe Abb. 4.3.56).

4.4. Vergleich von APE- und HYP-geschmierten Daten

Bisher wurden lediglich mit dem APE-Verfahren geschmierte Daten untersucht. In dieser Arbeit soll auch das HYP-Smearing-Verfahren genauer betrachtet werden, insbesondere in Hinblick darauf, ob bei der Bestimmung des statischen Potentials und des Sommer-Parameters mit diesem Verfahren bessere Ergebnisse erzielt werden können und wo in Bezug auf die Daten Unterschiede zum APE-Smearing-Verfahren zu finden sind.

4.4.1. Benutzte Parameter

Für die APE-geschmierten Daten werden die gleichen Parameter wie bei der letzten Untersuchung benutzt, die in Abschnitt 4.3.1 zu finden sind. Für die HYP-geschmierten Daten gelten nachfolgend aufgelistete Parameter:

Gitter	$16^3 \times 36, \beta = 1.75, \kappa = 0.1490$
Anzahl ausgewerteter Konfigurationen	9798
Größe der Jackknife-Bins	10
Smearing-Methode	HYP
Smearing-Parameter	(0.6, 0.3)

Tabelle 4.9.: Benutzte Parameter für HYP-Daten.

4.4.2. Verhalten des Sommer-Parameters

Zunächst soll im Folgenden das Verhalten des Sommer-Parameters für beide Smearing-Verfahren gegenüber gestellt werden. Dabei sollen alle benutzten Methoden untersucht werden.

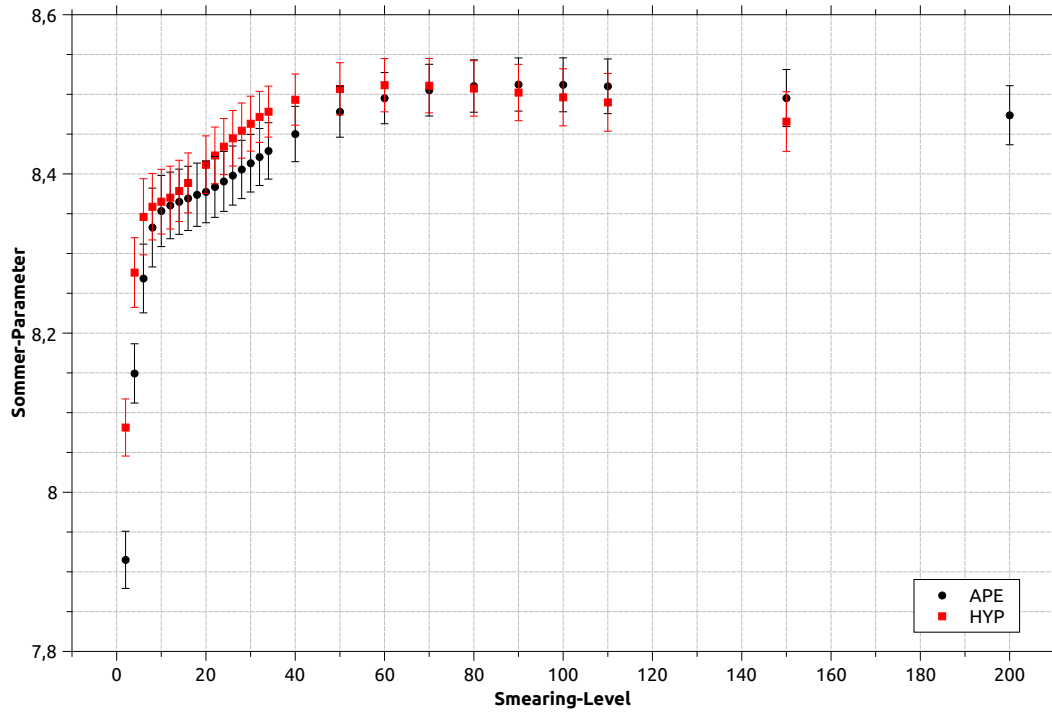


Abbildung 4.4.1.: Methode 1.1a: Sommer-Parameter in Abhängigkeit vom Smearing-Level für APE- und HYP-Smearing.

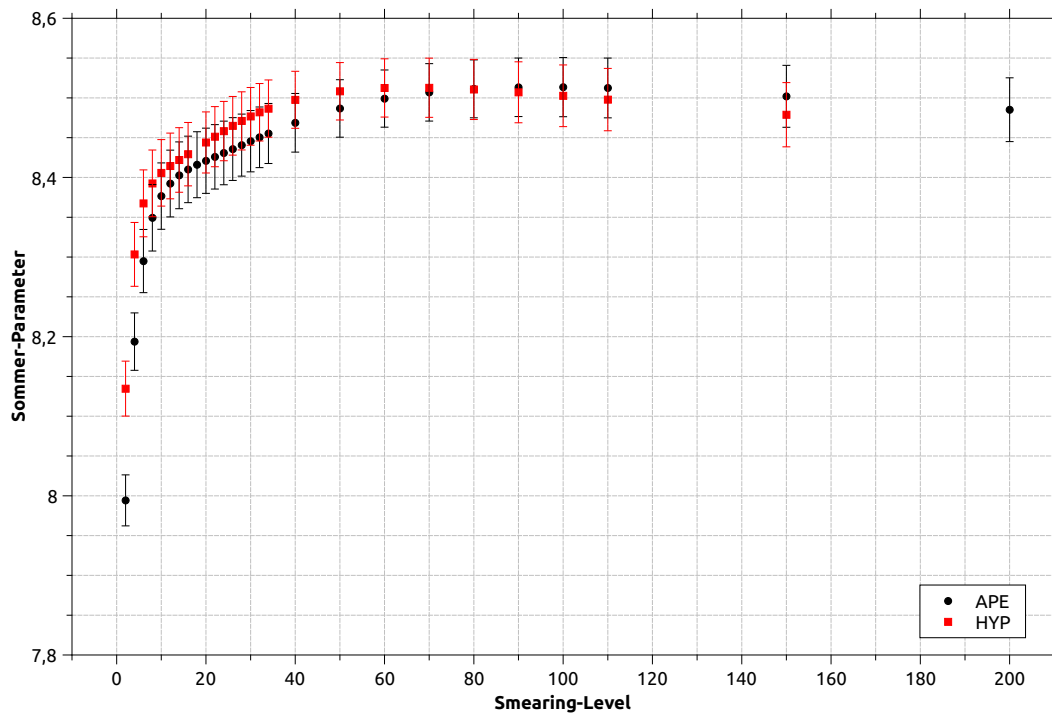


Abbildung 4.4.2.: Methode 1.1b: Sommer-Parameter in Abhängigkeit vom Smearing-Level für APE- und HYP-Smearing.

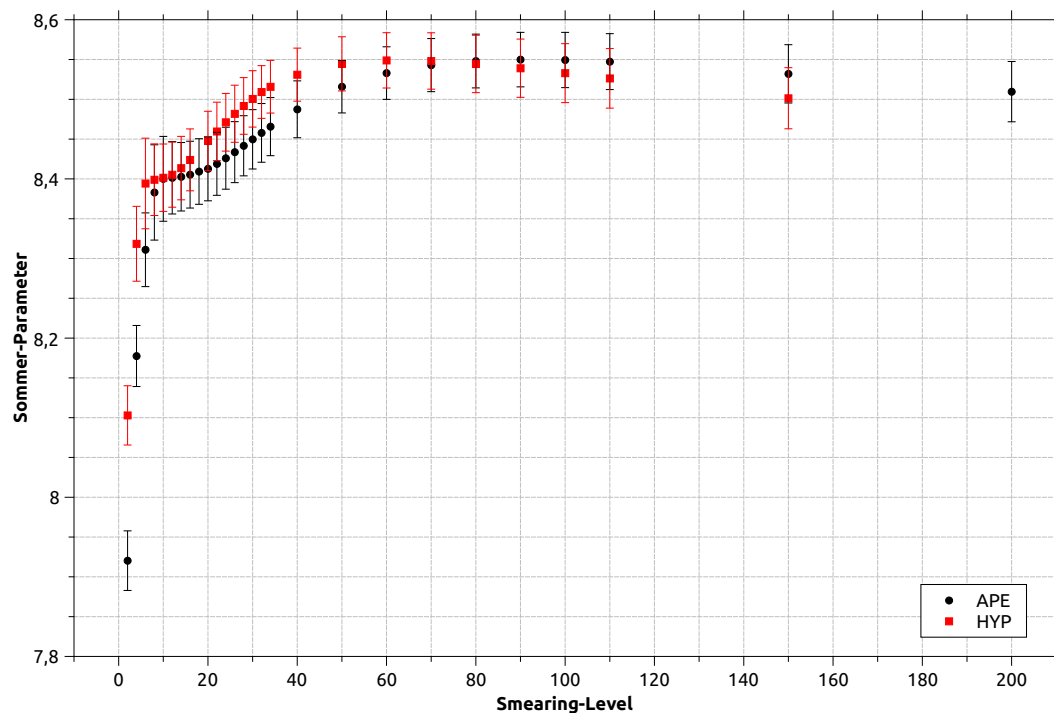


Abbildung 4.4.3.: Methode 1.1c: Sommer-Parameter in Abhängigkeit vom Smearing-Level für APE- und HYP-Smearing.

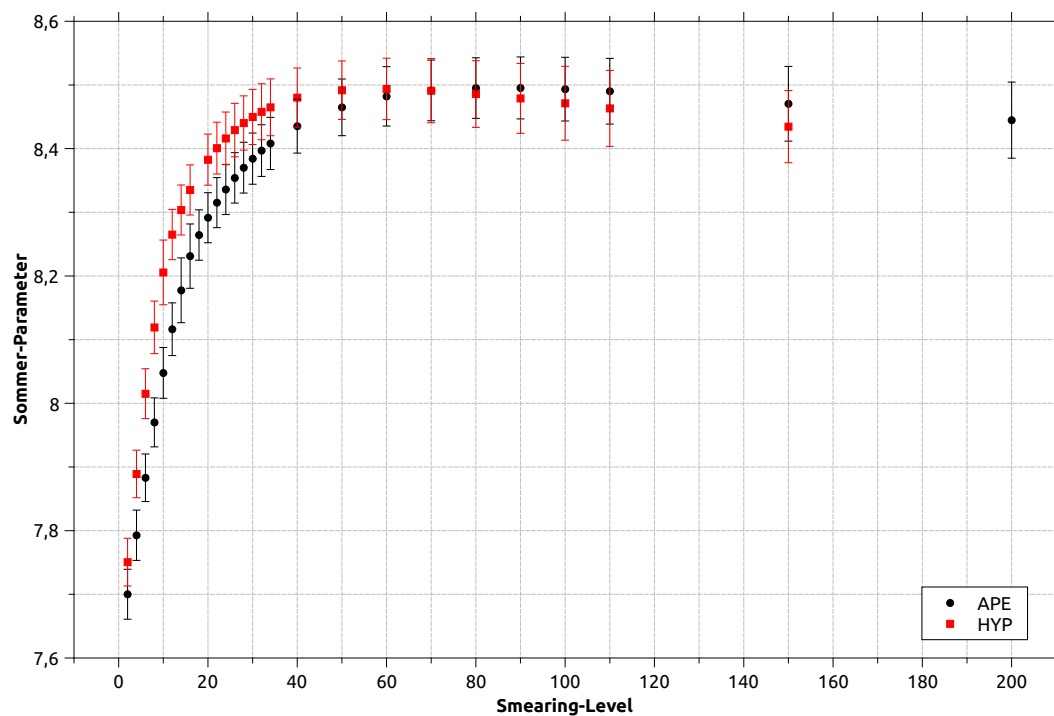


Abbildung 4.4.4.: Methode 1.2: Sommer-Parameter in Abhängigkeit vom Smearing-Level für APE- und HYP-Smearing.

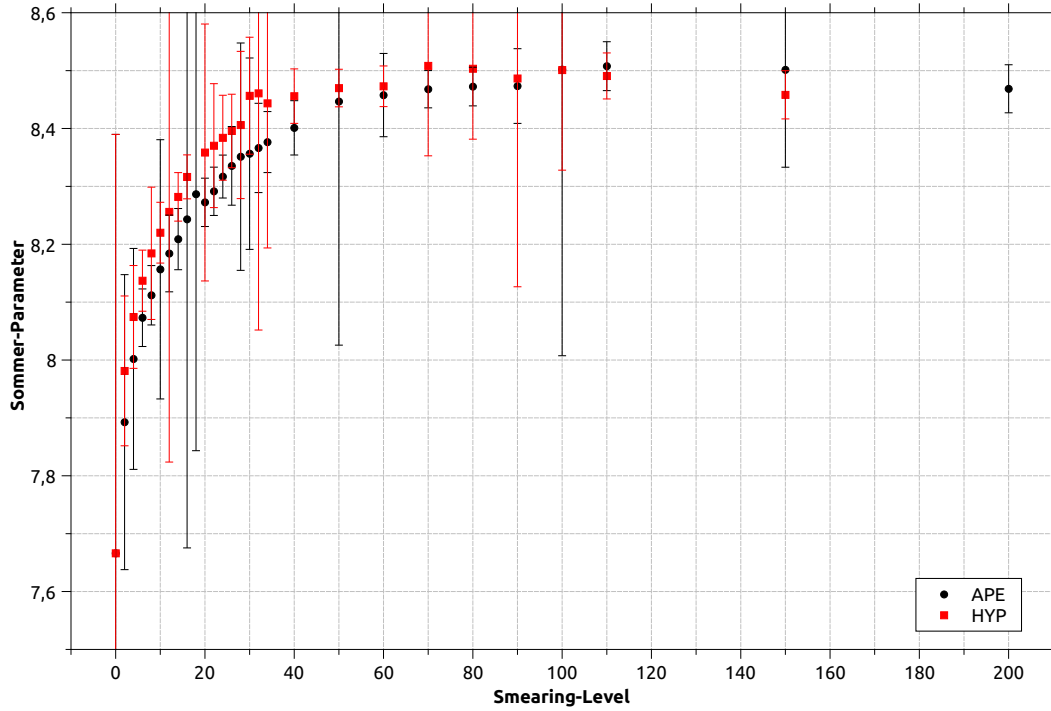


Abbildung 4.4.5.: Methode 2.1: Sommer-Parameter in Abhängigkeit vom Smearing-Level für APE- und HYP-Smearing.

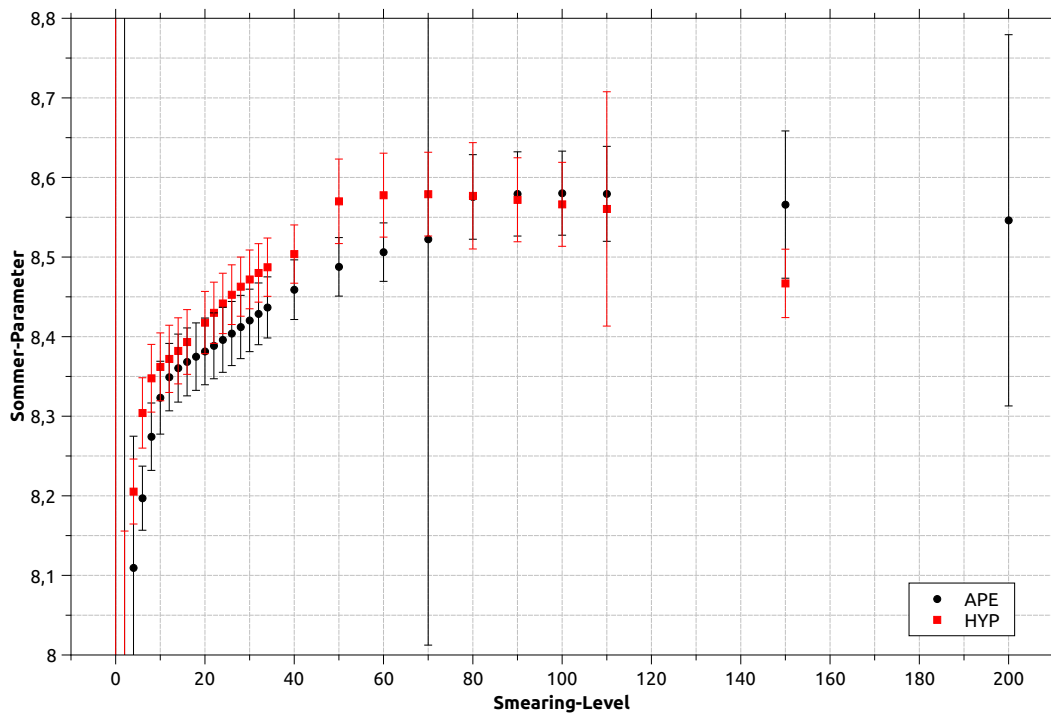


Abbildung 4.4.6.: Methode 2.2: Sommer-Parameter in Abhängigkeit vom Smearing-Level für APE- und HYP-Smearing.

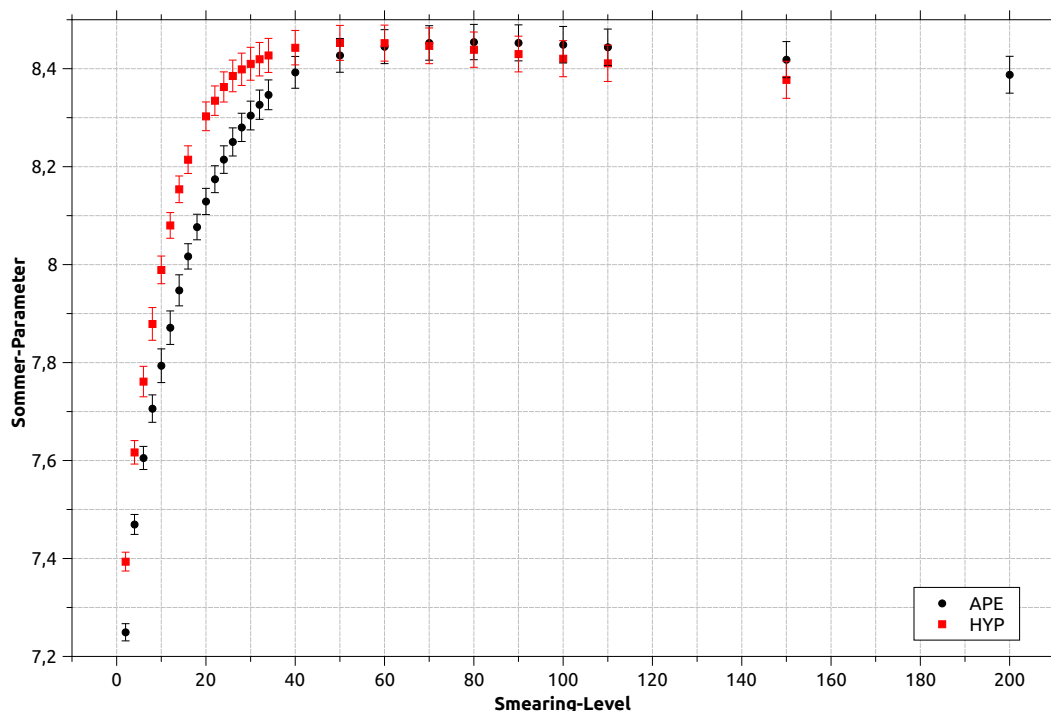


Abbildung 4.4.7.: Methode 3: Sommer-Parameter in Abhängigkeit vom Smearing-Level für APE- und HYP-Smearing.

Die r_0 -Verläufe der APE- und HYP-geschmierten Daten zeigen sehr schnell eine Übereinstimmung im Rahmen des Fehlers. Einzig die Methoden 1.2 und 2.2 verhalten sich erst bei den Levels 24 beziehungsweise 40 in dieser Weise. Ebenfalls sind die Unterschiede der statistischen Fehler zwischen APE- und HYP-Daten scheinbar klein.

Viel interessanter ist aber der Umstand, dass sich die Verläufe für APE- und HYP-Daten scheinbar hauptsächlich durch eine Stauchung in Smearing-Level-Richtung unterscheiden. Dieses Verhalten soll im folgenden Abschnitt genauer untersucht werden.

4.4.3. Skalenvergleich von HYP- und APE-geschmierten Daten

Wenn die Ergebnisse für den Sommer-Parameter in beiden Smearing-Verfahren lediglich dadurch differieren, dass sie gegeneinander in Smearing-Level-Richtung gestaucht sind, dann bedeutet das, dass beide Smearing-Methoden dieselben Ergebnisse produzieren, dafür aber eine unterschiedlich große Anzahl an Smearing-Iterationen benötigen. Aus diesem Grund wird nun im Folgenden ein Vergleich der beiden Skalen für die Ergebnisse der Methode 1.1a durchgeführt.

Das Verfahren für solch einen Vergleich ist einfach: Für jeden HYP-geschmierten Datenpunkt wird derjenige APE-geschmierte Datenpunkt gesucht, bei welchem das gleiche Ergebnis für r_0 produziert wird. Die Smearing-Levels, bei denen sich die dadurch ermittelten Datenpunkte befinden, geben an, wie viele Smearing-Levels das jeweilige Verfahren zum Erreichen eines bestimmten Wertes für r_0 benötigen.

Weil aber nur eine begrenzte Anzahl von Datenpunkten vorliegt, existiert für die meisten HYP-Datenpunkte jedoch kein APE-Datenpunkt, der einen sehr ähnlichen r_0 -Wert aufweist. Deshalb wurden die HYP-Datenpunkte mit einer Interpolationskurve der APE-Datenpunkte verglichen.²⁶

Eine schematische Darstellung dieses Verfahrens ist in untenstehender Abbildung zu finden.

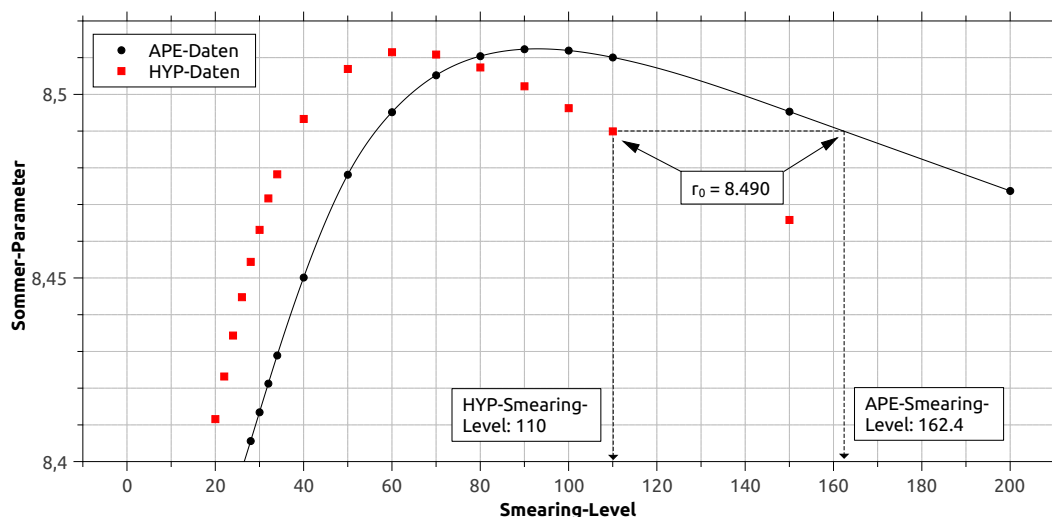


Abbildung 4.4.8.: Schematische Darstellung des verwendeten Verfahrens zum Vergleich zweier Skalen. Exemplarisch wird hier der Verlauf der APE- und HYP-Daten für Methode 1.1a in einer Skalierung gezeigt, in der das Verfahren gut illustriert werden kann.

²⁶Wiederum wurde eine kubische Interpolation der Daten genutzt.

Durch dieses Verfahren wurden folgende Ergebnisse ermittelt:

Smearing-Level APE	Smearing-Level HYP
6.2	4
9.0	6
11.4	8
14.0	10
16.4	12
20.4	14
23.4	16
29.6	20
32.4	22
35.4	24
38.4	26
41.2	28
44.2	30
47.3	32
50.1	34
58.7	40
72.5	50
83.9	60
106.5	70
119.5	80
133.5	90
147.8	100
162.4	110

Tabelle 4.10.: Nach oben beschriebenem Verfahren ermittelte Smearing-Levels, bei denen die Ergebnisse für den Sommer-Parameter bei HYP- und APE-Smearing einander entsprechen.

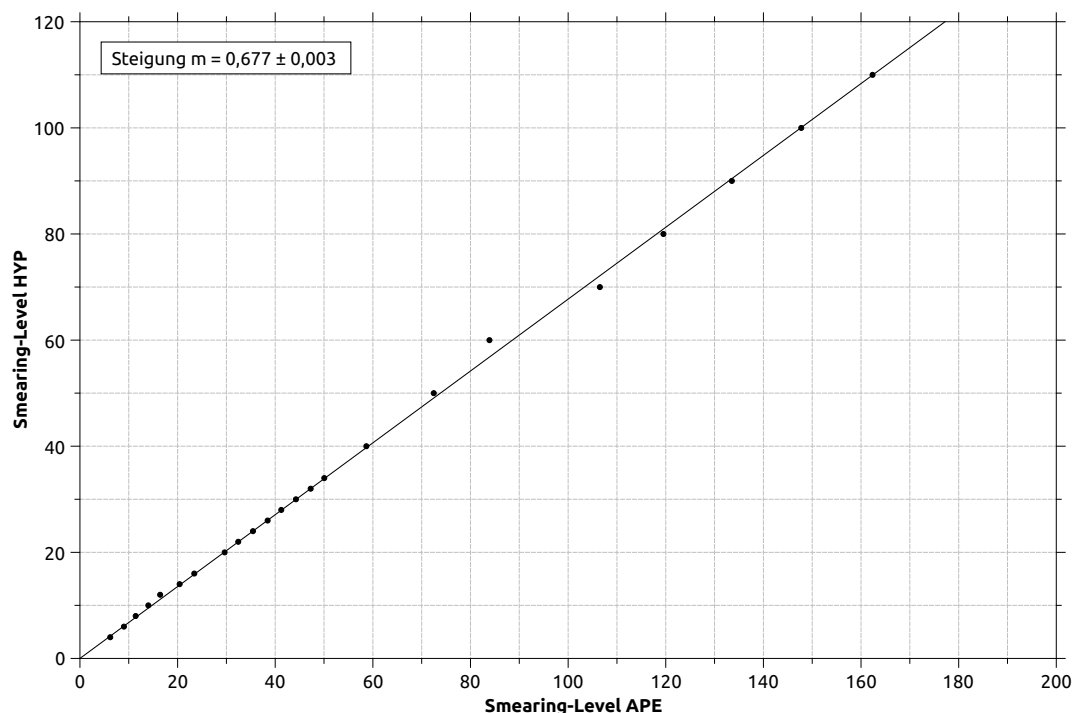


Abbildung 4.4.9.: Darstellung der Ergebnisse aus Tabelle 4.10. Es sei darauf hingewiesen, dass der Fehler der Steigung im linearen Fit $y = m \cdot x$ nur als grober Anhaltspunkt gelten kann, weil für die einzelnen Datenpunkte kein Fehler bestimmt wurde.

In Abbildung 4.4.9 wurde explizit die Steigung der Fit-Geraden eingetragen. Anschaulich bedeutet das Ergebnis dieser Untersuchung, dass die APE- und HYP-geschmierten Daten tatsächlich bezüglich des Smearing-Levels systematisch in linearer Weise gegeneinander gestaucht sind. Die Steigung der Geraden kann so verstanden werden, dass für das benutzte HYP-Smearing nur 0.677-mal so viele Smearing-Schritte erforderlich sind, um dieselben Ergebnisse wie das benutzte APE-Smearing zu produzieren.

Es sei hier darauf hingewiesen, dass dies natürlich nur für die genutzten Smearing-Parameter gezeigt wurde und dass insbesondere die Steigung nur für eben diese gilt. Streng genommen wurde diese Relation auch bisher lediglich für Methode 1.1a gezeigt, allerdings zeigen die r_0 -Verläufe *aller* Methoden eine Übereinstimmung für beide Smearing-Verfahren, wenn die Smearing-Level-Skalen aneinander angepasst werden.

Exemplarisch soll dies nun bei Methode 1.1a für den Sommer-Parameter und den relativen Fehler gezeigt werden. Im Anhang können äquivalente Darstellungen für die anderen Methoden gefunden werden (siehe A.2 auf S. 224ff.).

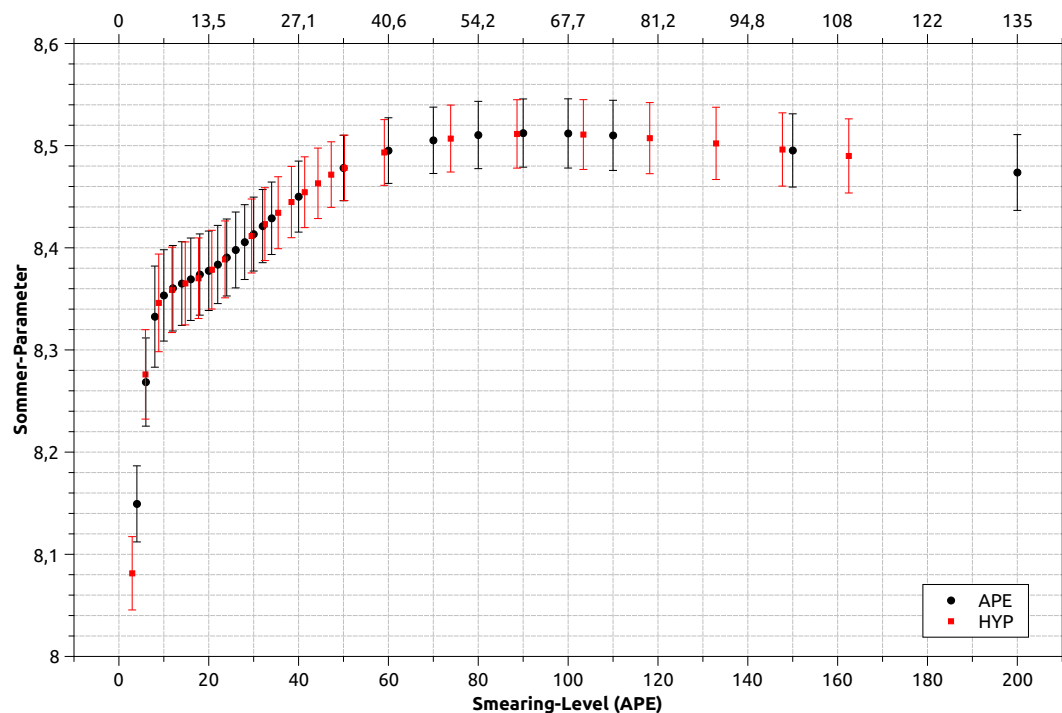


Abbildung 4.4.10.: Methode 1.1a: r_0 -Verläufe für APE- und HYP-Smearing in angepasster Skalierung. In dieser und der folgenden Abb. stellt die obere Skala das Smearing-Level für die HYP-Daten dar.

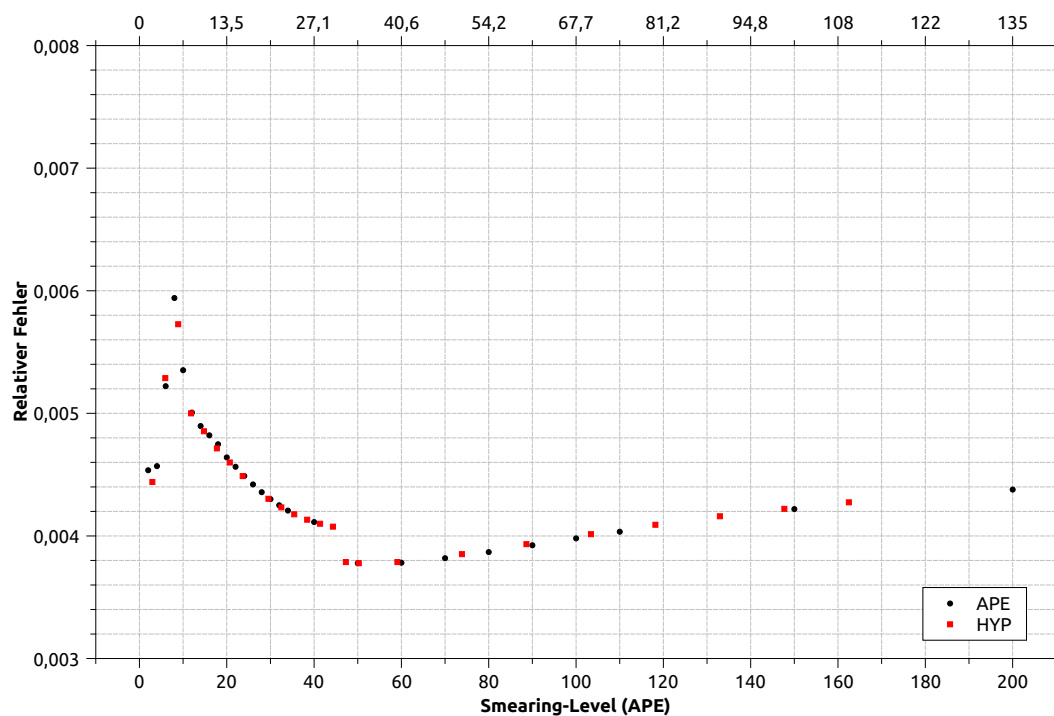


Abbildung 4.4.11.: Methode 1.1a: Relativer statistischer Fehler von r_0 für APE- und HYP-Smearing in angepasster Skalierung.

4.4.4. Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen

Es ist es auch beim Vergleich der beiden Smearing-Verfahren interessant zu erfahren, ob APE- und HYP-geschmierte Ergebnisse bezüglich der Konfigurationsanzahl ein verschiedenartiges Verhalten zeigen. Deshalb soll auch der Verlauf der Sommer-Parameters gegen verschiedene Konfigurationsanzahlen dargestellt werden. Exemplarisch werden dabei die Werte von Methode 1.1a bei Smearing-Level 80 für APE- und HYP-Smearing verglichen.

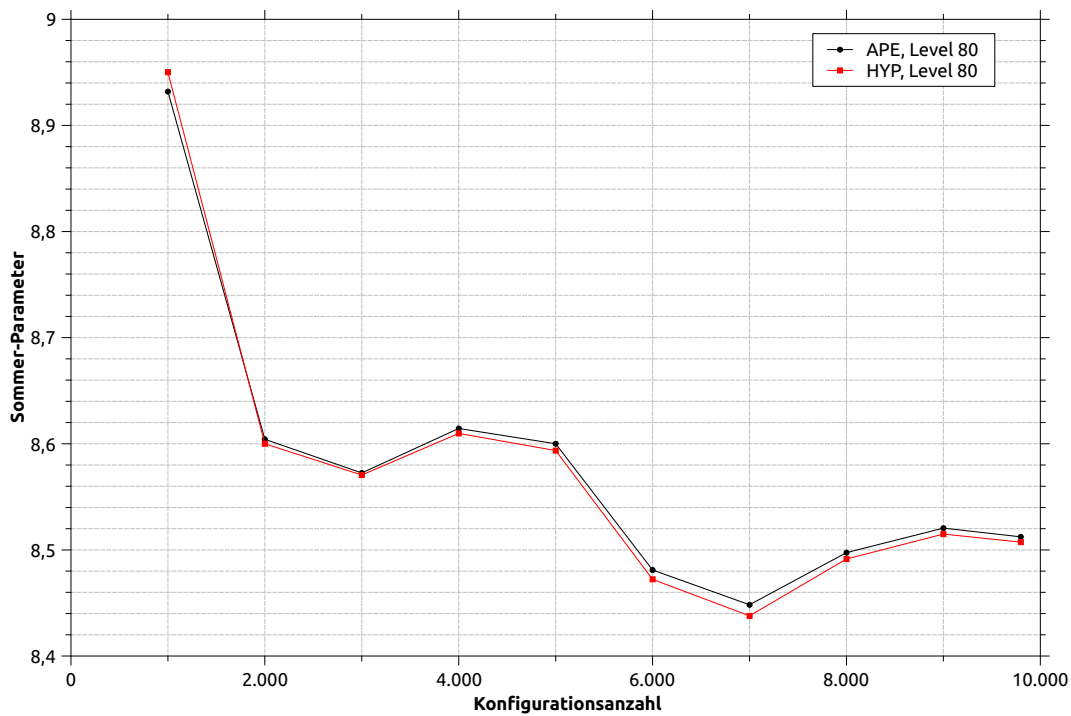


Abbildung 4.4.12.: Verlauf des Sommer-Parameters für verschieden viele Konfigurationen. Vergleich von Methode 1.1a für APE- und HYP-Smearing bei Level 80.

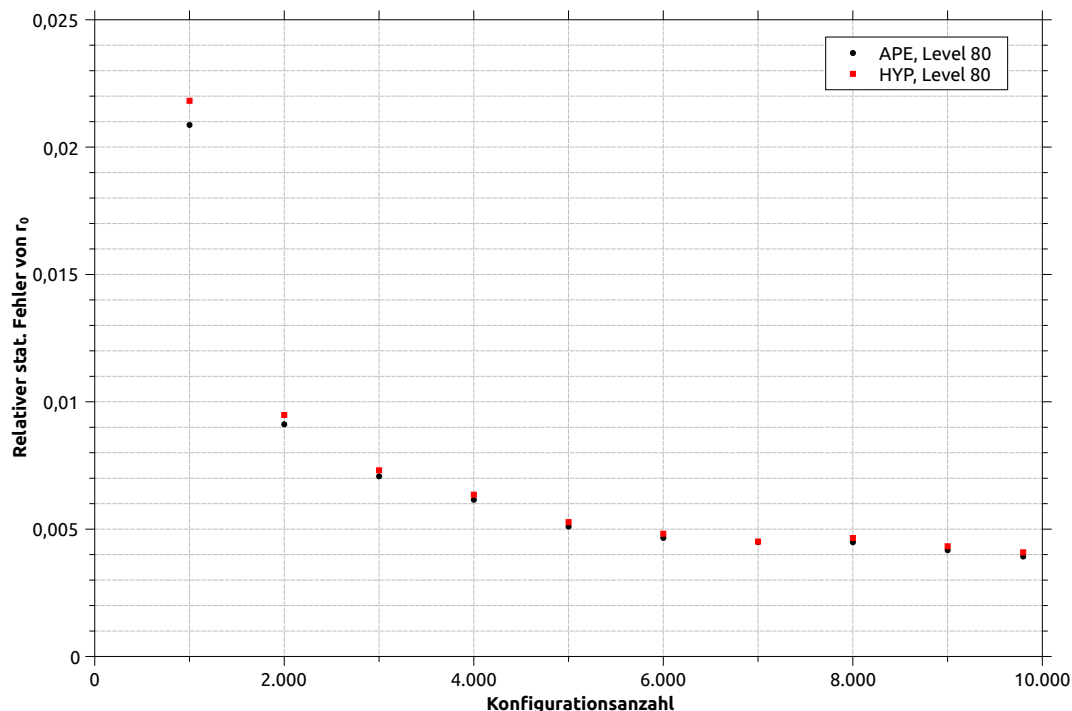


Abbildung 4.4.13.: Relativer Fehler von r_0 bzgl. der Anzahl der Konfigurationen. Vergleich von Methode 1.1a für APE- und HYP-Smearing bei Level 80.

In Abb. 4.4.12 eindeutig zu erkennen ist, dass sich der Verlauf des Sommer-Parameters für APE- und HYP-Smearing nur systematisch unterscheidet und nur geringe Abweichungen zeigt. Ähnlich verhält es sich mit dem relativen Fehler (Abb. 4.4.13), der für beide Smearing-Methoden den gleichen Verlauf zeigt.

Dass die systematischen Abweichungen hier so gering sind, liegt darin begründet, dass APE- und HYP-Smearing bei Smearing-Level 80 einen sehr ähnlichen r_0 -Wert ermitteln (siehe Abb. 4.4.1).

4.4.5. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse

Diese Teiluntersuchung erbrachte das Ergebnis, dass sich APE- und HYP-Smearing-Verfahren lediglich dadurch unterscheiden, wie viele Smearing-Iterationen notwendig sind, um einen bestimmten Wert für r_0 zu erzielen. Dies konnte dadurch gezeigt werden, dass die APE- und HYP-Verläufe von Sommer-Parameter und relativem Fehler für jeweils alle Methoden zur Deckung gebracht werden konnten, wenn die Smearing-Level-Skala angepasst wurde.

Bezüglich der Konfigurationsanzahl zeigen beide Smearing-Verfahren das gleiche Konvergenzverhalten. Es konnten lediglich systematische Verschiebungen beobachtet werden. Dementsprechend hat keine Methode, abgesehen von Erwägungen, die die Rechenzeit betreffen, einen Vorteil.

Ein genauer Vergleich der Rechenzeit ist hier schwierig. Einerseits benötigt das HYP-Smearing grundsätzlich mehr Rechenzeit für eine Iteration als das APE-Smearing, allerdings liefert es auch - im Fall der genutzten Parameter - bei einer geringeren Anzahl von Smearing-Iterationen die gleichen Ergebnisse wie das APE-Smearing.

Wie viele Iterationen weniger von Nöten sind, hängt aber zusätzlich noch von den APE- und HYP-Parametern ab, sodass zur Beantwortung der Frage nach der effizientesten Smearing-Methode zusätzlich sehr viele Untersuchungen bei verschiedenen Parametern durchgeführt werden müssten.

