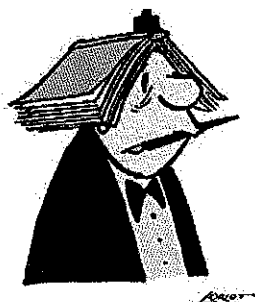


Methoden der Spektrumanalyse



Henning Jürgens

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Theorie der Supersymmetrie	2
1.1 Einführung	2
1.2 $N = 1$ Super Yang-Mills Theorie	4
2 Massenbestimmung	7
2.1 Effektive Massen	9
2.2 Maximum Likelihood Verfahren	10
2.3 Iteratives Subtraktionsverfahren	14
2.4 Fits mit Zwangsbedingungen	15
2.5 Jackknife Fehlerkalkulation	16
3 Auswertung und Ergebnisse	18
3.1 Grundlegende Konzepte und Datengrundlage	18
3.1.1 Datenbasis	18

3.1.2	Binning	20
3.1.3	Parametrisierung	20
3.1.4	Numerische Methoden	22
3.2	Die Methode Maximum Likelihood	22
3.2.1	Gluino-Glue	23
3.2.2	Adjungierte Mesonen	32
3.2.3	Anmerkungen	46
3.3	Fits mit Zwangsbedingungen	51
3.3.1	Imitation des Subtraktionsverfahrens	51
3.3.2	Die SEB Methode	54
3.4	Zusammenfassung	57
A	Korrelationskoeffizienten	58
A.1	Gluino Glue Bindungszustände	59
A.2	Adjungierte Mesonen	61
	Literaturverzeichnis	64
	Abbildungsverzeichnis	64
	Tabellenverzeichnis	65

Einleitung

Gegenwärtig werden die Elementarteilchen und ihre fundamentalen Wechselwirkungen, die elektromagnetische, die schwache und die starke Wechselwirkung, durch das Standardmodell beschrieben. Sein Erfolg ist beeindruckend, dennoch bleiben einige Fragen ungeklärt. So vermag das Standardmodell zum Beispiel nicht zu erklären, warum die elementaren Fermionen in Form von drei Familien auftreten. Weiter sei noch das sogenannte Hierarchieproblem genannt.

Eine der meistbeachteten Erweiterungen des Standardmodells ist das Konzept der Supersymmetrie. Dieses beschreibt eine Symmetrie zwischen den zwei fundamentalen Teilchengruppen der Fermionen und Bosonen. Im ungebrochenen Fall gäbe es zu jedem Teilchen der einen Familie einen korrespondierenden *Superpartner* der anderen, welcher sich lediglich durch den Spin unterscheiden würde. Dieses würde dann natürlich insbesondere gleiche Massen der beiden Partnerteilchen voraussetzen, was in Folge nicht mit dem fehlenden experimentellen Nachweis in Einklang zu bringen wäre. Das Standardmodell der Teilchenphysik um das Konzept der Supersymmetrie erweiternde Modelle wie das minimale supersymmetrische Standardmodell (MSSM) implizieren aus diesem Grund eine gebrochene Supersymmetrie. Von besonderem Interesse sind dabei Theorien, in welchen die Symmetriebrechung im niedrigen Energiebereich in weicher Form erfolgt. Eine der einfachsten dieser Theorien ist die $N = 1$ Super Yang-Mills Theorie.

Das Interesse an der Supersymmetrie gilt unter anderem dem Spektrum der leichtesten Teilchen. Dieses kann im Rahmen einer Simulation auf dem Gitter aus dem asymptotischen Verlauf von Zwei-Punkt Korrelationsfunktionen abgeleitet werden. Die der Simulation entnommenen Korrelationsfunktionen werden dafür an ihren theoretischen Verlauf - beschrieben durch die Massen und Amplituden der einzelnen Anregungszustände - gefittet.

Im Rahmen dieser Arbeit werden verschiedene Verfahren für solche Fits auf ihre Vor- und Nachteile untersucht. Die zugrundegelegten Simulationsdaten sind dafür aber nicht neu erstellt worden, sondern es wird ein Teil der von Roland Peetz im Rahmen seiner Dissertation [4] erstellten Daten (neu) ausgewertet.

Kapitel 1

Theorie der Supersymmetrie

1.1 Einführung

Das Konzept der Supersymmetrie stellt eine Erweiterung der regulären Poincaré Algebra dar. Die Generatoren der Raum-Zeit Rotationen und Translationen P^μ und $M^{\mu\nu}$ werden dabei speziell im Fall der $N = 1$ Super Yang-Mills Theorie um die vier spinorartigen Generatoren Q_a erweitert. Genauer läßt sich Q als Majorana-Spinor auffassen, insbesondere genügt er den Relationen

$$Q = C\bar{Q}^T \quad \text{und} \quad \bar{Q} = Q^T C, \quad (1.1)$$

wobei wie üblich C die Ladungs-Konjugationsmatrix bezeichnet. Es ist häufig üblich, die Majorana-Spinoren Q_a in Form zweier Weyl-Spinoren darzustellen:

$$Q_a = \begin{pmatrix} Q_A \\ \bar{Q}^{\dot{A}} \end{pmatrix}. \quad (1.2)$$

Die Super Poincaré Algebra sei an dieser Stelle kurz zusammengefaßt:

$$\begin{aligned} [P^\mu, P^\nu] &= 0 \\ [P^\mu, M^{\rho\sigma}] &= i(g^{\mu\rho}P^\sigma - g^{\mu\sigma}P^\rho) \\ [M^{\mu\nu}, M^{\rho\sigma}] &= -i(g^{\mu\rho}M^{\nu\sigma} - g^{\mu\sigma}M^{\nu\rho} - g^{\nu\rho}M^{\mu\sigma} + g^{\nu\sigma}M^{\mu\rho}) \\ [Q_a, P^\mu] = [\bar{Q}_a, P^\mu] &= 0 \\ [Q_a, M^{\mu\nu}] &= \sigma_{ab}^{\mu\nu} Q_b \\ \{Q_a, \bar{Q}_b\} &= 2\gamma_{ab}^\mu P_\mu, \end{aligned} \quad (1.3)$$

wobei $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$.

Die supersymmetrischen Teilchen leiten sich aus den irreduziblen Darstellungen der Poincaré Algebra ab, welche sich mit Hilfe von Casimir-Operatoren darstellen lassen. Die Casimir-Operatoren sind dadurch definiert, daß sie mit allen Generatoren vertauschen. Im Falle der gewöhnlichen Poincaré Algebra lauten die Casimir-Operatoren

$$\begin{aligned} P^2 &= P_\mu P^\mu \\ W^2 &= W_\mu W^\mu, \end{aligned} \tag{1.4}$$

mit dem Pauli-Lubanski-(Spin-)Vektor W_μ :

$$W_\mu = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} P^\nu M^{\rho\sigma}. \tag{1.5}$$

Die Verallgemeinerung auf den Fall der Super Poincaré Gruppe ist ausgehend von einer Verallgemeinerung des Pauli-Lubanski-Vektors möglich. Die Weyl-Spinoren Q und $\bar{Q}$ werden dabei z.B. in der Form

$$Y^\mu := W^\mu - \frac{1}{4} X^\mu \quad \text{mit} \quad X^\mu = Q \sigma^\mu \bar{Q} \tag{1.6}$$

eingeschlossen. Dabei stellt $\frac{1}{m} \vec{Y}$ eine Verallgemeinerung des Drehimpulses dar, der auch *Superspin* genannt wird. Die Eigenwerte lauten

$$\left(\frac{\vec{Y}}{m} \right)^2 = y(y+1) \quad \text{mit} \quad y = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \tag{1.7}$$

Darauf aufbauend lassen sich die Casimir-Operatoren für den supersymmetrischen Fall ableiten, sie lauten:

$$\begin{aligned} P^2 &= P^\mu P_\mu \\ C^2 &= C_{\mu\nu} C^{\mu\nu} \quad \text{mit} \quad C^{\mu\nu} = Y^\mu P^\nu - Y^\nu P^\mu. \end{aligned} \tag{1.8}$$

Für die Eigenwerte von C^2 ergibt sich

$$C^2 = -2m^4 y(y+1) \quad \text{mit} \quad y = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \tag{1.9}$$

Die irreduziblen Darstellungen der Super Poincaré Algebra lassen sich (im massiven Fall) dann gerade durch die Masse m einerseits und den Superspin y andererseits charakterisieren. Innerhalb eines solchen Supermultipletts erfolgt eine weitere Klassifizierung nach den Eigenwerten

der z-Komponente y^3 des Superspins $\frac{1}{m}\vec{W}$ und den Eigenwerte s^3 der z-Komponente des Spins $\frac{1}{m}\vec{W}$, wobei

$$-y \leq y^3 \leq y \quad \text{und} \quad s^3 \in \left\{ y^3 - \frac{1}{2}, y^3, y^3 + \frac{1}{2} \right\}. \quad (1.10)$$

Der Fall $s^3 = y^3$ ist noch weiter zweifach entartet. Die zwei einfachsten Darstellungen ergeben sich für $y = 0$ (chirales Supermultiplett) und $y = \frac{1}{2}$ (Vektor-Supermultiplett). Die jeweiligen Klassifikationen der einzelnen Teilchen soll hier kurz zusammengefaßt werden:

Chirales Supermultiplett

Das chirale Supermultiplett setzt sich aus

- einem Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (Dublett)
- einem skalaren Teilchen (Spin 0)
- einem pseudoskalaren Teilchen (Spin 0)

zusammen, es beschreibt Quarks und Leptonen sowie ihre jeweiligen Superpartner.

Vektor-Supermultiplett

Das Vektor-Supermultiplett setzt sich aus

- zwei Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen (Dublett's)
- einem Vektorteilchen (Spin 1, Triplet)
- einem pseudoskalaren Teilchen (Spin 0)

zusammen. Über das Vektorteilchen können Eichbosonen und ihre jeweiligen Superpartner beschrieben werden.

1.2 $N = 1$ Super Yang-Mills Theorie

Die Wirkung der $N = 1$ Super Yang-Mills Theorie (SYM) ähnelt der Wirkung der QCD, sie beinhaltet aber einen auf den Ausdruck eines (masselosen) Majorana-Fermions (gluino) zu-

rückzuführenden Anteil in der adjungierten Darstellung λ . Die (onshell) Wirkung ist durch

$$S_{SYM} = \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a(x) F_{\mu\nu}^a(x) + \frac{1}{2} \bar{\lambda}^a(x) \gamma_\mu D_\mu \lambda^a(x) \right\} \quad (1.11)$$

gegeben. Dabei bezeichnet $F_{\mu\nu}^a$ den Feldstärketensor und D_μ die kovariante (Superraum-)Ableitung. Die Invarianz der Wirkung unter den supersymmetrischen Transformationen

$$\begin{aligned} \delta A_\mu(x) &= -2g \bar{\lambda}(x) \gamma_\mu \epsilon \\ \delta \lambda(x) &= -\frac{i}{g} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \epsilon \\ \delta \bar{\lambda}(x) &= \frac{i}{g} \bar{\epsilon} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}(x) \end{aligned} \quad (1.12)$$

auf den Feldern kann durch explizite Anwendung bewiesen werden. Dabei ist ϵ ein Grassmann Spinor Parameter. Durch die Einführung eines Massenterms für das Gluino

$$L_{SYM} \rightarrow L = L_{SYM} + m_{\bar{g}}(\bar{\lambda}\lambda) \quad (1.13)$$

wird die Supersymmetrie weich gebrochen (das bedeutet, daß einige wichtige Eigenschaften wie das Nicht-Renormalisierungstheorem erhalten bleiben).