Letztlich bringen APE- und HYP-Smearing jedoch - wenn auch bei unterschiedlichen Smearing-Levels - mehr oder weniger äquivalente Ergebnisse. Deshalb soll im Folgenden auch weiterhin das APE-Smearing-Verfahren Anwendung finden.

4.5. Vergleich verschiedener APE-Parameter

In diesem Abschnitt soll untersucht werden, in welcher Weise verschiedene APE-Smearing-Parameter ε Einfluss auf die Berechnung des Sommer-Parameters ausüben. Die Linktransformation ist beim APE-Smearing durch

$$U_\mu(n) \rightarrow U_\mu^{\text{APE}}(n) = \text{Proj}_G \left[U_\mu(n) + \varepsilon \sum_{\nu \neq \mu} (C_{\mu\nu}^l(n) + C_{\mu\nu}^r(n)) \right]$$

gegeben, wie in Abschnitt 3.2.1.1 beschrieben wurde. Das bedeutet, der Parameter ε gibt an, wie stark die den Link umgebenden *staples* in die Betrachtung eingehen. Der Fokus dieser Betrachtung soll dabei auf dem allgemeinen Zusammenhang zwischen Daten liegen, die mit unterschiedlichem ε geschmiert wurden.

Der Übersichtlichkeit wegen soll sich die Präsentation dieser Untersuchung auf Methode 1.1a beschränken - insbesondere weil Untersuchungen der anderen Methoden zeigten, dass diese qualitativ dasselbe Verhalten aufweisen.

4.5.1. Benutzte Parameter

Folgende Parameter wurden für die Berechnungen dieses Abschnitts genutzt:

Gitter	$16^3 \times 36$, $\beta = 1.75$, $\kappa = 0.1490$
Anzahl ausgewerteter Konfigurationen	9798
Größe der Jackknife-Bins	10
Smearing-Methode	APE
Smearing-Parameter	0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7

Tabelle 4.11.: Benutzte Parameter für die Daten. Es sollen im Folgenden Daten verschiedener Smearing-Parameter untersucht werden. An den jeweiligen Stellen wird dort dann darauf hingewiesen, welcher Parameter benutzt wurde.

4.5.2. Verhalten des Sommer-Parameters

Für verschiedene APE-Parameter ε wurde der Sommer-Parameter r_0 für ausgewählte Smearing-Levels bestimmt. Diese Verläufe sollen nun dargestellt werden. In jeder Abbildung soll zudem der Verlauf der mit $\varepsilon = 0.5$ geschmierten Daten zum Vergleich dargestellt werden.

Zur besseren Erkennbarkeit und um den Verlauf besser darstellen zu können, wurden die einzelnen Datenpunkte mit Linien verbunden.

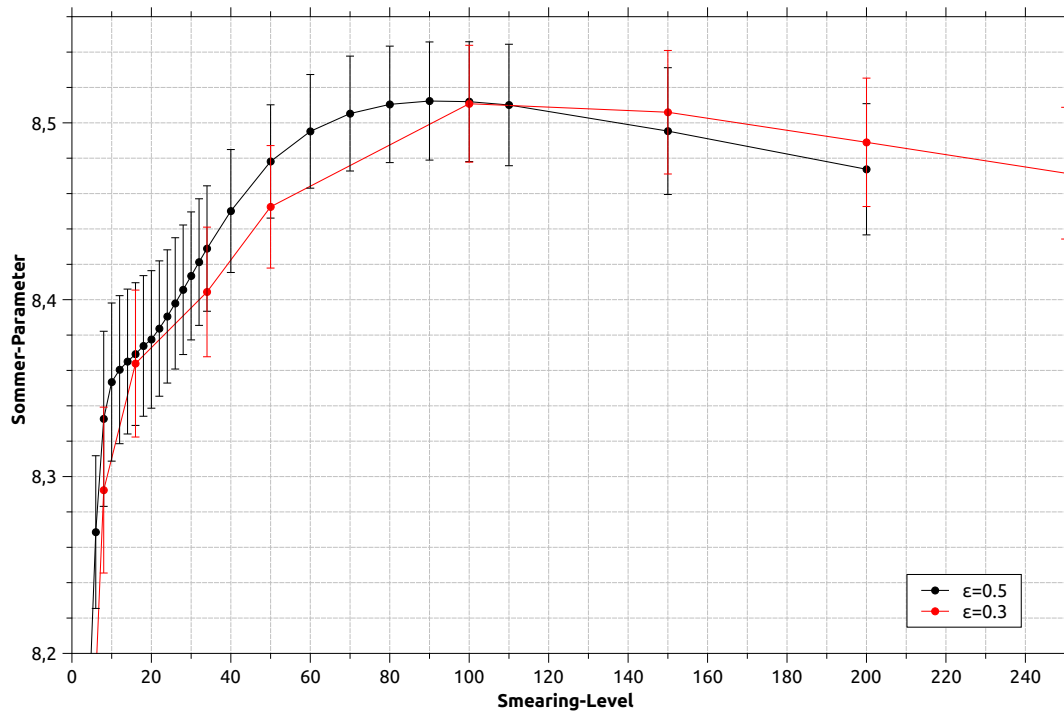


Abbildung 4.5.1.: Darstellung des r_0 -Verlaufs für $\varepsilon = 0.3$ im Vergleich zum Verlauf für den Parameter $\varepsilon = 0.5$. Es sei noch einmal darauf hingewiesen, dass lediglich Methode 1.1a präsentiert wird.

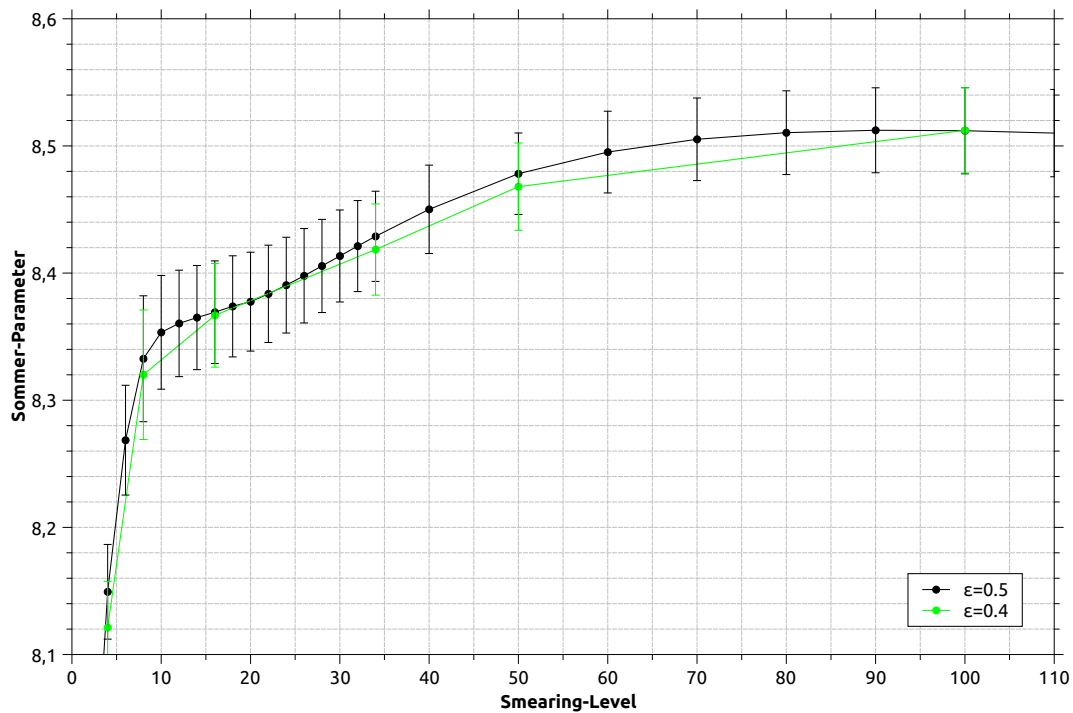
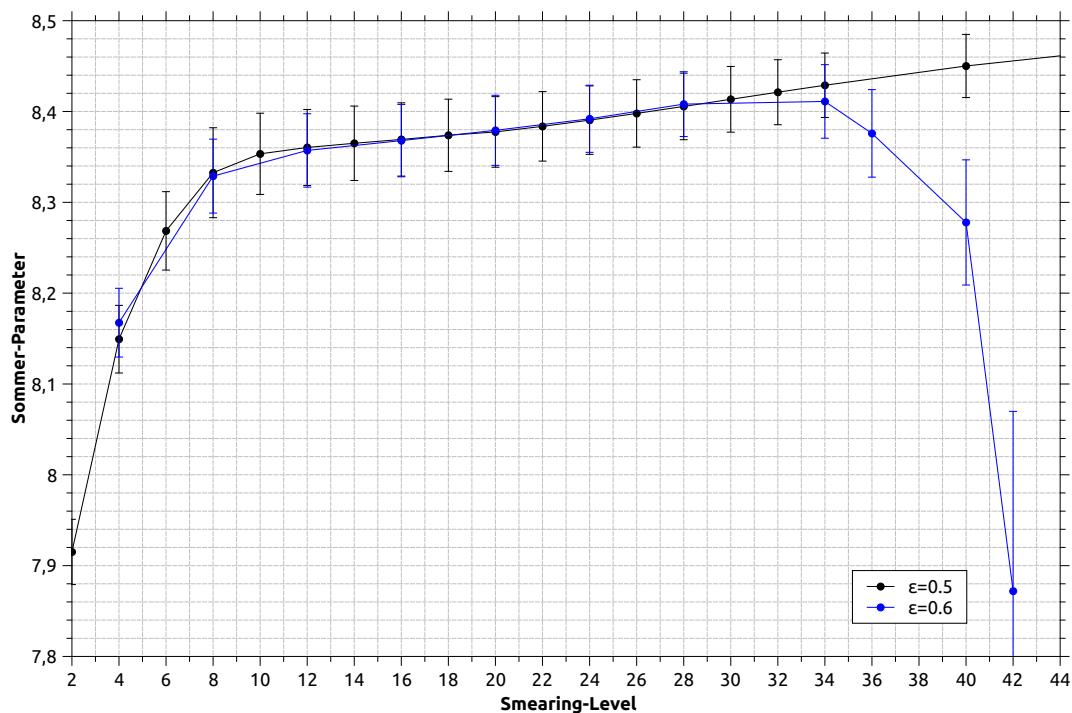


Abbildung 4.5.2.: Darstellung des r_0 -Verlaufs für $\varepsilon = 0.4$.

Abbildung 4.5.3.: Darstellung des r_0 -Verlaufs für $\varepsilon = 0.6$.

Die mit dem APE-Parameter $\varepsilon = 0.7$ geschmierten Daten können vom Programm bereits ab Smearing-Level 16 schlecht und darauf folgend gar nicht mehr berechnet werden, weshalb sie hier nicht dargestellt wurden.

In den Abb. 4.5.1 und 4.5.2 ist zu erkennen, dass die verschieden geschmierten Daten eine große Übereinstimmung mit den Referenzdaten zeigen. Im Rahmen des Fehlers stimmen alle Datenpunkte für $\varepsilon = 0.3$ und $\varepsilon = 0.4$ mit den Referenzdaten überein - auch beim nicht dargestellten Smearing-Level 4.

Durchaus interessant ist das Verhalten der $\varepsilon = 0.6$ -Daten. In Abb. 4.5.3 kann zunächst eine sehr gute Übereinstimmung mit den Referenzdaten bei niedrigen Smearing-Levels erkannt werden. Doch ab etwa Smearing-Level 34 sinkt der Sommer-Parameter bei steigendem Fehler kontinuierlich ab, bis er schließlich ab Level 44 vom Analyseprogramm gar nicht mehr berechnet werden kann.

In einem später folgenden Abschnitt soll hierauf noch genauer eingegangen werden.

4.5.3. Skalenvergleich

Wie bei den HYP-geschmierten Daten fällt hier ebenfalls auf, dass sich die mit verschiedenen APE-Parametern geschmierten Daten gegenüber den Referenzdaten lediglich durch eine Streckung der Smearing-Level-Achse zu unterscheiden scheinen, wenn von den $\varepsilon = 0.6$ -Daten abgesehen wird.

Um diese Hypothese zu verifizieren und auch zu quantifizieren, bietet sich also eine Untersuchung an, die schon bei den HYP-Daten in Abschnitt 4.4.3 interessante Erkenntnisse brachte: Ein Vergleich der Smearing-Level-Skalen.

Durch das in Abschnitt 4.4.3 beschriebene Verfahren zum Vergleich zweier Smearing-Level-Skalen (siehe S. 149), wurden die Zusammenhänge dieser Skalen ermittelt. Hier soll nun eine grafische Darstellung der Ergebnisse folgen.

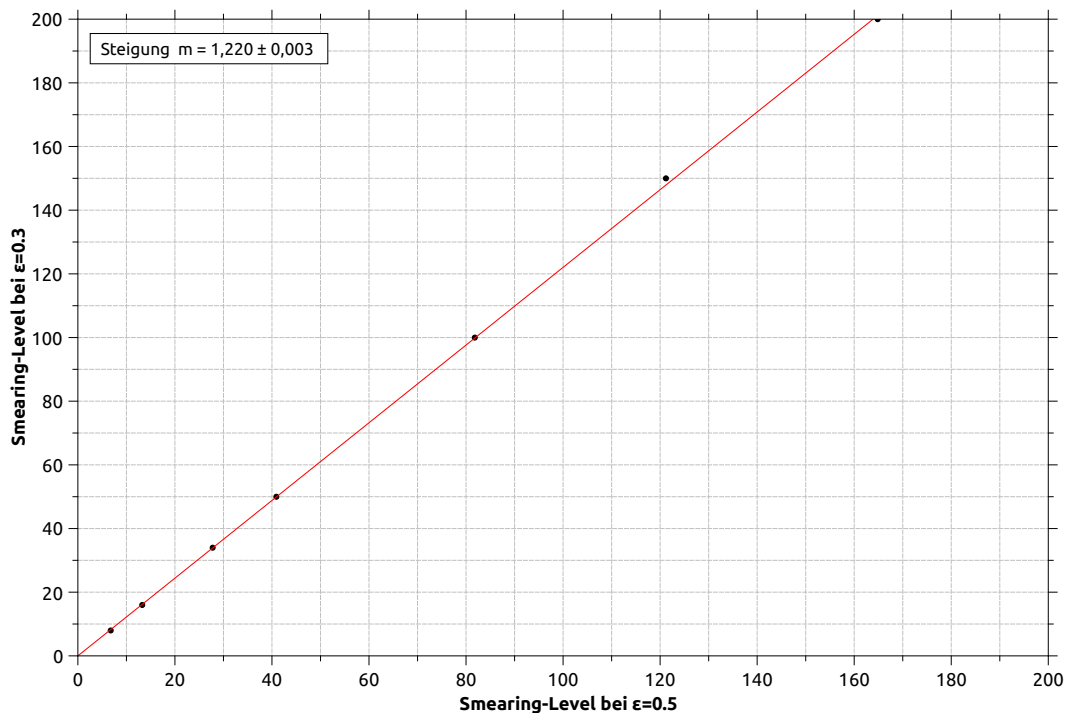
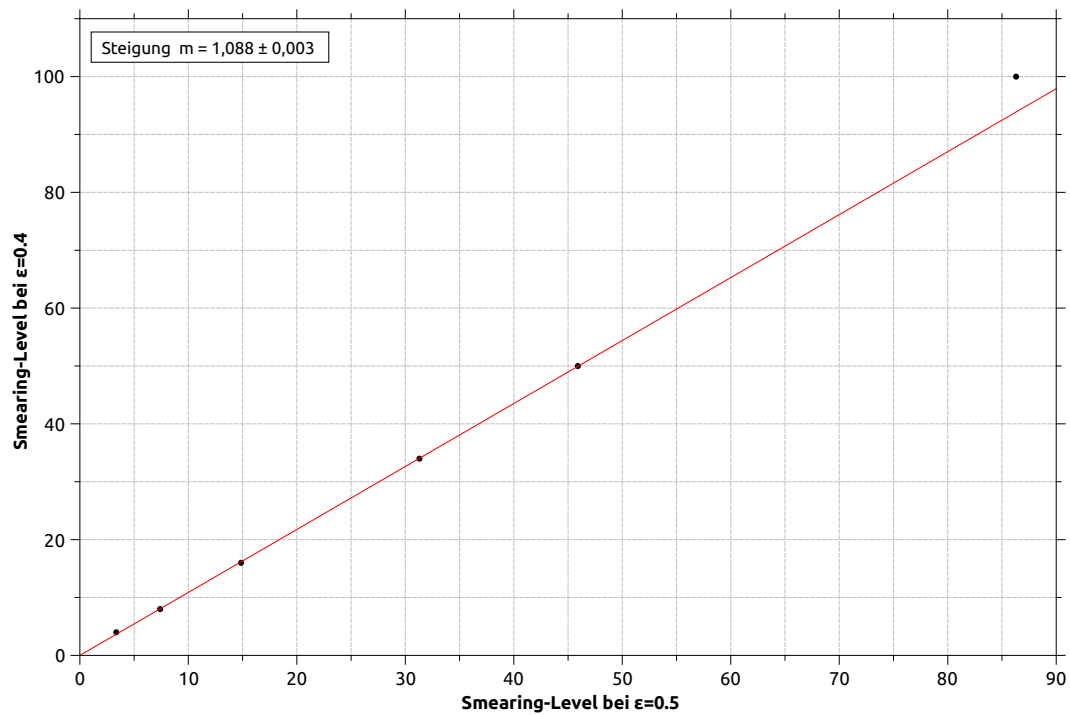
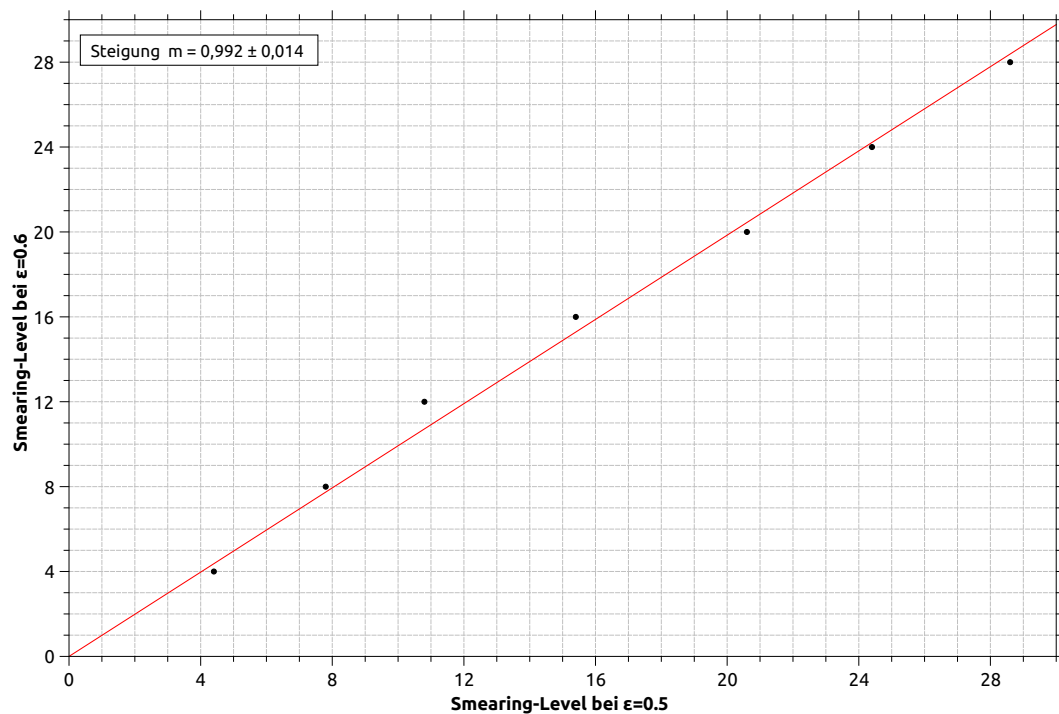


Abbildung 4.5.4.: In dieser und den zwei folgenden Abb. stellen die Punkte diejenigen Smearing-Levels dar, bei denen die r_0 -Werte der verschieden geschmierten Daten übereinstimmen. Hier dargestellt ist das Skalenverhalten der mit $\varepsilon = 0.3$ geschmierten Daten. Gefittet wurden die Daten durch die Funktion $y = mx$.

Abbildung 4.5.5.: Skalenverhalten der mit $\epsilon = 0.4$ geschmierten Daten.Abbildung 4.5.6.: Skalenverhalten der mit $\epsilon = 0.6$ geschmierten Daten.

Es zeigt sich ein klar linearer Zusammenhang der Skalen. Die Ergebnisse für verschiedene APE-Parameter unterscheiden sich demnach nur dadurch, wie viele Smearing-Levels für einen bestimmten Wert von Nöten sind - ganz so, wie es schon beim Vergleich von HYP- und APE-Smearing-Verfahren gezeigt wurde.

Zur Extraktion des linearen Steigungsfaktors m wurde für den Fit der Daten bei $\varepsilon = 0.4$ (siehe Abb. 4.5.5) der letzte Punkt weggelassen, weil dieser sehr schlecht zu bestimmen ist. Bei diesem Punkt muss ein Vergleich der Verläufe in Abb. 4.5.2 bei Smearing-Level 100 durchgeführt werden. Der Referenzverlauf ($\varepsilon = 0.5$) zeigt an dieser Stelle sein Maximum und dementsprechend eine sehr geringe Steigung. Somit ist das Smearing-Level, bei dem das Referenz- r_0 mit dem r_0 bei $\varepsilon = 0.4$ übereinstimmt, nur ungenau zu bestimmen.

Das Ergebnis des Skalenvergleichs für die mit $\varepsilon = 0.6$ geschmierten Daten (Abb. 4.5.6) ist überraschend. Der lineare Steigungsfaktor m ist im Rahmen des Fehler 1.²⁷ Die beiden Skalen scheinen hier also nicht linear gegeneinander gestaucht oder gestreckt zu sein, wie es bei den anderen Parametern der Fall ist. Aufgrund der hohen Unsicherheit, der das Verfahren zur Bestimmung der Daten der Geraden unterliegt, kann dies aber nicht mit Sicherheit gesagt werden.

Um zu demonstrieren, dass sich die Werte für r_0 für verschiedene APE-Parameter ε tatsächlich nur durch eine Streckung/Stauchung der Smearing-Level-Skala unterscheiden, sollen nun Darstellungen folgen, in denen die Daten durch angepasste Skalen zur Deckung gebracht wurden (Abbildungen 4.5.7 und 4.5.8). Exemplarisch soll auch die Übereinstimmung des relativen Fehlers zwischen den Daten bei $\varepsilon = 0.5$ und $\varepsilon = 0.3$ bei angepassten Skalen in Abb. 4.5.9 gezeigt werden.

Die untere Skala in den folgenden Plots entspricht der Skala der $\varepsilon = 0.5$ -Daten, die obere Skala der $\varepsilon \neq 0.5$ -Daten.

²⁷Es sei an dieser Stelle noch einmal betont, dass die Fehler der Steigung nur einen groben Ansatzpunkt darstellen und vermutlich weit unter den realen Fehlern liegen.

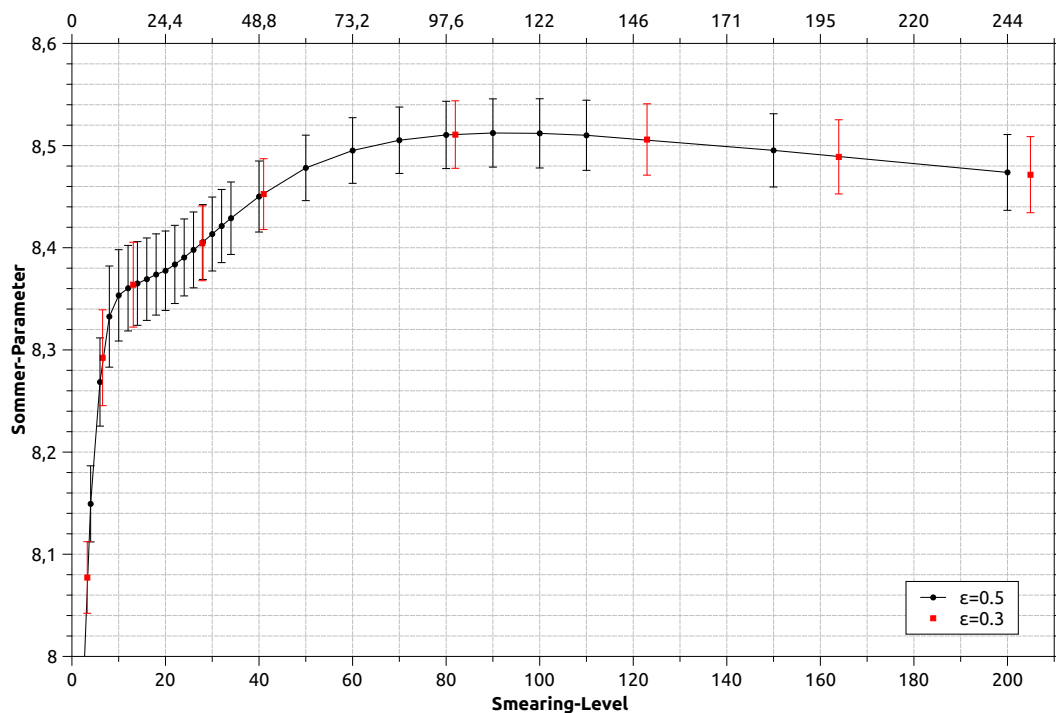


Abbildung 4.5.7.: Verläufe des Sommer-Parameters r_0 für die Parameter $\varepsilon = 0.3$ und $\varepsilon = 0.5$ bei angepassten Skalen.

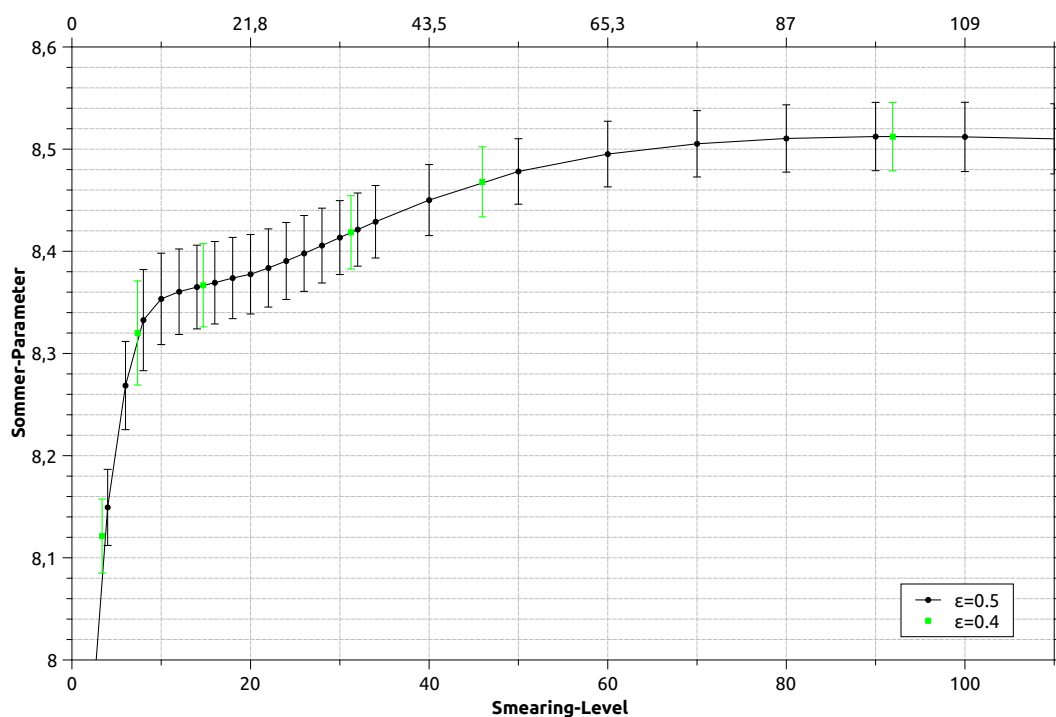


Abbildung 4.5.8.: Verläufe des Sommer-Parameters r_0 für die Parameter $\varepsilon = 0.4$ und $\varepsilon = 0.5$ bei angepassten Skalen.

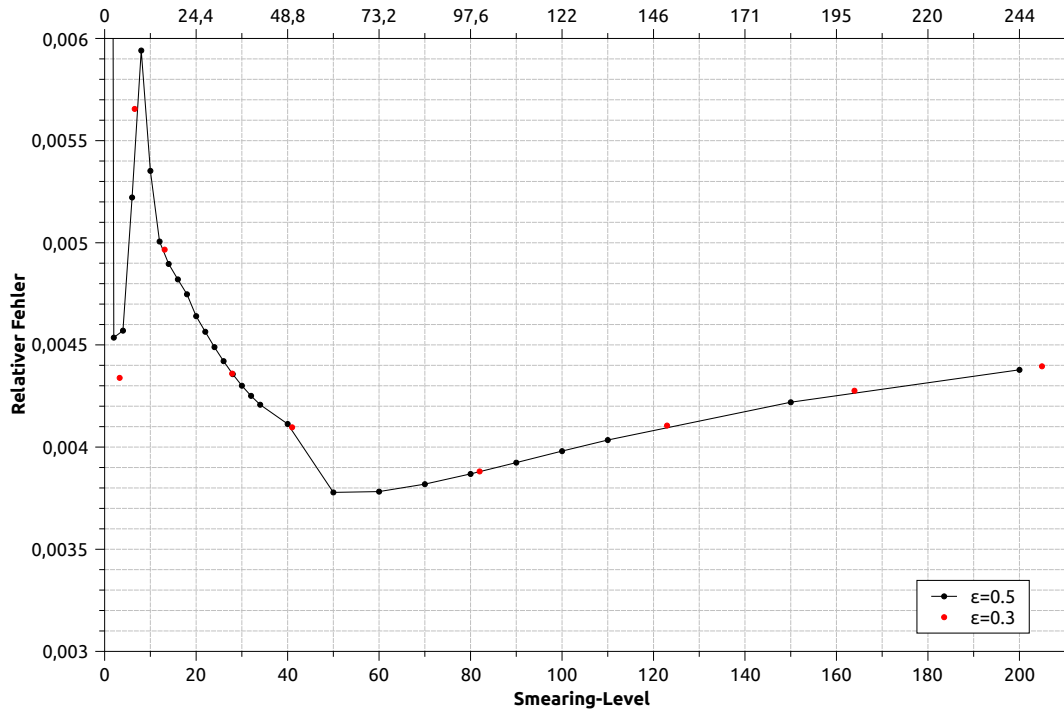


Abbildung 4.5.9.: Verlauf des relativen statistischen Fehlers von r_0 für $\epsilon = 0.3$ und $\epsilon = 0.5$ bei angepassten Skalen.

4.5.4. Untersuchung der $\epsilon = 0.6$ -Daten bei den Levels 34 bis 42

Die Daten, die mit einem Parameter $\epsilon > 0.5$ geschmiert wurden, zeigen ein ungewöhnliches Verhalten. Das betrifft die $\epsilon = 0.6$ - und $\epsilon = 0.7$ -Daten, wobei für letztere keine ausreichende Datengrundlage zur Verfügung steht. Insbesondere von Interesse ist, warum der Sommer-Parameter einen sehr starken Abfall zeigt.

Im Folgenden soll deshalb eine Untersuchung der $\epsilon = 0.6$ -Daten bei den Levels 34-42 durchgeführt werden, bei welchen sich ein schneller Abfall des Sommer-Parameters und ein starker Anstieg des Fehlers zeigt (Abb. 4.5.2). Hierfür bietet sich zunächst eine Analyse des zeitabhängigen Potentials $V(r, t)$ an, das die Effekte des Smearing-Verfahrens auf die Wilson-Loops ohne Verfälschung durch Fits darstellen sollte.

Untersucht werden soll hier das $V(r, t)$, welches von den Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2 verwendet wird.

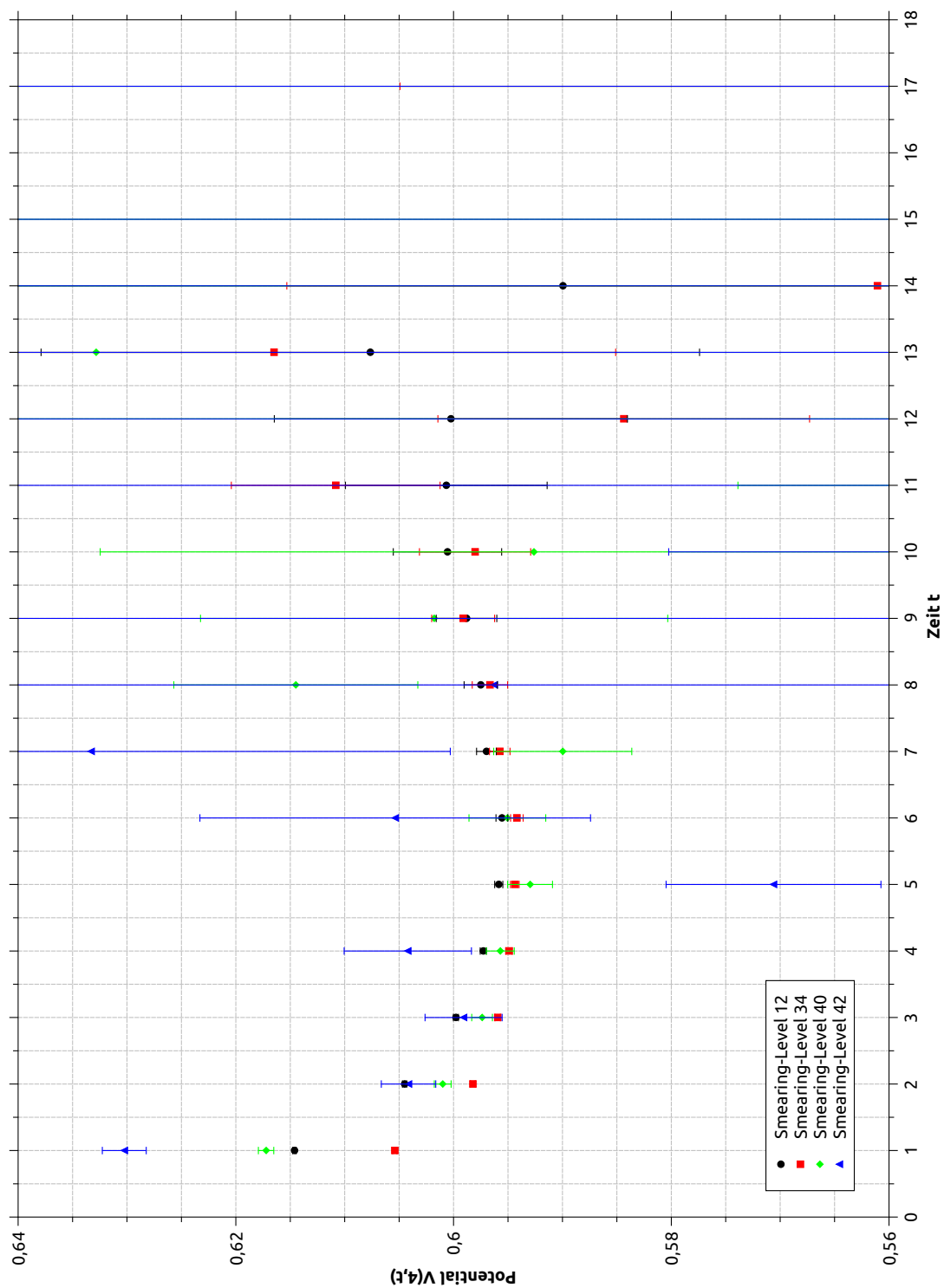


Abbildung 4.5.10.: Darstellung des Potentials $V(r,t)$ für $r = 4$ für verschiedene mit $\varepsilon = 0.6$ APE-gesmierte Smearing-Levels.

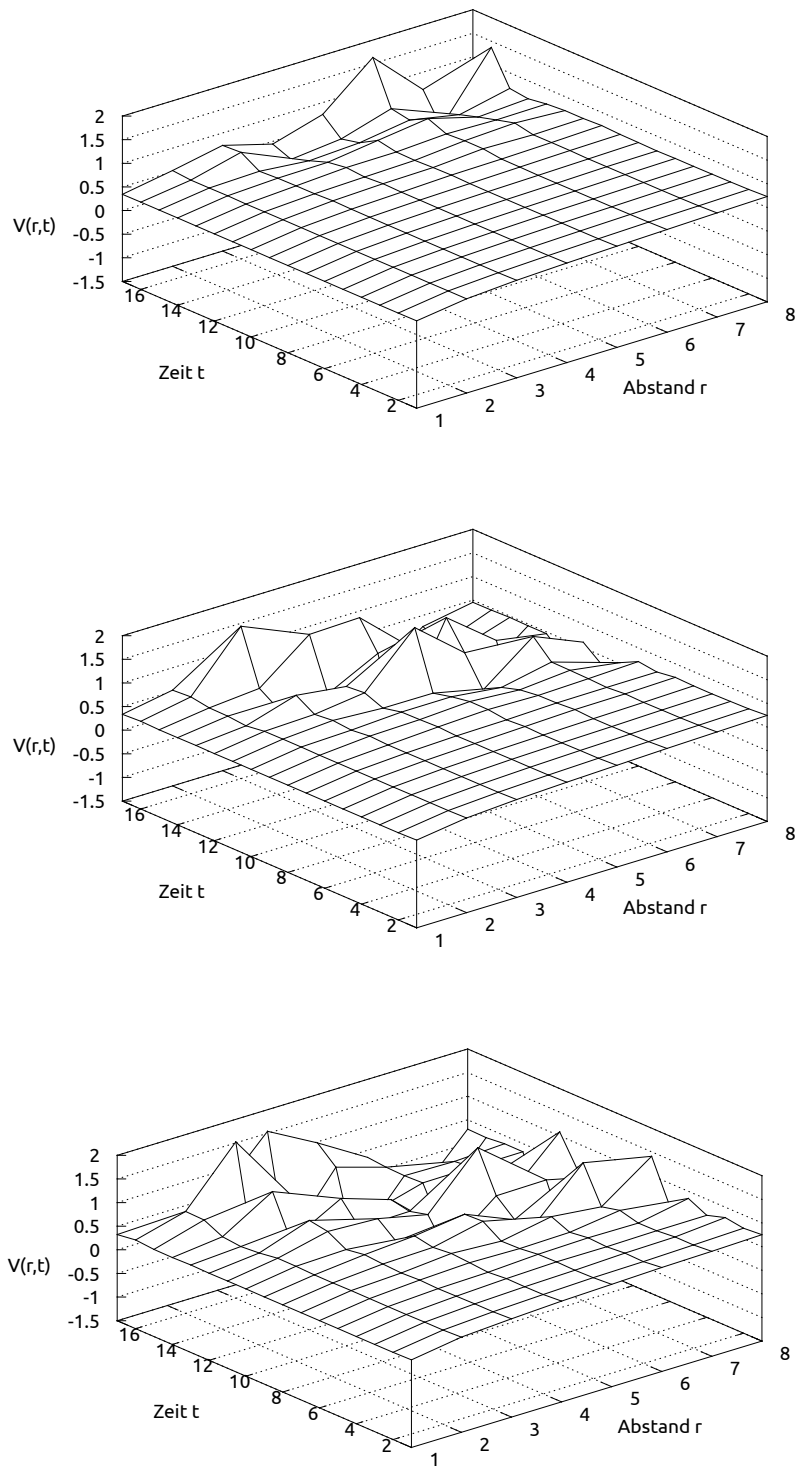


Abbildung 4.5.11.: Dreidimensionale Darstellung des Potentials $V(r,t)$ für die Levels 34, 40 und 42 (von oben nach unten).

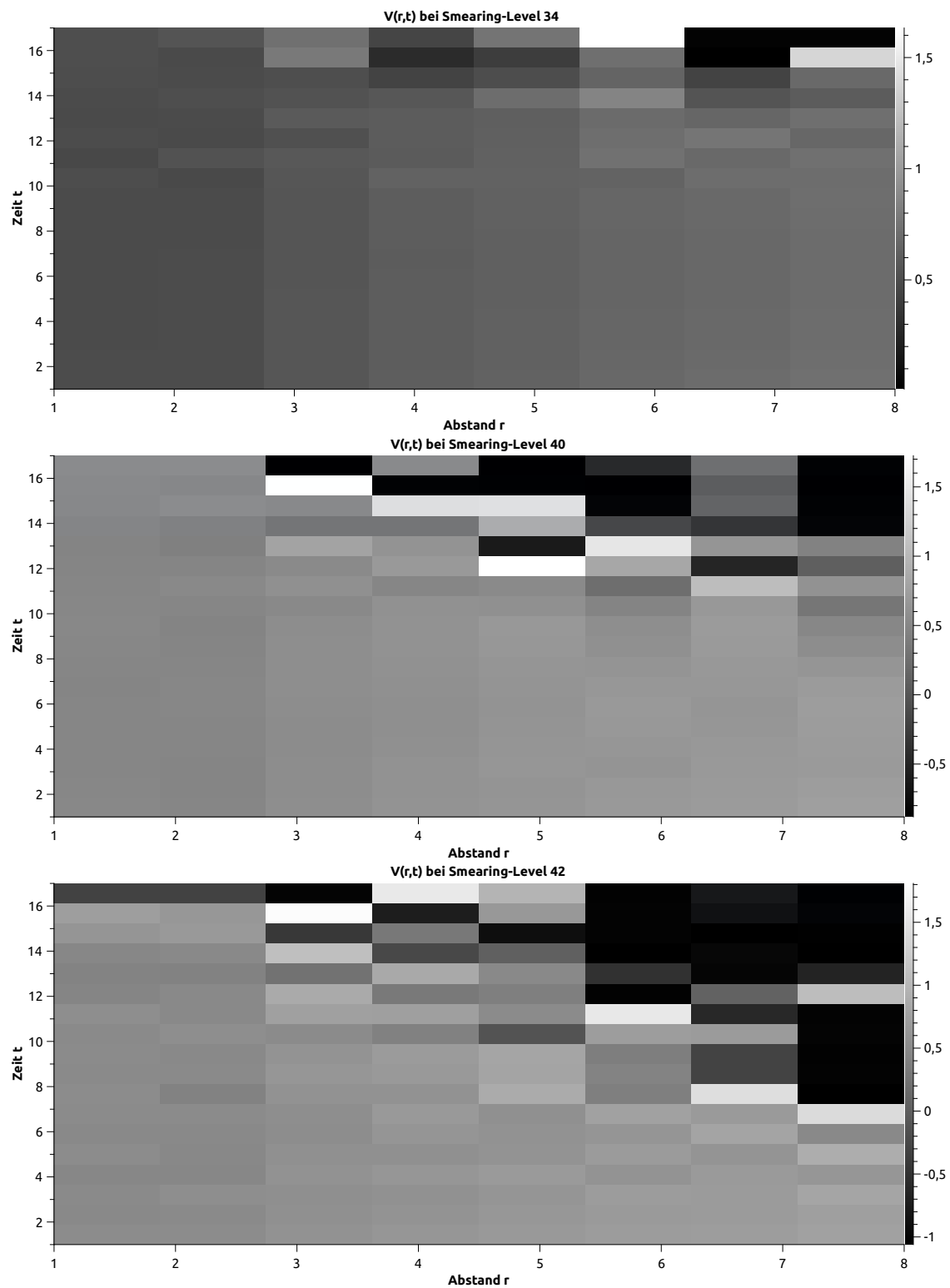


Abbildung 4.5.12.: Darstellung des Potential $V(r,t)$ durch Graustufen-Farbskala für die Levels 34, 40 und 42.

In Abb. 4.5.10 ist im interessanten Bereich kleiner Zeiten zu erkennen, dass die exponentielle Anregung zwischen den Levels 12 (schwarze Datenpunkte) und 34 (rote Datenpunkte) zunächst erwartungsgemäß absinkt, dann allerdings für die Levels 40 und 42 stark ansteigt.

Weiterhin zeigt sich, dass die höheren Smearing-Levels tendenziell früher zu rauschen beginnen. Besonders gut ist dies für die 42-fach geschmierten Daten ersichtlich, die bereits ab $t = 4$ stark verrauschte Werte für r_0 liefern. In diesem Zusammenhang sei noch einmal erwähnt, dass die verwendeten Smearing-Techniken lediglich in räumlicher und nicht in zeitlicher Richtung schmieren.

Die Plots in Abbildung 4.5.11 zeigen das zeitabhängige Potential $V(r, t)$ in dreidimensionaler Darstellung. Hier kann die allgemeine Tendenz beobachtet werden, dass das Rauschen mit steigendem Smearing-Level zunimmt. Gut sichtbar wird dies auch in Abb. 4.5.12, in welcher die Werte für $V(r, t)$ durch Graustufen dargestellt werden.

Die Extraktion von $V(r)$ geschieht bei Methode 1.1a durch Fit von $V(r, t)$ für festes r , wodurch nach und nach die einzelnen $V(r)$ -Datenpunkte ermittelt werden. Dies entspricht in Abb. 4.5.12 einer Betrachtung der Daten in *vertikaler* Richtung für festes r . Insbesondere bei Smearing-Level 42 zeigen diese zu fittenden Daten, mit Ausnahme der kleinsten Abstände r , ein starkes Rauschen selbst bei kleinen Zeiten, wodurch natürlich die Berechnung von $V(r)$ weitaus unzuverlässiger und letztendlich unmöglich wird.

Das Rauschen des zeitabhängigen Potentials ist auf das Rauschen der Wilson-Loops selbst zurückzuführen. Zur Verdeutlichung sollen hier die Werte der Wilson-Loops in dreidimensionaler Darstellung aufgetragen werden.

Es stellt sich heraus, dass auch die Wilson-Loops für große Zeiten und Abstände (große temporale und spatiale Ausdehnungen der Schleife) stark verrauscht sind. Zudem zeigen sie bei steigendem Smearing-Level einen stärkeren exponentiellen Abfall, der in der folgenden Abbildung wie ein *Verkippen* der (logarithmisch dargestellten) Ebene wirkt.

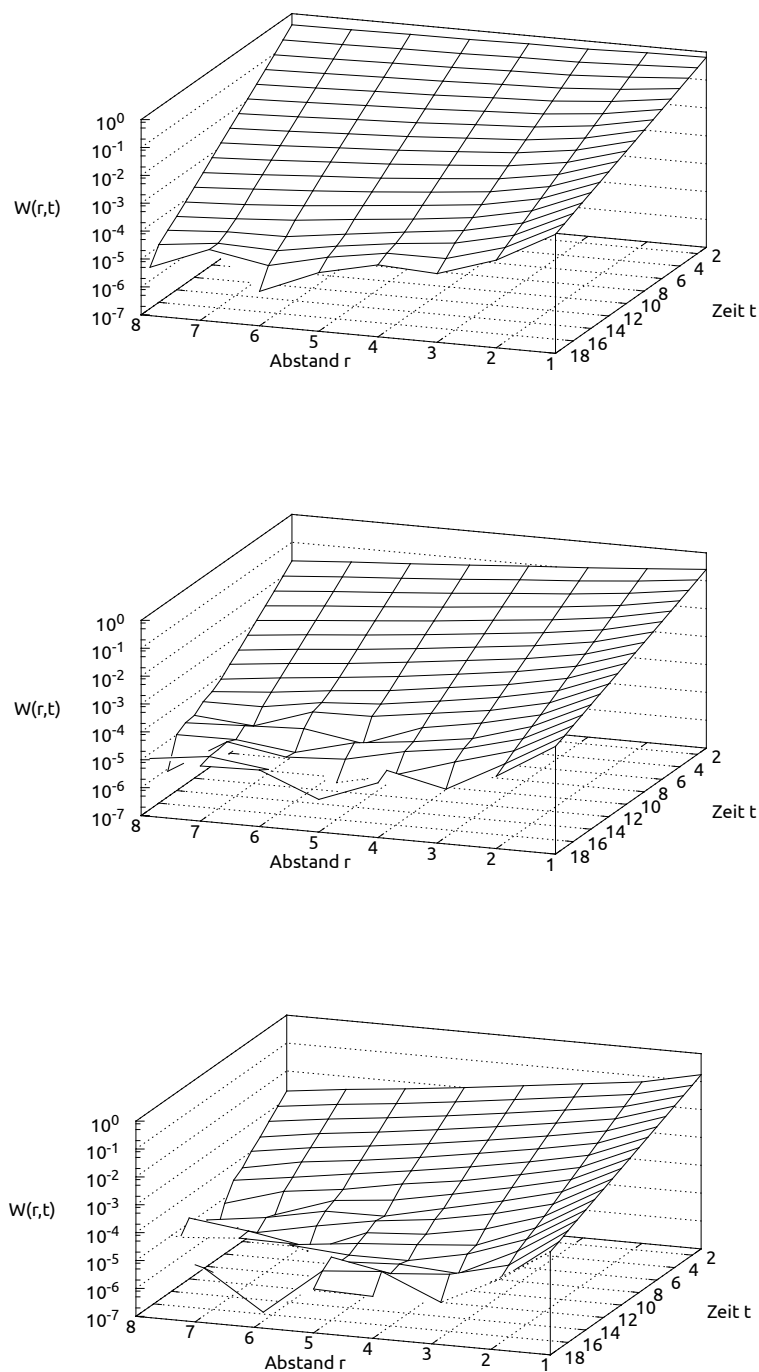


Abbildung 4.5.13.: Dreidimensionale Darstellung der Wilson-Loops $\langle W(r, t) \rangle$ für die Levels 34, 40 und 42. Negative Werte können aufgrund der logarithmischen Skala nicht dargestellt werden und erscheinen in den Plots nicht.

4.5.5. Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen

Ähnlich wie beim Vergleich der APE- und HYP-geschmierten Ergebnisse, ist es auch für verschiedene APE-Smearing-Parameter interessant zu erfahren, ob dort ein Unterschied im Konvergenzverhalten bezüglich der Konfigurationsanzahl existiert. Da aber bereits nachgewiesen wurde, dass sich verschiedenartig geschmierte Daten lediglich durch eine andere Smearing-Level-Skalierung unterscheiden, sollten sich die Verläufe von r_0 für verschieden viele Konfigurationen wieder höchstens systematisch voneinander unterscheiden.

Exemplarisch sollen aber der Vollständigkeit wegen die Verläufe der $\varepsilon = 0.5$ - und $\varepsilon = 0.3$ -Daten bei den Smearing-Levels 80 bzw. 50 verglichen werden.

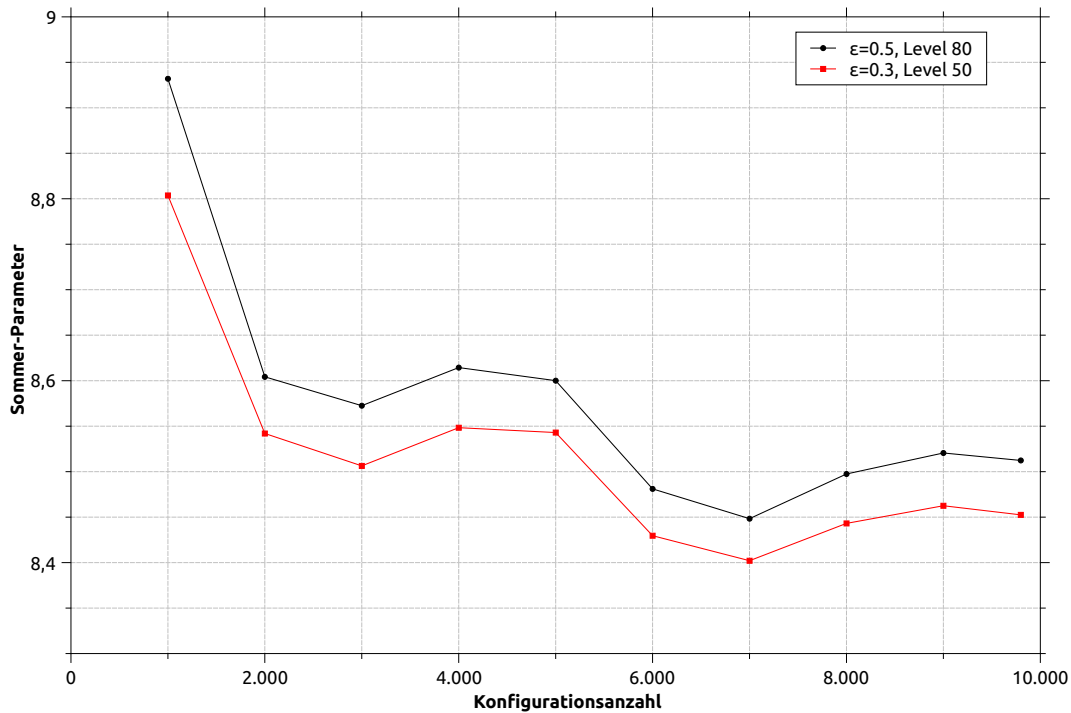


Abbildung 4.5.14.: Verlauf des Sommer-Parameters für verschieden viele Konfigurationen. Vergleich von Methode 1.1a für verschiedene APE-Parameter.

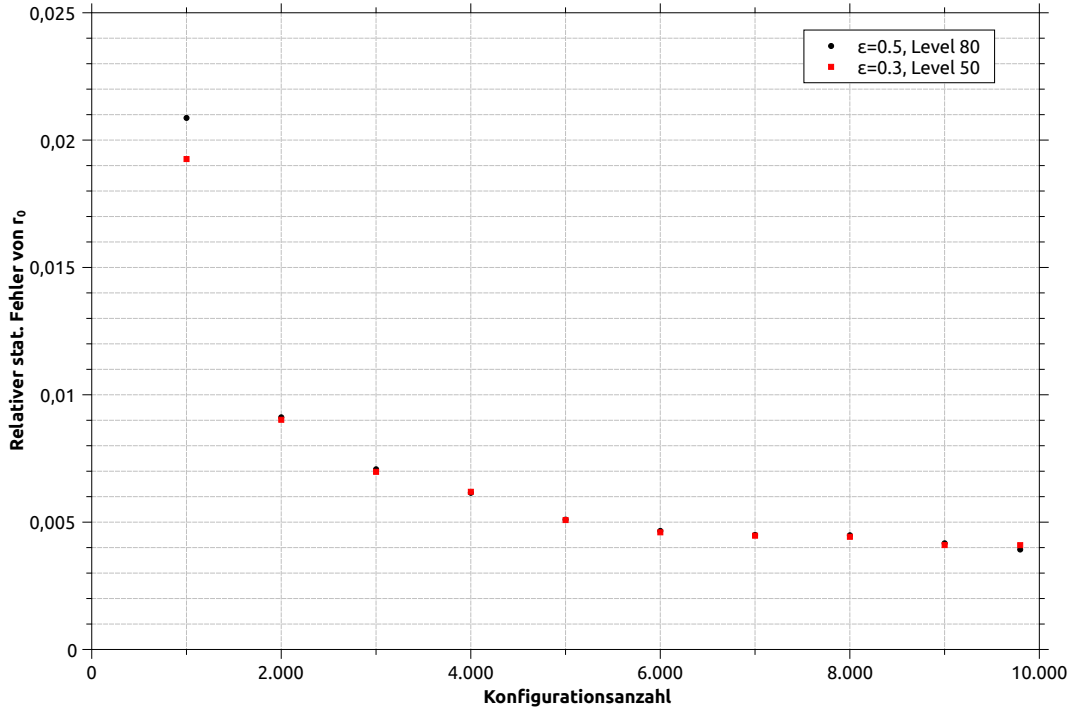


Abbildung 4.5.15.: Relativer Fehler von r_0 bzgl. der Anzahl der Konfigurationen. Vergleich von Methode 1.1a für verschiedene APE-Parameter.

Die Verläufe des Sommer-Parameters unterscheiden sich wie in den bisherigen Untersuchungen zur Abhängigkeit von der Konfigurationsanzahl lediglich systematisch, genau wie es erwartet wurde. Ebenso sind die relativen Fehler wieder sehr ähnlich und zeigen für höhere Smearing-Levels eine große Übereinstimmung.

Dass hier die Daten der unterschiedlichen Smearing-Parameter beim Smearing-Level 80 bzw. 50 verwendet wurden, hat lediglich den Grund, dass diese beiden Datenpunkte als Messdaten vorliegen. Prinzipiell ist es unerheblich, welche Smearing-Levels miteinander verglichen werden, weil in Unterabschnitt 4.3.7 bereits gezeigt wurde, dass sich die Daten für unterschiedliche Smearing-Levels nur systematisch voneinander unterscheiden.

4.5.6. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse

Skalenverhalten

Für die untersuchten APE-Parameter $\epsilon = 0.4$ und $\epsilon = 0.3$ wurde nachgewiesen, dass sich die Verläufe des Sommer-Parameters lediglich durch eine lineare Streckung der Smearing-Level-Achse vom Verlauf bei $\epsilon = 0.5$ unterscheiden. Genauso wie es schon für das HYP-

Smearing-Verfahren nachgewiesen wurde, zeigen also auch unterschiedliche Parameter beim APE-Smearing kein qualitativ neues Verhalten. Es sind lediglich unterschiedlich viele Smearing-Iterationen notwendig, um das gleiche Ergebnis zu erzielen.

Der Grund, warum überhaupt eine *lineare* Streckung vorliegt, lässt sich anhand des Smearing-Radius verstehen. Wird angenommen, dass der Smearing-Radius tatsächlich ein Maß für die effektive Reichweite - sozusagen ein Maß für die *Stärke* des Smearing-Verfahrens - ist, so sollte der Sommer-Parameter unter Vernachlässigung anderer Effekte immer dann den gleichen Wert haben, wenn der Smearing-Radius

$$R_{\text{smear}} = \sqrt{\frac{\varepsilon N}{3}} \quad (4.5.1)$$

gleich ist. Formal muss dann also gelten:

$$r_0(R_1) = r_0(R_2), \text{ wenn } R_1 = R_2. \quad (4.5.2)$$

Letztere Bedingung ist nicht nur durch identische APE-Parameter und gleiche Iterationsanzahl zu erfüllen. Lediglich das Produkt εN muss gleich sein, damit der Sommer-Parameter in beiden Fällen identische Werte besitzt.

Werden nun zwei mit unterschiedlichem APE-Parameter ε geschmierte Sommer-Parameter-Verläufe in Smearing-Radius-Skalierung betrachtet,

$$r_0(R_1), r_0(R_2) \text{ mit } R_1 = \sqrt{\varepsilon_1} \sqrt{\frac{N}{3}}, R_2 = \sqrt{\varepsilon_2} \sqrt{\frac{N}{3}}, \quad (4.5.3)$$

so folgt wegen $R_1 = R_2 \cdot \sqrt{\varepsilon_1/\varepsilon_2}$ unmittelbar, dass

$$r_0(R_1) = r_0\left(R_2 \cdot \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}}\right) \quad (4.5.4)$$

bei gleichem Smearing-Level N gilt. Das bedeutet, dass die Verläufe des Sommer-Parameters für unterschiedliche Smearing-Parameter übereinstimmen, wenn die Skalierung angepasst wird. Dieser Skalierungsfaktor hängt dabei nur von den beiden Smearing-Parametern ab.

Bei den Untersuchungen zum Skalenverhalten wurde das Smearing-*Level* und nicht der Smearing-*Radius* als Skala verwendet. An der linearen Relation der Skalen ändert sich dadurch aber nichts, weil die Voraussetzung in Gleichung (4.5.2) mithilfe der Definition des Smearing-Radius auch direkt auf die Smearing-Level-Skalierung übertragen werden kann:

$$\begin{aligned} R_1 = R_2 &\Rightarrow \sqrt{\frac{\varepsilon_1 N_1}{3}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_2 N_2}{3}} \\ &\Rightarrow N_2 = \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} N_1. \end{aligned} \quad (4.5.5)$$

Die letzte Gleichung bedeutet anschaulich, dass die Berechnung der mit ε_2 geschmierten Daten $\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}N_1$ -viele Iterationen benötigt, um den gleichen r_0 -Wert zu berechnen, der aus den mit ε_1 geschmierten Daten nach N_1 -vielen Iterationen berechnet werden kann.

Für die Interpretation der vorliegenden Daten ist hier allerdings lediglich die lineare Relation, die die Skalen zueinander besitzen, wichtig. Wie sich nämlich zeigt, stimmen die Vorhersagen für den Streckungsfaktor nicht mit den beobachteten Werten überein. Dies zeigen die Werte der folgenden Tabelle:

ε	$m_{\text{Vorhergesagt}}$	$m_{\text{Beobachtet}}$
0.3	1.6	1.220 ± 0.003
0.4	1.2	1.088 ± 0.003
0.6	0.83	0.992 ± 0.014

Tabelle 4.12.: Gegenüberstellungen der vorgesagten und der tatsächlich beobachteten Werte für den Streckungsfaktor der Skalen gegenüber $\varepsilon = 0.5$ -Daten. Der vorhergesagte Wert ist gemäß Gleichung (4.5.5) durch $\frac{0.5}{\varepsilon}$ gegeben.

Die gemessenen Datenpunkte reichen nicht aus, um den genauen Zusammenhang für den Skalierungsfaktor zu ermitteln. Dies ist allerdings für die weitere Betrachtung auch nicht weiter relevant. Angemerkt werden soll hier noch lediglich, dass der Zusammenhang

$$N_2 = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2}} N_1 \quad (4.5.6)$$

an Stelle von Gleichung (4.5.5) weitaus passender wäre. In diesem Fall würden die Vorhersagen besser mit den beobachteten Werten übereinstimmen:

ε	$m_{\text{Vorhergesagt}}$	$m_{\text{Beobachtet}}$
0.3	1.291	1.220 ± 0.003
0.4	1.118	1.088 ± 0.003
0.6	0.913	0.992 ± 0.014

Tabelle 4.13.: Gegenüberstellungen der beobachteten und nach Gleichung (4.5.6) vorhergesagten Werte für den Streckungsfaktor der Skalen gegenüber der Daten mit $\varepsilon = 0.5$.

Dieser Zusammenhang ergäbe sich z.B., wenn die Definition

$$R''_{\text{smear}} = c\sqrt[4]{\varepsilon}\sqrt{N}, \quad (4.5.7)$$

für den Smearing-Radius verwendet würde. Für den Vergleich der Skalen ist der Parameter c nicht von Interesse, ebenso wie die genaue Ausführung der Formel. Damit der Zusammenhang in (4.5.6) erfüllt werden kann, muss lediglich

$$R''_{\text{smear}} \propto \varepsilon^l N^{l+2} \quad (4.5.8)$$

gelten. Es sei hier angemerkt, dass die vorgestellte alternative Definition für den Smearing-Radius $R'_{\text{smear}} = \varepsilon N$ diesen Zusammenhang nicht erfüllt (vgl. Gleichung (3.2.12)).

Verhalten der mit $\varepsilon = 0.6$ geschmierten Daten

Qualitativ bisher in keiner Untersuchung beobachtetes Verhalten zeigte sich bei der Untersuchung der mit $\varepsilon > 0.5$ geschmierten Daten, insbesondere für $\varepsilon = 0.6$. Dort zeigen die Daten bei kleinen Smearing-Levels eine große Übereinstimmung mit den Referenzdaten bei $\varepsilon = 0.5$, bis der Sommer-Parameter-Verlauf zwischen den Levels 34 und 42 plötzlich *abstürzt*. Die Daten bei $\varepsilon = 0.7$ zeigen dieses Verhalten ebenfalls, allerdings bei einem so niedrigen Smearing-Level, dass keine auswertbaren Daten vorlagen.

Für die Untersuchung des *Absturz* wurde das zeitabhängige Potential betrachtet. Dieses zeigt im Bereich des plötzlichen Absinkens zwei Effekte. Zum einen scheint es, als würden die angeregten Zustände, die durch das Smearing eigentlich unterdrückt werden sollten, mit steigendem Smearing-Level wieder ansteigen (siehe Abb. 4.5.10). Auf der anderen Seite zeigt sich ein mit steigendem Smearing-Level zunehmendes Rauschen in $V(r, t)$. Dieses Rauschen erscheint auch für immer kleiner werdende r und t (siehe Abb. 4.5.11 und 4.5.12). Es konnte auf ein Rauschen in den Werten der Wilson-Loops selbst zurückgeführt werden (Abb. 4.5.13).

Die Datenpunkte für größere r und t werden aus Linkketten großer Ausdehnung gewonnen werden. Dementsprechend *stärker* wirkt sich bei diesen das Smearing aus. Dass das Rauschen allerdings innerhalb weniger Smearing-Iterationen so stark zunimmt und sich zudem auf kleinere r und t ausdehnt, ist unerwartet. Auch auffällig dabei ist, dass die Werte der Wilson-Loops für große räumliche Abstände - also große r - und steigendem Smearing-Level stark absinken. Scheinbar ist hier ein kritischer Punkt erreicht, an dem das Smearing-Verfahren einen Vorgang begünstigt, der die Werte der Wilson-Loops absinken lässt und bei immer kleineren werdenden r und t zu starkem Rauschen führt.

Vorteile einzelner Parameter

Die Untersuchungen legen nahe, dass der bisher immer benutzte Smearing-Parameter $\varepsilon = 0.5$ die besten Daten erzeugt. Größere Werte für ε führen scheinbar zu einem *Absturz* des Sommer-Parameters bei verhältnismäßig niedrigen Smearing-Levels.

Kleinere Parameter erzeugen hingegen die gleichen Daten, benötigen dafür aber eine größere Anzahl an Smearing-Iterationen. Somit benötigen Messungen mit solchen Parametern eine größere Rechenzeit bei gleichen Ergebnissen und sind deshalb von Nachteil. Natürlich sind hier die Parameter lediglich in großen Abständen getestet worden. Ein wirklich optimaler Wert für ε würde aber eine weitaus feinere Abtastung und somit viele weitere Untersuchungen erfordern.

Ähnliche Ergebnisse erbringt auch die Untersuchung in [Bon02]. Hier wird angegeben, dass der Parameter ε zur Produktion vernünftiger Werte unterhalb von 0.6 liegen muss.

4.6. Untersuchung des Variational Smearing-Verfahrens

Beim Variational Smearing ist, wie im Kapitel zu den theoretischen Grundlagen bereits erwähnt, eine Reduktion des Einflusses angeregter Zustände zu erwarten, was zu einem besseren Ergebnis für den Sommer-Parameter führen sollte. Statt lediglich Wilson-Loops eines Smearing-Levels zu untersuchen, werden bei diesem Verfahren Wilson-Loops, die sich aus mehreren Smearing-Levels zusammensetzen, zu einer Observable verbunden, um den gewünschten Grundzustand besonders gut beschreiben zu können.

Insbesondere aber in Hinblick auf den weitaus höheren Rechenbedarf, der quadratisch mit der Größe der Korrelationsmatrix steigt, ist eine genauere Untersuchung dieses Verfahrens wünschenswert.

4.6.1. Benutzte Parameter

Folgende Parameter wurden für die Ergebnisse dieses Abschnitts genutzt:

Gitter	$16^3 \times 36$, $\beta = 1.75$, $\kappa = 0.1490$
Anzahl ausgewerteter Konfigurationen	9798
Größe der Jackknife-Bins	10
Smearing-Methode	APE (Variational Smearing)
Smearing-Parameter	0.5

Tabelle 4.14.: Benutzte Parameter für die Daten.

Da das Variational Smearing-Verfahren keine eigenständige Smearing-Methode ist, sondern lediglich ein Smearing-Verfahren mit der Anwendung von Variationsmethoden verknüpft, ist in obiger Tabelle das benutzte Verfahren spezifiziert. Das APE-Verfahren findet hier Anwendung, weil in Abschnitt 4.4 gezeigt werden konnte, dass sich APE- und HYP-Smearing lediglich durch eine andere Smearing-Level-Skala unterscheiden und für das APE-Smearing-Verfahren viele Daten zum Vergleich zur Verfügung stehen.

4.6.2. Darstellung der Ergebnisse für die einzelnen Methoden

Zunächst folgt nun eine Darstellung der Variational Smearing-Ergebnisse für die verschiedenen Methoden. Dabei werden verschiedene Smearing-Level-Intervalle in der Korrelationsmatrix berücksichtigt; mit Ausnahme des in den Abbildungen dargestellten letzten Datenpunktes enthalten die 4×4 -Korrelationsmatrizen immer vier Smearing-Levels, die sich durch eine Differenz von wiederum vier Levels untereinander unterscheiden.

Der letzte Datenpunkt deckt ein weitaus größeres Intervall ab, wie in unten stehender Tabelle zu erkennen ist. In den Abbildungen dargestellt werden jeweils die Ergebnisse

der beiden Verfahren, die zur Bestimmung der dem Wilson-Loop entsprechenden Observable benutzt werden: Das *fixed vector*- und das *t-eigenvector*-Verfahren. Eine kurze Erläuterung und eine Referenz hierzu findet sich in Abschnitt 3.2.1.1.

Smearing-Levels in Korrelationsmatrix
{4, 8, 12, 16}
{20, 24, 28, 32}
{34, 38, 42, 46}
{48, 52, 56, 60}
{62, 66, 70, 74}
{80, 84, 88, 92}
{16, 40, 64, 88}

Tabelle 4.15.: Für die Korrelationsmatrix genutzte Smearing-Levels.

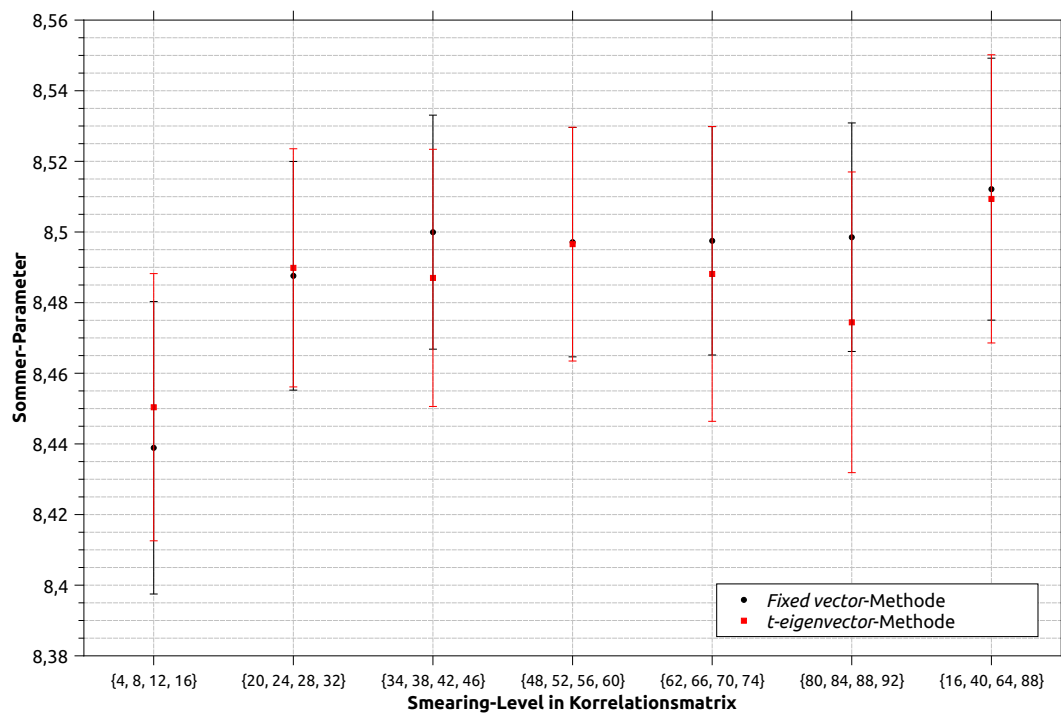


Abbildung 4.6.1.: Methode 1.1a: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen.

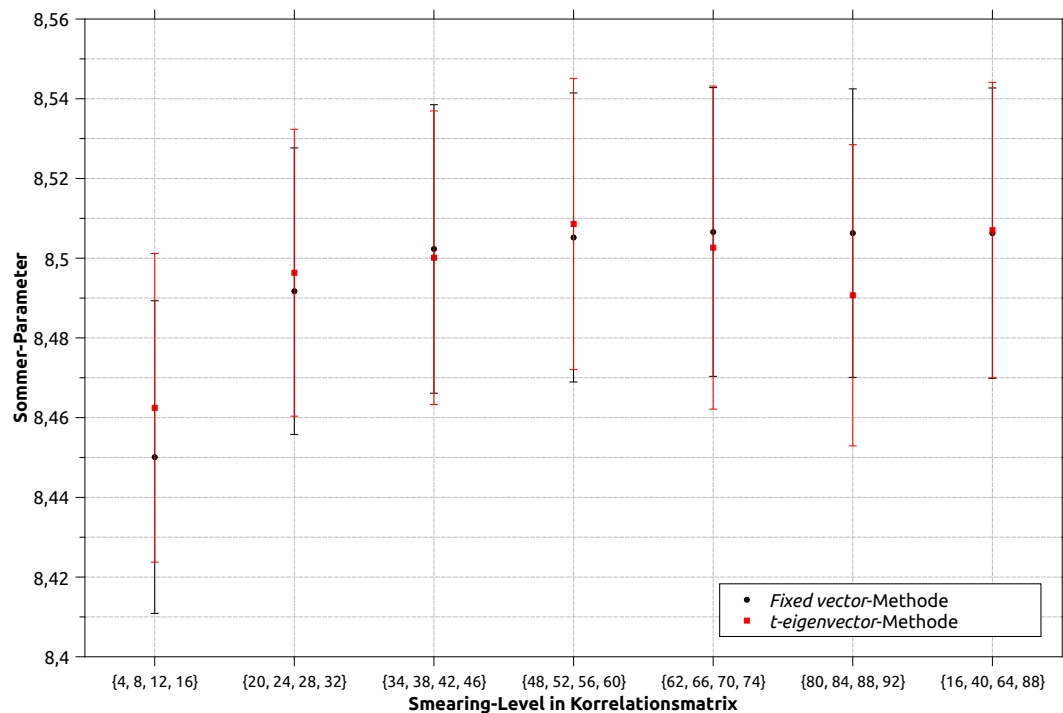


Abbildung 4.6.2.: Methode 1.1b: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen.

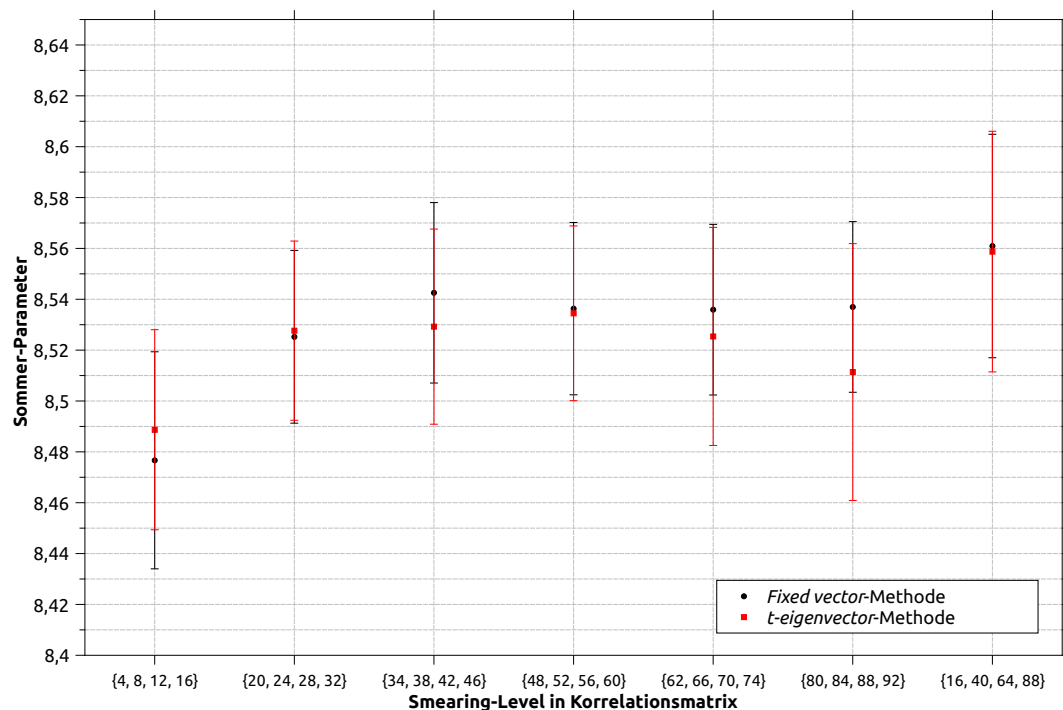


Abbildung 4.6.3.: Methode 1.1c: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen.

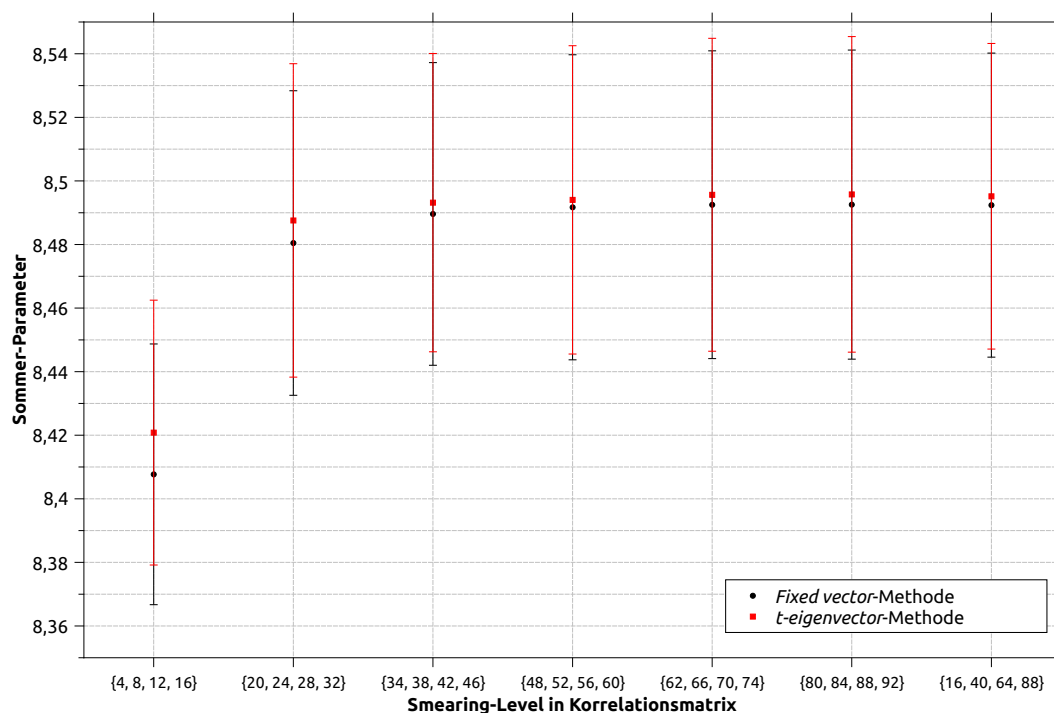


Abbildung 4.6.4.: Methode 1.2: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen.

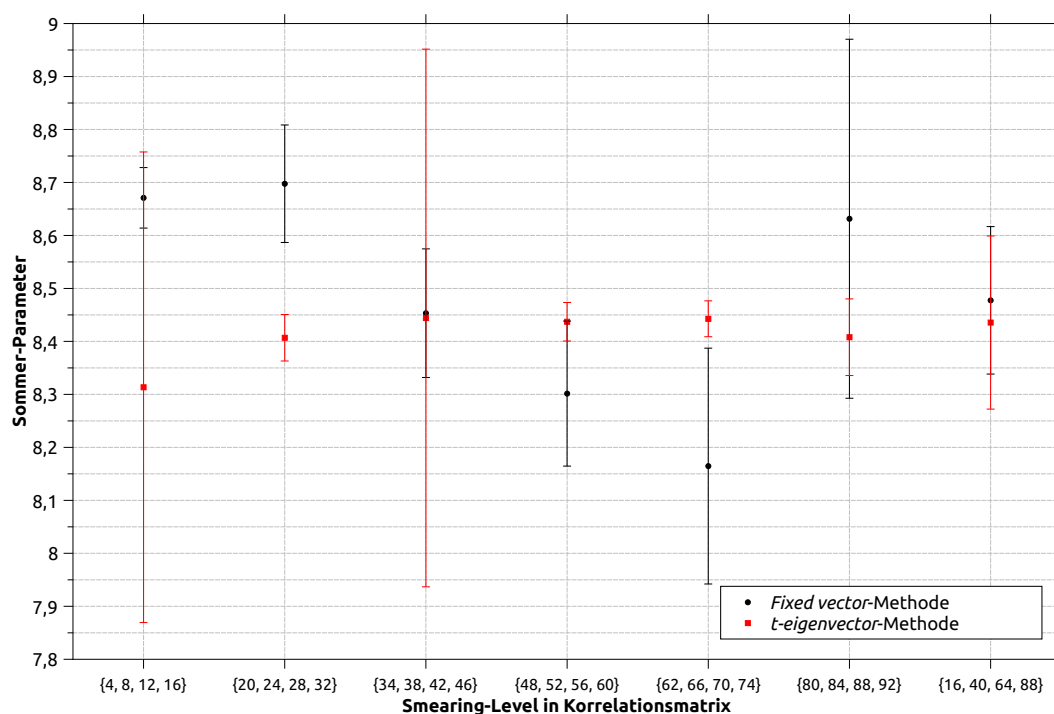


Abbildung 4.6.5.: Methode 2.1: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen.