Zur Beschreibung des Bereichs der niedrigen Energie der $N = 1$ SYM wurde von Veneziano und Yankielowicz [1] eine effektive Wirkung vorgeschlagen. Die Darstellung der effektiven Wirkung erfolgt dabei auf Basis der eichinvarianten und farblosen zusammengesetzten Felder

$$\begin{aligned} &F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a \\ &F_{\mu\nu}^a \tilde{F}_{\mu\nu}^a \\ &\bar{\lambda}^a \lambda^a \\ &\sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}^a \lambda^a. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Der Ansatz von Veneziano und Yankielowicz wurde von Farrar, Gabadadze und Schwetz zu einer effektiven Wirkung weiterentwickelt [2], welche aus zwei chiralen Supermultiplett-Operatoren besteht. Diese Wirkung sagt zwei verschiedene Multipletts voraus. Das schwere Multiplett stimmt mit dem Veneziano-Yankielowicz-Multiplett überein, es besteht aus folgenden Teilchen:

- ein pseudoskalar Meson, $a - \eta'$ genannt
- ein skalares Meson, $a - f_0$ genannt

- ein Gluino Glue Bindungszustand.

Entsprechend für das leichte Multiplett:

- ein 0^+ Glueball
- ein 0^- Glueball
- ein Gluino-Glueball-Grundzustand.

Die Massen der Teilchen innerhalb eines Multipletts würden bei ungebrochener Supersymmetrie identisch sein, aber durch die Einführung eines Massenterms für das Gluino und die dadurch resultierende weiche Symmetriebrechung werden die einzelnen Massen des Multipletts aufgespalten.

Kapitel 2

Massenbestimmung

Um die Masse eines gebundenen Zustandes im Rahmen einer Simulation auf dem Gitter zu messen, ist es notwendig, Vakuum Erwartungswerte von Funktionen der Eichfelder $A(U)$ zu berechnen. Im Rahmen der Gitterformulierung reduziert sich der Pfadintegralzugang,

$$\langle A(U) \rangle = \int \mathcal{D}U e^{-S_{eff}} A(U), \quad (2.1)$$

dabei bekanntlich zu einer gewöhnliche Integration:

$$\mathcal{D}U = \prod_{i,\mu} dU_\mu(x). \quad (2.2)$$

Wegen der großen Anzahl von Freiheitsgraden kommt zu dessen Berechnung nur eine Monte-Carlo-Simulation in Frage. Um dabei dem scharfen Peak des Faktors $e^{-S_{eff}}$ gerecht zu werden, wird durch einen stochastischen Prozeß ein Ensemble aus N zufälligen Feldkonfigurationen $\{U_i | i = 1, \dots, N\}$ der Verteilung

$$p(U_i) \sim e^{-S_{eff}} \quad (2.3)$$

erzeugt. Auf dieser Grundlage ergibt sich dann für den Erwartungswert von $A(U)$ die Schätzung

$$\langle A(U) \rangle \approx \bar{A} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A(U_i). \quad (2.4)$$

Die Massen und Amplituden von gebundenen Zuständen, beschrieben durch einen eichfeldabhängigen Operator $O_U(\vec{x}, t)$, können aus dem Verlauf von Zwei-Punkt Korrelationsfunktionen der Form

$$C(\Delta t) = \langle S^\dagger(t + \Delta t) S(t) \rangle \quad (2.5)$$

zu unterschiedlichen Zeitscheibendistanzen Δt abgeleitet werden. Hierbei bezeichnet $S(t)$ den Zeitscheibenerwartungswert

$$S(t, p=0) = \frac{1}{\sqrt{V_S}} \sum_{\vec{x}} O_U(\vec{x}, t) \quad (2.6)$$

bei einem (räumlichen) Volumen $V_S = L^3$ des Gitters mit (räumlicher) Ausdehnung L . Die Summation über die gesamte Zeitscheibe t liefert dabei gerade die Komponenten mit Impuls $p=0$. Durch Einfügen eines vollständigen Satzes von Energieeigenfunktionen in (2.5) und unter Berücksichtigung periodischer bzw. antiperiodischer Randbedingungen in Zeitrichtung ergibt sich als Spektralzerlegung

$$\begin{aligned} C(\Delta t) &= |\langle 0|S(t)|0\rangle|^2 + \sum_n |\langle n|S(t)|0\rangle|^2 e^{-m_n \Delta t} \pm |\langle n|S^\dagger(t)|0\rangle|^2 e^{-m_n(T-\Delta t)} \\ &= \omega_0 + \sum_n \omega_n \left(e^{-m_n \Delta t} \pm e^{-m_n(T-\Delta t)} \right). \end{aligned} \quad (2.7)$$

Dabei bezeichnet T die (zeitliche) Ausdehnung des Gitters. Es sollte noch angemerkt, daß der alternative Zugang

$$C(\Delta t) = \langle S^\dagger(t+\Delta t)S(t) \rangle - \langle S^\dagger(t+\Delta t) \rangle \langle S(t) \rangle \quad (2.8)$$

genau zu einem Ausschluß des möglichen Vakuum Erwartungswertes ω_0 in (2.7) führen würde. In jedem Fall resultiert durch die Periodizität des Gitters eine Symmetrie um $\frac{T}{2}$, welche sich durch die Umformung

$$\begin{aligned} C(\Delta t) &= \omega_0 + \sum_n \omega_n \cdot e^{-\frac{T}{2}m_n} \left(e^{m_n(\frac{T}{2}-\Delta t)} \pm e^{-m_n(\frac{T}{2}-\Delta t)} \right) \\ &= \begin{cases} \omega_0 + \sum_n \omega_n \cdot e^{-\frac{T}{2}m_n} \cdot 2 \cdot \cosh(m_n(\frac{T}{2}-\Delta t)) & (+) \\ \omega_0 + \sum_n \omega_n \cdot e^{-\frac{T}{2}m_n} \cdot 2 \cdot \sinh(m_n(\frac{T}{2}-\Delta t)) & (-) \end{cases} \end{aligned} \quad (2.9)$$

besonders schön illustrieren läßt. Diese Symmetrie läßt sich vermöge einer Zeitsymmetrisierung

$$C(\Delta t)|_{[0, \dots, T]} \rightarrow \tilde{C}(\Delta t)|_{[0, \dots, \frac{T}{2}]} := \frac{1}{2} \cdot [C(\Delta t) \pm C(T-\Delta t)]. \quad (2.10)$$

ausgenutzt, um das Rauschen des Korrelators zu reduzieren (von jetzt an möge $C(\Delta t)$ für die zeitsymmetrisierte Korrelationsfunktion stehen).

Durch die stärkere exponentielle Dämpfung höherer Moden wird der Verlauf der Korrelationsfunktion für große Zeitscheibendistanzen durch die Beiträge der leichtesten Zustände des Spektrums dominiert, im Grenzfall $\Delta t \rightarrow \infty$ nur noch durch den Grundzustand:

$$C(\Delta t) \rightarrow \omega_0 + \omega_1 \left(e^{-m_1 \Delta t} \pm e^{-m_1 (T - \Delta t)} \right). \quad (2.11)$$

Die unterschiedlichen Ansätze, aus der Schätzung einer Korrelationsfunktion Aussagen über die Parameter ihres theoretischen Verlaufs, also der Massen und Amplituden, zu gewinnen bilden den zentralen Gegenstand dieser Arbeit und werden im folgenden einführend vorgestellt. Die Schreibweise von Zeitscheibendistanzen wird dabei vielfach ohne Δ -Notation erfolgen.

2.1 Effektive Massen

Eine Methode zur Schätzung der Grundzustandsmasse stellt die Kalkulation *effektiver Massen* [3] dar. Ausgehend von dem asymptotischen Verlauf der Korrelationsfunktion in (2.11) (zunächst unter Vernachlässigung von ω_0) werden zu einem gegebenen Zeitscheibenpaar (t_1, t_2) und einer gegebenen zeitlichen Gitterausdehnung T die Lösungen $m(t_1, t_2, T)$ und ω_1 des Gleichungssystems

$$\begin{aligned} \langle S(t+t_1)S(t) \rangle &= \omega \cdot \left(e^{-m(t_1, t_2, T)t_1} \pm e^{-m(t_1, t_2, T)(T-t_1)} \right) \\ \langle S(t+t_2)S(t) \rangle &= \omega \cdot \left(e^{-m(t_1, t_2, T)t_2} \pm e^{-m(t_1, t_2, T)(T-t_2)} \right) \end{aligned} \quad (2.12)$$

als *effektive Masse* (bzw. dessen korrespondierende Amplitude) für t_1, t_2, T bezeichnet. Im Grenzfall $\{t_1, t_2, T\} \rightarrow \infty$ entspricht dann die effektive Masse der wahren Grundzustandsmasse. Zur Lösung des Gleichungssystems (2.12) wird, weiter der Darstellung in [3] folgend, das Verhältnis

$$r_{12} \equiv \frac{\langle S(t+t_1)S(t) \rangle}{\langle S(t+t_2)S(t) \rangle} = \frac{e^{-m(t_1, t_2, T)t_1} \pm e^{-m(t_1, t_2, T)(T-t_1)}}{e^{-m(t_1, t_2, T)t_2} \pm e^{-m(t_1, t_2, T)(T-t_2)}} \quad (2.13)$$

unter den Abkürzungen

$$\tau_i \equiv \left(\frac{T}{2} - t_i \right), \quad x \equiv e^{-m(t_1, t_2, T)} \quad (2.14)$$

definiert. Damit läßt sich das Gleichungssystem (2.12) in der Form

$$r_{12}(x^{-\tau_2} \pm x^{\tau_2}) = (x^{-\tau_1} \pm x^{\tau_1}) \quad (2.15)$$

schreiben, welche eine einfache numerische Lösung für x , und damit auch für $m(t_1, t_2, T) = -\log x$ sowie ω_1 zuläßt.

Im allgemeinen Fall von $\omega_0 \neq 0$ in (2.11) muß zur Ableitung der drei freien Parameter natürlich auch der Wert der Korrelationsfunktion für eine dritte Zeitscheibe ausgewertet werden. Für den Fall $t_3 = \frac{1}{2}(t_1 + t_2)$ und positiver Randbedingungen führt dies bei den gleichen Abkürzungen wie oben auf das Gleichungssystem

$$(r_{13} - 1)(x^{\tau_2} + x^{-\tau_2} - x^{\tau_3} - x^{-\tau_3}) = (r_{23} - 1)(x^{\tau_1} + x^{-\tau_1} - x^{\tau_3} - x^{-\tau_3}), \quad (2.16)$$

welches entsprechend in einfacher Weise eine numerische Lösung für x ermöglicht.

Im Rahmen dieser Arbeit wird durchgängig $t_2 = t_1 + 1$ (für $\omega_0 = 0$), resp. $t_2 = t_1 + 2$ (für $\omega_0 \neq 0$) vorausgesetzt. Unter dieser Setzung ist dann natürlich für einen ansteigenden Wert von t_1 gemäß mit theoretischen Verlauf der Korrelationsfunktion mit einem sukzessiven Absinken der ermittelten effektiven Massen zu rechnen (durch das Abklingen höherer Moden). Stabilisieren sich die Werte von einem gewissen t_1 an, läßt dies dann z.B. darauf schließen, daß der Korrelator an dieser Stelle stark durch den Term des Grundzustandes dominiert wird.