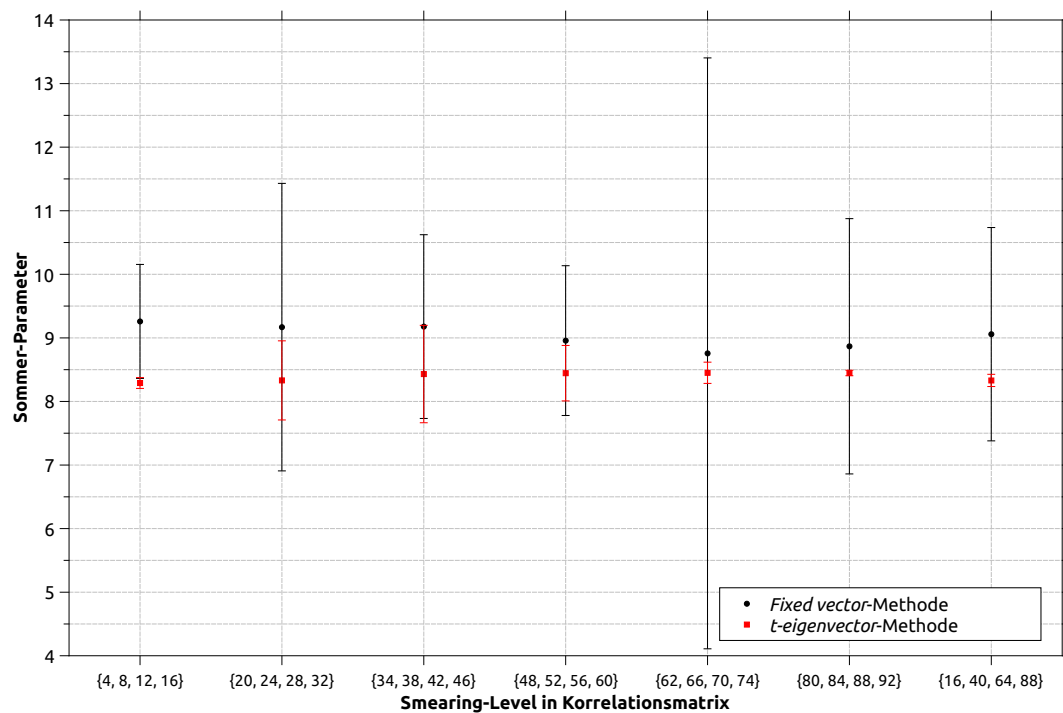


Abbildung 4.6.6.: Methode 2.2: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen.

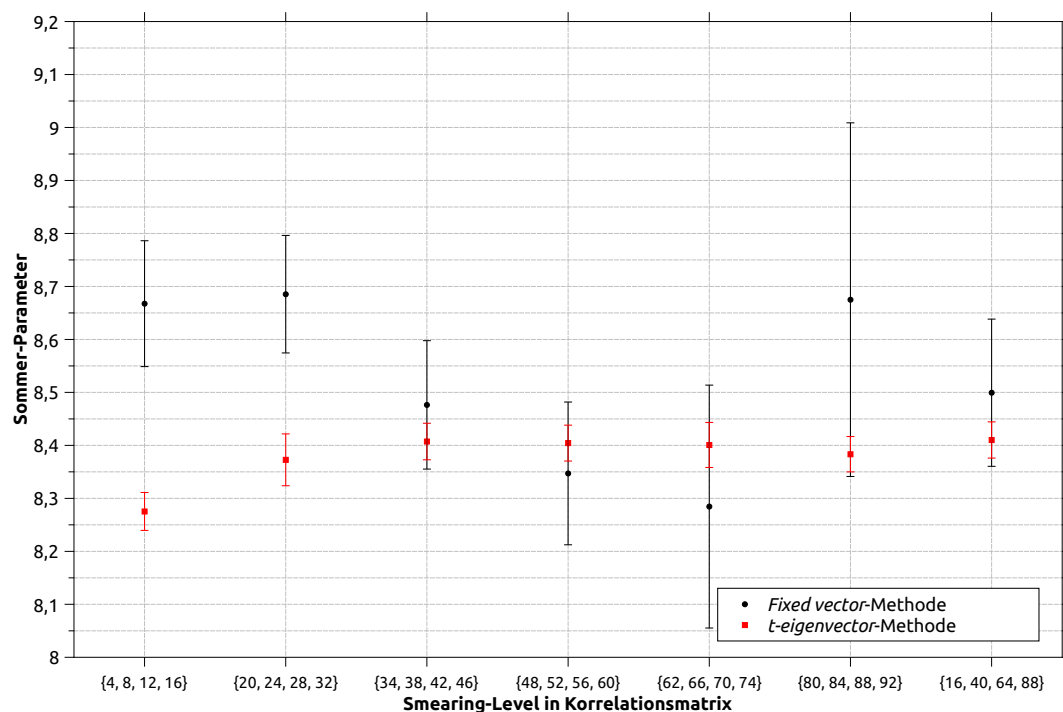


Abbildung 4.6.7.: Methode 3: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen.

Die Beschreibung der Daten soll separat für beide Verfahren geschehen.

fixed vector-Verfahren

Die Methoden 1.1a bis 1.1c und Methode 1.2 zeigen ein stabiles Verhalten. Die sich abzeichnende Tendenz ähnelt der beim Standard-Smearing: Der Sommer-Parameter ist für niedrige Smearing-Levels kleiner als für hohe Smearing-Levels. Scheinbar erreicht der Sommer-Parameter dann eine Art Plateau. Im Rahmen des Fehlers sind die Ergebnisse der genannten Methoden für alle Datenpunkte kompatibel.

Interessanterweise ähneln sich die Verläufe der Methoden 2.1 und 3 stark. Der Sommer-Parameter zeigt in beiden Fällen einen relativ starken Abfall zwischen den Smearing-Level-Intervallen $\{20, 24, 28, 32\}$ und $\{62, 66, 70, 74\}$. Bei diesen Methoden sind die Ergebnisse im Rahmen des Fehlers nicht für alle Datenpunkte kompatibel.

Methode 2.2 zeigt stark fluktuierende Werte mit großen Fehlern. Ein Vergleich mit den anderen Methoden zeigt auch, dass die Werte alle sehr hoch sind.

t-eigenvector-Verfahren

Die ersten drei Methoden ebenso wie Methode 1.2 zeigen hier einen sehr ähnlichen Verlauf im Vergleich zur *fixed vector*-Methode. Anders verhalten sich die Methoden 2.1, 2.2 und 3. Diese Methoden sind hier grundsätzlich stabiler, die Ergebnisse fluktuieren also weniger. Die Methoden 2.2 und 3 zeigen zudem einen grundsätzlich kleineren Fehler und Methode 2.2 ist im Vergleich zum *fixed vector*-Verfahren nicht erhöht.

4.6.3. Vergleich zwischen Standard- und Variational Smearing

Von besonderem Interesse ist auch der Vergleich der Ergebnisse mit denen des Standard-Smearing-Verfahrens. Das Standard-Smearing-Verfahren ist weitaus weniger rechenintensiv und hat dadurch bereits einen Vorteil. Folgen soll deshalb eine Untersuchung der Daten für jede Methode beim Standard- und Variational Smearing, wobei besonderes Augenmerk auf eventuelle Vor- und Nachteile gelegt werden soll.

Die Variational Smearing-Ergebnisse werden in den Abbildungen dabei als transparente Rechtecke dargestellt, deren Breite die Größe des Smearing-Level-Intervalls repräsentiert und deren Mitte die Größe des Wertes darstellt. Die Höhe der Rechtecke stellt die Unsicherheit des Wertes dar.

Für die Methoden 1.1a bis 1.1c und 1.2 sollen der Übersichtlichkeit wegen lediglich die Ergebnisse der *fixed vector*-Methode dargestellt werden. Wie im letzten Abschnitt gezeigt, unterscheiden sich *t-eigenvector*- und *fixed vector*-Methode dort nicht sehr stark. Im Gegensatz dazu sollen die Ergebnisse der Methoden 2.1, 2.2 und 3 für beide Verfahren gezeigt werden, weil hier starke Unterschiede bestehen.

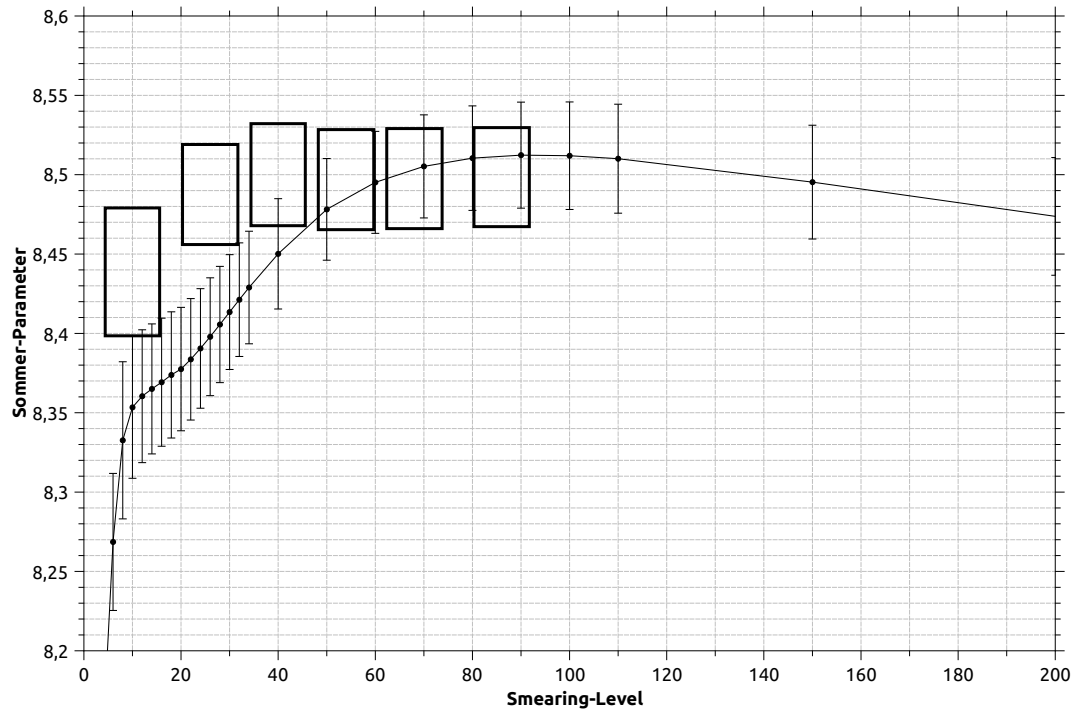


Abbildung 4.6.8.: Methode 1.1a: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*fixed vector*-Methode).

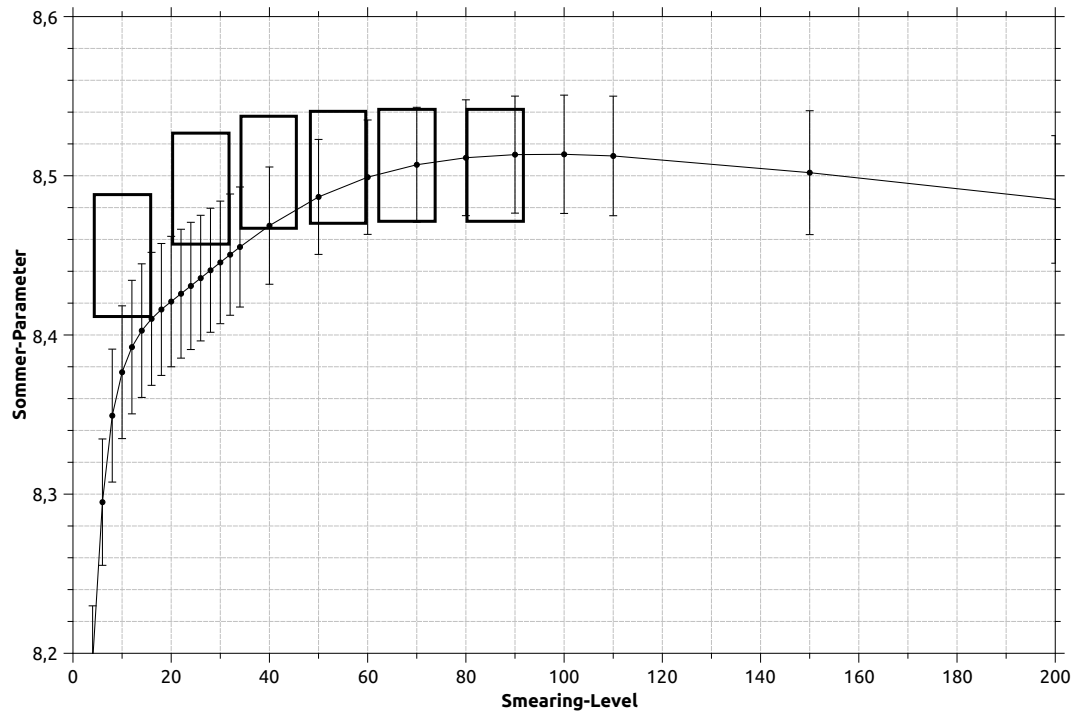


Abbildung 4.6.9.: Methode 1.1b: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*fixed vector*-Methode).

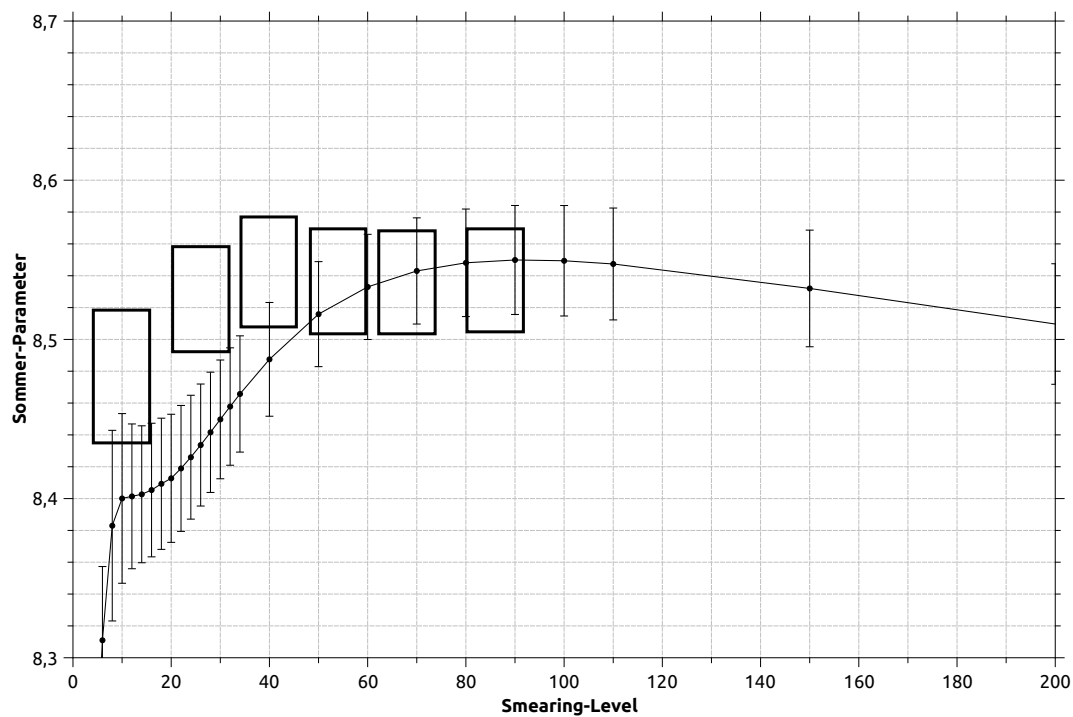


Abbildung 4.6.10.: Methode 1.1c: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*fixed vector*-Methode).

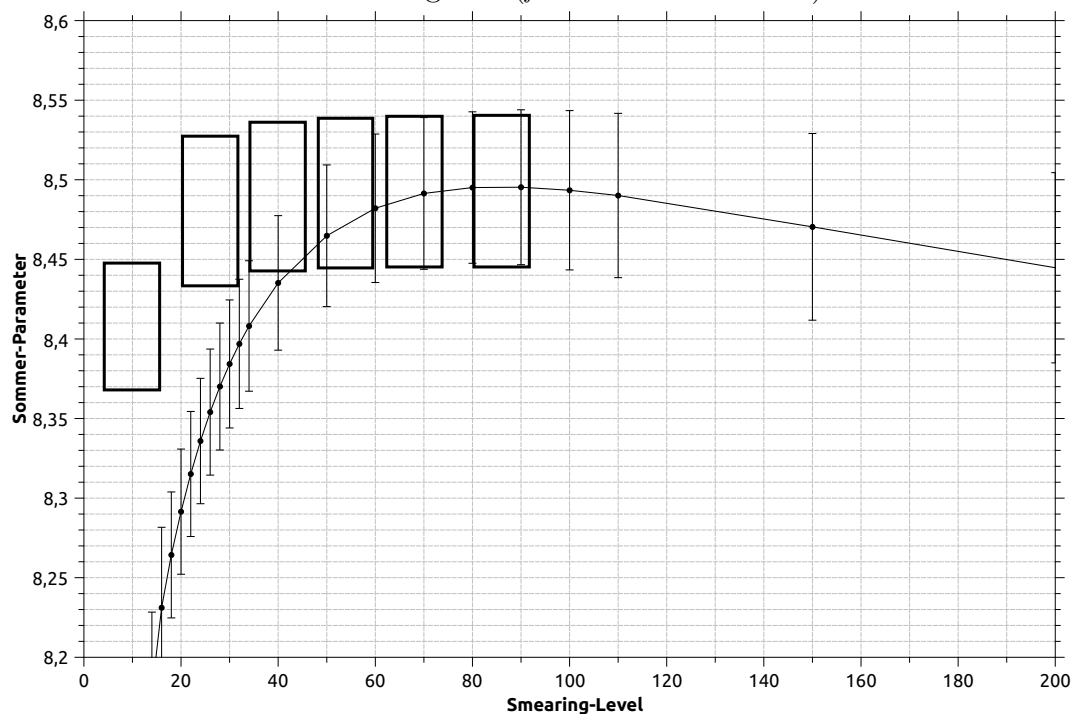


Abbildung 4.6.11.: Methode 1.2: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*fixed vector*-Methode).

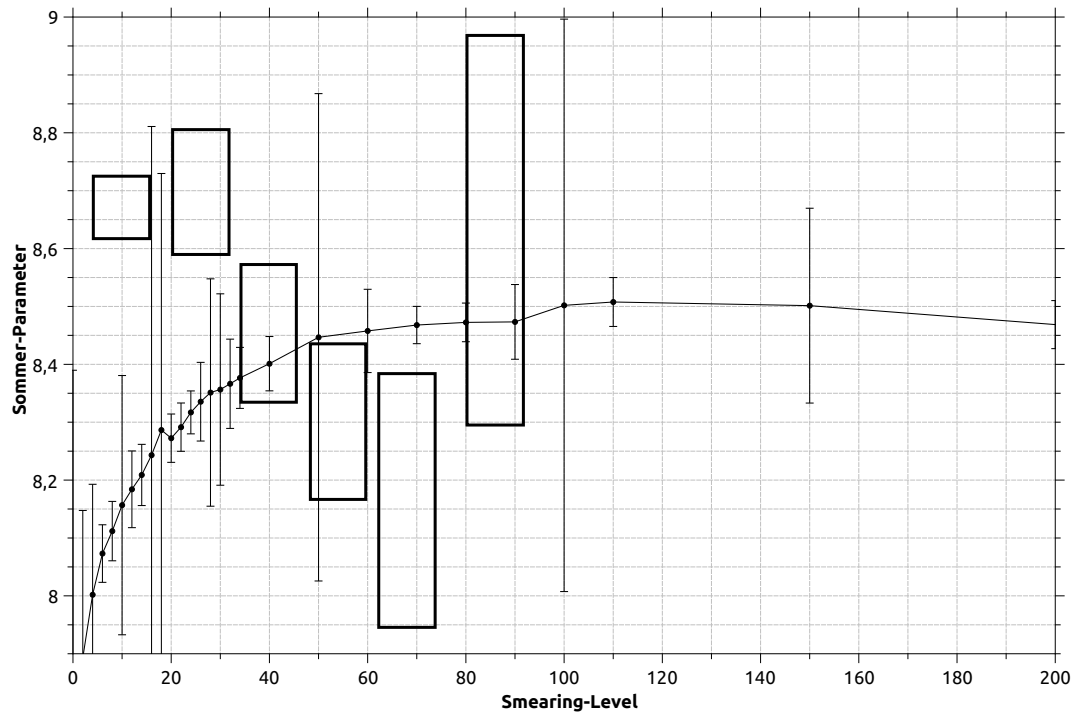


Abbildung 4.6.12.: Methode 2.1: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*fixed vector*-Methode).

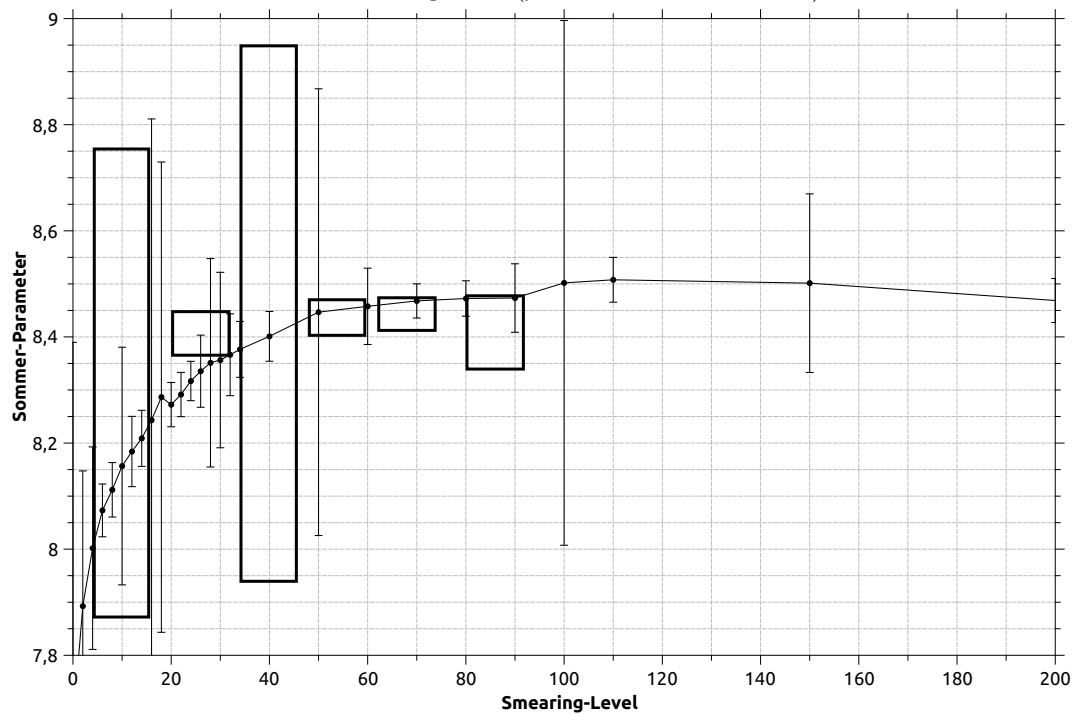


Abbildung 4.6.13.: Methode 2.1: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*t-eigenvector*-Methode).

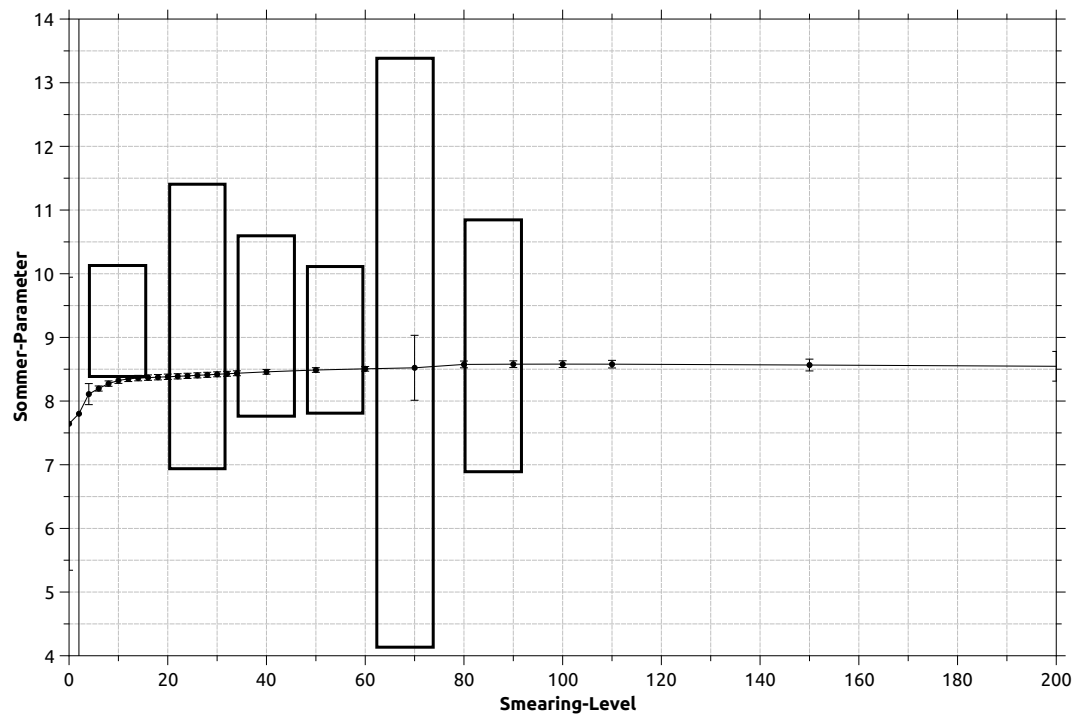


Abbildung 4.6.14.: Methode 2.2: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*fixed vector*-Methode).

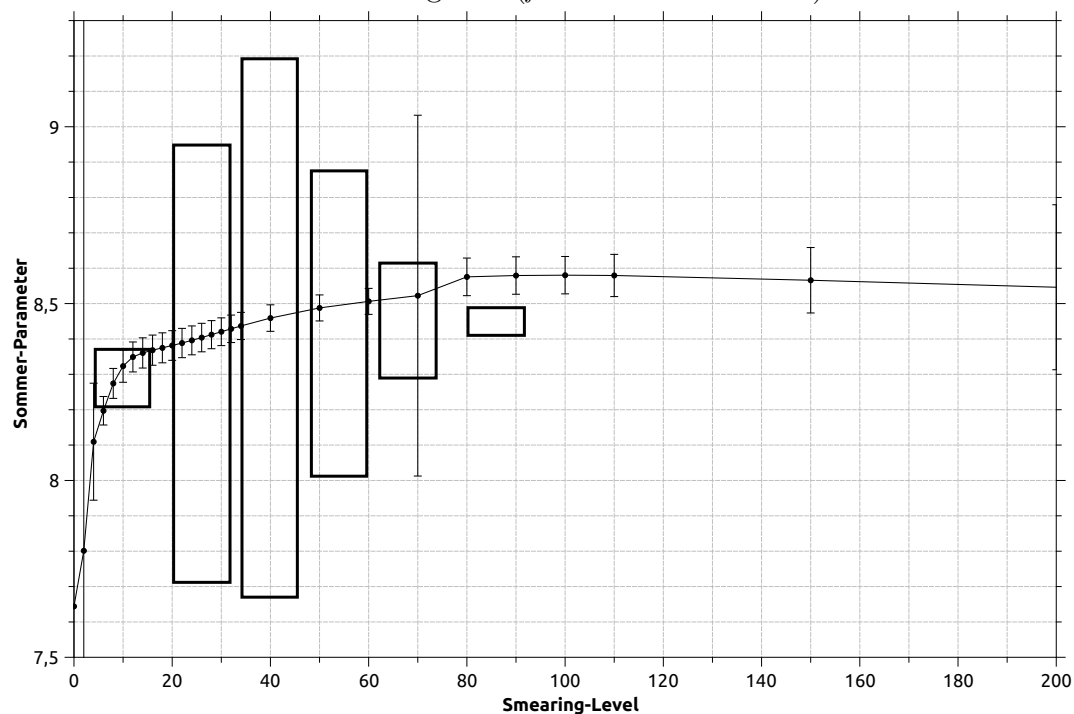


Abbildung 4.6.15.: Methode 2.2: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*t-eigenvector*-Methode).

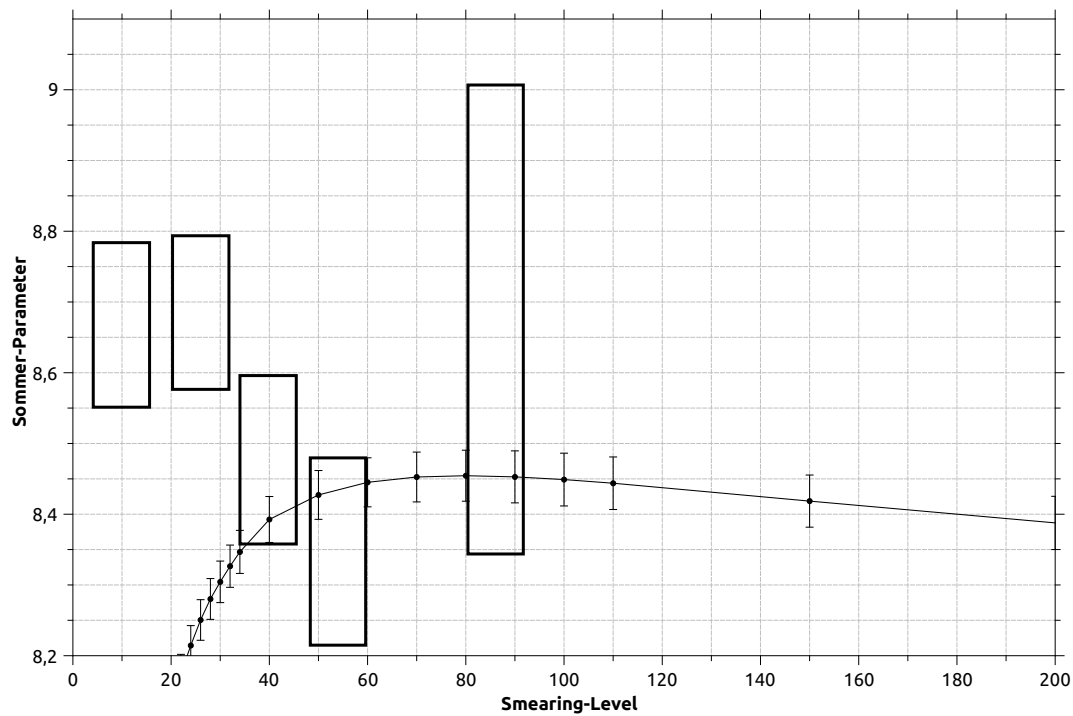


Abbildung 4.6.16.: Methode 3: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*fixed vector*-Methode).

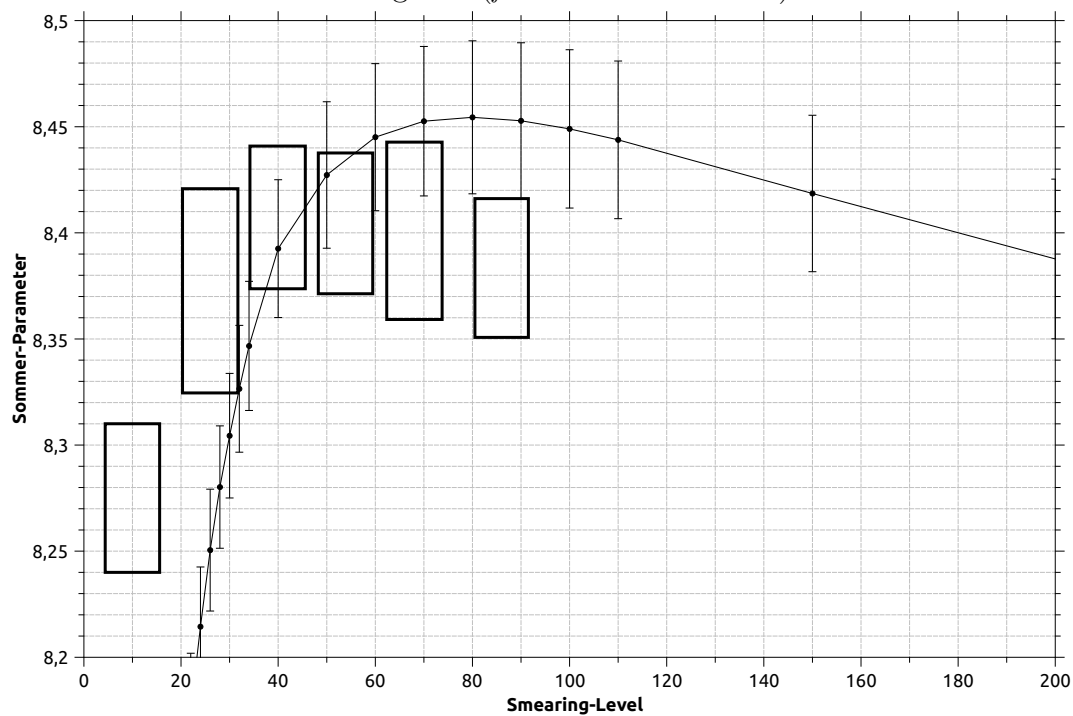


Abbildung 4.6.17.: Methode 3: Sommer-Parameter für verschiedene Korrelationsmatrizen im Vergleich (*t-eigenvector*-Methode).

Die Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2 erweisen sich auch im direkten Vergleich zwischen Standard- und Variational Smearing als stabil. Mit Ausnahme des ersten Intervalls sind sich die Ergebnisse beider Smearing-Verfahren sehr ähnlich. Grundsätzlich scheint der Sommer-Parameter beim Variational Smearing für diese Methoden sehr stabil zu sein. Fast unabhängig vom untersuchten Smearing-Intervall wird durchgehend ein bestimmter r_0 -Wert ermittelt. Der Verlauf, der sich beim Standard-Smearing-Verfahren zeigt, also das Ansteigen auf ein Maximum mit anschließendem Absinken, ist hier nicht zu beobachten.

Insbesondere für die ersten beiden Korrelationsmatrizen liegen die Werte im Vergleich zum Standard-Smearing bei den ersten drei Methoden etwas und bei Methode 1.2 sehr viel höher. Dies ist gleichbedeutend mit einem im Vergleich besseren Konvergenzverhalten.

Die anderen Methoden 2.1, 2.2 und 3 produzieren mit Variational Smearing und dem *fixed vector*-Verfahren weitaus instabilere Ergebnisse als mit dem Standard-Smearing. Insbesondere Methode 2.2 zeigt dabei einen systematisch stark erhöhten Wert und sehr große Fehler.

Das *t-eigenvector*-Verfahren bringt zwar weitaus bessere Ergebnisse als das *fixed vector*-Verfahren; diese sind allerdings immer noch instabil (Methode 2.1) oder besitzen sehr große Fehler (Methode 2.2). Methode 2.1 besitzt hier zwar weitaus weniger starke Fluktuationen für den Wert von r_0 - die Fehler sind aber ebenfalls sehr hoch. Ebenso verhält es sich mit Methode 2.2. Allein Methode 3 produziert zusammen mit dem *t-eigenvector*-Verfahren stabile Werte mit verhältnismäßig kleinen Fehlern im Vergleich zum Standard-Smearing.

4.6.4. Methodenvergleich

Die Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2, welche sich im letzten Abschnitt beim *fixed vector*-Verfahren als stabil erwiesen, sollen nun gegeneinander verglichen werden. Dabei soll lediglich Methode 1.1a mit Fehlern dargestellt werden, um den Plot übersichtlich zu halten. Gleichzeitig werden aus demselben Grund die einzelnen Datenpunkte mit Linien verbunden.

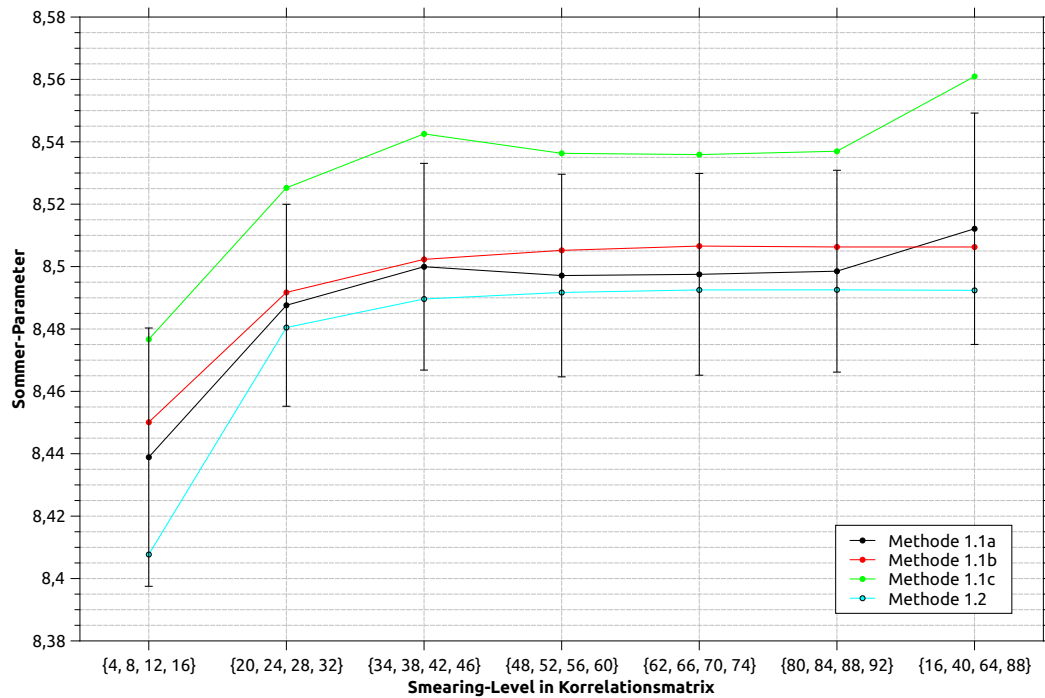


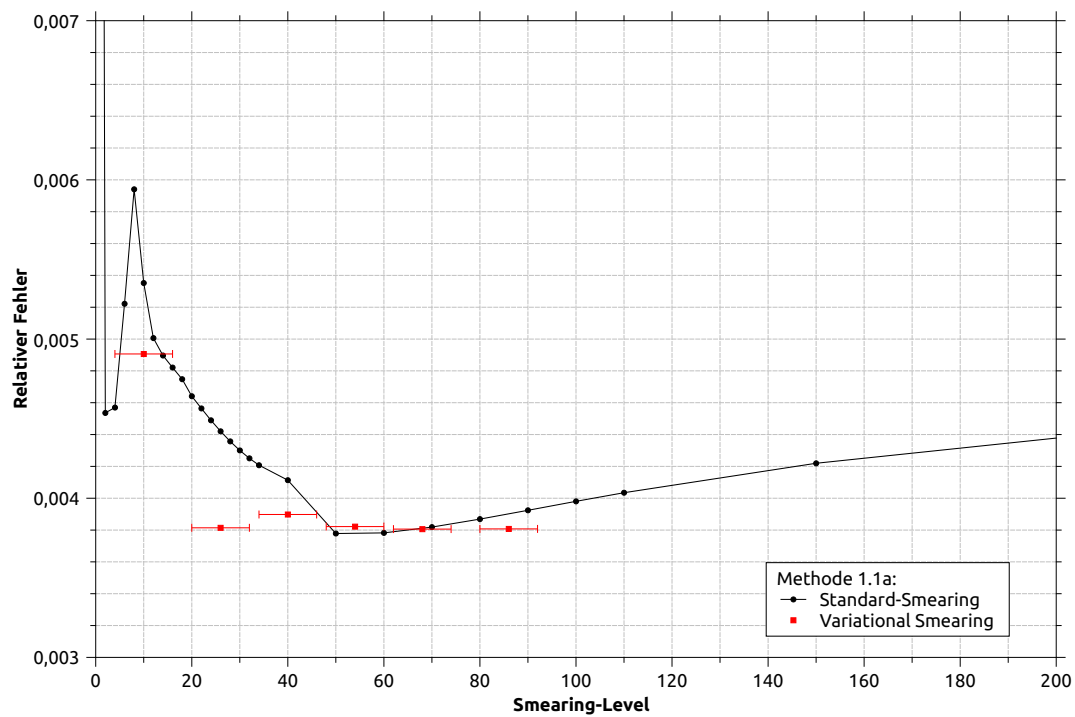
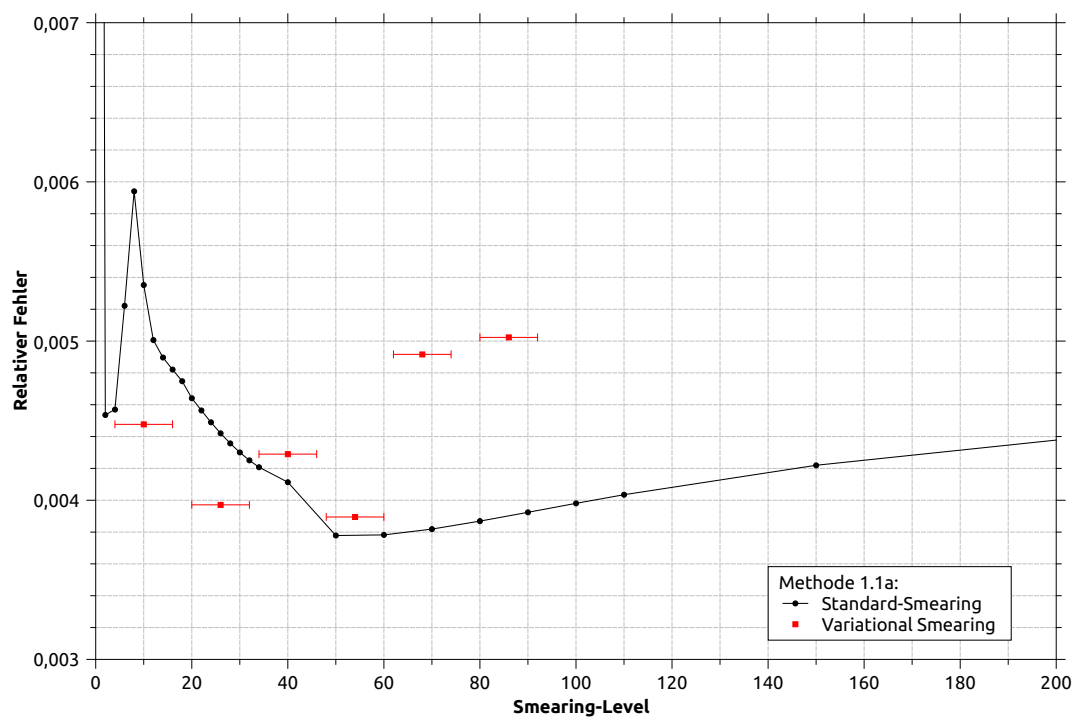
Abbildung 4.6.18.: Vergleich der Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2 (*fixed vector*-Verfahren) für die verschiedenen Korrelationsmatrizen.

Mit Ausnahme von Methode 1.1c stimmen die Ergebnisse aller Methoden im Rahmen des Fehlers überein. Methode 1.1c ist - wie auch schon beim Standard-Smearing - stark erhöht. Alle Methoden zeigen dabei deutlich das Plateau bezüglich des Smearing-Levels. Insbesondere bei den Methode 1.1b und 1.2 erweist sich dieses als sehr stabil.

4.6.5. Vergleich der relativen Fehler

In Abschnitt 4.6.3 konnte an der Höhe der Rechtecke bereits gesehen werden, dass die Fehler der (stabilen) Variational Smearing-Methoden keine deutlichen Abweichungen im Vergleich zum Standard-Smearing zeigen. Nun soll dieser Sachverhalt genauer behandelt werden, indem die relativen Fehler aller Methoden im Vergleich zu denen des Standard-Smearings dargestellt werden. Die relativen Fehler der Methoden 2.1 und 2.2 sollen hier nicht dargestellt werden, weil diese Methoden vergleichsweise große Fehler und unzuverlässige Ergebnisse produzieren.

Es sollen die Daten des *t-eigen*vector- und des *fixed vector*-Verfahrens präsentiert werden.

Abbildung 4.6.19.: Methode 1.1a: Relative Fehler im Vergleich (*fixed vector*-Verfahren).Abbildung 4.6.20.: Methode 1.1a: Relative Fehler im Vergleich (*t-eigenvector*-Verfahren).

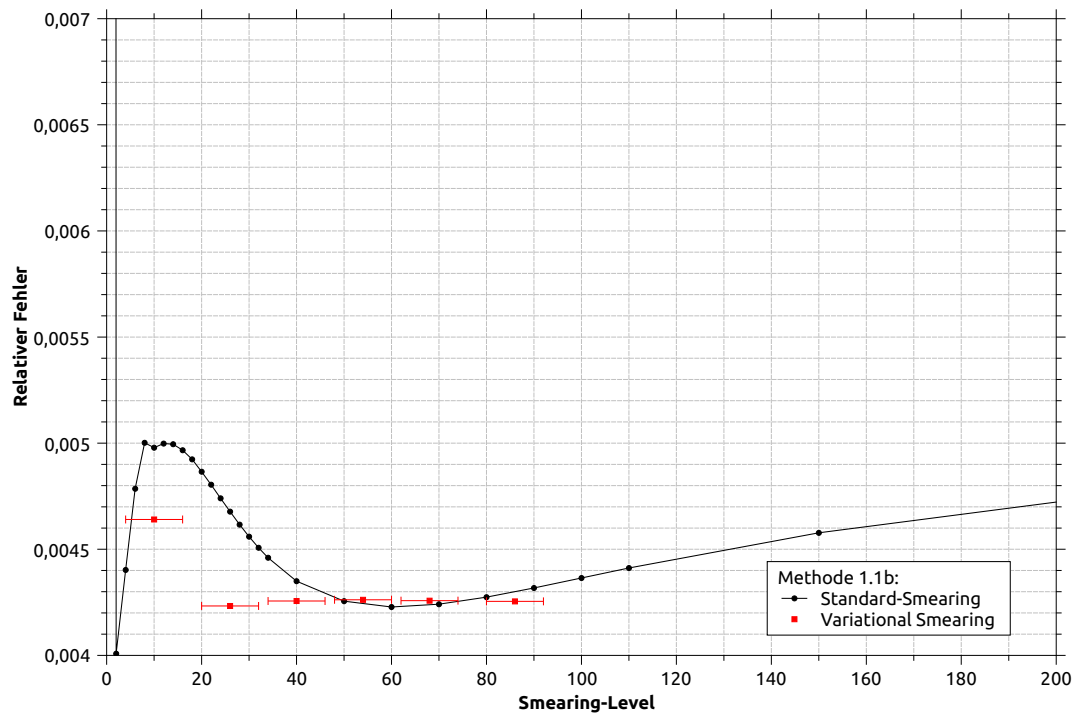


Abbildung 4.6.21.: Methode 1.1b: Relative Fehler im Vergleich (*fixed vector*-Verfahren).

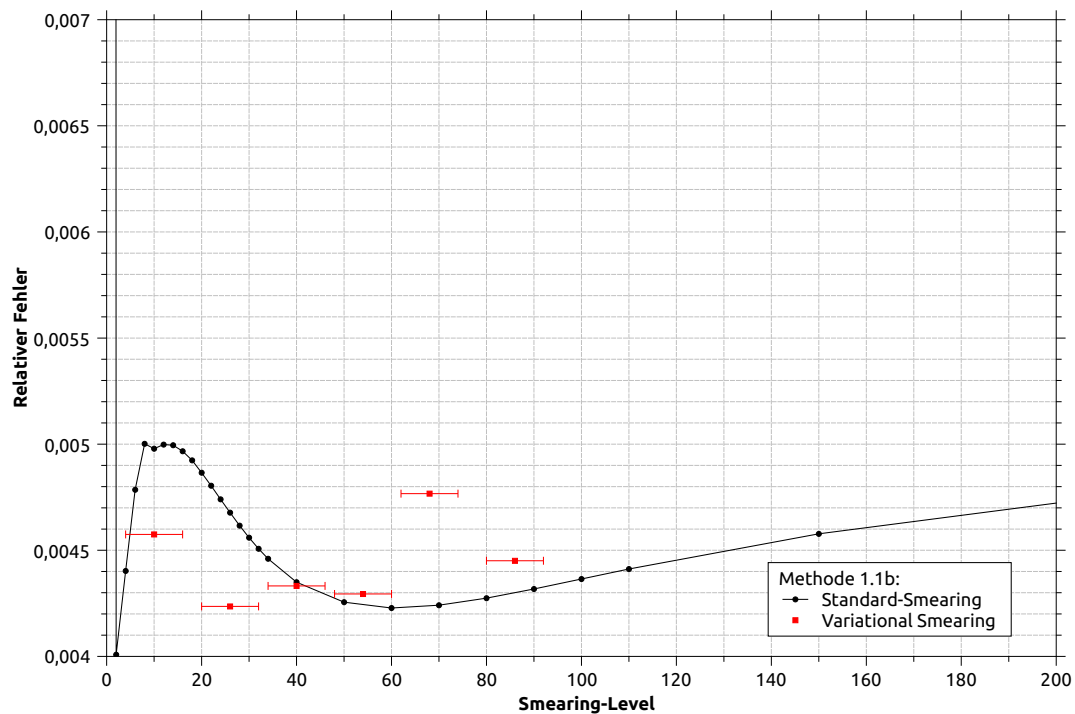
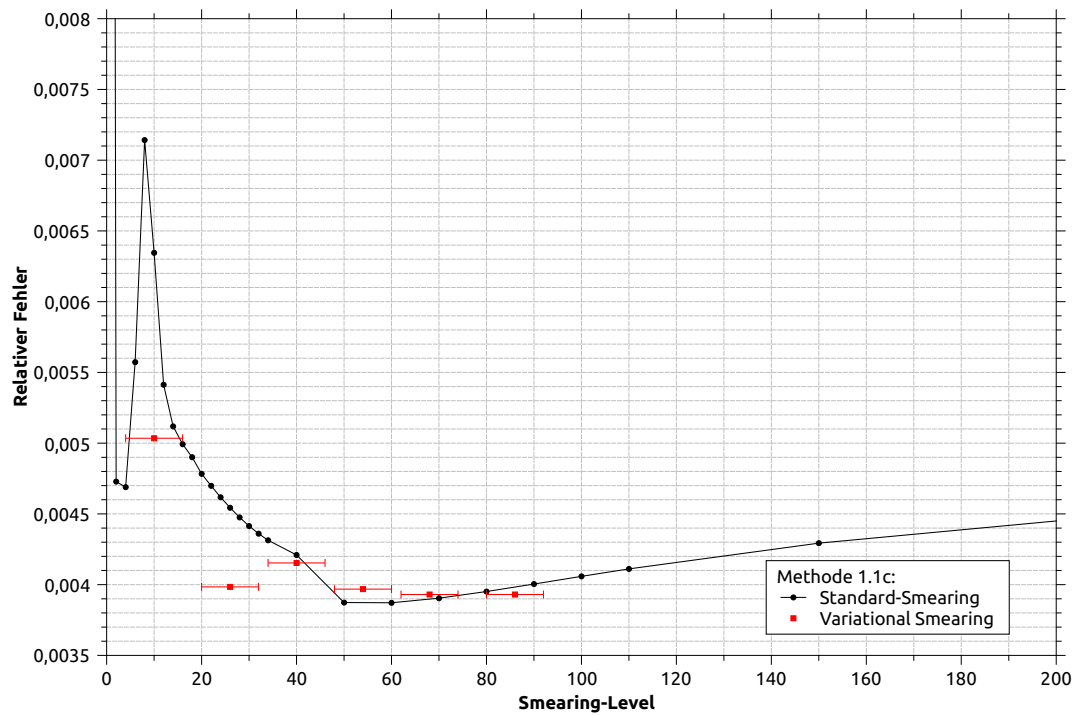
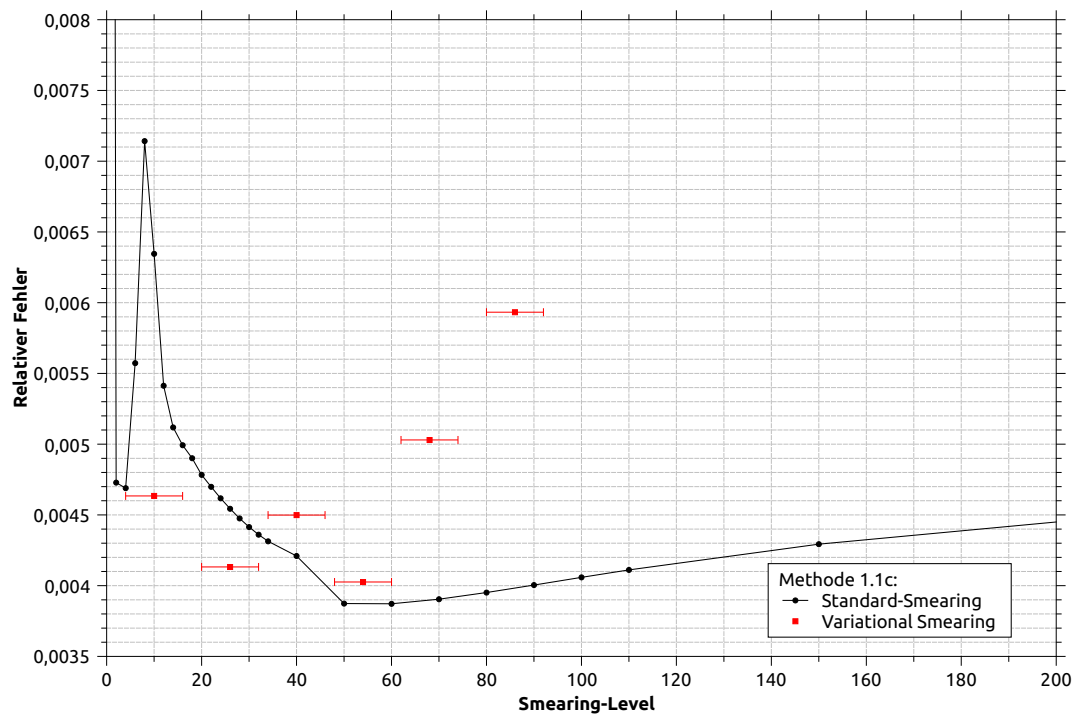


Abbildung 4.6.22.: Methode 1.1b: Relative Fehler im Vergleich (*t-eigenvector*-Verfahren).

Abbildung 4.6.23.: Methode 1.1c: Relative Fehler im Vergleich (*fixed vector*-Verfahren).Abbildung 4.6.24.: Methode 1.1c: Relative Fehler im Vergleich (*t-eigenvector*-Verfahren).

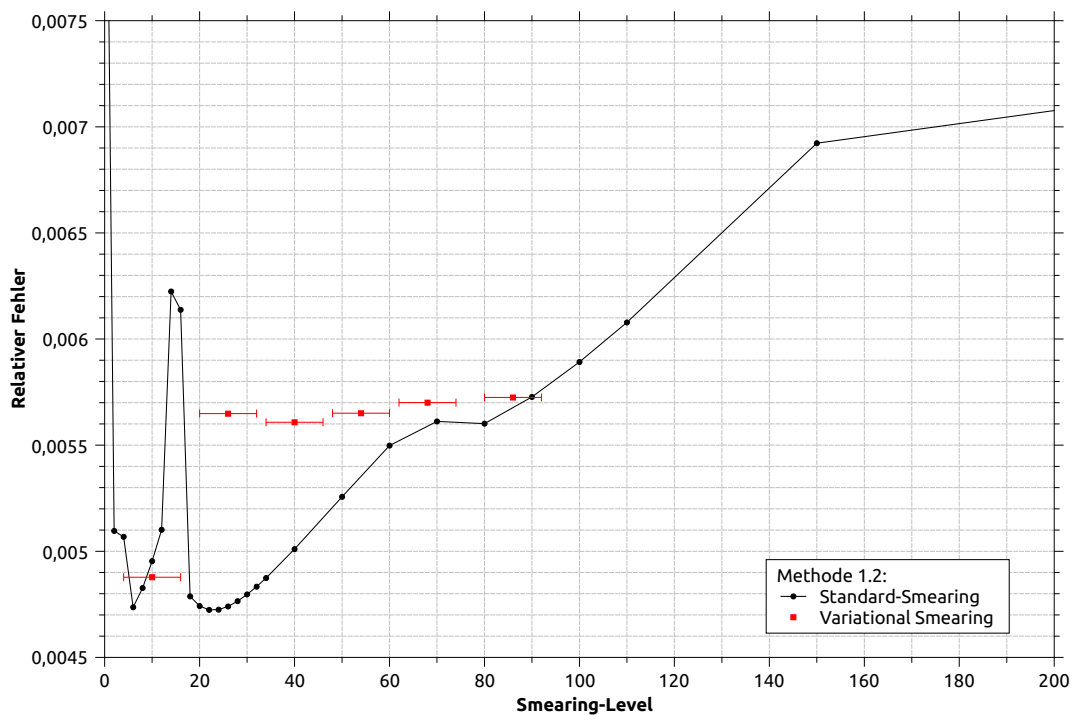


Abbildung 4.6.25.: Methode 1.2: Relative Fehler im Vergleich (*fixed vector*-Verfahren).

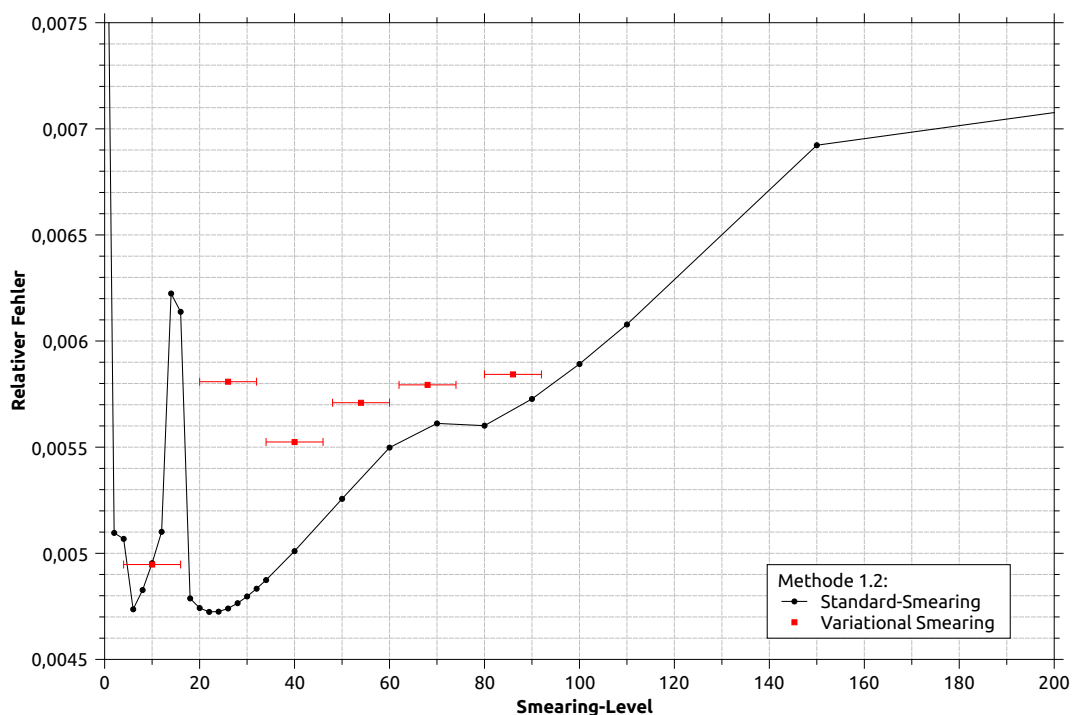
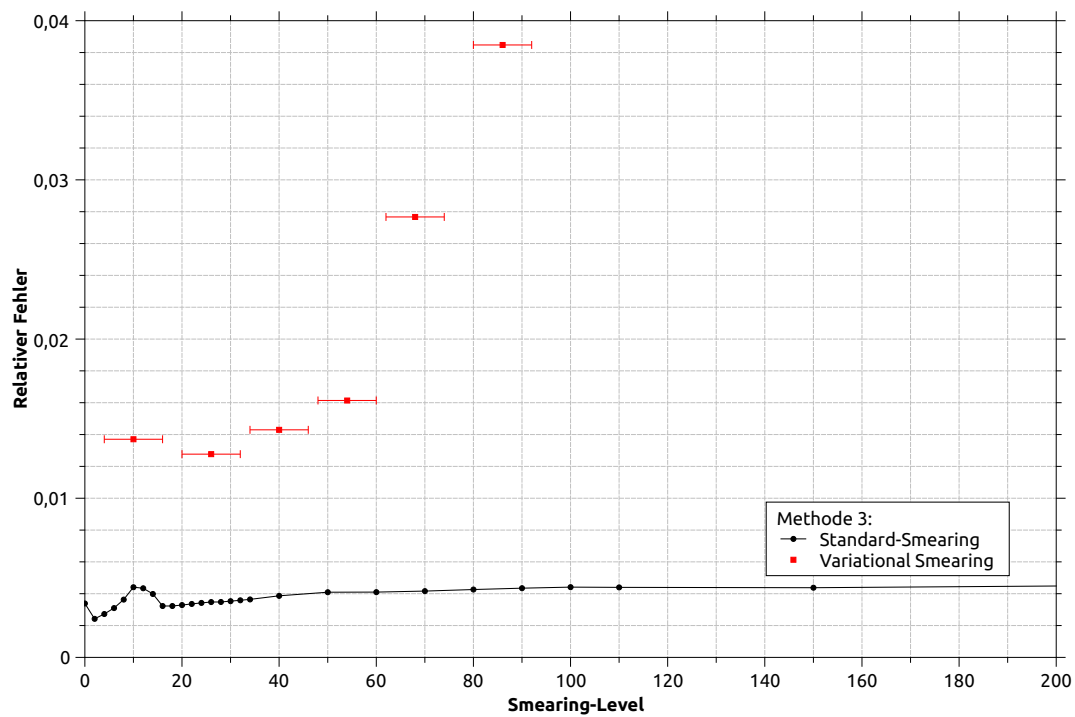
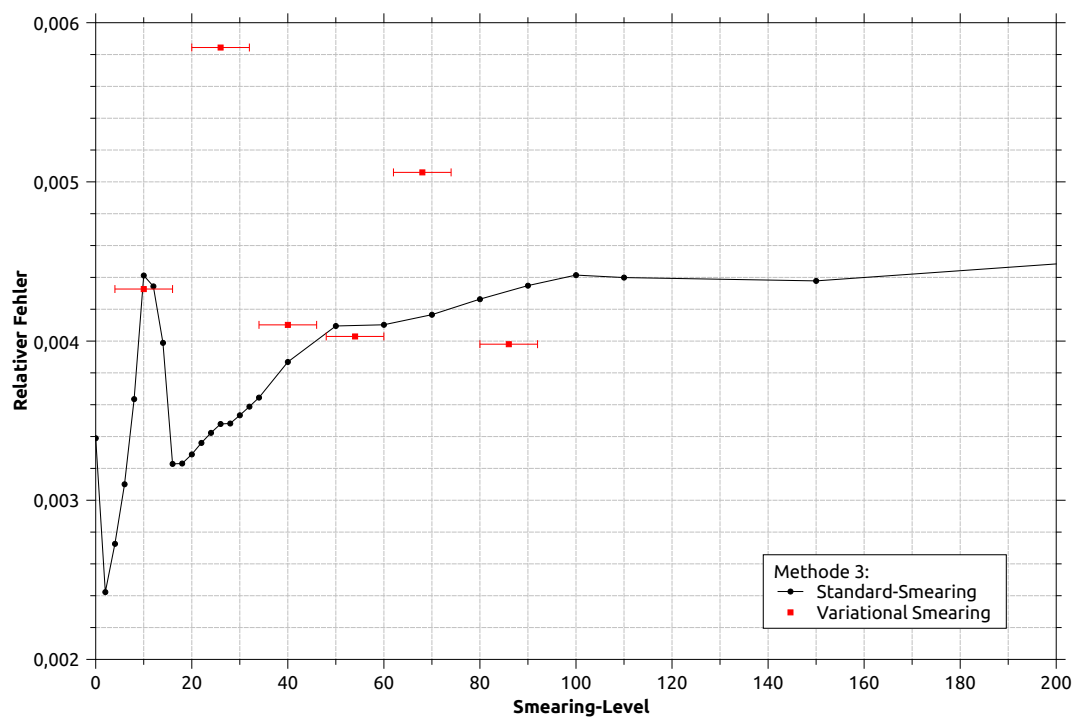


Abbildung 4.6.26.: Methode 1.2: Relative Fehler im Vergleich (*t-eigenvector*-Verfahren).

Abbildung 4.6.27.: Methode 3: Relative Fehler im Vergleich (*fixed vector*-Verfahren).Abbildung 4.6.28.: Methode 3: Relative Fehler im Vergleich (*t-eigenvector*-Verfahren).

In den Abbildungen ist die horizontale Ausdehnung der Variational Smearing-Datenpunkte nicht etwa als Unsicherheitsintervall zu verstehen, sondern analog zur Darstellung im vorletzten Abschnitt als Größe des Smearing-Level-Intervalls derjenigen Levels, die in der Korrelationsmatrix vorkommen.

Wird der jeweils erste Datenpunkt außer Acht gelassen, so produzieren die Methoden 1.1a bis 1.1c und 1.2 beim *fixed vector*-Verfahren sehr stabile - also für die einzelnen Intervalle sehr ähnliche - Fehler. Für die ersten drei Methoden sind diese Fehler sehr klein und entsprechen in etwa dem Fehler des Minimums der Standard-Smearing-Ergebnisse. Methode 1.1b zeigt hier besonders stabile Werte.

Für Methode 1.2 hingegen entsprechen die Fehler nicht denen des Minimums in den Werten der Standard-Smearing-Ergebnisse. Hier scheint es, als würden grob die Fehler des Plateaus in den Standard-Smearing-Werten reproduziert werden.

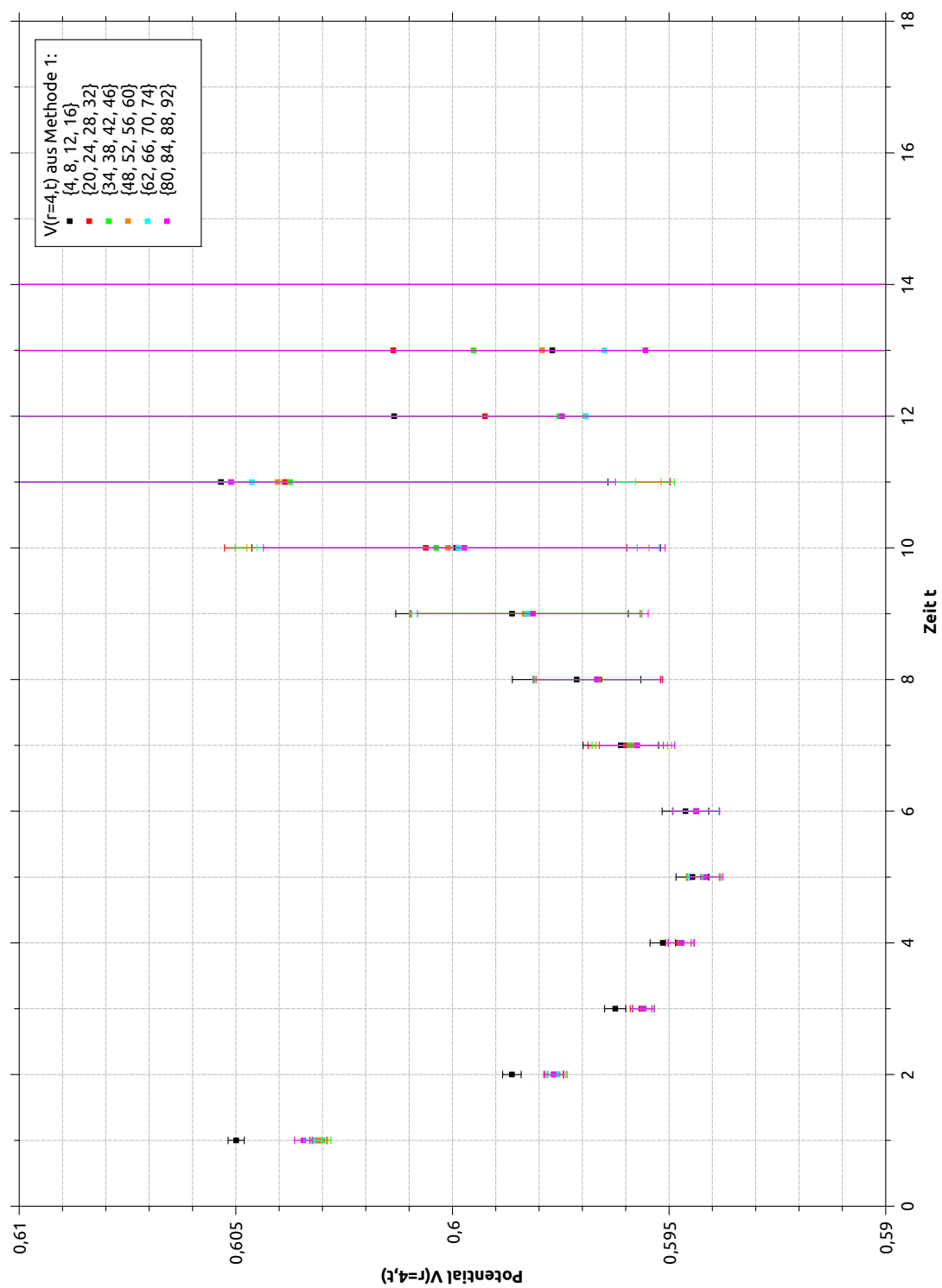
Die Fehler von Methode 3 sind relativ zu den Fehlern des Standard-Smearings und auch im Vergleich zu den anderen Methoden beim *fixed vector*-Verfahren sehr groß.

Die mit dem *t-eigenvector*-Verfahren berechneten Werte für die Methoden 1.1a bis 1.1c und 1.2 sind dagegen instabiler, die Fehler zeigen also stärkere Fluktuationen. Dennoch sind auch hier die Fehler nicht übermäßig groß. Interessanterweise ist der relative Fehler von Methode 3 bei diesem Verfahren deutlich kleiner und stabiler als beim *fixed vector*-Verfahren.

4.6.6. Verhalten des Potentials $V(r, t)$

Bei den Daten des Standard-Smearing-Verfahrens brachte die Betrachtung des zeitabhängigen Potentials $V(r, t)$ nützliche Informationen. So war bereits an den Abbildungen ersichtlich, dass die angeregten Zustände bis zu einem bestimmten Smearing-Level gedämpft werden und danach wieder anzusteigen scheinen.

Deshalb soll nun das Verhalten des Potentials $V(r, t)$ für die einzelnen Smearing-Intervalle untersucht werden. Dabei soll sich die Darstellung auf Methode 1.1a und die Anwendung des *fixed vector*-Verfahrens beschränken. Für einen übersichtlichen zweidimensionalen Plot wurde $r = 4$ gesetzt; betrachtet wird also die Größe $V(r = 4, t)$ in Abhängigkeit von t .

Abbildung 4.6.29.: Zeitabhängiges Potential $V(r, t)$ für $r = 4$ beim Variational Smearing.

Es ist klar, dass - trotz der großen Darstellung der Potentiale in einer seitenfüllenden Abbildung - ein quantitativer Vergleich aller Potentiale anhand dieses Plots nicht möglich ist. Die grundsätzliche Tendenz des Potentialverlaufs ist jedoch sehr deutlich sichtbar: Bis auf das Potential des ersten Intervalls $\{4, 8, 12, 16\}$ zeigen die Potentiale aller Intervalle eine sehr große Übereinstimmung.

Das allgemeine Verhalten des Potentials, also das exponentielle Absinken auf ein Plateau mit anschließend verrauschten Werten, ist beim Variational Smearing prinzipiell das gleiche wie auch schon beim Standard-Smearing, jedoch stimmen hier die unterschiedlich geschmierten Daten viel besser überein. Das Smearing-Verfahren scheint also die angeregten Zustände für die einzelnen Intervalle nahezu gleich stark zu unterdrücken.

Einzige Ausnahme bildet das erste Intervall mit den Levels 4, 8, 12 und 16, dessen exponentielle Komponente für kleine Zeiten weniger gut gedämpft ist.

4.6.7. Einfluss der Größe der Korrelationsmatrix

In den bisherigen Untersuchungen wurden Daten betrachtet, die vier Smearing-Levels in der Korrelationsmatrix nutzen. Von Interesse ist aber auch, zu erfahren, was passiert, wenn ein oder zwei Smearing-Levels weniger aus diesem Smearing-Level-Intervall für die Analyse genutzt werden.

In das Analyseprogramm wurde deshalb eine Funktion implementiert, die es ermöglicht, beliebige Smearing-Levels aus der Korrelationsmatrix auszulassen. Somit kann ohne Neumessung der Daten eine Untersuchung des Intervalls $\{34, 38, 42, 46\}$ durchgeführt werden, bei der nur jeweils zwei oder drei Levels für die Analyse genutzt werden. Im Folgenden soll diese Analyse für Methode 1.1a in Zusammenspiel mit dem *fixed vector*-Verfahren durchgeführt werden.

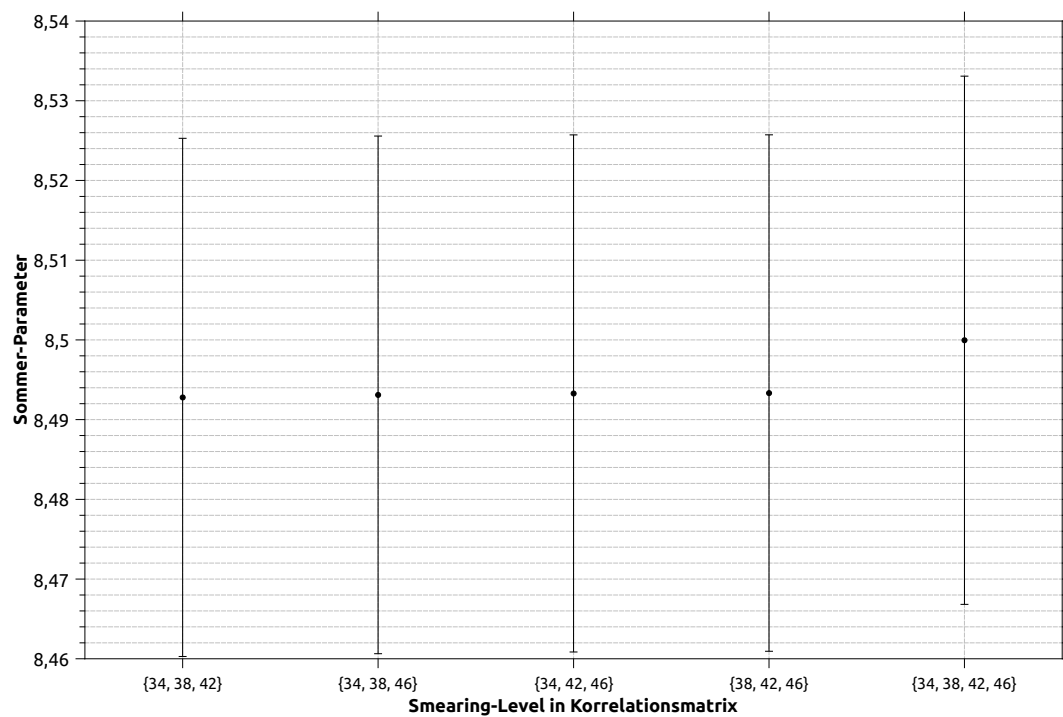


Abbildung 4.6.30.: Methode 1.1a: Sommer-Parameter für unterschiedliche Korrelationsmatrizen (3 Einträge).

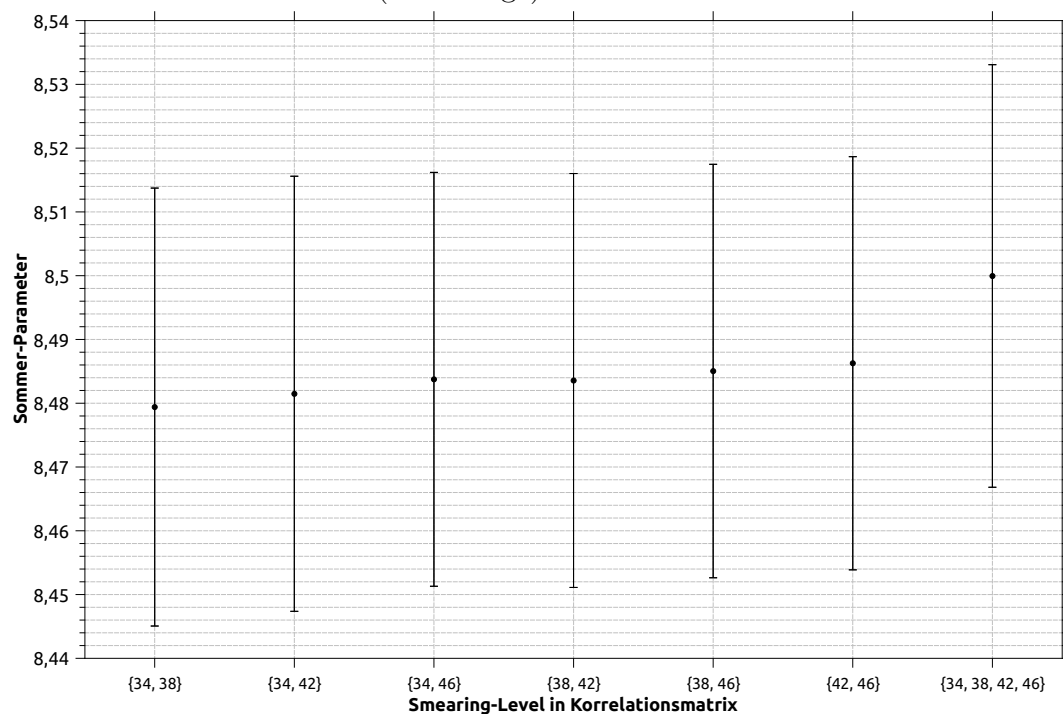


Abbildung 4.6.31.: Methode 1.1a: Sommer-Parameter für unterschiedliche Korrelationsmatrizen (2 Einträge).

Die Ergebnisse beim Auslassen nur eines Eintrags der Korrelationsmatrix im Intervall $\{34, 38, 42, 46\}$ scheinen unabhängig davon zu sein, welches Smearing-Level bei der Analyse unberücksichtigt bleibt. Alle Werte in Abb. 4.6.30 sind im Vergleich zum Ergebnis bei Nutzung des vollen Intervalls in gleicher Weise zu niedrigeren r_0 -Werten verschoben. Der Effekt selbst ist relativ klein, wie in folgender Tabelle abzulesen ist:

Matrizeinträge	r_0
$\{34, 38, 42\}$	8.4928 ± 0.0325
$\{34, 38, 46\}$	8.4931 ± 0.0325
$\{34, 42, 46\}$	8.4933 ± 0.0324
$\{38, 42, 46\}$	8.4933 ± 0.0324
$\{34, 38, 42, 46\}$	8.5000 ± 0.0331

Tabelle 4.16.: Ergebnisse für den Sommer-Parameter bei Auslassung eines Eintrags der Korrelationsmatrix.

Werden zwei Einträge der Korrelationsmatrix ausgelassen, so zeigt der jeweils gemessene Sommer-Parameter ebenfalls einen kleineren Wert im Vergleich zur Ausnutzung des vollen Smearing-Intervalls (siehe Abb. 4.6.31). Der Effekt ist hier weitaus stärker als bei der Auslassung eines Eintrags der Matrix: Zum einen sind die Messwerte hier kleiner als noch bei der Auslassung eines Eintrags und zum anderen ist die Differenz zwischen den einzelnen Werten größer. Eine tabellarische Auflistung der Daten soll zur Verdeutlichung nun folgen:

Matrizeinträge	r_0
$\{34, 38\}$	8.4794 ± 0.0343
$\{34, 42\}$	8.4815 ± 0.0341
$\{34, 46\}$	8.4837 ± 0.0324
$\{38, 42\}$	8.4836 ± 0.0325
$\{38, 46\}$	8.4850 ± 0.0324
$\{42, 46\}$	8.4863 ± 0.0324
$\{34, 38, 42, 46\}$	8.5000 ± 0.0331

Tabelle 4.17.: Ergebnisse für den Sommer-Parameter bei Auslassung von zwei Einträgen der Korrelationsmatrix.

Zum Vergleich: Beim Standard-Smearing berechnet die gleiche Methode bei Level 40 einen Wert von $r_0 = 8.4501 \pm 0.0348$. Die Auslassung von selbst zwei Smearing-Levels innerhalb der Korrelationsmatrix hat also nur relativ kleine Auswirkungen.

Insgesamt zeigt sich hier auch, dass die Benutzung von mehr Einträgen in der Korrelationsmatrix keine Vorteile bezüglich des Fehlers aufweist, dafür allerdings die Werte für r_0 stärker von denen des Standard-Smearings abweichen.

4.6.8. Ergebnisse bei Nutzung einer 2×2 -Korrelationsmatrix

Im letzten Abschnitt wurde ersichtlich, dass auch durchaus weniger große Korrelationsmatrizen gute Ergebnisse liefern können. Da große Korrelationsmatrizen sehr viel Rechenzeit benötigen, ist es natürlich wünschenswert, die kleinstmögliche Größe für Messungen zu wählen.

Aus diesem Grund sollen nun die Ergebnisse für den Sommer-Parameter aller Intervalle bei einer 2×2 großen Matrix mit denen der 4×4 -Korrelationsmatrix und den Standard-Smearing-Ergebnissen verglichen werden. Die Einträge der 2×2 -Matrizen sollen dabei aus den beiden mittleren Smearing-Levels der gemessenen Smearing-Intervalle gebildet werden. Zum Beispiel werden also statt der Levels $\{4, 8, 12, 16\}$ die Levels $\{8, 12\}$ genutzt.

Zur Auswertung wurde Methode 1.1a und das *fixed vector*-Verfahren benutzt. Die Darstellungsweise von Variational Smearing- und Standard-Smearing-Ergebnissen in einem Plot ist dieselbe, die auch in Abschnitt 4.6.3 benutzt wurde: Variational Smearing-Daten werden als Rechtecke dargestellt, deren Mitte den Wert für r_0 , deren Höhe die Fehlergrenzen und deren Breite das Smearing-Intervall angeben.