2.2 Maximum Likelihood Verfahren

Die Standardvorgehensweise zur Analyse des leichtesten Teils des Massenspektrums ist es, die Korrelationsfunktion an einen Ansatz mit einer kleinen Anzahl von Massentermen p

$$C(\Delta t) \rightarrow f(\vec{\lambda}, t) := \omega_0 + \sum_{n=1}^p \omega_n \left(e^{-m_n t} \pm e^{-m_n (T-t)} \right) \quad (2.17)$$

zu fitten. Die abzuleitenden Parameter $\{\omega_i, m_i\}$ wurden oben in dem Vektor $\vec{\lambda}$ zusammengefaßt. Der Fit erfolgt dabei in der Regel auf einem von links eingeschränkten Zeitscheibenintervall $[t_{\min}, \frac{T}{2}]$. Durch sukzessives Erhöhen von $t_{\min}$ läßt sich (wie im Falle der effektiven Massen für t_1) bei ausreichender Datenqualität ein Bereich ausmachen, für den die Beiträge höherer Moden hinreichend abgeklungen sind, um den Ansatz mit p Termen zu rechtfertigen.

Die Ableitung der besten Fitparameter $\vec{\lambda}^*$ - in Bezug auf die gegebenen Daten - stützt sich gewöhnlich auf die Methode *Maximum Likelihood*. Das Verfahren soll im folgenden motiviert werden. Dafür sei an dieser Stelle für den Moment unterstellt, daß die im Laufe der Simulation gewonnenen N Schätzer für die Korrelationsfunktion $\{C_i(t)\}$ statistisch unabhängig sind. Mit $\hat{C}(t)$ sei die (unbekannte) Schätzung (!) der Korrelationsfunktion bezeichnet, die sich im

Grenzfall unendlich langer Simulationszeit ergeben würde:

$$\hat{C}(t) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} C_i(t). \quad (2.18)$$

Die bei einer vielfachen Wiederholung der Simulation, mit einer jeweils endlichen aber großen Anzahl einzelnen Schätzungen N , gewonnenen Durchschnittswerte $\overline{C(t)}$ sind dann unter sehr milden Voraussetzungen, gemäß dem zentralen Grenzwertsatz, normalverteilt um $\hat{C}(t)$, und zwar mit der Varianz

$$\frac{\overline{(C(t) - \overline{C(t)})^2}}{N - 1}. \quad (2.19)$$

Ferner beschreibt die *Kovarianzmatrix*

$$\sigma_{t,t'}^2 \equiv \frac{1}{N - 1} \left(\overline{C(t)C(t')} - \overline{C(t)} \cdot \overline{C(t')} \right), \quad (2.20)$$

die Korrelationen zwischen den einzelnen Messungen $\overline{C(t)}$ aus der Wiederholung. Genauer stellen die *Korrelationskoeffizienten*

$$\rho_{t,t'} \equiv \sigma_{t,t'}^2 / (\sigma_{t,t} \cdot \sigma_{t',t'}) \quad (2.21)$$

ein auf $[-1, 1]$ skaliertes Maß für einen linearen Zusammenhang von $\overline{C(t)}$ und $\overline{C(t')}$ dar. Die Verteilung von $\overline{C(t)}$ schreibt sich mit Hilfe der Kovarianzmatrix zu

$$P(\overline{C}) \propto \exp \left(-\frac{1}{2} (\overline{C(t)} - \hat{C}(t)) \sigma_{t,t'}^{-2} (\overline{C(t')} - \hat{C}(t')) \right). \quad (2.22)$$

Die besten Fitparameter $\vec{\lambda}^*$ im Sinne der Methode *Maximum Likelihood* sind als die dem Minimum der wohlbekannten Größe

$$\chi^2(\vec{\lambda}) \equiv \sum_{t,t'} [\overline{C(t)} - f(\vec{\lambda}, t)] \sigma_{t,t'}^{-2} [\overline{C(t')} - f(\vec{\lambda}, t')] \quad (2.23)$$

entsprechenden Parameter definiert:

$$\chi^2(\vec{\lambda}^*) = \text{Min} \left(\chi^2(\vec{\lambda}) \right). \quad (2.24)$$

Die Motivation dafür liefert ein Blick auf (2.22): Wenn der theoretische Ansatz $f(\vec{\lambda})$ richtig ist - oder andersherum: wenn die vorliegende Gittersimulation keine systematischen Fehler enthält,

$\widehat{C}(t)$ also dem *wahren* Wert der Korrelationsfunktion entspricht - dann läßt sich $\widehat{C}(t)$ durch die *wahren* Parameter $\vec{\lambda}_{\text{wahr}}$ (das Objekt unseres Interesses) beschreiben:

$$\widehat{C}(t) = f(\vec{\lambda}_{\text{wahr}}(t)). \quad (2.25)$$

Weiter sind unter diesen Voraussetzungen dann die besten Fitparameter $\vec{\lambda}^*$ diejenigen, für welche die Wahrscheinlichkeit, unter den gegebenen $\vec{\lambda}^*$ gerade die Daten $\overline{C}(t)$ zu messen / zu simulieren, maximal wird. Allgemein wird die bedingte Wahrscheinlichkeit, zu gegebenen Parametern $\vec{\lambda}$ gerade die Daten $\overline{C}(t)$ zu messen,

$$P(\overline{C}|\vec{\lambda}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\chi^2(\vec{\lambda})\right), \quad (2.26)$$

auch als *Likelihood* der Daten bezeichnet.

Das Maximum Likelihood Verfahren ist besser unter dem Namen der *Methode der kleinsten Quadrate* bekannt. In der Tat ist es häufig nützlich, (2.23) in eine echte Summe von Quadraten zu überführen; die Darstellung ist bei Beschreibung zeitlicher Abhängigkeiten als Spaltenvektoren bzw. Matrizen besonders übersichtlich (ausgedrückt durch eine Notation in fetten Lettern): Sei $\sigma^2 = \mathbf{U}^T \mathbf{U}$ die Cholesky Zerlegung von σ^2 (wobei $\mathbf{U}$ eine obere Dreiecksmatrix bezeichnet) und $\mathbf{R} = (\mathbf{U}^T)^{-1}$. Unter den Abkürzungen

$$\overline{\mathbf{G}} := \mathbf{R}\overline{\mathbf{C}} \quad ; \quad \mathbf{g}(\vec{\lambda}) := \mathbf{R}\mathbf{f}(\vec{\lambda}) \quad (2.27)$$

läßt sich (2.23) in der Form

$$\begin{aligned} \chi^2(\vec{\lambda}) &= [\overline{\mathbf{C}} - \mathbf{f}(\vec{\lambda})]^T \sigma^{-2} [\overline{\mathbf{C}} - \mathbf{f}(\vec{\lambda})] \\ &= [\overline{\mathbf{C}} - \mathbf{f}(\vec{\lambda})]^T \mathbf{R}^T \mathbf{R} [\overline{\mathbf{C}} - \mathbf{f}(\vec{\lambda})] \\ &= [\overline{\mathbf{G}} - \mathbf{g}(\vec{\lambda})]^T [\overline{\mathbf{G}} - \mathbf{g}(\vec{\lambda})] \\ &= \|\overline{\mathbf{G}} - \mathbf{g}(\vec{\lambda})\|^2 \end{aligned} \quad (2.28)$$

schreiben. Im Rahmen der Auswertung wird häufig auch auf das χ^2 -Verfahren als die Methode Maximum Likelihood verwiesen.

In dem speziellen Fall verschwindender Nichtdiagonalterme der Kovarianzmatrix (2.20) ergibt sich eine Darstellung der Form (2.28) ohne Transformationen:

$$\chi_D^2(\vec{\lambda}) = \|\overline{\mathbf{C}} - \mathbf{f}(\vec{\lambda})\|^2. \quad (2.29)$$

Ein Ansatz dieser Form wird allgemein (also auch wenn die Nichtdiagonalterme der Kovarianzmatrix von null verschieden sind) die *gewöhnliche Methode der kleinsten Quadrate* - im

Rahmen der Auswertung auch χ_D^2 -Verfahren - bezeichnet (Vorsicht: $\chi_D^2(\vec{\lambda})$ ergibt sich dann im allgemeinen natürlich **nicht** aus $\chi^2(\vec{\lambda})$ durch einfaches Vernachlässigen der Nichtdiagonalelemente der inversen Kovarianzmatrix in (2.23)).

Offensichtlich impliziert das χ_D^2 -Verfahren im Unterschied zum χ^2 -Verfahren vernachlässigbare Korrelationen zwischen unseren Schätzern der Korrelationsfunktion zu unterschiedlichen Zeitscheibendistanzen.

Bis zu diesem Zeitpunkt wurde die Frage der Varianzen der besten Fitparameter $\vec{\lambda}^*$ ausgeklammert. Wenn $\hat{\lambda}_i^*$ die (unbekannte) Schätzung für den i 'ten Parameter bezeichnet, die sich sich für eine unendlich lange Simulationszeit ergäbe (analog dem Fall für $\hat{C}(t)$), schreibt sich die *Varianz-Kovarianzmatrix der besten Fitparameter* zu

$$\Delta_{ij} = \int [d\vec{C}] P(\vec{C}) (\lambda_i^* - \hat{\lambda}_i^*) (\lambda_j^* - \hat{\lambda}_j^*). \quad (2.30)$$

Unter der Voraussetzung, daß sich χ^2 um das Minimum λ_j^* gut quadratisch beschreiben läßt, kann diese (wie in [10] nachzulesen ist) durch den Ausdruck

$$\Delta_{ij} \approx \left[\mathbf{F}^T(\vec{\lambda}^*) \sigma^{-2} \mathbf{F}(\vec{\lambda}^*) \right]^{-1} \quad (2.31)$$

approximiert werden. Dabei wurde die Abkürzung

$$\mathbf{F}(\vec{\lambda}^*) := \frac{\partial \mathbf{f}(\vec{\lambda})}{\partial \vec{\lambda}} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial \lambda_j}(\vec{\lambda}) \right)_{i,j} \quad (2.32)$$

verwendet. Die Wurzeln der Diagonalelemente von (2.30) werden häufig als *Fit-Fehler* (*fitting error*) des Einzelparameters λ_j^* bezeichnet. Zu ihrer Schätzung aus den vorliegenden Daten sowie den besten Fitparametern wird in der Regel die Approximation (2.31) verwendet. Die *Fit-Fehler* werden dann in der Setzung (!)

$$\hat{\lambda}_j = \lambda_j^* \pm \sqrt{\Delta_{jj}} \quad (2.33)$$

als Approximation für die gewünschte Varianz der besten Fit-Parameter verwendet. Es muß allerdings vor zwei prinzipiellen Unzulänglichkeiten gewarnt werden:

- Aus der Voraussetzung, daß sich χ^2 um das Minimum λ_j^* gut quadratisch beschreiben läßt, resultiert natürlich insbesondere folgende Tatsache: Unter einer unbedachten Variablentransformation $\vec{\lambda} \rightarrow \vec{\lambda}'$ sind die Ausdrücke 2.31 **nicht** invariant. Die Approximation (2.31) muß für eine Parametrisierung $\vec{\lambda}'$ erfolgen, für welche die obige Voraussetzung gut erfüllt ist. Daraus sind dann die Varianzen unter der im übrigen verwendeten (u.U. unterschiedlichen) Parametrisierung $\vec{\lambda}$ gemäß dem Gesetz der Fehlerfortpflanzung abzuleiten.

- Die *Fit-Fehler* stellen offensichtlich eine Schätzung der Varianz unter Vernachlässigung der Korrelation der einzelnen Parameter λ_i dar.

Aufgrund dieser Unzulänglichkeiten werden statt der *Fit-Fehler* häufig andere Schätzverfahren für die Varianzen der besten Fitparameter verwendet. Dazu gehört z.B. das Jackknife Verfahren, welches in 2.5 vorgestellt wird.

Wir hatten oben statistisch unabhängige Schätzer der Korrelationsfunktion vorausgesetzt. Diese Voraussetzung kann z.B. durch Blockbildung erfüllt werden, worauf im Rahmen von 3.1.4 eingegangen wird.

2.3 Iteratives Subtraktionsverfahren

Das *iterative Subtraktionsverfahren* ist in [4] eingeführt worden. Es wurde unter anderem auch für die Analyse der dieser Arbeit zugrunde liegenden Daten verwendet.

Das Verfahren wurde durch folgende Umstände motiviert: In vielen Fällen zeigten die Verläufe von Ein-Massen-Fits klare Hinweise auf starke Restsignale höherer Zustände. Gleichzeitig verliefen Zwei-Massen-Fits aber durchweg instabil.

Ausgehend von Schätzungen über den Grundzustandsterm $\{\omega_1, m_1\}$ auf Basis des Ein-Massen-Fits wurde der entsprechende Beitrag vom Signal der Korrelationsfunktion abgezogen:

$$C(\Delta t) \rightarrow \tilde{C}(\Delta t) = C(\Delta t) - \omega_1 \cdot (e^{m_1 \Delta t} \pm e^{m_1(T-\Delta t)}) \quad (2.34)$$

und für das Restsignal $\tilde{C}(\Delta t)$ wiederum ein Ein-Massen-Fit durchgeführt. Der Beitrag der Ergebnisse dieses Fits $\{\omega_2, m_2\}$ wurden dann wie in (2.34) wieder vom vollen Signal $C(\Delta t)$ abgezogen und der Prozeß iterativ fortgesetzt.

Das Verfahren stoppt beim Erreichen eines Fixpunktes, in diesem Fall wurden die beiden korrespondierenden Terme als beste Schätzungen festgehalten.

Obwohl natürlich auch das Minimum im χ_D^2 (dieses war der Ansatz), in jedem Fall einen Fixpunkt darstellt, verbleiben zwei grundsätzliche Unsicherheiten:

- Das Minimum im χ_D^2 könnte nicht der einzige Fixpunkt sein und das Verfahren somit die beste Schätzung verfehlen.
- Die Kalkulation der Fehlerbereiche für beide Terme muß bei abgezogenem Signal des anderen Terms erfolgen, Korrelationen zwischen den beiden Termen bleiben also unberücksichtigt und der wahre Fehler wird unter Umständen stark unterschätzt.

2.4 Fits mit Zwangsbedingungen

Große Aufmerksamkeit haben in der jüngeren Vergangenheit Verfahren von Fits mit Zwangsbedingungen (*constrained fits*) auf sich gezogen [6, 7]. Sie lassen sich im Rahmen der Bayes'en Statistik motivieren.

In Übereinstimmung mit der einschlägigen Literatur soll im folgenden D für die Gesamtheit der vorliegenden Daten stehen, ferner sei die Gesamtheit der Fitparameter wieder mit $\lambda_i = \{\omega_i, m_i\}$ zusammengefaßt. Im Rahmen von 2.2 war bereits der *Likelihood* der Daten D als die Wahrscheinlichkeit, unter gegebenen Parametern $\vec{\lambda}$ gerade die Daten D zu messen, eingeführt worden:

$$P(D|\vec{\lambda}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2}\chi^2\right). \quad (2.35)$$

Die besten Fitparameter im Sinne der *Methode Maximum Likelihood* waren gerade als diejenigen definiert worden, für welche der Ausdruck (2.35) maximiert wurde. Der *Bayes'e* Ansatz dreht diese Beziehungen gerade um: Die besten Fitparameter werden als diejenigen definiert, für welche die *posterior Wahrscheinlichkeit* $P(\vec{\lambda}|D)$ maximal wird. Mit Hilfe der, aus den elementaren Eigenschaften der Wahrscheinlichkeitsrechnung folgenden, Relation

$$\begin{aligned} P(\vec{\lambda}|D)P(D) &= P(\vec{\lambda} \cap D) \\ &= P(D|\vec{\lambda})P(\vec{\lambda}) \end{aligned} \quad (2.36)$$

läßt sich das *Bayes'e Theorem der bedingten Wahrscheinlichkeiten* für eine Darstellung der *Posterior Wahrscheinlichkeit* ausnutzen:

$$\begin{aligned} P(\vec{\lambda}|D) &= \frac{P(D|\vec{\lambda})P(\vec{\lambda})}{P(D)} \\ &= \frac{P(D|\vec{\lambda})P(\vec{\lambda})}{\int d\vec{\lambda} P(D|\vec{\lambda})P(\vec{\lambda})} \\ &= \frac{P(D|\vec{\lambda})P(\vec{\lambda})}{P(D)} \\ &\propto P(D|\vec{\lambda})P(\vec{\lambda}), \end{aligned} \quad (2.37)$$

wobei die Normierung $\int d\vec{\lambda} P(\vec{\lambda}|D) = 1$ unterstellt wurde. Die a priori Wahrscheinlichkeit, daß spezielle Parameter $\vec{\lambda}$ in Abwesenheit jeglicher Daten korrekt sind, $P(\vec{\lambda})$, wird auch als *Prior Wahrscheinlichkeit* oder kurz *Prior* bezeichnet. Das Bayes'e Theorem läßt sich also als *Posterior Wahrscheinlichkeit* $\propto$ *Likelihood* $\times$ *Prior Wahrscheinlichkeit* zusammenfassen.

Zur weiteren Motivation muß der sehr spezielle Fall unterstellt werden, daß bereits vor der Messung (a priori) **Wissen** über die korrekten Parameter $\lambda_i \approx \tilde{\lambda}_i \pm \tilde{\sigma}_{\lambda_i}$ vorliegt und die Prior Wahrscheinlichkeit normalverteilt ist:

$$P(\lambda|\vec{D}) \propto e^{-\frac{1}{2}\chi_{aug}^2} \quad \text{mit} \quad \chi_{prior}^2 = \sum_i \frac{(\lambda_i - \tilde{\lambda}_i)^2}{\tilde{\sigma}_{\lambda_i}^2}. \quad (2.38)$$

Daraus resultiert dann ein, im Vergleich mit der Methode Maximum Likelihood um den additiven Zusatzterm χ_{prior}^2 erhöhter (*augmented*), Minimierungsansatz:

$$\chi^2 \rightarrow \chi_{aug}^2 = \chi^2 + \chi_{prior}^2. \quad (2.39)$$

Die *Zwangsbedingungen* in χ_{prior} dienen aus technischer Sicht zunächst einer Stabilisierung des Fits: Der Algorithmus favorisiert Werte um die zentralen Schätzungen $\tilde{\lambda}_i$. Angestrebt wird dann ein Fit auf dem vollständigen Zeitscheibenintervall, ohne daß eine Grenze variiert wird. Stattdessen wird die Anzahl der berücksichtigten Terme sukzessive erhöht.

Die zur obigen Motivation getroffene Annahme eines echten a priori Wissens über die korrekten Fitparameter $\lambda_i \approx \tilde{\lambda}_i \pm \tilde{\sigma}_{\lambda_i}$ ist natürlich in den wenigsten Fällen gegeben - derartige Schätzungen sind ja gerade das Ziel entsprechender Messungen. So muß klar betont werden, daß die Motivation zur Anwendung von *constrained fits* sicherlich gerade umgekehrt in der technischen Stabilisierungswirkung der Zwangsbedingungen liegt. Ziel ist es, die vorliegenden Daten über die Korrelationsfunktion vollständig - d.h. alle Zeitscheibendistanzen einschließlich - auszunutzen.

Häufig werden auch die Daten selbst dafür genutzt, entsprechende Prior-Informationen abzuleiten und diese im Anschluß zur Auswertung der gleichen Daten zu nutzen. Ein entsprechender Ansatz verletzt dabei natürlich in jedem Fall den Bayes'en Zugang. Ein Beispiel für eine derartiges Verfahren stellt die *Sequential Empirical Bayes Method* (SEB) [8] dar. Ausgehend von einem Ein-Massen-Ansatz ohne Zwangsbedingungen auf einem Zeitscheibenintervall mit linker Grenze t_1 werden dabei in einem graduelle, iterativen Verfahren nach und nach immer größere Zeitscheibenintervalle mit linken Grenzen $t_2, t_3, \dots, t_N = 0$ untersucht: Zwischen jedem Schritt des Verfahrens wird dabei die Anzahl der betrachteten Massenterme um eins erhöht und die Fitergebnisse des vorangegangenen Schrittes dienen als Zwangsbedingungen. Das genaue Verfahren wird im Rahmen der Auswertung an einem Beispiel detailliert erklärt.

2.5 Jackknife Fehlerkalkulation

Die Jackknife Fehlerkalkulation [3] offeriert die Möglichkeit der Fehlerschätzung für sekundäre Größen, beispielsweise für die aus einem Fit resultierenden Parameter. Alle in dieser Arbeit an-

gegebenen Fehler sind, soweit nicht ausdrücklich auf das Gegenteil hingewiesen wird, Jackknife-Fehler.

Liegen für eine primäre Größe A_i insgesamt N Messwerte vor, so bezeichne A_j^{JK} den Durchschnittswert des Samples bei einem Streichen des Wertes A_j :

$$A_j^{JK} = \frac{1}{N-1} \cdot \sum_{n \neq j} A_n. \quad (2.40)$$

Darauf aufbauend definiert sich die Jackknife-Schätzung einer sekundären Größe $y(A)$ zu $y_j^{JK} = y(A_j^{JK})$. Der Durchschnitt beträgt

$$\bar{y}^{(J)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j^{(JK)} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y(A_j^{(JK)}). \quad (2.41)$$

In natürlicher Weise ergibt sich als Varianz der Jackknife-Schätzung:

$$\sigma^2(\bar{y}^{(JK)}) = \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i^{(JK)} - \bar{y}^{(JK)})^2 \quad (2.42)$$

Kapitel 3

Auswertung und Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die numerischen Ergebnisse dieser Arbeit dargestellt. Ziel dieser Arbeit ist ein methodischer Vergleich der verschiedenen Ansätze für Fits an Korrelationsfunktionen; Abweichungen bzw. Verbesserungen gegenüber der Analyse in [4] werden ausführlich diskutiert.

Zunächst erfolgt eine Einführung in die dieser Arbeit zu Grunde liegende Datenbasis und einige vorbereitende Konzepte. Die Auswahl orientiert sich dabei nach der Nützlichkeit für die weiterführende Diskussion. Im Anschluß werden Fits nach der Methode Maximum Likelihood Anwendung zur Analyse der Massenspektren Anwendung finden. Es folgt eine Betrachtung von Fits mit Zwangsbedingungen, namentlich wird die SEB Methode ausführlich diskutiert.