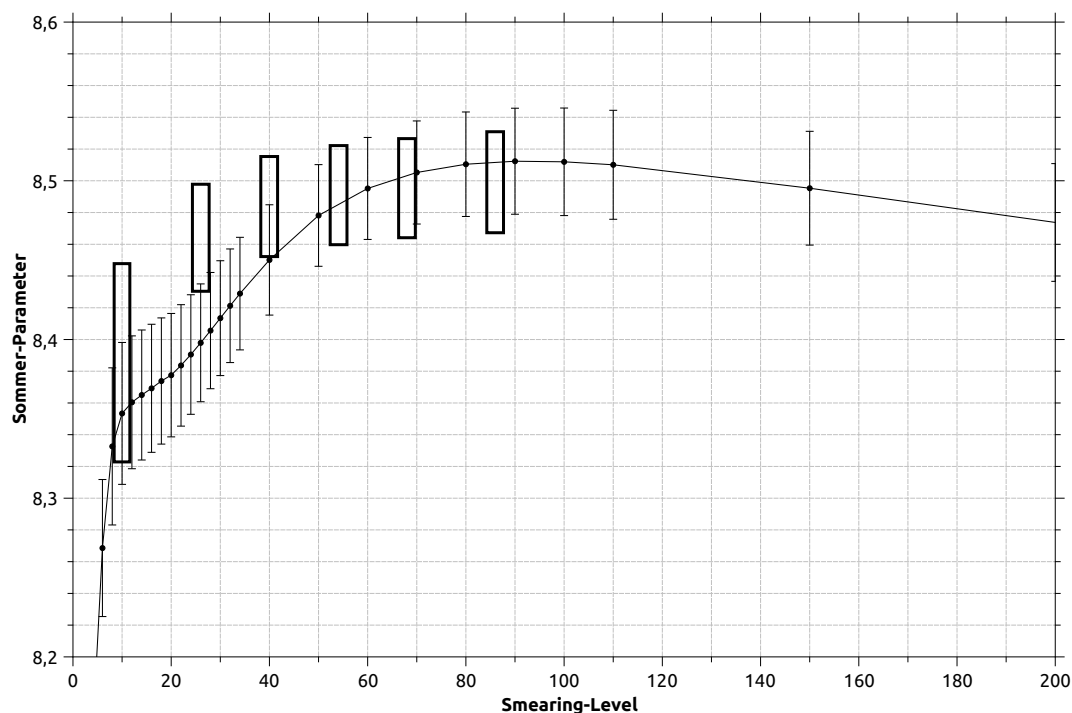


Abbildung 4.6.32.: Vergleich der Variational- und der Standard-Smearing-Daten bei Benutzung einer 2×2 großen Korrelationsmatrix.

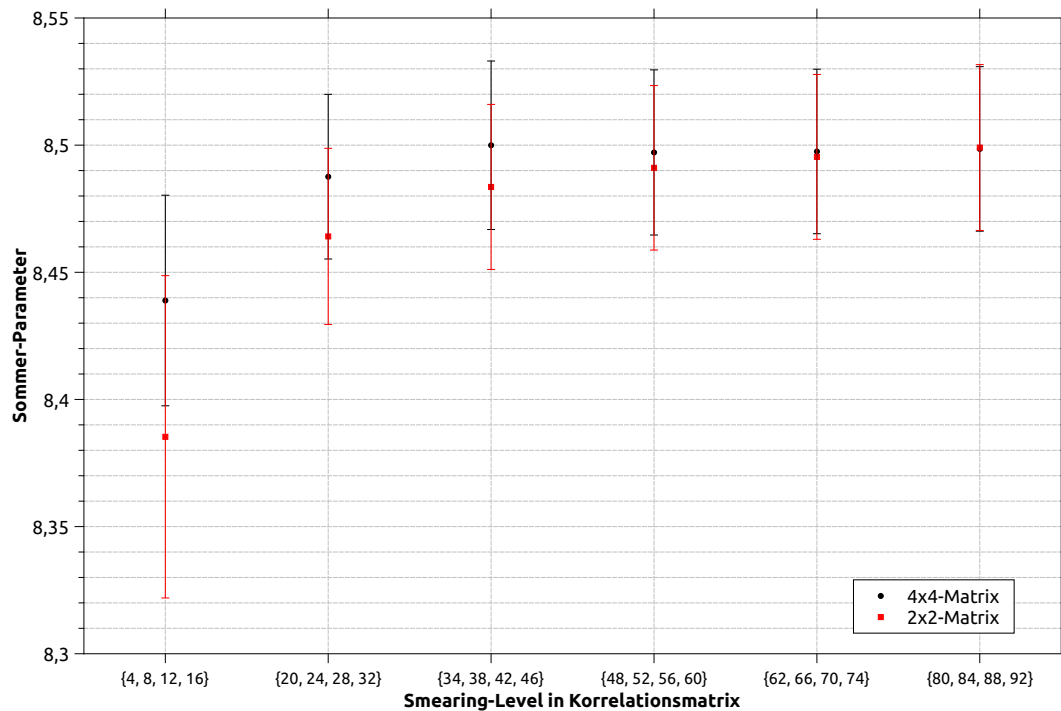


Abbildung 4.6.33.: Vergleich der Variational Smearing-Daten bei Benutzung einer 2×2 - und 4×4 großen Korrelationsmatrix.

Im Vergleich zu den Standard-Smearing-Ergebnissen zeigt sich auch bei Nutzung von 2×2 -Korrelationsmatrizen eine größere Stabilität des Verlaufs (siehe Abb. 4.6.32). Die Variational Smearing-Werte scheinen für höhere Smearing-Levels ein Plateau zu bilden, wie es schon bei den Korrelationsmatrizen voller Größe beobachtet werden konnte. Die Fehler sind mit Ausnahme des ersten Intervalls bei beiden Smearing-Verfahren in etwa von gleicher Größe. Beim ersten Intervall mit den kleinsten Smearing-Levels 8 und 12 besitzt der Fehler einen deutlich größeren Wert.

Werden die Ergebnisse der beiden Korrelationsmatrix-Größen direkt miteinander verglichen, so fällt sofort auf, dass die Konvergenz zum Plateau bei Nutzung der 2×2 -Matrix weitaus langsamer verläuft als bei Nutzung der 4×4 -Matrix. Beide Matrizen erbringen jedoch im Rahmen des Fehlers kompatible Ergebnisse, die für die letzten drei Intervalle besonders gut miteinander übereinstimmen. Es scheint, als strebten beide Verläufe dem gleichen Wert entgegen.

Zur weiteren Untersuchung soll nun das zeitabhängige Potential $V(r, t)$ für die Daten bei einer 2×2 -Matrix gezeigt werden. In der Abbildung ist zum Vergleich eine gestrichelte Linie für den Verlauf eines Potentials bei Nutzung der 4×4 -Matrix eingezeichnet.

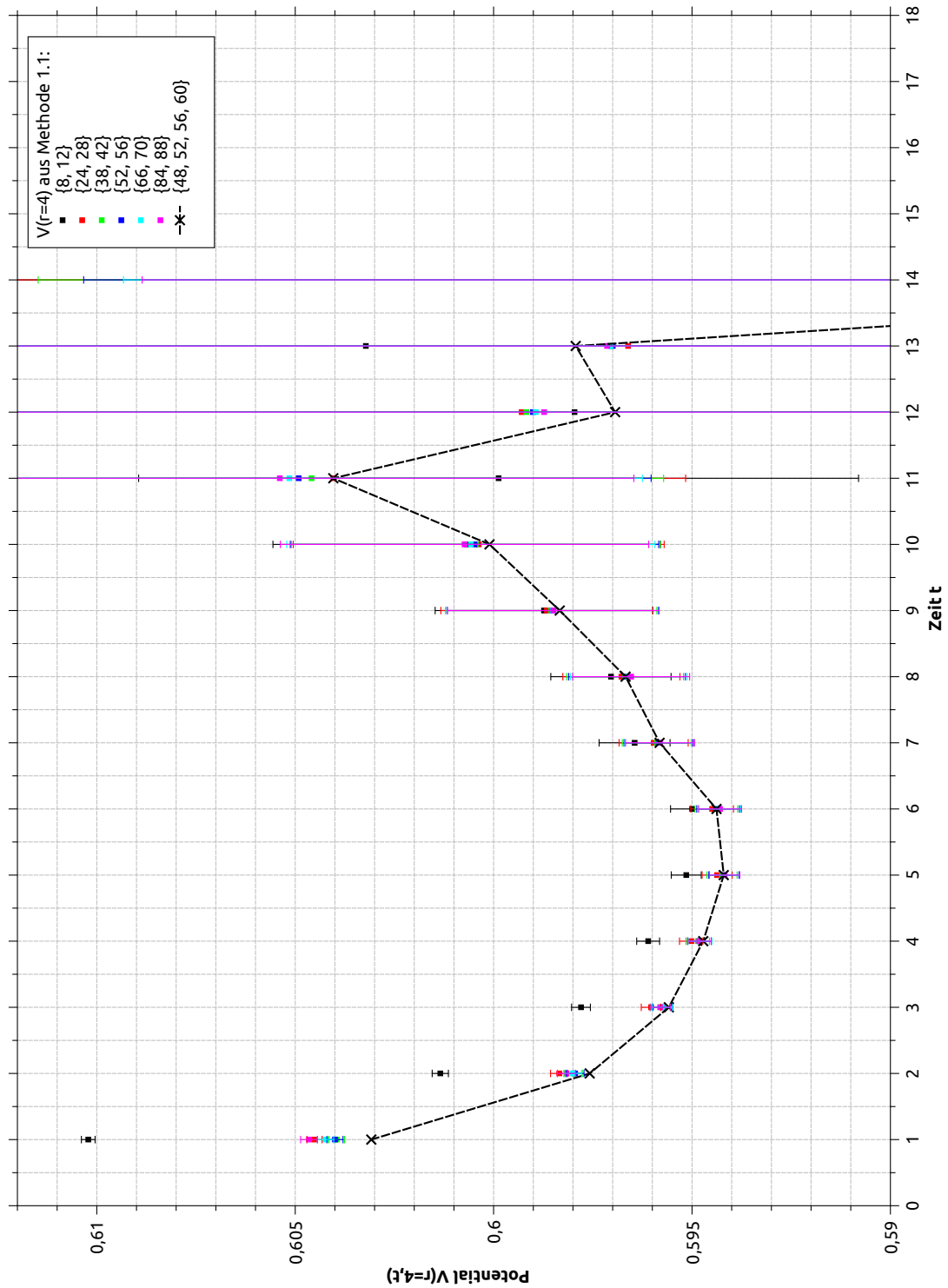


Abbildung 4.6.34.: Zeitabhängiges Potential $V(r, t)$ für $r = 4$ beim Variational Smearing bei Nutzung einer 2×2 -großen Korrelationsmatrix. Die gestrichelte Linie dient zum Vergleich mit einem Potential bei Nutzung einer 4×4 -großen Korrelationsmatrix.

Qualitativ zeigt sich auch hier das gleiche Verhalten wie bei den Daten der 4×4 -Matrix: Mit Ausnahme des ersten Intervalls liegen die Potentialpunkte der Intervalle sehr eng beieinander. Das erste Intervall zeigt hier eine besonders große Abweichung im Vergleich zu den anderen Intervallen.

Der Vergleich mit einem Intervall bestehend aus vier mittelgroßen Smearing-Levels (gestrichelte Linie) zeigt, dass bei Nutzung der 4×4 -großen Korrelationsmatrix der exponentielle Anteil am Anfang des Potentials stärker unterdrückt ist. Besonders gut ist dies beim ersten Potentialpunkt zu erkennen. Welches Intervall hier zum Vergleich herangezogen wird, ist außer beim ersten Intervall prinzipiell unerheblich, weil alle Intervalle extrem ähnliche Werte aufweisen. Hier wurde willkürlich das Intervall $\{48, 52, 56, 60\}$ für den Vergleich ausgewählt.

4.6.9. Abhängigkeit von der Anzahl der Konfigurationen

Auch für das Variational Smearing-Verfahren soll bestimmt werden, ob in Abhängigkeit von der Konfigurationsanzahl ein Unterschied im Konvergenzverhalten existiert. Exemplarisch soll diese Untersuchung für Methode 1.1a beim *fixed vector*-Verfahren durchgeführt werden. Wie bei der letzten Untersuchung der Abhängigkeit von der Konfigurationsanzahl, werden auch hier nicht Daten bei gleichen Smearing-Levels verglichen. Dort wurde aber bereits erwähnt, dass dies unerheblich ist, weil in Unterabschnitt 4.3.7 gezeigt wurde, dass sich die Daten für unterschiedliche Smearing-Levels nur systematisch voneinander unterscheiden.

Die Untersuchung zeigt, dass sich auch hier die Verläufe des Sommer-Parameters beim Variational Smearing wie bei allen bisherigen Untersuchungen wieder lediglich systematisch unterscheiden. Die zugehörigen Darstellungen sollen nun folgen.

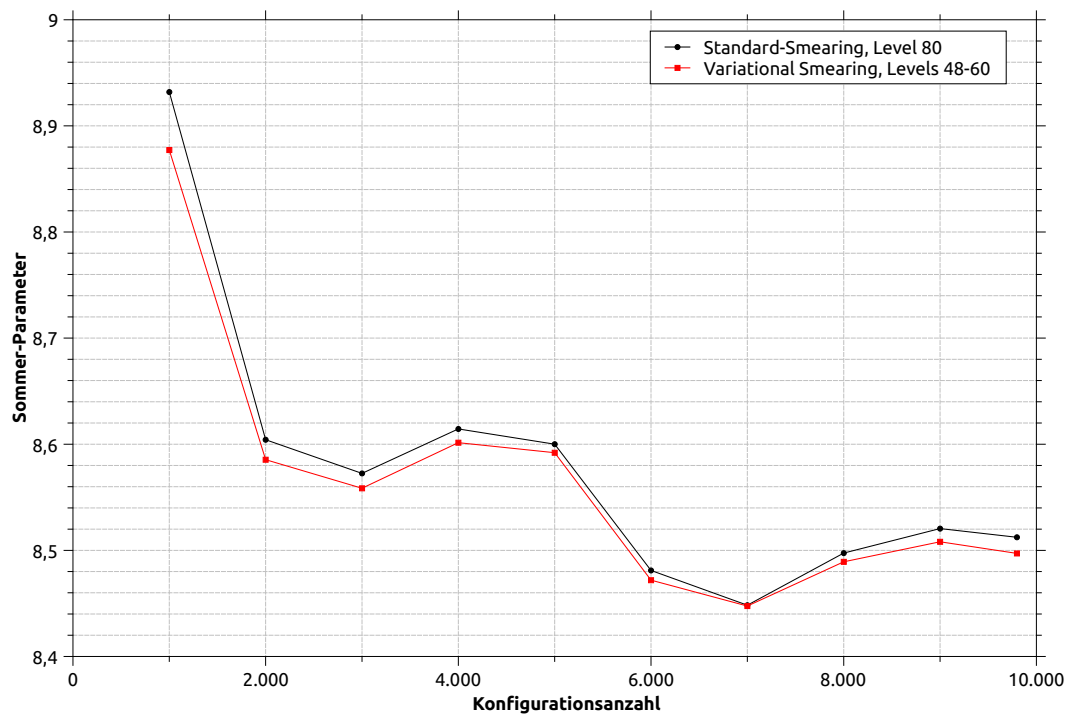


Abbildung 4.6.35.: Verlauf des Sommer-Parameters für verschieden viele Konfigurationen. Vergleich von Methode 1.1a für Variational Smearing und Standard Smearing.

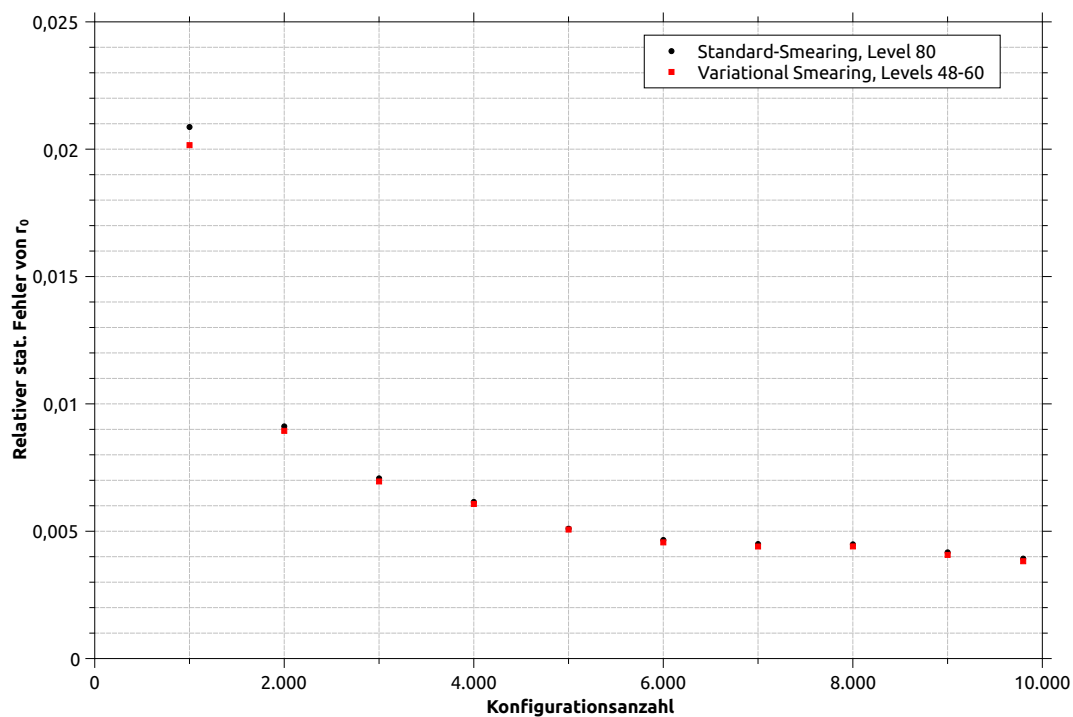


Abbildung 4.6.36.: Relativer Fehler von r_0 bzgl. der Anzahl der Konfigurationen. Vergleich von Methode 1.1a für Variational Smearing und Standard-Smearing.

4.6.10. Zusammenfassung und Diskussion der Ergebnisse

Variational Smearing und Standard-Smearing im Vergleich

Die Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2 zeigen auch beim Variational Smearing generell gute Ergebnisse. Der Sommer-Parameter scheint hier wie beim Standard-Smearing gegen einen bestimmten Wert zu konvergieren.

Diese Konvergenz ist beim Variational Smearing-Verfahren für diese Methoden deutlich besser. Das heißt, dass der *beste* Wert bereits bei relativ kleinen Smearing-Levels erreicht wird. Diese Hypothese wird auch durch die relativen Fehler gestützt. Beim *fixed vector*-Verfahren scheinen diese ein Plateau zu bilden, welches in etwa den Wert des geringsten relativen Fehlers beim Standard-Smearing besitzt (siehe Abb. 4.6.19, 4.6.21, 4.6.23, 4.6.25).

Einen Vorteil des Variational Smearing bezüglich der Fehler ist hier allerdings nicht zu erkennen. Je nachdem, welches Smearing-Level beim Standard-Smearing zum Vergleich herangezogen wird, liegen die relativen Fehler des Variational Smearing entweder über oder unter denen des Standard-Smearing.

Bei den restlichen Methoden muss zwischen *t-eigenvector*- und *fixed vector*-Verfahren unterschieden werden. Die Methoden 2.1 und 2.2 zeigen bei keinem Verfahren wirklich gute Werte im Vergleich zum Standard-Smearing; das *fixed vector*-Verfahren ermittelt für beide Methoden stark fluktuierende Werte mit sehr großen Fehlern. Zudem liegen hier alle Werte von Methode 2.2 systematisch über den beim Standard-Smearing bestimmten Werten. Das *t-eigenvector*-Verfahren liefert etwas stabilere Werte für beide Methoden, die Fehler sind allerdings im Vergleich zum Standard-Smearing auch hier recht groß.

Methode 3 stellt hier einen Sonderfall dar. Beim *fixed vector*-Verfahren erzeugt diese Methode stark fluktuierende Ergebnisse, die vom Verlauf her denen der Methode 2.1 ähneln. Zudem sind hier auch die Fehler verhältnismäßig groß. Das *t-eigenvector*-Verfahren hingegen erzeugt sehr stabile Werte, die mit denen des Standard-Smearings kompatibel sind. Gleiches gilt hier für die Fehler, die mit denen des Standard-Smearing-Verfahrens vergleichbar sind.

Zusammengefasst zeigen die *stabilen* Methoden (1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2) mit Variational Smearing eine schnellere Konvergenz bezüglich der Anzahl der Smearing-Iterationen, allerdings keine deutlichen Vorteile in Hinblick auf Fehlergröße oder Stabilität.

Die anderen Methoden (2.1, 2.2 und 3) zeigen mit Ausnahme von Methode 3 schlechtere Ergebnisse im Vergleich zum Standard-Smearing-Verfahren. Methode 3 bringt bei Benutzung des *t-eigenvector*-Verfahren stabile Werte, die mit den Werten beim Standard-Smearing vergleichbar sind.

Vergleich der stabilen Methoden

Der Vergleich der stabilen Methoden untereinander erbrachte nur wenige neue Informa-

tionen. Die Ergebnisse der Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2 stimmen im Rahmen des Fehlers für alle betrachteten Smearing-Intervalle überein; Methode 1.1c zeigt - wie schon beim Standard-Smearing - systematisch größere Werte als die anderen Methoden.

Alle Methoden erreichen ein Plateau in Bezug auf das Smearing-Level schon etwa beim zweiten Intervall, obwohl dies stark von der Definition des Begriffs *Plateau* abhängt. In jedem Fall werden im zweiten Intervall von allen Methoden bereits sehr gute Werte produziert.

Insgesamt erbringen alle diese Methoden gute Ergebnisse, Methode 1.1b scheint dabei die besten Resultate zu liefern. Die Differenz zwischen dem größten und dem kleinsten Sommer-Parameter ist hier am geringsten. Gleichzeitig ist sie sehr stabil in der Form ihres Verlaufs und besitzt im Gegensatz zu den Methoden 1.1a und 1.1c keine nennenswerten Fluktuationen.

Allerdings sind auch bei diesen Methoden die Fluktuationen sehr klein, so dass auch diese als *stabil* bezeichnet werden sollten.

Vergleich der Smearing-Level-Intervalle

Bei den Methoden, die stabile Werte für den Sommer-Parameter produzieren, ist zu erkennen, dass sich die Intervalle $\{20, 24, 28, 32\}$, $\{34, 38, 42, 46\}$, $\{48, 52, 56, 60\}$, $\{62, 66, 70, 74\}$ und $\{80, 84, 88, 92\}$ nur sehr geringfügig unterscheiden. Die Intervalle $\{4, 8, 12, 16\}$ und $\{16, 40, 64, 88\}$ hingegen zeigen teilweise deutlichere Abweichungen.

Dabei zeigt das erste Intervall für die stabilen Methoden einen im Vergleich etwas zu kleinen Wert. In Anbetracht des Umstands, dass auch die Werte beim Standard-Smearing dort kleiner sind als bei höheren Smearing-Levels, ist dies nicht weiter verwunderlich. Vergleichsweise sind die Unterschiede zwischen diesem ersten und den folgenden Intervallen sogar kleiner als die Unterschiede zwischen den zugehörigen niedrigen und hohen Smearing-Levels beim Standard-Smearing.

Im Allgemeinen zeigt sich, dass die Variational Smearing-Ergebnisse der betrachteten *stabilen* Methoden für alle Intervalle im Rahmen des Fehlers kompatibel sind.

Das Intervall $\{16, 40, 64, 88\}$ ist das einzige betrachtete Intervall in den Daten, dessen einzelne Smearing-Levels sich nicht durch vier Iterationen voneinander unterscheiden. Bei den Methoden 1.1b und 1.2 liegt dieses Intervall ebenfalls auf Höhe des Plateaus, für die Methoden 1.1a und 1.1c ist der Wert etwas erhöht.

Bei genauerer Betrachtung ist zu erkennen, dass der Wert beim zweiten Intervall $\{20, 24, 28, 32\}$ nur geringfügig unterhalb der Werte der folgenden Intervalle liegt. Es liegt damit also mehr oder weniger auf dem Plateau der nachfolgenden Werte. Damit scheint sich dieses Intervall für das Variational Smearing auf dem betrachteten Gitter besonders gut zu eignen, weil es einen guten Kompromiss zwischen benötigter Rechenzeit und Ge-

nauigkeit darstellt - dies gilt zumindest bei Nutzung von Korrelationsmatrizen, die vier Smearing-Levels nutzen.

fixed vector- vs. t-eigenvector-Verfahren

Wie bereits erwähnt wurde, unterscheiden sich die Ergebnisse der beiden Verfahren für die Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2 nicht sehr stark. Gleichzeitig konnte in den Abb. 4.6.2, 4.6.3 und 4.6.4 aber erkannt werden, dass hier das *fixed vector*-Verfahren leicht stabilere Werte ermittelt. Dies zeigt sich auch in den relativen Fehlern, die beim *fixed vector*-Verfahren ein stabiles Plateau zeigen und beim *t-eigenvector*-Verfahren im Vergleich dazu relativ stark fluktuieren.

Ein größerer Unterschied zeigt sich allerdings bei den anderen Methoden, wie oben beschrieben wurde. Hier liefert das *t-eigenvector*-Verfahren deutlich bessere Ergebnisse, insbesondere bei Methode 3.

Verhalten des zeitabhängigen Potentials $V(r, t)$

Das zeitabhängige Potential, das unter anderem von Methode 1.1a genutzt wird, zeigt beim Variational Smearing denselben allgemeinen Verlauf wie beim Standard-Smearing. Auf einen exponentiellen Zerfall folgt ein Plateau, welches dann in ein Rauschen übergeht. Beim Variational Smearing weisen die unterschiedlich geschmierten Potentiale allerdings eine sehr große Übereinstimmung untereinander auf.

Das einzige abweichende Potential wird beim Smearing-Intervall $\{4, 8, 12, 16\}$ produziert. Hier zeigt sich ein deutlich größerer exponentieller Anteil als bei den anderen Intervallen. Dies kann vermutlich dadurch erklärt werden, dass die hier in der Korrelationsmatrix vorhandenen Smearing-Level einfach sehr stark durch angeregte Zustände „verunreinigt“ sind und dementsprechend keine bessere Evaluation erlauben.

Optimales Smearing-Level

Wie bereits in der Diskussion in Abschnitt 4.3 angekündigt wurde, ist mit dem Variational Smearing-Verfahren eine weitere Möglichkeit gegeben, um das optimale Smearing-Level bei den Standard-Smearing-Methoden abzuschätzen. Vorausgesetzt, dass das Verfahren wie erwartet funktioniert, sollten die damit berechneten Ergebnisse näher am Grundzustand liegen, als es beim Standard-Smearing-Verfahren der Fall ist und somit *bessere* Ergebnisse für r_0 liefern. In diesem Fall muss nur verglichen werden, bei welchem Smearing-Level die Standard-Methoden eben dieses bessere Ergebnis reproduzieren.

Die stabilen Methoden 1.1a, 1.1b, 1.1c und 1.2 zeigen beim *fixed vector*-Verfahren, wie bereits erwähnt, ein recht stabiles Plateau. Wird der Wert für dieses Plateau grob ab-

geschätzt und dieser dann mit den Werten des Standard-Smearing-Verfahrens verglichen, so ergeben sich folgende *optimale* Smearing-Levels:

Methode	Optimales Smearing-Level
1.1a	60
1.1b	70
1.1c	60
1.2	(70)

Tabelle 4.18.: Optimale Smearing-Levels für das Standard-Smearing-Verfahren gemäß der Variational Smearing-Ergebnisse.

Der letzte Wert in der Tabelle ist in Klammern gesetzt, weil hier eine genaue Bestimmung unmöglich ist (siehe Abb. 4.6.11) und deshalb dieser Wert nur als grober Anhaltspunkt dienen kann.

Insgesamt sind die hier vorhergesagten Werte kompatibel mit der Vorhersage in Abschnitt 4.3, dass das optimale Smearing-Level unterhalb von 75 Iterationen liegen sollte. Diese konkreten Angaben gelten natürlich wieder lediglich für das hier betrachtete Gitter.

Verschiedene Größen der Korrelationsmatrix

Es konnte gezeigt werden, dass auch zuverlässige Ergebnisse produziert werden können, wenn die Korrelationsmatrix nur zwei oder drei Einträge enthält. Solche Daten brachten in der ersten Untersuchung für das betrachtete Intervall $\{34, 38, 42, 46\}$ jedoch einen niedrigeren Wert für r_0 , der hier gleichbedeutend mit stärkeren Einflüssen kurzreichweitiger Fluktuationen ist (dies ist schon bei den Ergebnissen des Standard-Smearing-Verfahrens ersichtlich, weil dort r_0 zu einem Maximum *ansteigt*). Bei Benutzung von drei Levels in der Korrelationsmatrix ist diese Abweichung von r_0 zu kleineren Werten relativ klein; bei zwei Levels ist sie hingegen schon verhältnismäßig groß.

Die Untersuchung erbrachte auch, dass der Wert für r_0 davon abhängt, welche zwei Levels aus dem Intervall $\{34, 38, 42, 46\}$ zur Berechnung genutzt werden. Bei Benutzung der obersten beiden Levels ergibt sich bei diesem Intervall der größte, bei Benutzung der untersten beiden Levels ergibt sich der kleinste Wert für den Sommer-Parameter. Dies ist dadurch zu erklären, dass die Daten höherer Smearing-Levels in diesem Bereich eine bessere Übereinstimmung mit dem Grundzustand des Potentials besitzen und weniger durch angeregte Zustände „verunreinigt“ sind, wie ja schon beim Standard-Smearing nachgewiesen werden konnte.

Die zweite Untersuchung, in der gesondert auf die Benutzung einer 2×2 -Matrix eingegangen wurde, ergab, dass die Konvergenz zum genannten Plateau für r_0 von der Größe der Korrelationsmatrix abhängt. Die Daten der 2×2 -Matrix scheinen zwar ebenfalls

den gleichen Wert für das Plateau anzustreben, wie es die Daten der 4×4 -Matrix tun, Dieser Wert wird aber weitaus langsamer erreicht; der Wert konvergiert hier schlechter. Ein Blick auf das zeitabhängige Potential $V(r, t)$ offenbarte ein sehr ähnliches Verhalten unabhängig davon, ob die Korrelationsmatrix von der Größe 2×2 oder 4×4 ist: Die einzelnen Potentialpunkte stimmen mit Ausnahme des ersten Intervalls $\{8, 12\}$ untereinander sehr gut überein. Gleichzeitig wurde aber auch festgestellt, dass der exponentielle Anteil bei kleinen Zeiten t - welcher den angeregten Zuständen entspricht - bei Nutzung der 4×4 -Matrix grundsätzlich etwas stärker unterdrückt ist. Ob dadurch jedoch bei Benutzung dieser Matrizen ein objektiver Vorteil vorliegt, ist unklar, da der Sommer-Parameter für die Intervalle hoher Smearing-Levels bei beiden Matrixgrößen nahezu identische Werte liefert.

Zusammenfassung und Ausblick

Zentrales Ziel dieser Arbeit war die Untersuchung verschiedener Verfahren zur Bestimmung des Sommer-Parameters r_0 in der $N = 1$ supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie auf dem Gitter. Hierfür wurden verschiedene Methoden zur Bestimmung der Potentialparameter, die für den Sommer-Parameter von Nöten sind, ebenso wie verschiedene Smearing-Methoden und das Variational Smearing untersucht.

Bei der Untersuchung der Smearing-Verfahren wurde festgestellt, dass r_0 mit steigender Anzahl der Smearing-Iterationen bei allen Bestimmungsmethoden in erster Näherung einen bestimmten Wert anstrebt. Die ersten Iterationen zeigten dabei die größten Auswirkungen. Im Detail zeigten alle Methoden zunächst einen Anstieg zu einem maximalen r_0 -Wert bei einem bestimmten Smearing-Level und ein abschließendes Absinken. Bei Betrachtung der sehr grundlegenden Größe des zeitabhängigen Potentials $V(r, t)$ konnte zudem festgestellt werden, dass die durch das Smearing unterdrückten angeregten Zustände ab einem bestimmten Smearing-Level scheinbar wieder ansteigen. Ab einem bestimmten Smearing-Level, das für dieses Gitter bei etwa 75 Iterationen liegt, werden die Ergebnisse also wieder schlechter, weil der Überlapp mit dem Grundzustand des Potentials wieder abnimmt.

Diese allgemeinen Effekte traten unabhängig davon auf, ob APE- oder HYP-Smearing angewendet wurden. Mehr noch: Es konnte sogar gezeigt werden, dass APE- und HYP-geschmierte Daten die gleichen Ergebnisse produzieren und dafür lediglich eine unterschiedliche Anzahl von Iterationen benötigen. Ähnliches konnte auch beim Vergleich unterschiedlicher Smearing-Parameter ε beim APE-Smearing beobachtet werden. Mit verschiedenen Parametern ε geschmierte Daten produzieren gleiche Ergebnisse bei unterschiedlichen Smearing-Levels. Allerdings konnte auch gezeigt werden, dass die Daten bei den untersuchten Parametern $\varepsilon = 0.6, 0.7$ schon bei relativ geringen Levels ein rapides Absinken des Sommer-Parameters aufweisen und somit eher als schlecht geeignet erscheinen.

Es zeigte sich, dass die Wahl $\varepsilon = 0.5$ im Vergleich zu anderen untersuchten Parametern die besten Ergebnisse produziert.

Die Untersuchung der unterschiedlichen Bestimmungsmethoden für r_0 erbrachte, dass besonders die Methoden 1.1a und 1.1b stabile Werte liefern. Beide Methoden nutzen den gleichen Ansatz zur Bestimmung des Potentials $V(r)$. Zunächst wird das zeitabhängige

Potential $V(r, t)$ durch

$$V(r, t) = \log \left(\frac{\langle W(r, t) \rangle}{\langle W(r, t + 1) \rangle} \right)$$

bestimmt, um anschließend $V(r)$ durch Fit von

$$V(r, t) = V(r) + c_1 \exp(-c_2 \cdot t)$$

zu erhalten. Die Methoden unterscheiden sich lediglich im Modell, das für das Potential angenommen wird. Es stellte sich heraus, dass das erweiterte Potential,

$$V(r) = A + B \left[\frac{1}{r} \right] + \sigma r + F \left(\left[\frac{1}{r} \right] - \frac{1}{r} \right),$$

welches von Methode 1.1b genutzt wird, insgesamt auch bei den anderen Methoden bessere Ergebnisse bringt. Vor allem bei kleinen Smearing-Levels zeigte sich ein deutlicher Vorteil.

Interessant ist auch die Erkenntnis, dass der Sommer-Parameter-Verlauf in Abhängigkeit der benutzten Konfigurationsanzahl scheinbar unabhängig von Smearing-Verfahren, Smearing-Level und Bestimmungsmethode ist. Es zeigten sich bei allen Untersuchungen lediglich systematische Unterschiede; somit eignet sich kein Verfahren besonders gut oder schlecht für wenige Konfigurationen. Insgesamt zeigt sich aber, dass der Sommer-Parameter auch bei verhältnismäßig kleiner Konfigurationsanzahl zuverlässig berechnet werden kann. Natürlich hängt die benötigte Anzahl sicherlich von den im Einzelfall verwendeten Konfigurationen und ebenso davon ab, welche Präzision erwünscht ist, allerdings reichten bei den untersuchten Daten auf dem betrachteten $16^3 \times 36$ -Gitter bereits 2000 Konfigurationen zur Bestimmung eines akzeptablen r_0 -Werts aus.

Die Daten, die durch das Variational Smearing-Verfahren erzeugt wurden, zeigten abhängig von der r_0 -Bestimmungsmethode teilweise stabileres, teilweise instabileres Verhalten. Die oben schon als besonders geeignet erscheinenden Methoden 1.1a und 1.1b zeigen hier etwas bessere Werte als beim Standard-Smearing. *Besser* bedeutet in diesem Zusammenhang, dass die r_0 -Werte in Abhängigkeit von den Smearing-Levels in der Korrelationsmatrix nicht so stark voneinander abweichen. Bezüglich der statistischen Fehler bringt das Variational Smearing aber keinen Vorteil.

Der Vergleich von *fixed vector*- und *t-eigenvector*-Verfahren zeigte, dass das *fixed vector*-Verfahren bei fast allen Methoden bessere Ergebnisse liefert und somit - insbesondere bei Benutzung der stabilen Methoden 1.1a oder 1.1b - vorzuziehen ist.

Aufgrund des hohen Rechenbedarfs beim Variational Smearing war auch insbesondere ein Vergleich der Ergebnisse verschieden großer Korrelationsmatrizen von Interesse. Dabei zeigte sich, dass auch die kleinstmöglichen Korrelationsmatrizen der Größe 2×2 den Vorteil einer recht stabilen r_0 -Bestimmung zeigen, auch wenn die Nutzung der 4×4

Korrelationsmatrizen bessere Ergebnisse bringt. In beiden Fällen scheint es, als würde r_0 mit steigenden Smearing-Levels in der Korrelationsmatrix einem bestimmten Wert entgegenstreben. Diese *Konvergenz* war bei großen Matrizen weitaus deutlicher ausgeprägt.

Neben diesen Ergebnissen war bei dieser Untersuchung aber auch eine gute Abschätzung des optimalen Smearing-Levels beim Standard-Smearing möglich. Insgesamt konnte es für das hier untersuchte Gitter auf den Bereich zwischen 60 und 70 Iterationen eingegrenzt werden. Diese recht hoch erscheinende Zahl erweist sich als berechtigt: Einmal durch die Daten selbst, die auch bei hohen Smearing-Levels eine große Stabilität zeigen und auf der anderen Seite durch Betrachtung des Smearing-Radius, der sich - zumindest in einer Definition - im verträglichen Bereich $R_{\text{smear}} \approx 3$ befindet.

Bei Betrachtung aller Ergebnisse ist es fraglich, ob die Vorteile des Variational Smearing-Verfahrens den stark erhöhten Rechenaufwand rechtfertigen können. Es scheint, als könne das Standard-Smearing bei Kenntnis des optimalen Smearing-Levels äquivalente Ergebnisse ermitteln und das zu einem Bruchteil der Rechenzeit, die beim Variational Smearing benötigt wird.

Problematisch ist hierbei natürlich, das für jedes Gitter optimale Smearing-Level zu bestimmen. In dieser Arbeit wurde es unter Zuhilfenahme der Ergebnisse des Variational Smearings ermittelt. Gleichzeitig wurden sehr viele Datenpunkte unterschiedlicher Smearing-Levels untersucht, was für praktische Untersuchung natürlich nicht in Frage kommt.

Von Interesse wäre also eine allgemeine Regel für das optimale Smearing-Level in Abhängigkeit der Gitter-Parameter. Dies ist eine der offenen Fragen, die sich nach Beendigung dieser Arbeit stellt.

In diesem Fall ist die Beantwortung der Frage durch recht simple, aber sehr zeitaufwendige Untersuchungen möglich: Für eine solche allgemeine Regel für das optimale Smearing-Level müssten unterschiedliche Gitter mit dem Variational Smearing- und dem Standard-Smearing-Verfahren untersucht werden. Unter der Annahme, dass r_0 für verschiedene Smearing-Level-Intervalle in der Korrelationsmatrix beim Variational Smearing einem bestimmten Wert entgegenstrebt, so wie es in dieser Arbeit beobachtet wurde, muss dieser Wert lediglich einem Smearing-Level beim Standard-Smearing zugeordnet werden. In Abhängigkeit von Gittergröße und anderen Parametern kann dann eine Regel für das optimale Smearing-Level aufgestellt werden.

Bevor eine solche oder ähnliche Untersuchung durchgeführt wurde, sollte tendenziell bei genügend vorhandener Rechenzeit das Variational Smearing-Verfahren genutzt werden, weil es in Abhängigkeit der verwendeten Smearing-Levels im Vergleich zum Standard-Smearing weniger stark fluktuierende Werte produziert.

Weitere offene Fragen und ungelöste Probleme sollen nun aufgelistet werden:

- Die erste Untersuchung, die eigentlich als Voruntersuchung gedacht war, betraf

den Einfluss der Bin-Größe auf die Ergebnisse. Sie wurde durchgeführt, um die optimale Bin-Größe zur weitgehenden Vermeidung der Autokorrelation zu evaluieren. Unerwarteterweise zeigte sich hier aber ein unschlüssiges Ergebnis: Das erwartete Plateau, aus dem die ideale Bin-Größe abgelesen werden sollte, erscheint für höhere Smearing-Levels nicht. Die Verläufe des Sommer-Parameters gegen die Bin-Größe sind abhängig vom benutzten Smearing-Level. Dieses Verhalten scheint jedoch nicht auf die Korrelation zurückzuführen zu sein, sondern auf einen unbekannten Effekt.

Hier bieten sich weitere Untersuchungen, wie eine Analyse der Autokorrelationszeit an, die aufgrund des Fokus dieser Arbeit nicht betrachtet wurden.