3.1 Grundlegende Konzepte und Datengrundlage

3.1.1 Datenbasis

Die für diese Arbeit zu Grunde gelegten Daten (Korrelationsfunktionen) sind von Roland Peetz im Rahmen seiner Dissertation [4] auf einem Gitter der Größe $V = 16^3 \times 32$ simuliert worden. Es werden an dieser Stelle die Korrelationsfunktionen von insgesamt drei Teilchen ausgewertet: Einem Gluino-Gluon-Bindungszustand sowie den beiden adjungierten Meson $a - \eta'$ und $a - f_0$. Diese drei Teilchen bilden gerade das in 1.2 beschriebene (schwere) Veneziano-Yankielowicz-Multiplett.

Zu jedem Teilchen bestanden die vorhandenen Simulationsdaten aus einem Sample von einzelnen Korrelationsfunktionen $\tilde{C}_i(\Delta t)$, abgeleitet aus entsprechenden Ensembles von Konfigurationen. Die Simulationsparameter lagen bei $\beta = 2,3$ und $\kappa = 0,194$ sowie $a \approx 0,06 fm (a^{-1} \approx$

3,3 GeV). Für weitere Details der Simulation wird auf die sehr ausführliche Darstellung in [4] verwiesen.

Die Korrelationsfunktion des Gluino Glue Bindungszustandes läßt sich in der Form [4]

$$C^{\alpha\beta}(\Delta t) = C_1(\Delta t)\delta^{\alpha\beta} + C_2(\Delta t)\gamma_0^{\alpha\beta}, \quad (3.1)$$

schreiben; wobei die beiden Komponenten $C_1(\Delta t)$ und $C_2(\Delta t)$ unterschiedliche Periodizität aufweisen. In der Praxis wurden die beiden Komponenten bereits während der Simulation, durch Spurbildung im Dirac-Raum, separiert. Insgesamt lagen jeweils 3879 Schätzungen für beide Komponenten

$$C_1(\Delta t) := 4C_1(\Delta t) = \text{Tr}[\mathbf{1}C(\Delta t)] \quad (-) \quad \text{resp.} \quad (3.2)$$

$$C_0(\Delta t) := 4C_2(\Delta t) = \text{Tr}[\gamma_0 C(\Delta t)] \quad (+). \quad (3.3)$$

vor.

Die Struktur der Korrelationsfunktionen der adjungierten Mesonen $a - \eta'$ und $a - f_0$ besteht aus einem verbundenen (1 loop) und einem unverbundenen Anteil (2-loop) [4]:

$$C(\Delta t) = C_{2-loop}(\Delta t) - 2 \cdot C_{1-loop}(\Delta t). \quad (3.4)$$

Beide Komponenten waren jeweils separat für jede Konfiguration des Ensemble gemessen und auch gespeichert worden, sie wurden dann im Rahmen dieser Auswertung konfigurationsweise kombiniert. Der unverbunden Anteil des hier zugrundegelegten Korrelators war mit einer verbesserten Version der *Volume Source Technique* (IVST) [9] und der verbundene durch Inversion der Fermionenmatrix Q gemessen worden. Die im Rahmen der Simulation gespeicherten Konfigurationen waren entsprechend der gemessenen Autokorrelationszeit $\tau_{int}(\lambda_{min})$ voneinander getrennt worden. Insgesamt lagen 218 Konfigurationen vor.

In jedem Fall wurde die jeweilige Symmetrie des Korrelators um $\frac{T}{2}$ im Rahmen einer Zeitsymmetrisierung ausgenutzt:

$$\tilde{C}_i(\Delta t)|_{[0, \dots, T]} \rightarrow C_i(\Delta t)|_{[0, \dots, \frac{T}{2}]} := \frac{1}{2} \cdot [\tilde{C}_i(\Delta t) \pm \tilde{C}_i(T - \Delta t)]. \quad (3.5)$$

Auf dieser Grundlage wurden dann die zentralen Schätzungen berechnet:

$$\overline{C(\Delta t)} = \frac{1}{N_{est}} \cdot \sum_{i=1}^{N_{est}} C_i(\Delta t), \quad (3.6)$$

wobei N_{est} die Sample-Größe bezeichne.

3.1.2 Binning

Im Fall der adjungierten Mesonen $a - \eta'$ und $a - f_0$ verifizierten Testrechnungen, daß die einzelnen Konfigurationen hinreichend unkorreliert waren (auch mit Hinblick auf die Fehlerrechnung für die sekundären Größen, i.e. die Fitparameter). Die Kovarianzmatrix konnte so auf Basis der gesamten Simulationsdaten berechnet werden:

$$\sigma_{\Delta t, \Delta t'}^2 = \frac{1}{N_{est} - 1} (\overline{C(\Delta t)C(\Delta t')} - \overline{C(\Delta t)} \cdot \overline{C(\Delta t')}). \quad (3.7)$$

Der Fall der Gluino Glue verlangte ein wenig mehr Aufmerksamkeit, weil die nacheinander gespeicherten Korrelatoren stark korrelierten. Dem Verfahren der Blockbildung (*binning*) entsprechend, wurden jeweils B aufeinander folgende Messungen in einen Block gemittelt und die resultierenden Sampledurchschnitte der N_B Blöcke als separate Messungen behandelt. Die Tabelle 3.1 zeigt die Ergebnisse für den Vertrauensbereich des Mittelwertes der Korrelationsfunktion bei ansteigender Blockgröße. Im Rahmen dieser Arbeit wurde stets mit einem Wert von $B = 90$, also $N_B = 43$ vermutlich unkorrelierten (Sample-)Korrelationsfunktionen für das Gluino Glue gerechnet.

Es muß bemerkt werden, daß dieses Vorgehen sich bereits von der Analyse in [4] unterscheidet. Programmierseitig wurde dort die Blockbildung nur zur Ableitung der Fehlerschätzungen für die Fitparameter implementiert (und nicht zur Fehlerschätzung für die Korrelationsfunktion selbst). In zweierlei Hinsicht resultierten daraus systematische Fehler. Zum einen wurde offensichtlich das Signal-Rauschen-Verhältnis falsch eingeschätzt (der Faktor $\frac{\tilde{\sigma}_{B=90}}{\tilde{\sigma}_{B=1}}$ in Tabelle 3.1 zeigt die Größe des Fehlers¹). Daraus resultiert zweitens aber auch eine falsch geschätzte Struktur von χ_D^2 , weil die Faktoren $\frac{\tilde{\sigma}_{B=90}}{\tilde{\sigma}_{B=1}}$ für unterschiedliche Zeitscheibenintervalle nicht konstant sind. In der Folge werden die Fitergebnisse verfälscht. In der Tat konnten diese Differenzen auch aufgelöst werden, sie waren aber in jedem Fall sehr klein im Vergleich mit den angegebenen statistischen Fehlern und sollen hier nicht weiter diskutiert werden.

3.1.3 Parametrisierung

Im Rahmen der Programmierung des Minimierungsproblems wurde durchgängig auch eine Parametrisierung der Form $\varepsilon_i := \sqrt{m_i}$ and $c_i := \sqrt{\omega_i}$, zurückgegriffen, um positive Werte für die Massen und Amplituden der Zustände zu erzwingen. Der Ansatz lautet also

$$C(\Delta t) = \omega_0 + \sum_{i=1}^N \omega_i \cdot \left(e^{-m_i \Delta t} \pm e^{-m_i (T - \Delta t)} \right)$$

¹Vgl. Abb. 3.1 auf S. 24 in Kombination mit [4, Figure 4.10 on page 59].

Gluino Glue, $\text{Tr}[\tilde{C}_{\tilde{g}g}\gamma_0]$
Geschätzte Standardabweichungen

Δt	$\frac{1}{4}\text{Tr}[\tilde{C}_{\tilde{g}g}\gamma_0]$	$\tilde{\sigma}_{B=1}$ ($N_B = 3879$)	$\tilde{\sigma}_{B=24}$ ($N_B = 161$)	$\tilde{\sigma}_{B=46}$ ($N_B = 84$)	$\tilde{\sigma}_{B=68}$ ($N_B = 57$)	$\tilde{\sigma}_{B=90}$ ($N_B = 43$)	$\frac{\tilde{\sigma}_{B=90}}{\tilde{\sigma}_{B=1}}$
1	4,13824	0,23%	0,40%	0,50%	0,59%	0,61%	2,6
2	1,49569	0,36%	0,64%	0,79%	0,93%	0,97%	2,7
3	0,63993	0,54%	0,93%	1,12%	1,30%	1,34%	2,5
4	0,29806	0,79%	1,41%	1,67%	1,82%	1,78%	2,3
5	0,14227	1,25%	2,18%	2,60%	2,80%	2,75%	2,2
6	0,07351	1,77%	2,69%	3,08%	3,23%	3,38%	1,9
7	0,03782	2,65%	3,86%	4,49%	4,76%	4,98%	1,9
8	0,02150	3,60%	5,62%	6,54%	7,03%	7,22%	2,0
9	0,01271	4,71%	7,60%	8,64%	9,35%	9,43%	2,0
10	0,00837	5,59%	8,57%	9,73%	9,98%	10,19%	1,8
11	0,00636	5,75%	9,05%	9,71%	10,24%	10,21%	1,8
12	0,00331	8,82%	13,45%	14,45%	15,42%	15,39%	1,8
13	0,00216	10,79%	16,09%	18,63%	18,46%	19,50%	1,8
14	0,00139	14,78%	26,32%	30,60%	31,29%	32,90%	2,2
15	0,00111	17,88%	31,52%	37,66%	41,76%	44,10%	2,5
16	0,00101	22,58%	36,32%	41,25%	44,38%	47,67%	2,1

Gluino Glue, $\text{Tr}[\tilde{C}_{\tilde{g}g}\mathbf{1}]$
Geschätzte Standardabweichungen

Δt	$\frac{1}{4}\text{Tr}[\tilde{C}_{\tilde{g}g}\mathbf{1}]$	$\tilde{\sigma}_{B=1}$ ($N_B = 3879$)	$\tilde{\sigma}_{B=24}$ ($N_B = 161$)	$\tilde{\sigma}_{B=46}$ ($N_B = 84$)	$\tilde{\sigma}_{B=68}$ ($N_B = 57$)	$\tilde{\sigma}_{B=90}$ ($N_B = 43$)	$\frac{\tilde{\sigma}_{B=90}}{\tilde{\sigma}_{B=1}}$
0	18,88883	0,20%	0,34%	0,43%	0,50%	0,53%	2,6
1	1,67669	0,46%	0,97%	1,24%	1,46%	1,53%	3,3
2	0,78466	0,59%	1,26%	1,58%	1,88%	1,90%	3,2
3	0,35630	0,85%	1,67%	2,03%	2,43%	2,53%	3,0
4	0,16917	1,29%	2,53%	3,02%	3,29%	3,40%	2,6
5	0,07793	2,16%	3,80%	4,28%	4,36%	4,42%	2,0
6	0,03634	3,41%	5,14%	5,68%	5,80%	5,94%	1,7
7	0,01603	5,99%	9,01%	9,54%	9,64%	9,91%	1,6
8	0,00965	7,79%	12,25%	14,13%	15,80%	17,01%	2,2
9	0,00645	9,14%	14,97%	17,05%	16,37%	17,37%	1,9
10	0,00434	10,54%	16,86%	18,24%	17,84%	18,68%	1,8
11	0,00344	10,38%	16,41%	17,55%	18,89%	19,68%	1,9
12	0,00135	21,27%	33,03%	35,56%	39,45%	41,01%	1,9
13	0,00101	22,67%	31,45%	35,68%	39,46%	38,06%	1,7
14	0,00076	23,69%	36,30%	40,10%	41,39%	41,31%	1,7
15	0,00057	24,69%	35,63%	40,25%	41,53%	45,22%	1,8
16	0,00007	320,60%	328,37%	362,58%	338,44%	370,87%	1,1

Tabelle 3.1: Geschätzte Standardabweichungen der Gluino Glue Korrelationsfunktion.

$$=: c_0^2 + \sum_{i=1}^N c_i^2 \cdot \left(e^{-\varepsilon_i^2 \Delta t} \pm e^{-\varepsilon_i^2 (T - \Delta t)} \right), \quad (3.8)$$

wobei N gerade der Anzahl der in Betracht genommenen Terme entspricht. In diesem Punkt unterscheidet sich die Wahl von derjenigen in [4] erneut, wo die Parametrisierung

$$\varepsilon_i := \sqrt{m_i} \quad ; \quad \tilde{c}_i := \sqrt{2\omega_i} \cdot e^{-\frac{T}{4}m_i} \quad (3.9)$$

entsprechend des Ansatzes

$$C(\Delta t) =: \begin{cases} (\omega_0 +) \sum_{i=1}^N \tilde{c}_i^2 \cdot \cosh(\varepsilon_i^2 (\frac{T}{2} - \Delta t)) & (+) \\ (\omega_0 +) \sum_{i=1}^N \tilde{c}_i^2 \cdot \sinh(\varepsilon_i^2 (\frac{T}{2} - \Delta t)) & (-) \end{cases} \quad (3.10)$$

gewählt wurde. Der Ansatz (3.8) schließt explizit den Fall eines von null verschiedenen Vakuumerwartungswertes ω_0 ein. Auf diese Möglichkeit wurde wenigstens in jedem Fall getestet, lieferten entsprechende Fits $\omega_0 \approx 0$, so wurde der Parameter für die weitere Auswertung aber verworfen.

3.1.4 Numerische Methoden

Im Rahmen der Fitprozeduren wurde durchweg ein Levenberg-Marquandt-Solver mit Ableitungen zur Lösung der Minimierungsaufgaben verwendet, welcher mit Hilfe der GNU Scientific Library (GSL, [5]) implementiert wurde.

3.2 Die Methode Maximum Likelihood

Die Auswertung strukturiert sich wie folgt. Es werden zunächst die beiden Komponenten der Gluino Glue Korrelationsfunktion $C_1(\Delta t)$ und $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ betrachtet, gefolgt von den zwei adjungierten Mesonen $a - \eta'$ und $a - f_0$. Einige technische Aspekte werden separat in 3.2.3 behandelt.

Für jede einzelne Korrelationsfunktion wird wie folgt vorgegangen. Es werden die effektiven Massen sowie Ein-Massen- und Zwei-Massen-Fits an ein Intervall $[t_{min}, \frac{T}{2}]$, mit dem variablen Startpunkt t_{min} , gezeigt. Im Anschluß erfolgen Fits an den vollen Datenbereich ($t_{min} \in \{0, 1\}$) bei einem sukzessiven Erhöhen der Anzahl der betrachteten Terme N im Ansatz (3.8).

In jedem Fall werden die Ergebnisse für die χ^2 als auch die χ_D^2 Minimierung gezeigt. Die kalkulierten Korrelationskoeffizienten $\rho_{\Delta t_1, \Delta t_2} = \sigma_{\Delta t, \Delta t'}^2 / (\sigma_{\Delta t} \sigma_{\Delta t'})$ der Korrelationsfunktionen finden

sich im Anhang A ².

3.2.1 Gluino-Glue

Für die Gluino-Glue Bindungszustände bestätigt die explizite Berücksichtigung eines Vakuum-Erwartungswertes in jedem Fall ein (im Rahmen der Fehlermessung) mit $\omega_0 = 0$ kompatibles Signal. Entsprechend wurde für alle im folgenden aufgeführten Ergebnisse wie oben beschrieben der Summand c_0^2 im Ansatz (3.8) vernachlässigt.

$C_{\gamma_0}(\Delta t)$ -Komponente

Abbildung 3.1 zeigt die $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ Komponente der Gluino-Glue Korrelationsfunktion, einen ersten Eindruck von den der Datenqualität und den lokalen Eigenschaften des Korrelators vermitteln die effektiven Massen (Abbildung 3.2). Der Verlauf der ermittelten Werte, vom linken Rand ($t_1 = 1$) zu größeren Zeitscheibendistanzen übergehend, entspricht den theoretischen Erwartungen: Durch die stärkere exponentielle Dämpfung der schweren Moden des Spektrums wird die Korrelationsfunktion zunehmend von dem Beitrag des Grundzustandes dominiert - die effektive Masse sinkt entsprechend zunächst stark ab und fluktuiert schließlich auf konstantem Niveau.

Im Gegensatz zur Kalkulation der (lokalen) effektiven Massen berücksichtigen die (globalen) Ein-Massen-Fits aus Abbildung 3.3 das gesamte Zeitscheibenintervall von einem Startwert t_{min} aus bis zum rechten Rand $T/2 = 16$. Die gefitteten Werte sind folgerichtig (durchgehend für $t_{min} \leq 8$) kleiner als die gemäß $t_1 = t_{min}$ zuzuordnenden effektiven Massen, weil der Fit in jedem Fall den durch den Grundzustand dominierten Bereich der Korrelationsfunktion einschließt. Dennoch ist in beiden Fällen der nur einen Massenterm einschließende Ansatz natürlich nur geeignet, das asymptotische Verhalten des Korrelators zu beschreiben. Die generelle Herausforderung illustriert sich an diesem Beispiel besonders deutlich: Für kleine Werte von t_{min} wird ein Großteil der Datenbasis berücksichtigt, dies resultiert zwar in geringen statistischen Fehlern der besten Fitparameter, diese sind allerdings aufgrund des unzulänglichen Ansatzes systematisch falsch. Um eine belastbare Schätzung für die Grundzustandsmasse zu gewinnen, muß t_{min} groß genug gewählt werden, daß die abgeleiteten statistischen Fehler mögliche systematische Fehler überdecken. Es ist üblich, aus dem Verlauf der gefitteten Massen für anwachsende Werte von t_{min} ein Plateaubereich abzulesen. Die subjektive Wahl des Autors wird im Rahmen dieser Arbeit durchgehend durch gestrichelte Linie in den entsprechenden Graphen verdeutlicht.

Im vorliegenden Fall bilden die Ergebnisse des Ein-Massen-Fits ein gut zu identifizierendes

²Die Korrelationskoeffizienten erlauben eine intuitivere Beurteilung der Korrelationen zwischen $C(\Delta t)$ und $C(\Delta t')$ als die Kovarianzmatrix selbst.

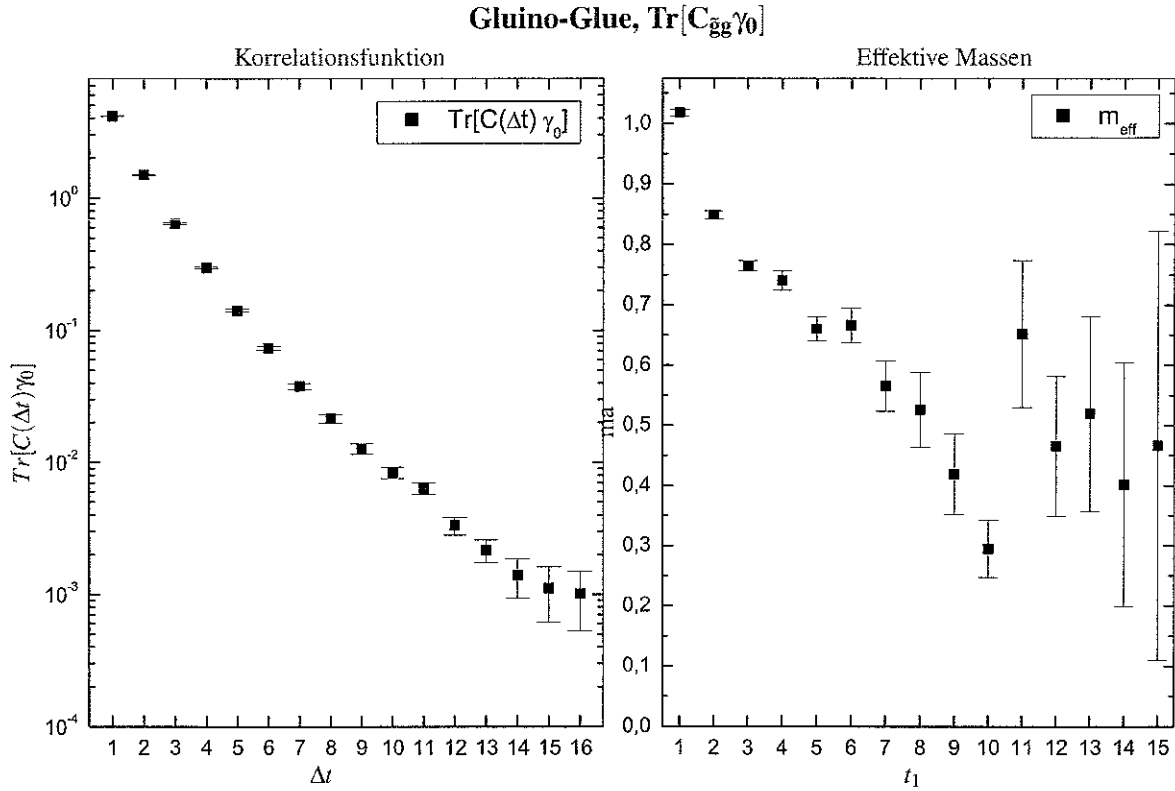


Abbildung 3.1: Gluino-Glue Korrelationsfunktion C_{γ_0} .

Abbildung 3.2: Effektive Massen der Gluino-Glue Korrelationsfunktion C_{γ_0} .

Plateau. Der Grundzustand scheint den Korrelator allerdings erst für relativ hohe Zeitscheibendistanzen Δt zu dominieren. Ein ersten Hinweis auf die Ursache vermitteln die Zwei-Massen-Fits, für welche in Abbildung 3.4 auch die gefitteten Amplituden aufgetragen sind: Die Amplitude des Grundzustandes ist um mindestens eine Größenordnung kleiner als die Amplitude des ersten angeregten Zustandes.