- Möglicherweise der erste Ansatzpunkt für eine Verbesserung der Sommer-Parameter-Bestimmung liegt beim Fitten der Potentiale. Es konnte gezeigt werden, dass der hintere Teil des Potentials relativ schlecht durch die Fitkurve approximiert wird. Dies wurde auf die sehr geringen Fehler im vorderen Teil des Potentials zurückgeführt. Die Einführung eines willkürlichen systematischen Fehlers würde dem Abhilfe schaffen, gleichzeitig aber wissenschaftlich schwer zu legitimieren sein. Für die Daten des von unserer Arbeitsgruppe benutzten supersymmetrischen Modells ist zudem fraglich, wie groß der Nutzen eines solchen Vorgehens wäre. Letztendlich von Interesse ist lediglich eine einheitliche Skala und somit ist eine Abweichung im Fit des Potentials unproblematisch, wenn sie denn systematisch für alle Gitter in gleicher Weise erfolgt. Auf jeden Fall problematisch wäre diese Abweichung dann, wenn die auf dem Gitter evaluierten Werte mit dem Experiment verglichen werden sollen, wie es zum Beispiel bei der Gitter-QCD der Fall sein kann.
- Bereits in kleinem Rahmen wurde die verschiedenen Definitionen für den Smearing-Radius anhand der Daten verschiedener APE-Parameter untersucht. Durch eine ausführlichere Untersuchung bei vielen verschiedenen APE-Parametern ε wäre sozusagen eine „experimentelle“ Verifikation des Smearing-Radius beim APE-Smearing möglich.
- Weiterhin offen ist ein genauer Vergleich von APE- und HYP-Smearing-Verfahren. Zwar wurde in dieser Arbeit gezeigt, dass beide Verfahren die gleichen Ergebnisse liefern, allerdings wurde nicht untersucht, welche Methode in Bezug auf die benötigte Rechenzeit optimal ist. Somit könnten durch eine genauere Untersuchung verschiedener Smearing-Parameter-Kombinationen die optimalen HYP-Parameter ermittelt werden, um dann durch APE- und HYP-Smearing erzeugte Daten hinsichtlich der Rechenzeit und Konvergenz untersuchen.

A. Zusätzliche Abbildungen

Im Folgenden sollen Plots, die der Übersichtlichkeit wegen nicht im Text untergebracht wurden, dargestellt werden.

A.1. Allgemeines Verhalten und Analyse der Smearing-Effekte

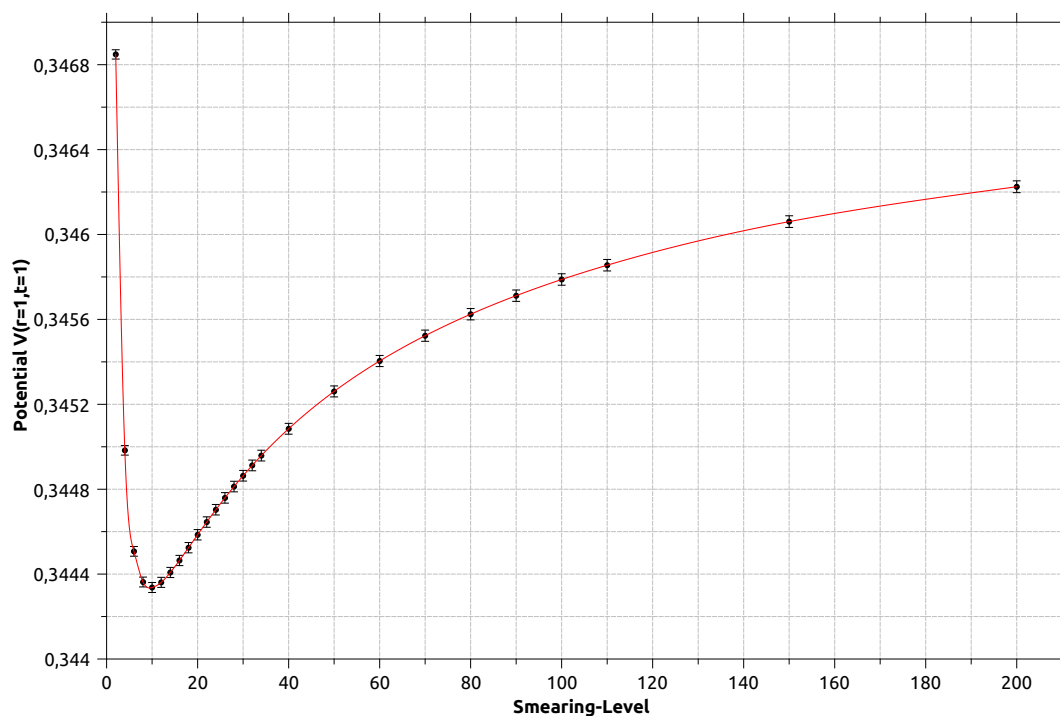


Abbildung A.1.1.: Darstellung des Potentialpunkts $V(r = 1, t = 1)$ in Abhängigkeit vom Smearing-Level. In dieser und den folgenden Abb. soll Methode 1.1a dargestellt werden.

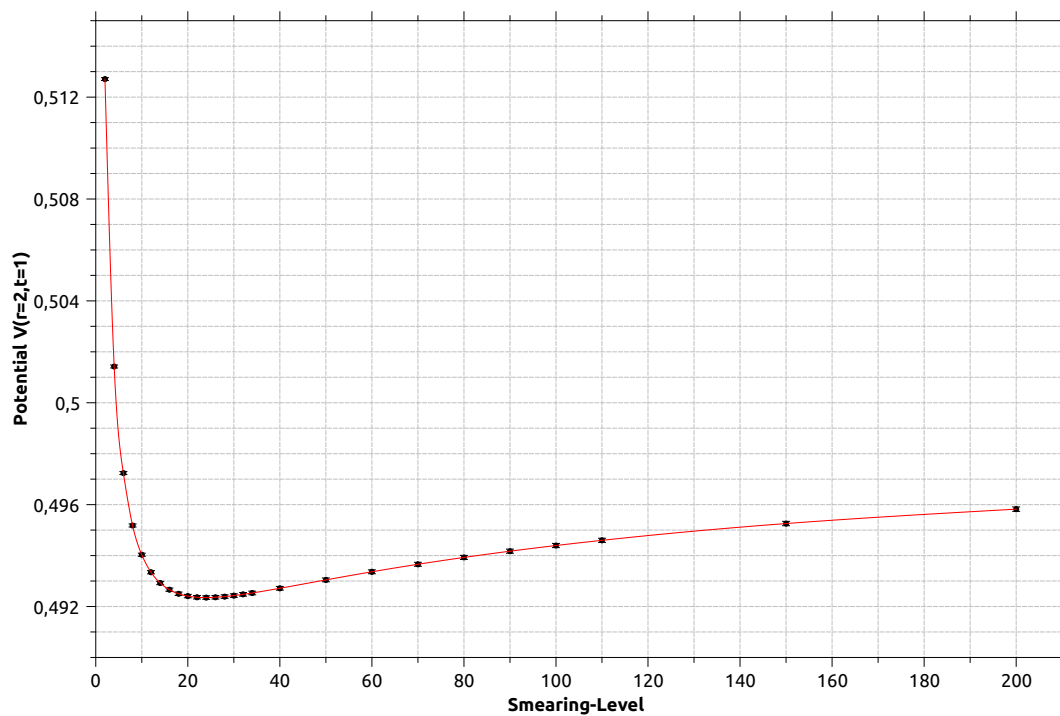


Abbildung A.1.2.: Darstellung des Potentialpunkts $V(r = 2, t = 1)$ in Abhängigkeit vom Smearing-Level.

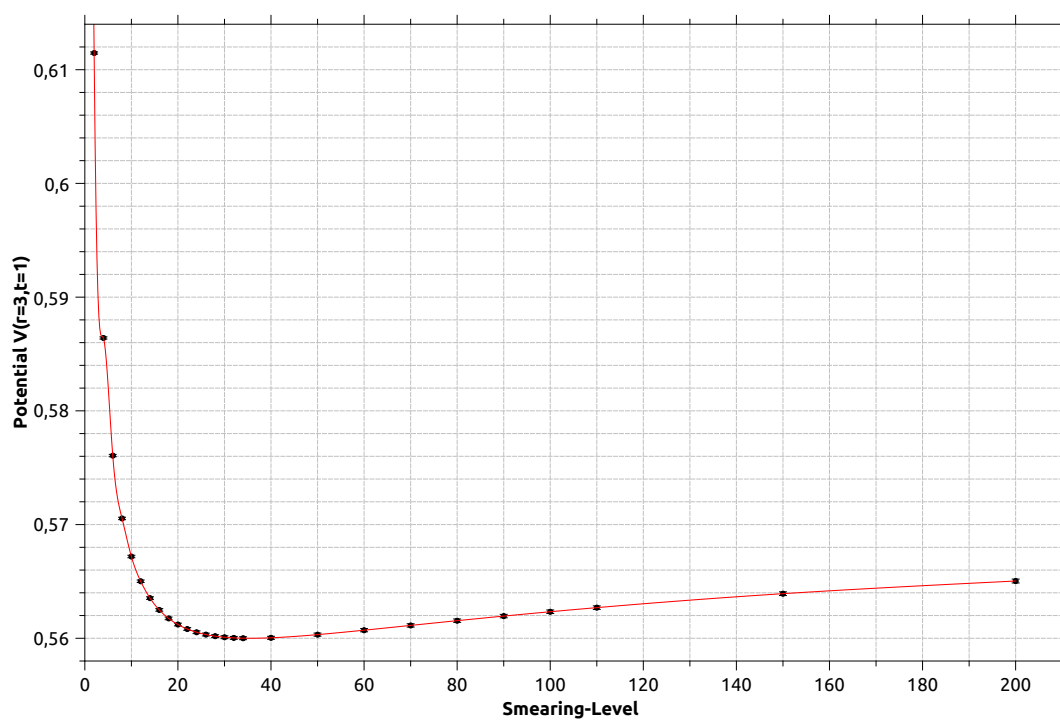


Abbildung A.1.3.: Darstellung des Potentialpunkts $V(r = 3, t = 1)$ in Abhängigkeit vom Smearing-Level.

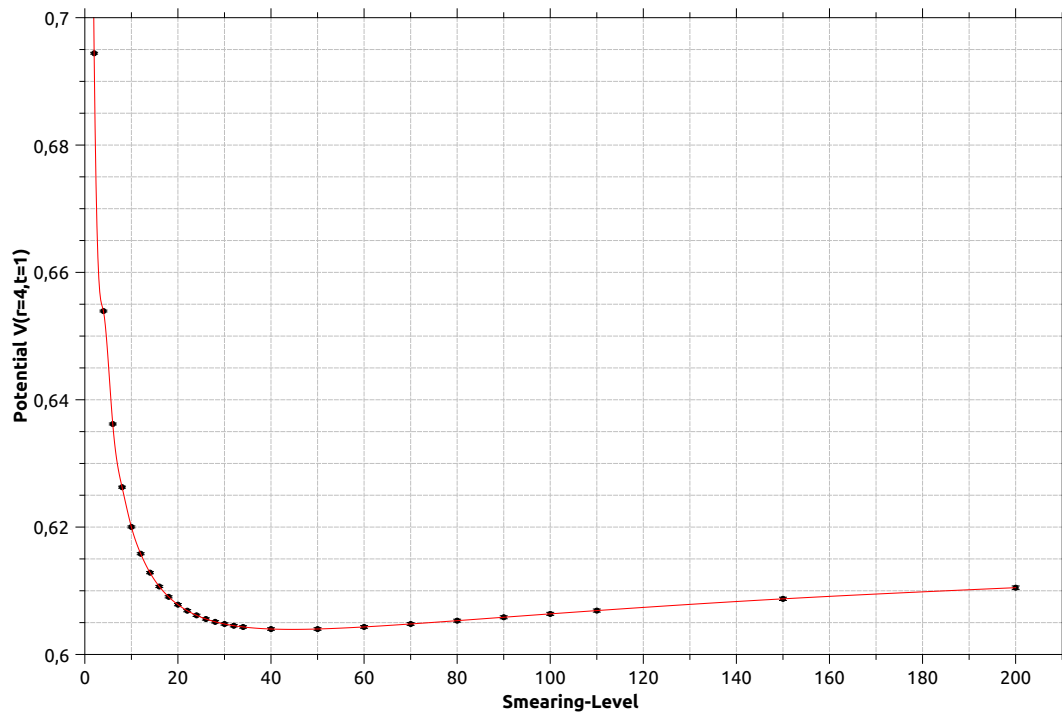


Abbildung A.1.4.: Darstellung des Potentialpunkts $V(r = 4, t = 1)$ in Abhängigkeit vom Smearing-Level.

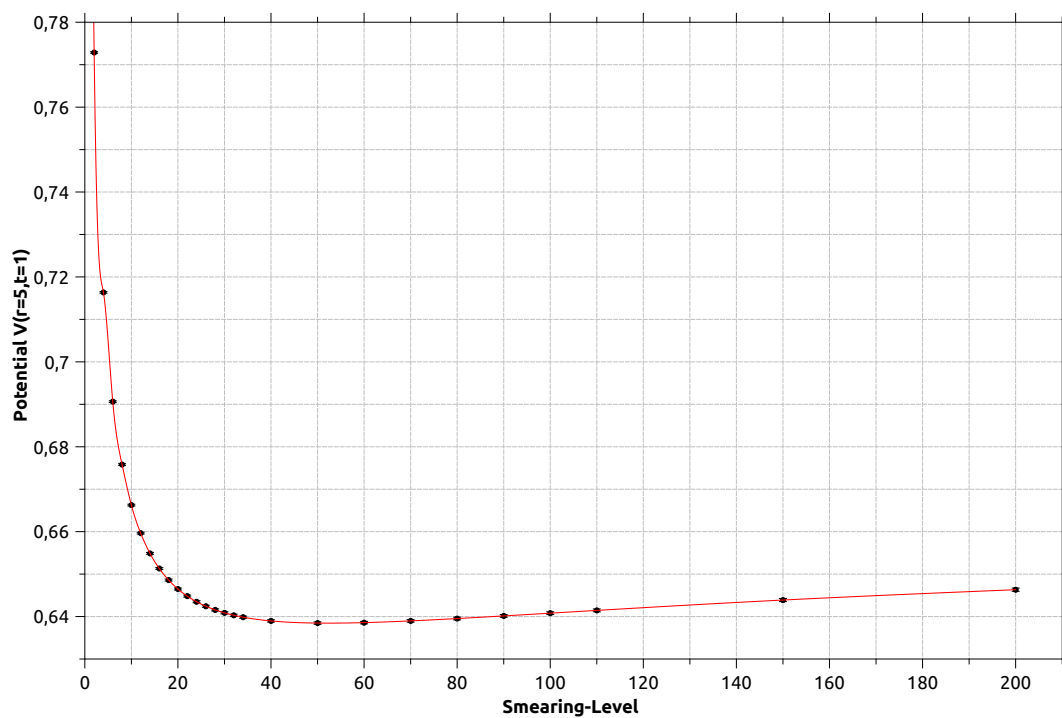


Abbildung A.1.5.: Darstellung des Potentialpunkts $V(r = 5, t = 1)$ in Abhängigkeit vom Smearing-Level.

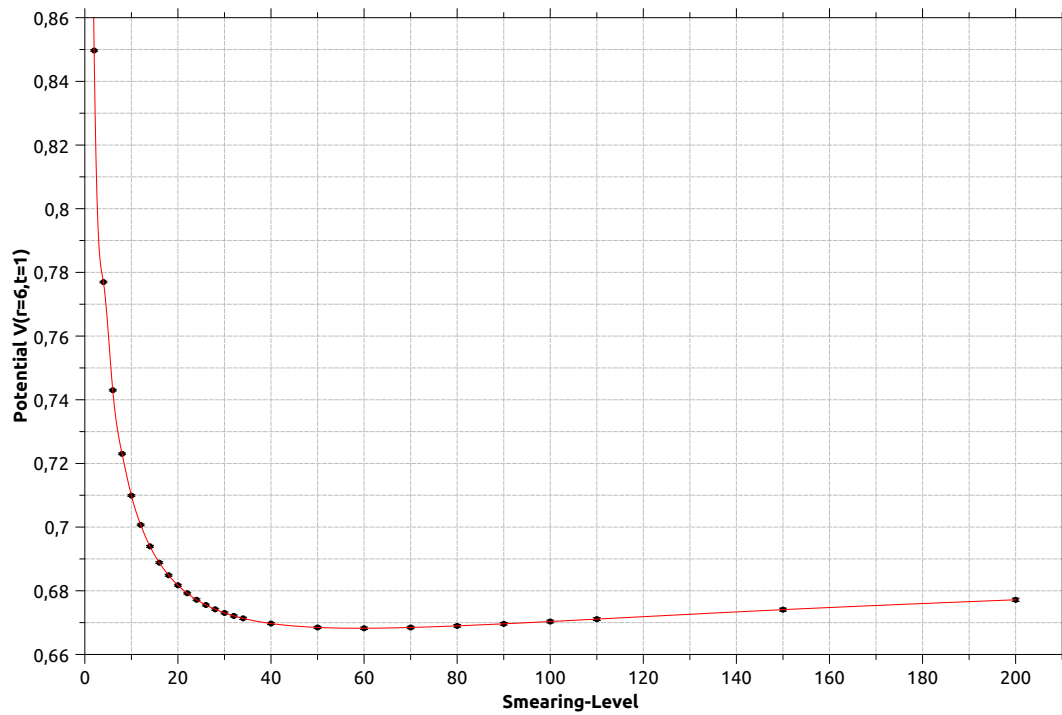


Abbildung A.1.6.: Darstellung des Potentialpunkts $V(r = 6, t = 1)$ in Abhängigkeit vom Smearing-Level.

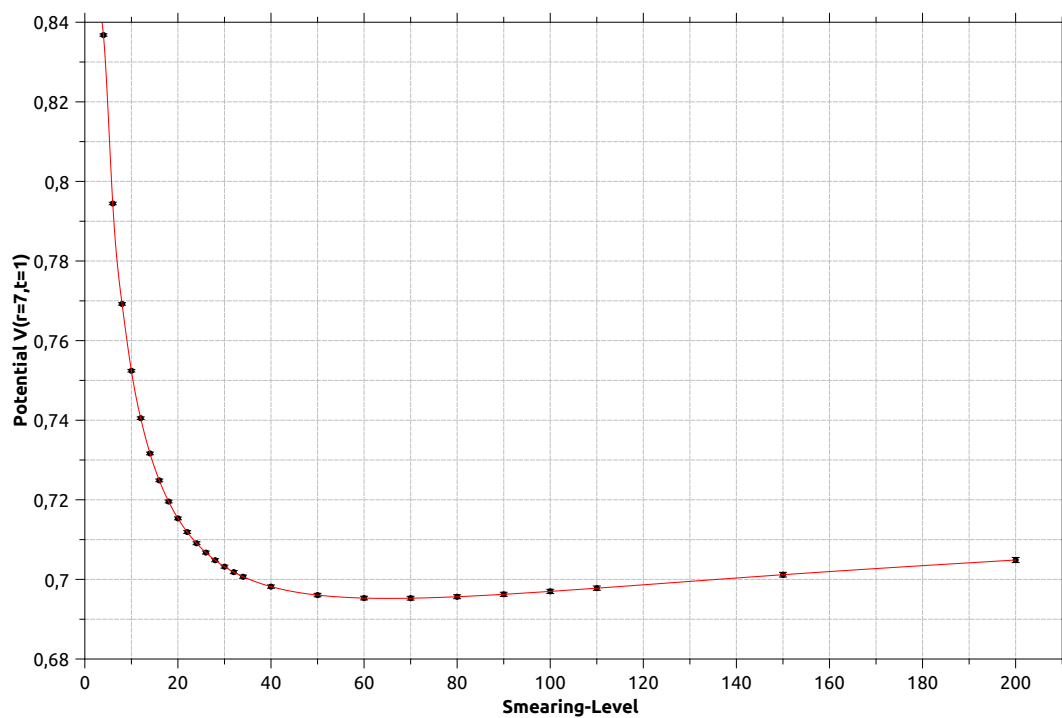


Abbildung A.1.7.: Darstellung des Potentialpunkts $V(r = 7, t = 1)$ in Abhängigkeit vom Smearing-Level.

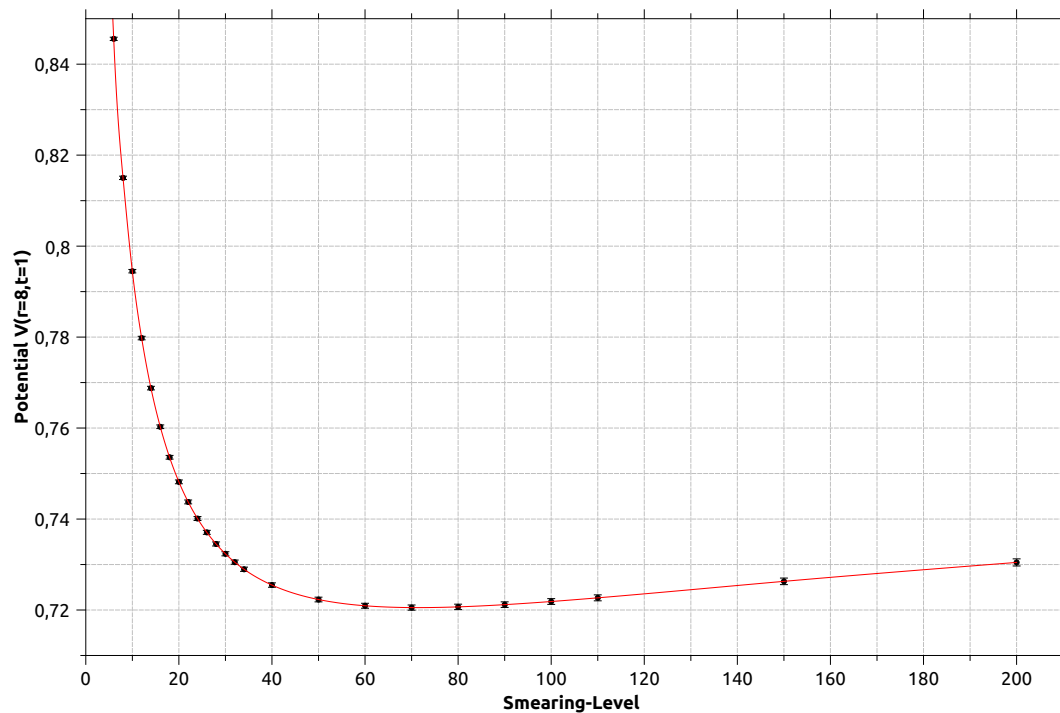


Abbildung A.1.8.: Darstellung des Potentialpunkts $V(r = 8, t = 1)$ in Abhängigkeit vom Smearing-Level.

Nachfolgende Abbildungen zeigen die Verläufe der Potentialparameter B und σ für die Methoden 1.1b bis 3. Die dazugehörige Untersuchung findet sich in Abschnitt 4.3.6 auf S. 132ff. .

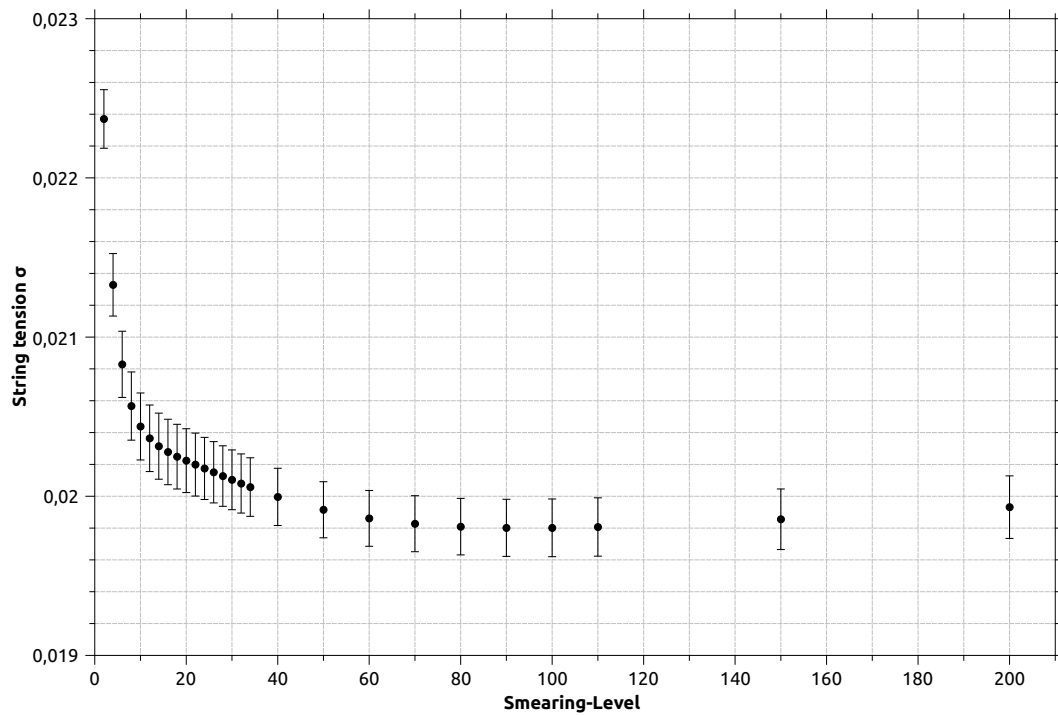


Abbildung A.1.9.: Darstellung der String-Tension σ für Methode 1.1b.

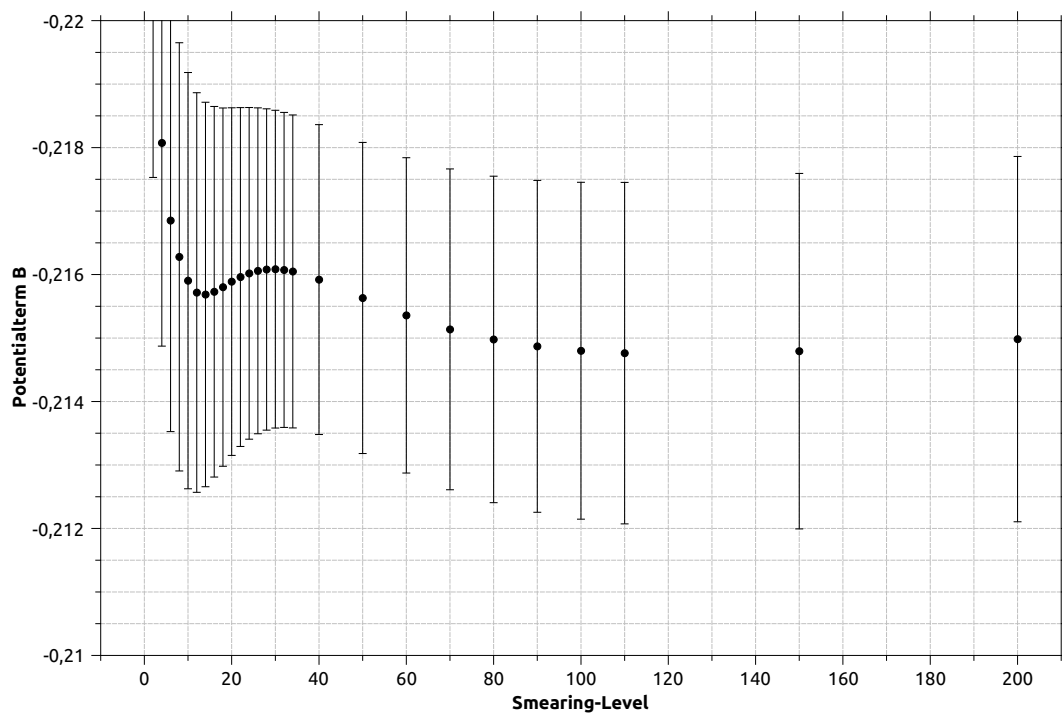


Abbildung A.1.10.: Darstellung des Coulomb-artigen Parameters B für Methode 1.1b.

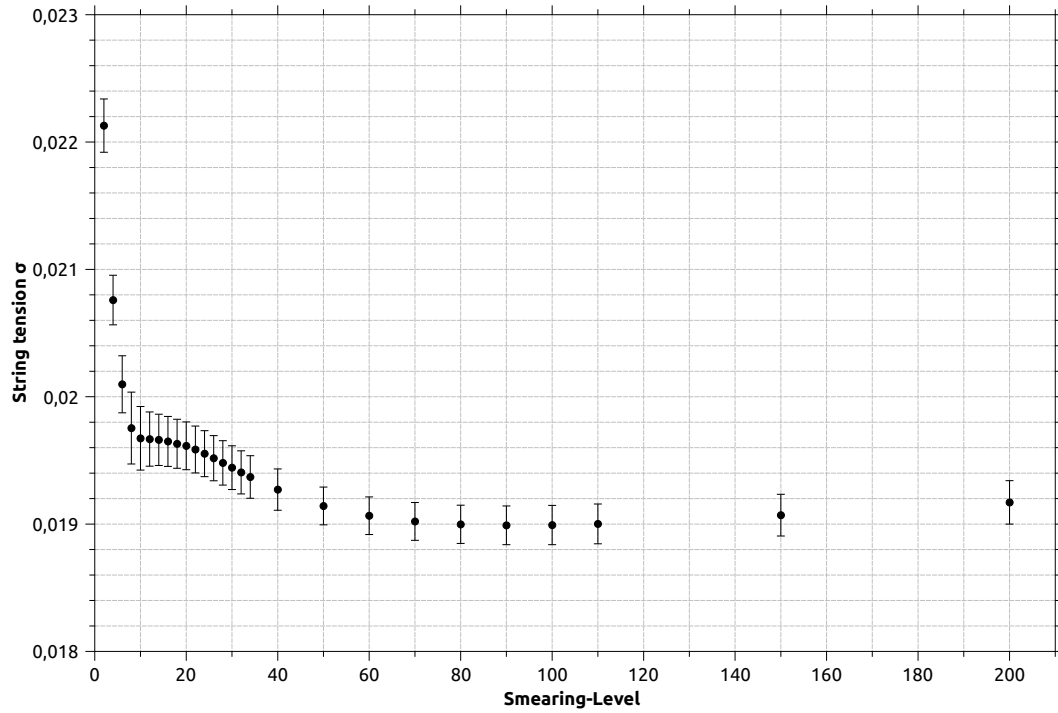
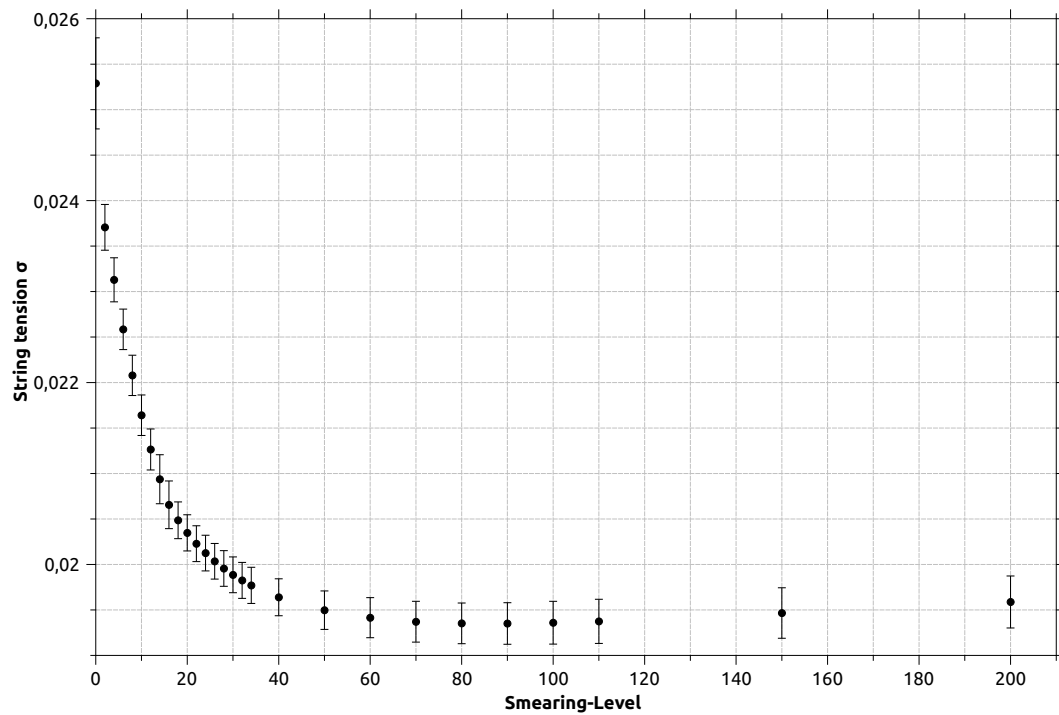
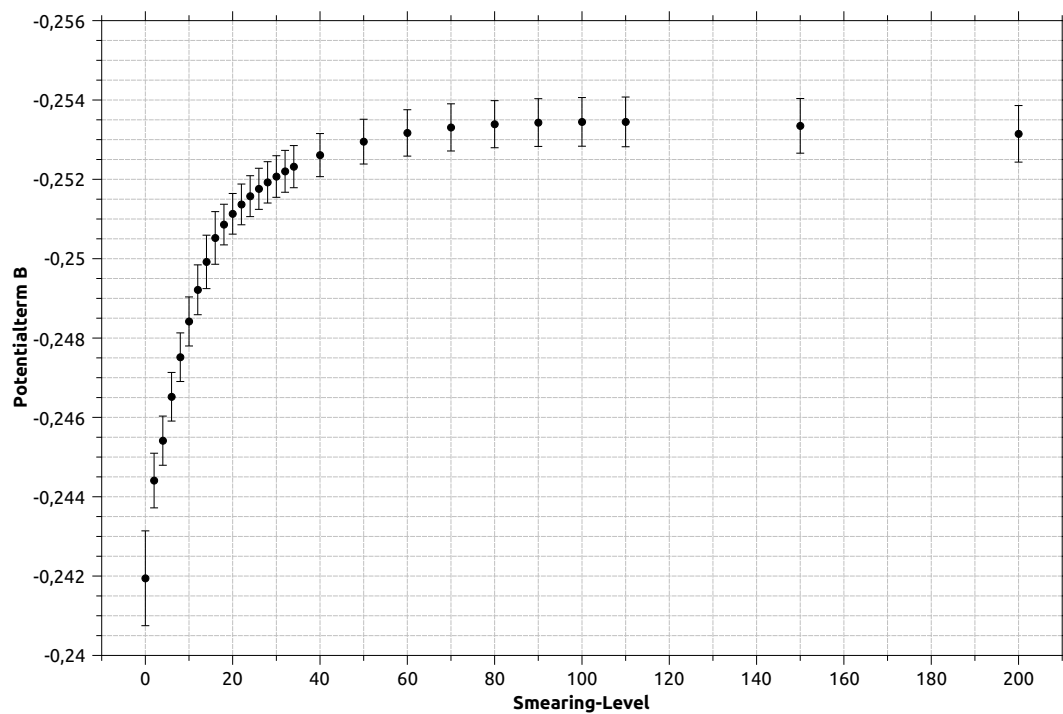


Abbildung A.1.11.: Darstellung der String-Tension σ für Methode 1.1c.

Anmerkung: Diese Methode nutzt eine Fitfunktion des Potentials, bei der B fest definiert wird. Deshalb erscheint der zugehörige Plot hier nicht.

Abbildung A.1.12.: Darstellung der String-Tension σ für Methode 1.2.Abbildung A.1.13.: Darstellung des Coulomb-artigen Parameters B für Methode 1.2.

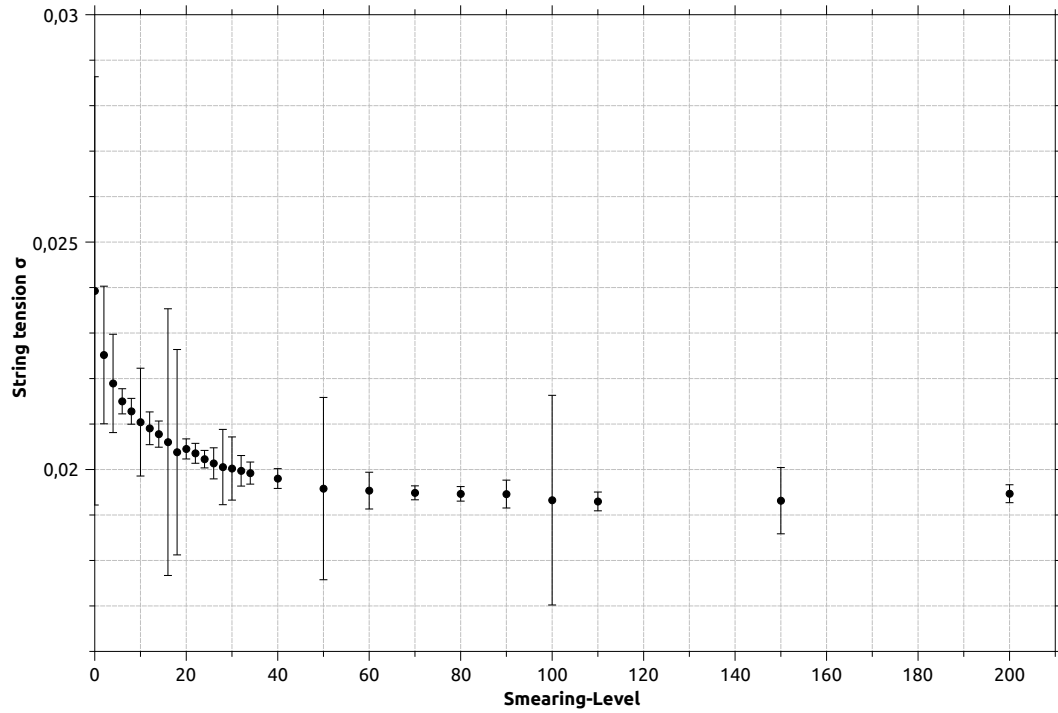


Abbildung A.1.14.: Darstellung der String-Tension σ für Methode 2.1.

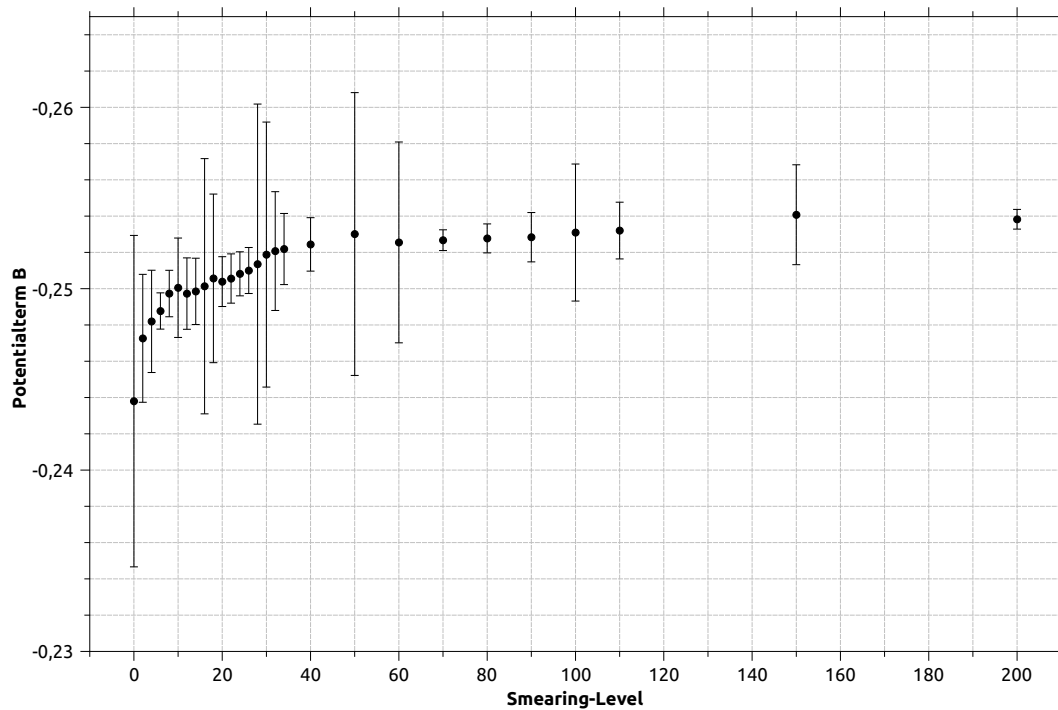


Abbildung A.1.15.: Darstellung des Coulomb-artigen Parameters B für Methode 2.1.

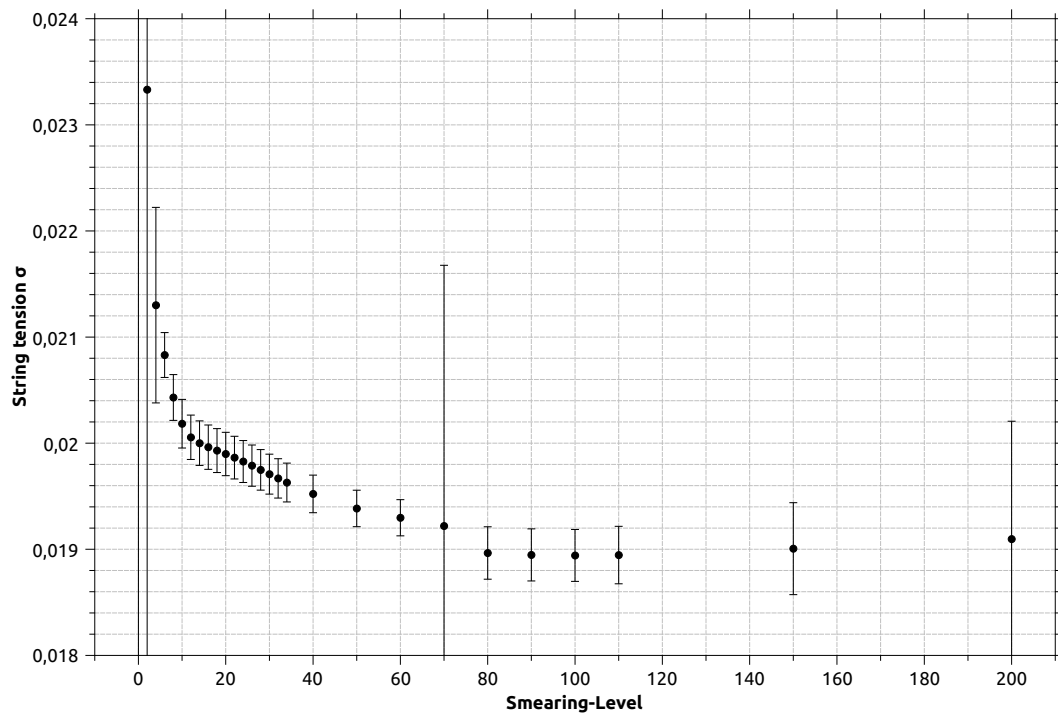


Abbildung A.1.16.: Darstellung der String-Tension σ für Methode 2.2.