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, daß die vorgestellten Zwei-Mass-Fits eine starke Verbesserung gegenüber der früheren Auswertung in [4] darstellen: Obwohl diese auf der gleichen Datenbasis erfolgte, konnten zuvor in keinem Fall stabile Ergebnisse auf Grundlage eines echten Zwei-Massen-Fits gewonnen werden. Der Grund für diesen Unterschied hängt mit den jeweils gewählten Parametrisierungen (3.8) und (3.9) zusammen, dieser Punkt wird in 3.2.3 ausführlich diskutiert. Da allerdings das iterative Subtraktionsverfahren auch in [4] Ergebnisse für einen Zwei-Massen-Ansatz geliefert hat, ist an dieser Stelle erstmalig eine Gegenüberstellung des Fixpunktverfahrens mit einem echten Zwei-Massen-Fit möglich. Zu vergleichen ist dabei [4, Abb. 4.20, Seite 66] mit den hier vorliegenden Ergebnissen auf Grundlage der χ_D -Minimierung im linken Teil von Abbildung 3.4: Für beide Verfahren stimmen die ermittelten Massen m_1 und m_2 sehr gut überein, die im Rahmen des Fits berechneten statistischen Fehler sind allerdings entscheidend größer - in etwa um einen Faktor 2. Dies bestätigt die bereits geäußerte Vermutung,

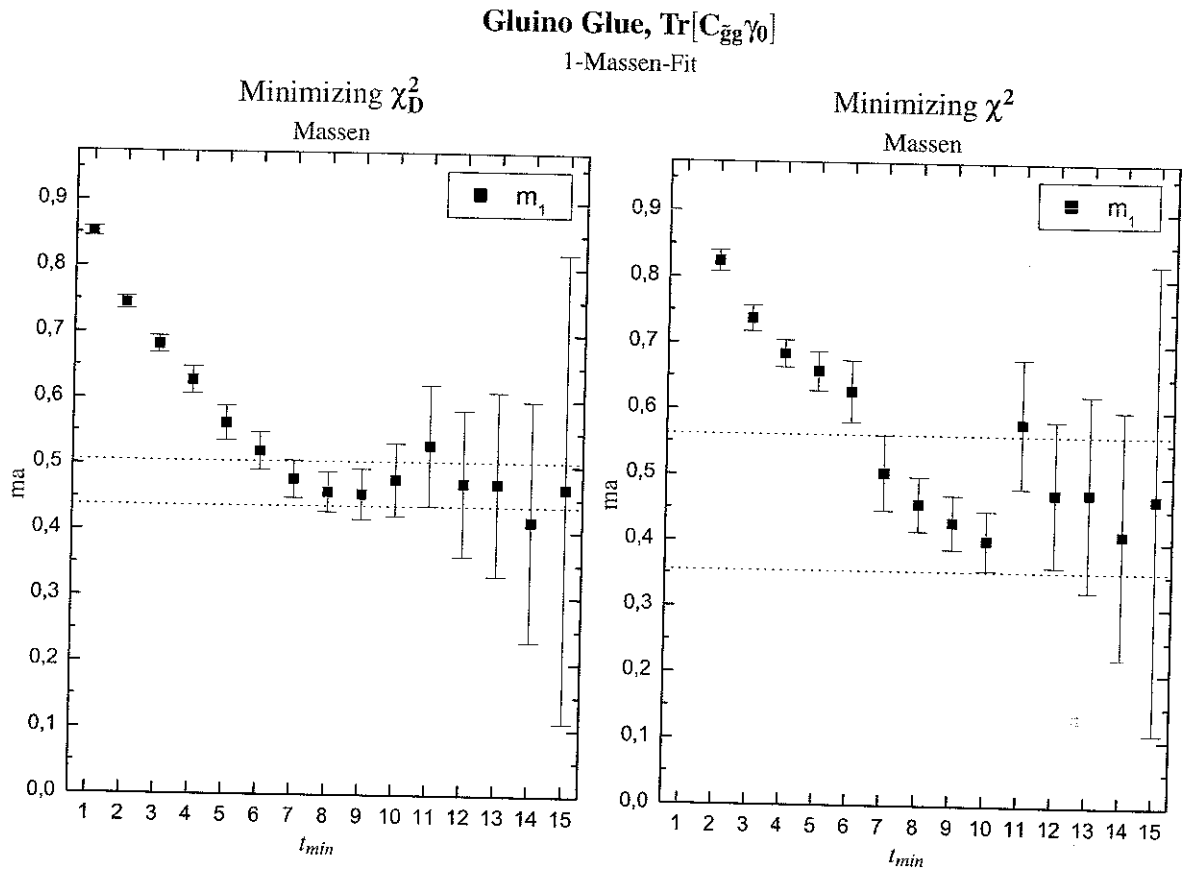


Abbildung 3.3: Ein-Massen-Fit an die Gluino-Gluon Korrelationsfunktion C_{γ_0} .

daß das Subtraktionsverfahren die statistischen Fehler (durch die notwendige Vernachlässigung der Kopplung der beiden Massenterme) systematisch und stark unterschätzt.

Bis zu diesem Punkt wurden die Unterschiede zwischen dem Ansatz einer χ_D^2 - resp. χ^2 -Minimierung, also einer Vernachlässigung bzw. expliziten Berücksichtigung der Korrelationen zwischen unseren Schätzern der Korrelationsfunktion zu unterschiedlichen Zeitscheibendistanzen, aus der Diskussion ausgespart. Die Ergebnisse unterscheiden sich qualitativ, insbesondere für den Zwei-Massen-Fit. Dabei scheint der χ_D^2 -Ansatz eher die *erhofften* Ergebnisse zu liefern: Bereits ab einem Wert von $t_{\min} = 2$ stabilisieren sich die gefitteten Werte für beide Massen und bilden ein gut ablesbares Plateau. Eine ergebnisseitige Betrachtung greift allerdings notwendigerweise zu kurz. Es sei daran erinnert, daß Fits auf Basis des χ_D^2 -Ansatzes implizit unkorrelierte Schätzer von $C(\Delta t)$ zu unterschiedlichen Zeitscheibendistanzen voraussetzen. Bereits ein kurzer Blick auf die Korrelationskoeffizienten in Tabelle A.1 verdeutlicht, daß diese Voraussetzung nicht gegeben ist. Im Gegenteil: Die Korrelationen sind, insbesondere für benachbarte Zeitscheibendistanzen sehr stark (positiv), sie reichen zum Teil nah an den Maximalwert von eins heran. Bei einem qualitativen Unterschied der Ergebnisse wie in Abbildung 3.4 muß folgerichtig der χ_D^2 -Ansatz verworfen werden.

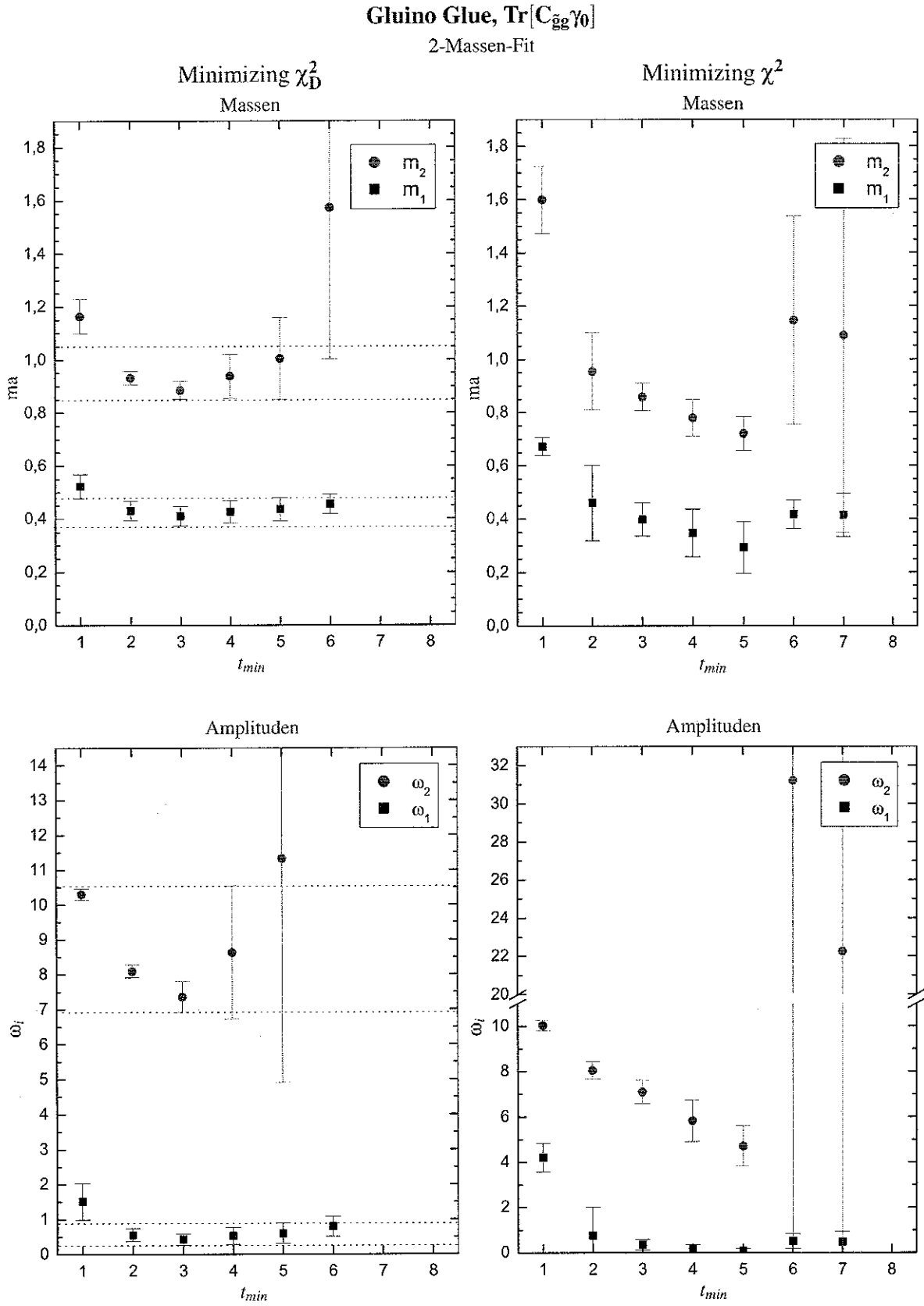


Abbildung 3.4: Zwei-Massen-Fit an die C_{γ_0} Gluino Glue Korrelationsfunktion.

Die Interpretation des Zwei-Massen-Fits fällt dementsprechend enttäuschender aus: das starke Absinken der beiden Massen läßt auf den spürbaren Einfluß noch nicht ausreichend abgeklungener höherer Moden schließen: Der χ_D^2 -Ansatz führt zu einem falschen Treffer.

Dieses legt den Versuch nahe, mehr als nur zwei Massenterme in unseren Ansatz einzuschließen. Anstatt allerdings wie bisher Fits mit einer festgesetzten Anzahl von Massentermen zu betrachten und durch ein sukzessives Erhöhen von t_{min} den gefitteten Bereich unserer Daten einzuschränken, folgen die im weiteren diskutierten N-Massen-Fits einer anderen Strategie: Berücksichtigt wird jeweils der gesamte Datenbereich, also das volle Zeitenscheibenintervall $\Delta t \in [1, 16]$, dafür wird die Anzahl der in unserem Ansatz in Betracht genommenen Massenterme N sukzessive erhöht. Es werden also nacheinander Ein-, Zwei-, Drei-,...Massen-Fits an den gesamten Korrelator durchgeführt. Es sei angemerkt, daß derartige Übergänge in der Literatur vielfach als instabil und singular beschrieben werden [6, 7]. Diese Probleme waren gerade die Motivation für Fits mit Zwangsbedingungen.