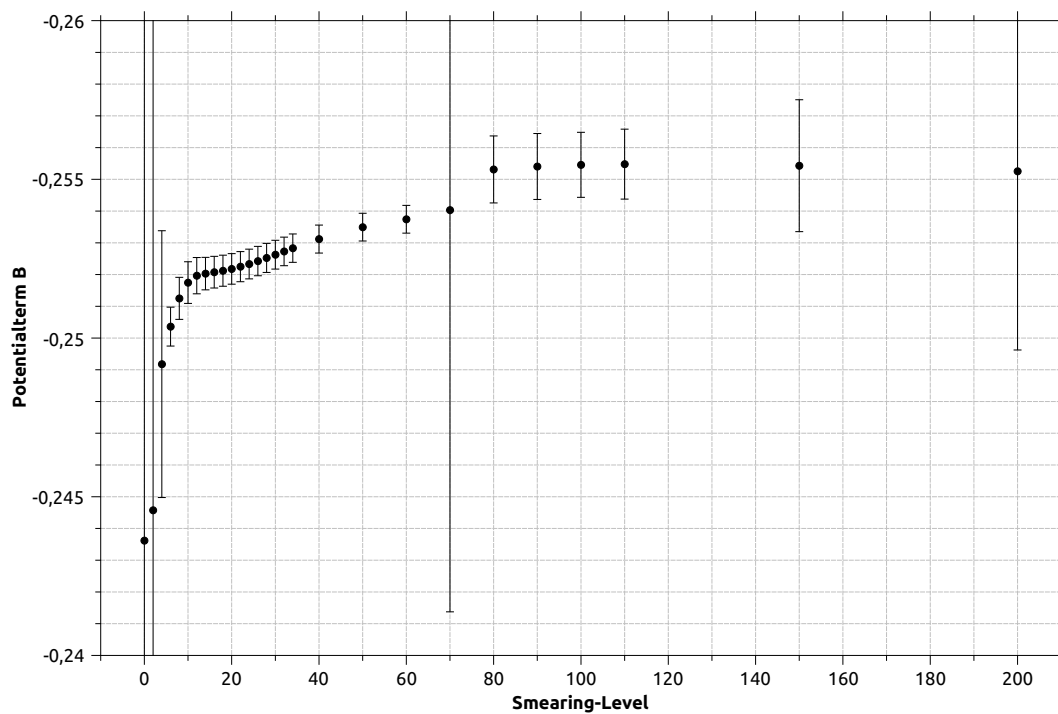


Abbildung A.1.17.: Darstellung des Coulomb-artigen Parameters B für Methode 2.2.

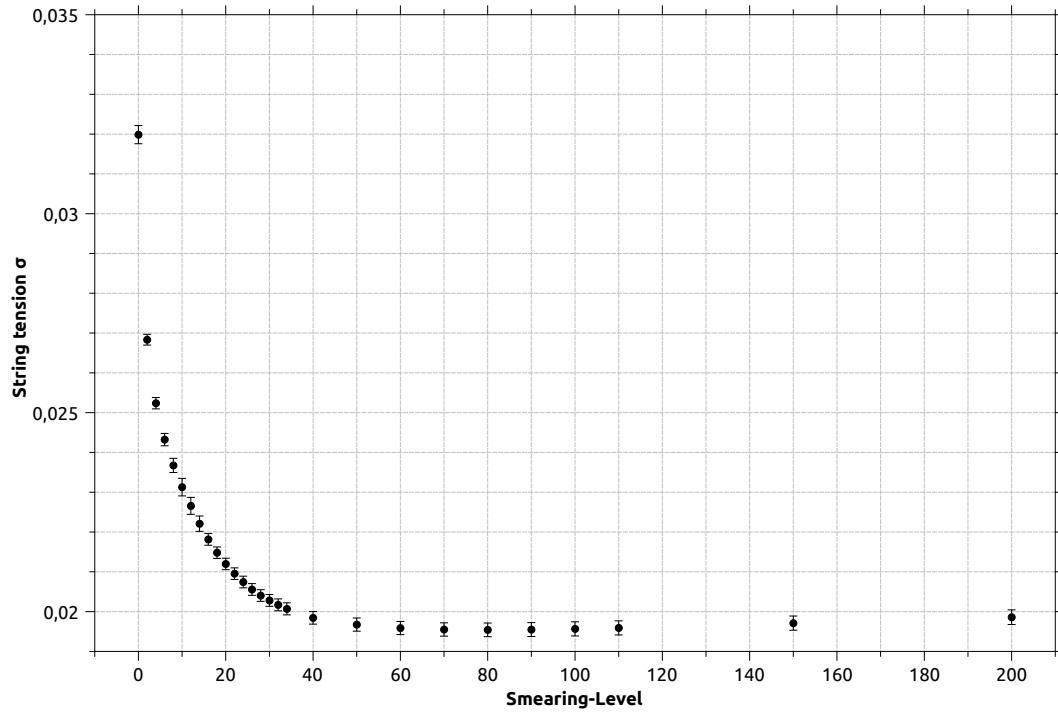


Abbildung A.1.18.: Darstellung der String-Tension σ für Methode 3.

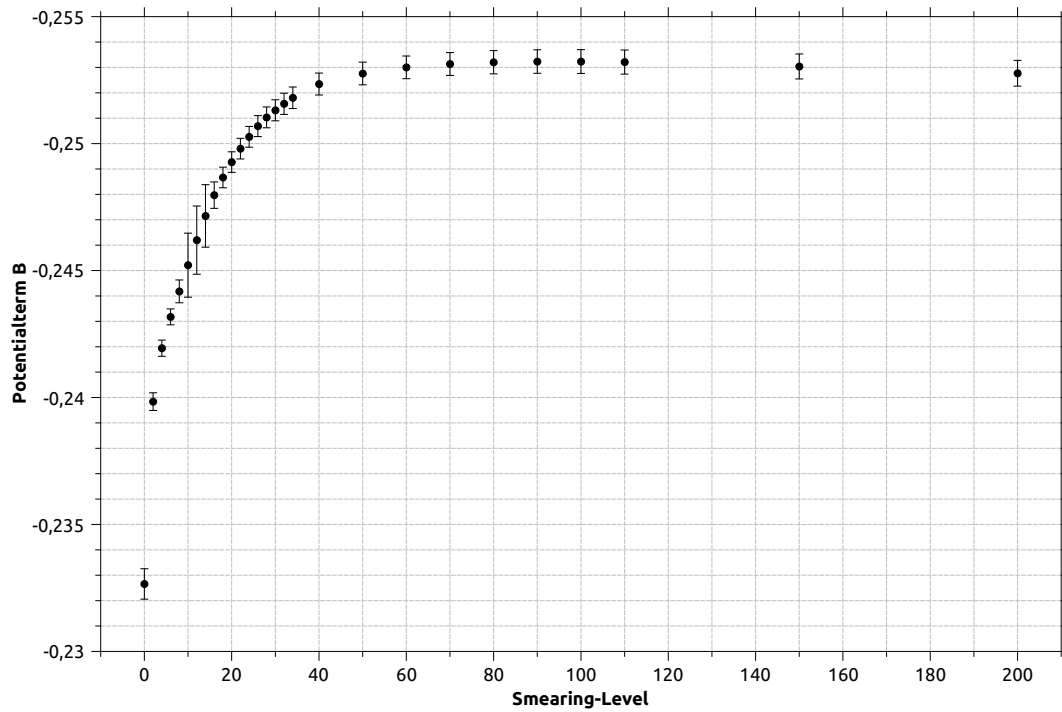


Abbildung A.1.19.: Darstellung des Coulomb-artigen Parameters B für Methode 3.

A.2. Vergleich von APE- und HYP-geschmierten Daten

Die folgenden Abbildungen zeigen die Verläufe des Sommer-Parameters für HYP- und APE-geschmierte Daten in angepassten Skalen im Vergleich. Die dazugehörige Untersuchung findet sich in Abschnitt 4.4.3 auf S. 151ff. .

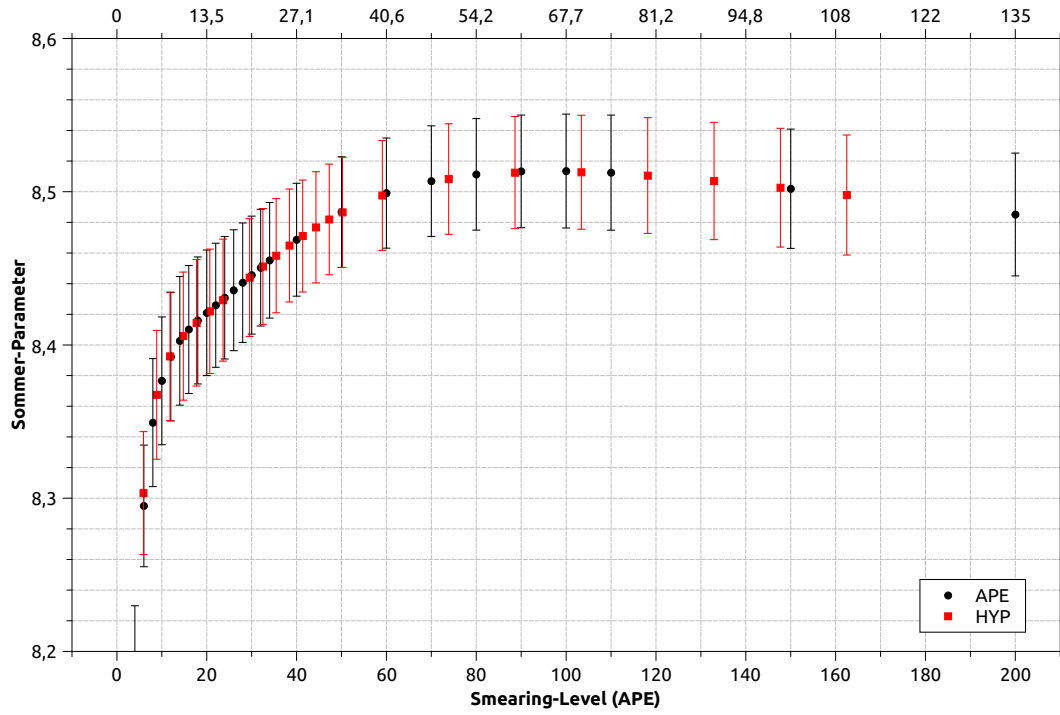


Abbildung A.2.1.: Methode 1.1b: r_0 -Verläufe für APE- und HYP-Smearing und angepasste Skalen. (Obere Skala: Smearing-Level für die HYP-Daten).

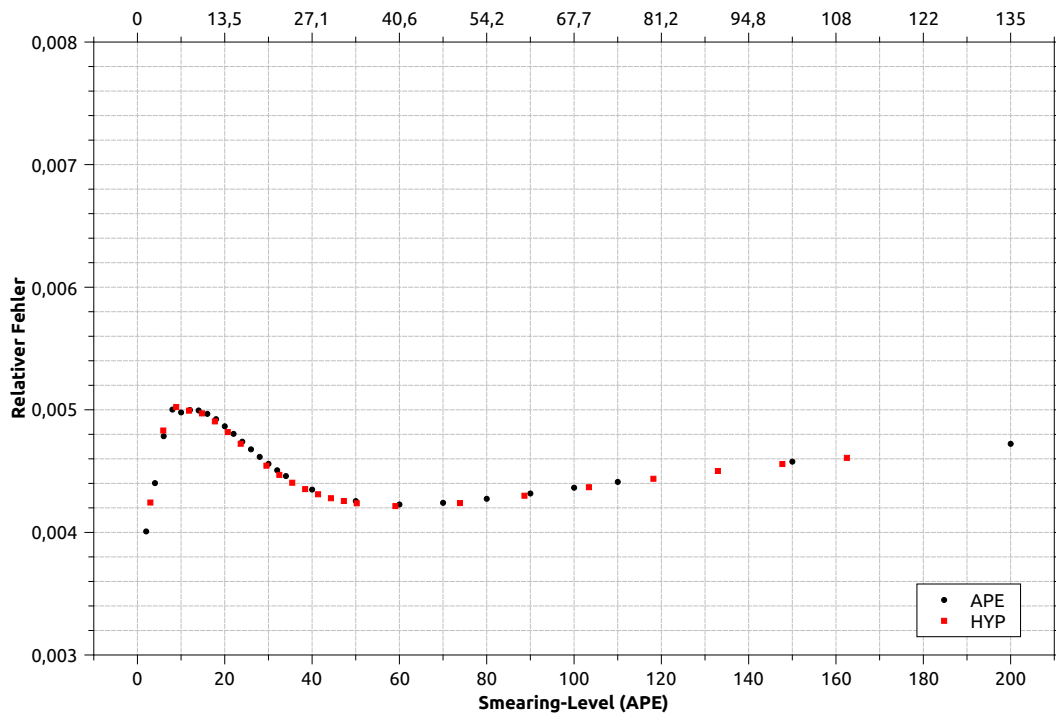


Abbildung A.2.2.: Methode 1.1b: Relativer statistischer Fehler von r_0 für APE- und HYP-Smearing in angepasster Skalierung.

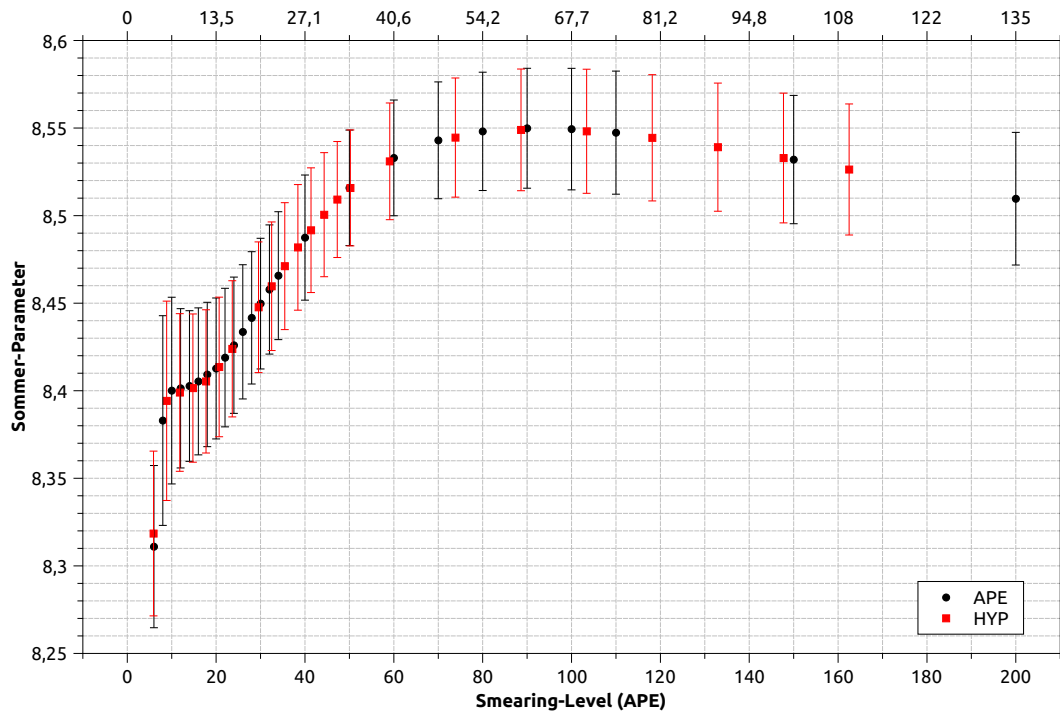


Abbildung A.2.3.: Methode 1.1c: r_0 -Verläufe für APE- und HYP-Smearing und angepasste Skalen. (Obere Skala: Smearing-Level für die HYP-Daten).

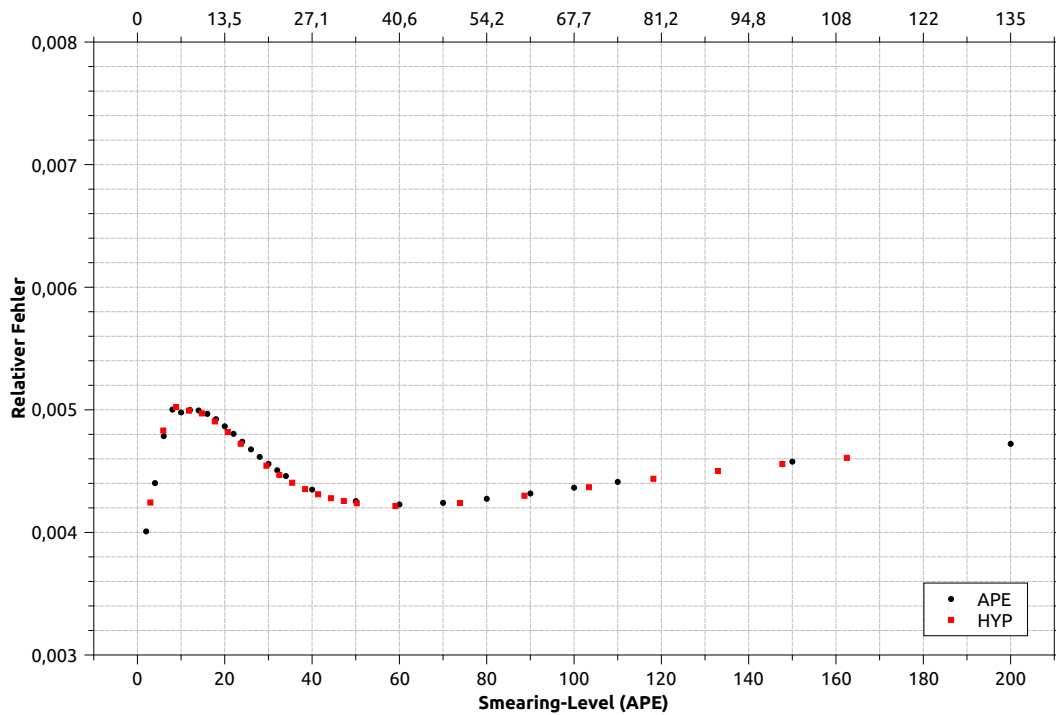


Abbildung A.2.4.: Methode 1.1c: Relativer statistischer Fehler von r_0 für APE- und HYP-Smearing in angepasster Skalierung.

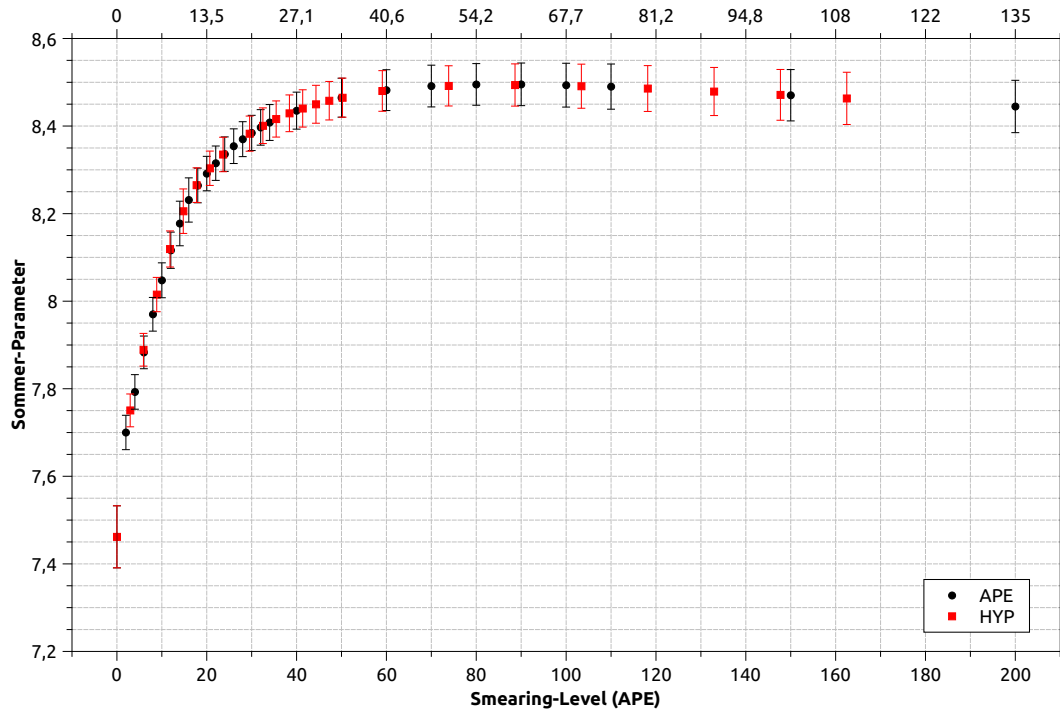


Abbildung A.2.5.: Methode 1.2: r_0 -Verläufe für APE- und HYP-Smearing und angepasste Skalen. (Obere Skala: Smearing-Level für die HYP-Daten).

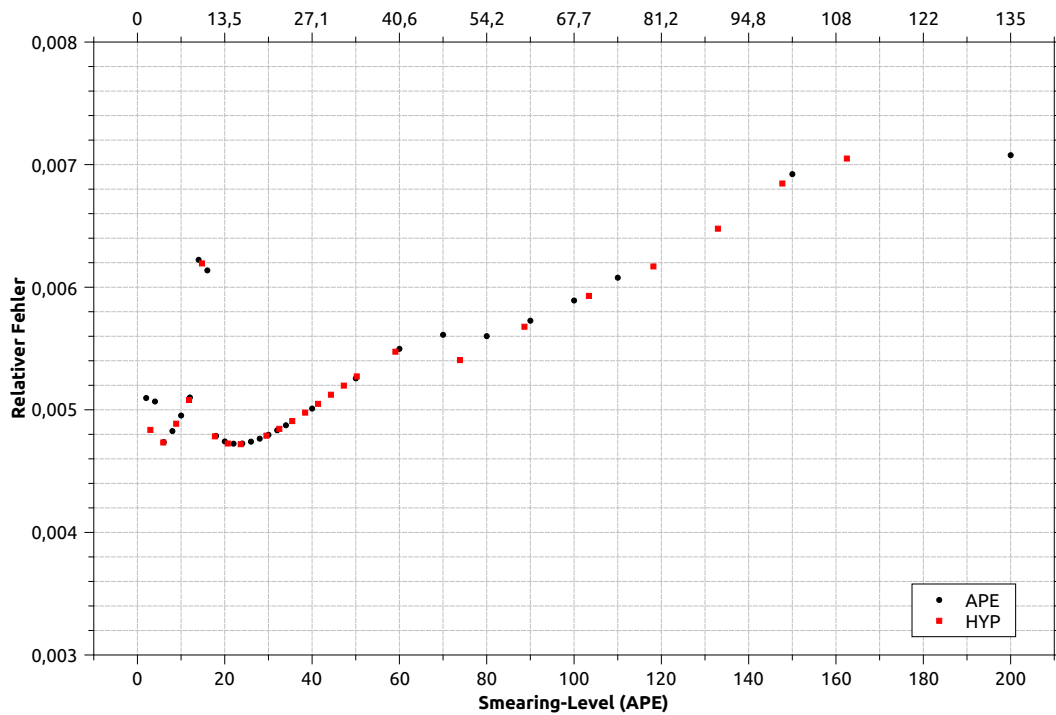


Abbildung A.2.6.: Methode 1.2: Relativer statistischer Fehler von r_0 für APE- und HYP-Smearing in angepasster Skalierung.

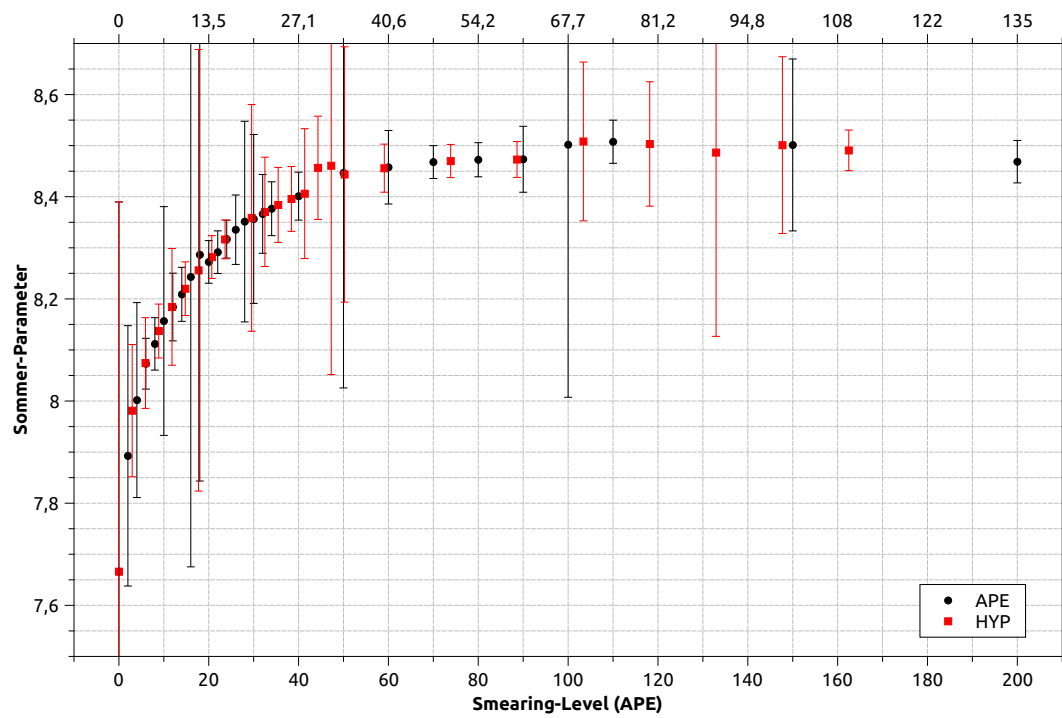


Abbildung A.2.7.: Methode 2.1: r_0 -Verläufe für APE- und HYP-Smearing und angepasste Skalen. (Obere Skala: Smearing-Level für die HYP-Daten).

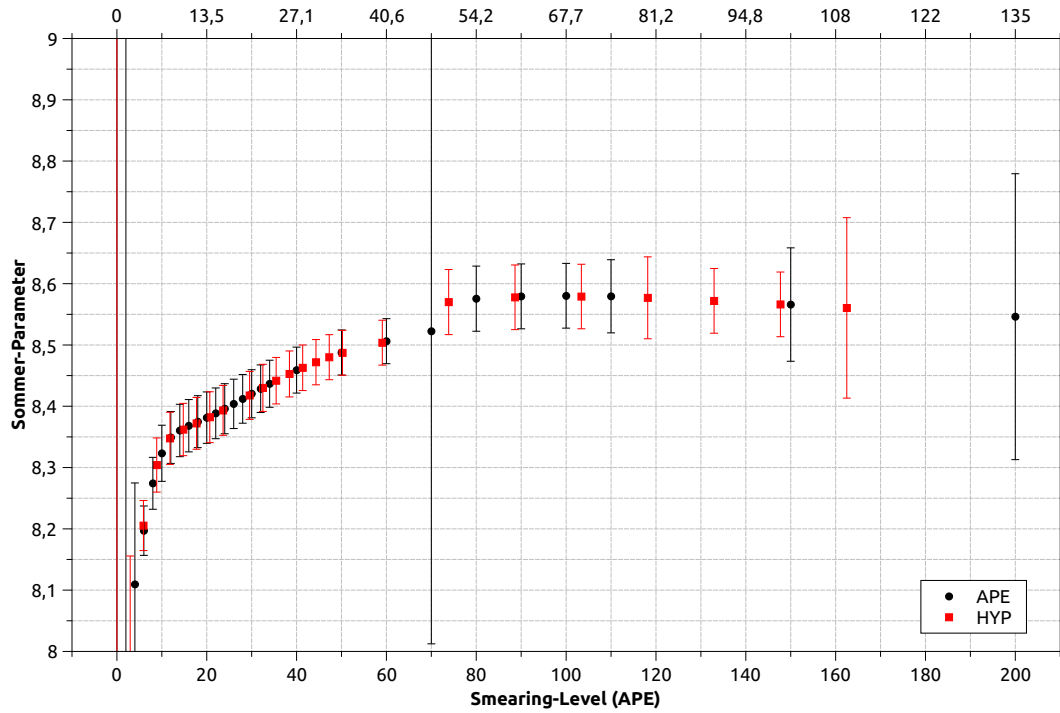


Abbildung A.2.8.: Methode 2.2: r_0 -Verläufe für APE- und HYP-Smearing und angepasste Skalen. (Obere Skala: Smearing-Level für die HYP-Daten).

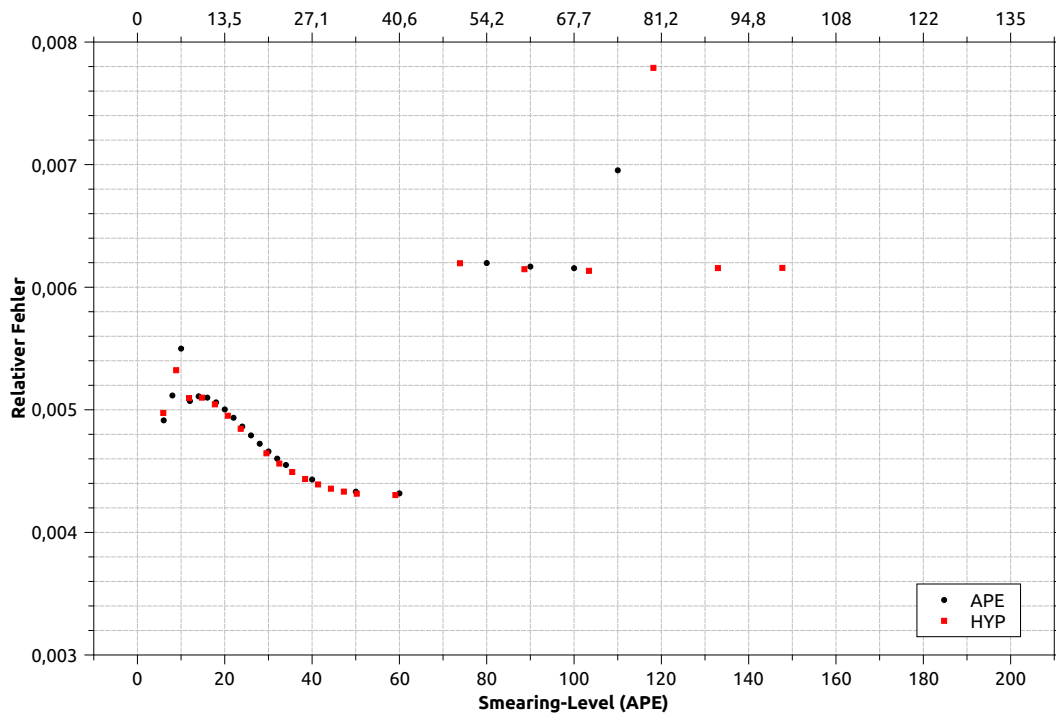


Abbildung A.2.9.: Methode 2.2: Relativer statistischer Fehler von r_0 für APE- und HYP-Smearing in angepasster Skalierung.

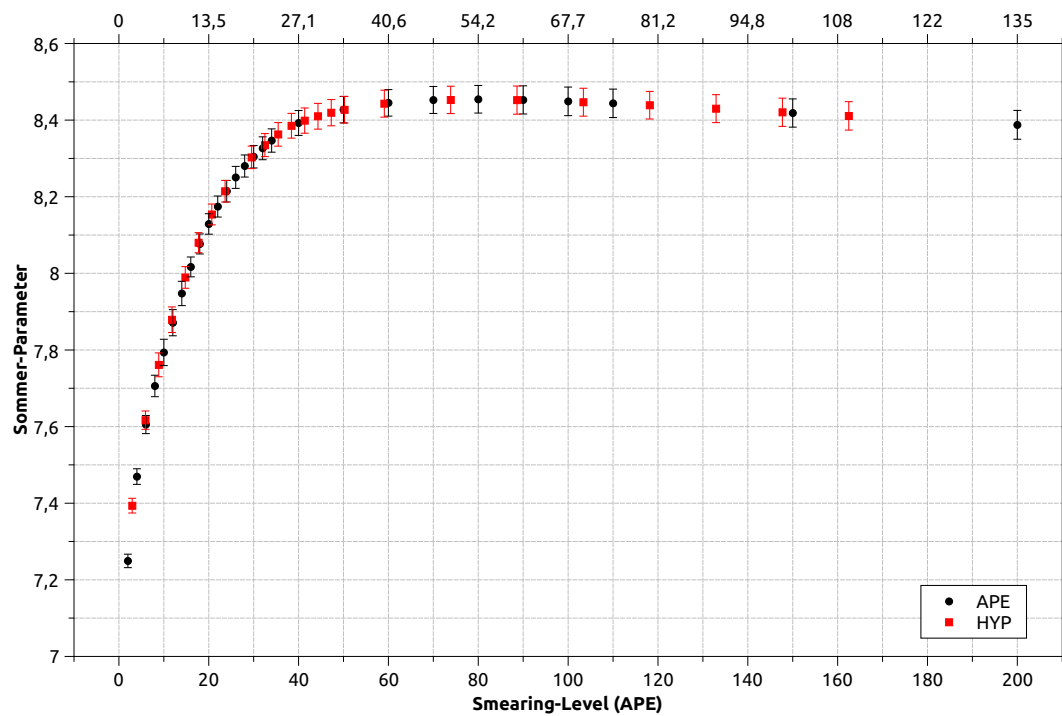


Abbildung A.2.10.: Methode 3: r_0 -Verläufe für APE- und HYP-Smearing und angepasste Skalen. (Obere Skala: Smearing-Level für die HYP-Daten).

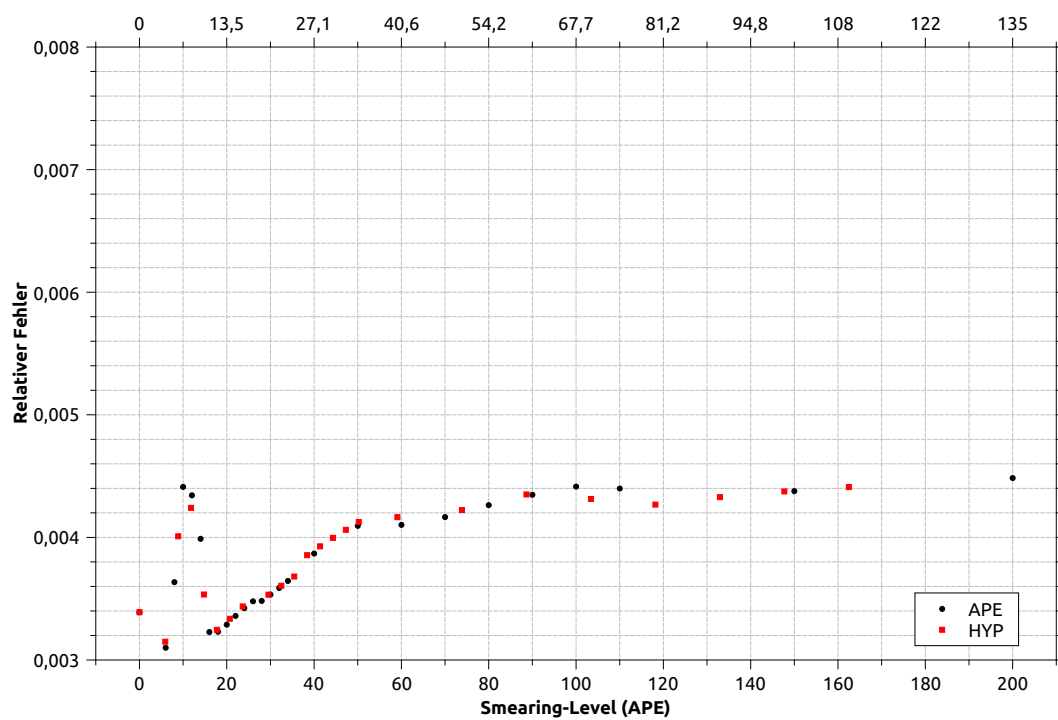


Abbildung A.2.11.: Methode 3: Relativer statistischer Fehler von r_0 für APE- und HYP-Smearing in angepasster Skalierung.

Literaturverzeichnis

- [AH03] Aitchison, I.J.R. / Hey, A.J.G.: *Gauge Theories in Particle Physics, Bd. 1: From Relativistic Quantum Mechanics to QED*, Bristol ³2003.
- [AH04] Aitchison, I.J.R. / Hey, A.J.G.: *Gauge Theories in Particle Physics, Bd. 2: Non-Abelian Gauge Theories. QCD and the Electroweak Theory*, Bristol ³2004.
- [Alb87] Albanese, M. u.a.: *Glueball Masses and String Tension in Lattice QCD*, Phys. Lett. B **192** (1987), S. 163-169.
- [BSS95] Bali, G.S. / Schlichter, C. / Schilling K.: *Observing Long Color Flux Tubes in SU(2) Lattice Gauge Theory*, Phys. Rev. D **51** (1995), S. 5165-5198.
- [Ber12] Berheide, T.: *Volumen-Effekte in der $N = 1$ supersymmetrischen Yang-Mills-Theorie auf dem Gitter*, Diplomarbeit an der Universität Münster (2012).
- [BD99] Bernard, C. / DeGrand, T.: *Perturbation Theory for Fat-Link Fermion Actions*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **83** (2000), S. 845-847, [arXiv:hep-lat/9909083](#).
- [Bon02] Bonnet, F.D.R. et al.: *Improved Smoothing Algorithms for Lattice Gauge Theory*, Phys. Rev. D **65** (2002), 114510, [arXiv:hep-lat/0106023](#).
- [Dem09] Demmouche, K.: *$\mathcal{N} = 1$ SU(2) Supersymmetric Yang-Mills Theory on the Lattice with Light Dynamical Wilson Gluinos*, Dissertation, Fachbereich Physik, Universität Münster 2009.
- [Des99] DESY-Münster Collaboration: *Monte Carlo Simulation of SU(2) Yang-Mills Theory with Light Gluinos*, Eur. Phys. J. C **11** (1999), S. 507-527, [arXiv:hep-lat/9903014](#).
- [FJ97] Frezzotti, R. / Jansen, K.: *A Polynomial Hybrid Monte Carlo Algorithm*, Phys. Lett. B **402** (1997), S. 328-334, [arXiv:hep-lat/9702016](#).
- [GL10] Gattringer, C. / Lang, C.B.: *Quantum Chromodynamics on the Lattice. An Introductory Presentation*, Berlin u.a. 2010.
- [HK01] Hasenfratz, A. / Knechtli, F.: *Flavor Symmetry and the Static Potential with Hypercubic Blocking*, Phys. Rev. D **64** (2001), 034504, [arXiv:hep-lat/0103029](#).

- [LW90] Lüscher M. / Wolff, U.: *How to Calculate the Elastic Scattering Matrix in Two-Dimensional Quantum Field Theories by Numerical Simulation*, Nucl. Phys. B **339** (1990), S. 222-252.
- [Mic92] Michael, C.: *The Running Coupling from Lattice Gauge Theory*, Phys. Lett. B **283** (1992), S. 103-106, [arXiv:hep-lat/9205010](#).
- [MW00] Münster, G. / Walzl, M.: *Lattice Gauge Theory. A Short Primer*, [arXiv:hep-lat/0012005](#).
- [Nec03] Necco, S.: *The Static Quark Potential and Scaling Behavior of SU(3) Lattice Yang-Mills Theory*, [arXiv:hep-lat/0306005](#).
- [Rot05] Rothe, H.J.: *Lattice Gauge Theories. An Introduction*, Singapur u.a. ³2005.
- [Smi02] Smit, J.: *Introduction to Quantum Fields on a Lattice*, Cambridge u.a. 2002.
- [Som94] Sommer, R.: *A New Way to Set the Energy Scale in Lattice Gauge Theories and its Application to the Static Force and α_s in SU(2) Yang-Mills Theory*, Nucl. Phys. B **411** (1994), S. 839-854, [arXiv:hep-lat/9310022](#).
- [Wil74] Wilson, K.G.: *Confinement of quarks*, Phys. Rev. D **10** (1974), S. 2445-2459.

Hiermit versichere ich, die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

Münster, im März 2012