Vor diesem Hintergrund sind die in Abbildung 3.5 gezeigten Ergebnisse des N-Massen-Fits (in höchstem Maße) erstaunlich: Die gefitteten Werte, wie auch die korrespondierenden statistischen Fehler, stabilisieren sich für $N \geq 3(\chi_D^2)$ bzw. $N \geq 4(\chi^2)$ auf konstantem Niveau. Dieser Verhalten bedarf einer genaueren Erklärung. Es konnten aus der Korrelationsfunktion nur die Signale von drei bzw. vier Zuständen *aufgelöst* werden - d.h. auch bei Inbetrachtung weiterer Terme bestätigt die Minimierungsprozedur exakt die Massen und Amplituden des 3- bzw. 4-Massen-Fits! Für einen stabilen Übergang (im Sinne nicht fluktuierender Werte und nicht auffächernder statistischer Fehler) zu Fits mit für die Minimierung redundanten Parametern wurden im entsprechenden Algorithmus kleinere technische Kniffe benötigt. Diese werden in 3.2.3 ausführlich vorgestellt, an dieser Stelle aber zunächst ausgeklammert.

Es stellt sich die Frage, wie vertrauenswürdig die erzielten Ergebnisse sind. Wie groß ist der systematische Fehler durch die beschränkte Auflösung? Im besten anzunehmenden Fall resultiert nur die größte noch aufgelöste Masse aus einem durch viele weitere Anregungszustände stark verrauschtem Signal, während die systematischen Fehler für die kleineren Massen gering sind, weil sie durch das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktion ausreichend gut bestimmt werden. Aus diesem Grund wurden die Fit-Ergebnisse für den dritten bzw. vierten Term in Abbildung 3.5 von vornherein verworfen und nicht abgebildet. Zumindest im hier interessanten χ^2 -Fall besteht durchaus Grund zu Optimismus: Beim Übergang vom Drei- zum Vier-Massen-Fit ergeben sich für m_1 und m_2 nur noch ein relativ kleine Änderungen. Der Autor verweist zusätzlich noch auf folgende Überlegung: Könnten (z.B. im Falle einer noch besseren Datenqualität) weiter Massenterme aus der Korrelationsfunktion aufgelöst werden, so würde der entsprechende Wert für m_1 wie im Verlauf in Abbildung 3.5 tendenziell weiter sinken. Der hier ermittelte Wert liegt aber bereits im unteren Bereich des aus dem Ein-Massen-Fit abgelesenen Plateaus. Mindestens die Schätzung für m_1 auf Grundlage des N-Massen-Fits scheint

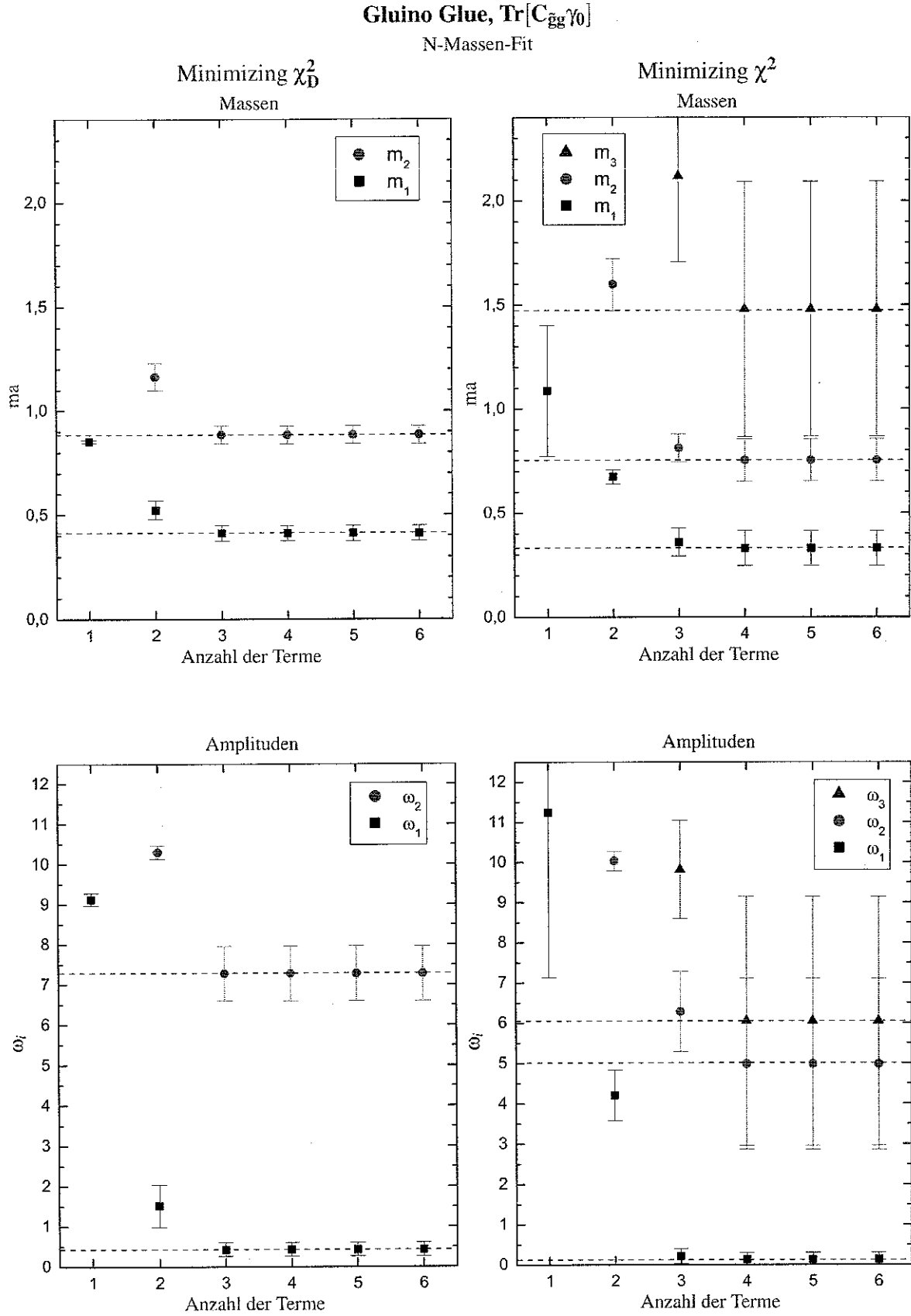


Abbildung 3.5: N-Massen-Fit an die C_{γ_0} Glino Glue Korrelationsfunktion.

also gerechtfertigt. Eine ähnliche Rechtfertigung erfährt aber auch die Schätzung für m_2 durch einen Vergleich mit den Ergebnisse des Zwei-Massen-Fits. Im Falle der dritten Masse m_3 erscheint der statistische Fehlerbereich dem Autor groß genug, um systematische Fehler sicher zu überdecken. Mit anderen Worten: Der Autor hält die Werte für die Massen und Amplituden des Grundzustandes und der beiden angeregten Zustände aus dem N-Massen-Fit für belastbar und für die bis zu dieser Stelle besten Schätzungen.

Festzuhalten bleiben noch zwei Punkte:

- Der (verworfenen) χ_D^2 -Ansatz liefert ein geringeres *Auflösungsvermögen* der Korrelationsfunktion. Dies ist nach der obigen Diskussion des entsprechenden Zwei-Massen-Fits nicht überraschend.
- Der zur Simulation des Gluino-Glue verwendete Operator scheint äußerst schlecht auf den Grundzustand zu projizieren. Abbildung 3.6 zeigt den N-Massen-Fit an die Korrelationsfunktion bei separatem Ausweis der m_1 -Komponente. (der Vollständigkeit halber auch für den χ_D^2 -Fall).

$C_1(\Delta t)$ -Komponente

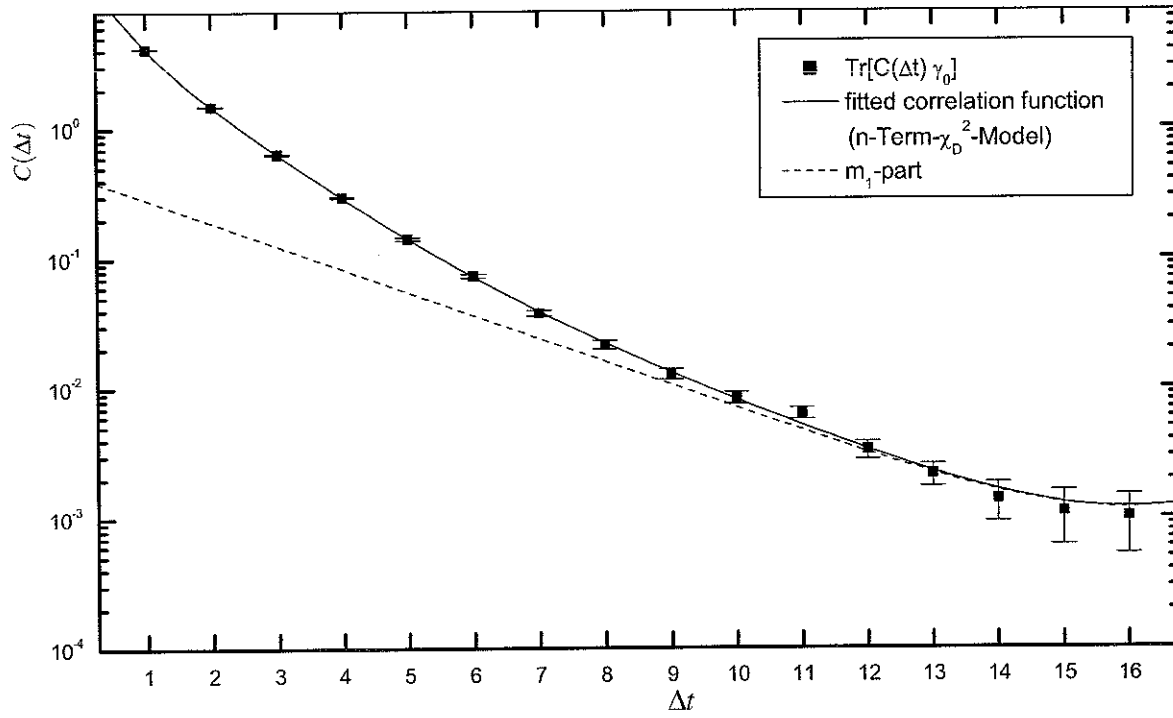
Abbildung 3.7 zeigt die $C_1(\Delta t)$ -Komponente der Gluino-Glue Korrelationsfunktion. Im Gegensatz zum obigen Fall klingen die effektiven Massen (Abbildung 3.8) bis zu einem Wert von $t_1 = 6$ nicht ab, sondern fluktuieren auf konstantem Niveau. Der Verlauf der Korrelationsfunktion läßt sich also am linken Rand durch nur einen Massen-Term gut beschreiben. Dieses ist bereits aus dem Korrelator selbst ersichtlich: im angesprochenen Bereich läßt sich der Verlauf unter logarithmischen Skalierung gut durch eine Gerade beschreiben - dieses entspricht für kleine Zeitscheibendistanzen ungefähr dem Signal eines einzelnen Massenterms:

$$\begin{aligned} \ln \left(\omega \cdot \left(e^{-m\Delta t} - e^{-m(T-\Delta t)} \right) \right) &= \ln(\omega) + \ln \left(1 - e^{-m(T-2\Delta t)} \right) - m\Delta t \\ &\approx \ln(\omega) - m\Delta t. \end{aligned}$$

Die angegebenen effektiven Massen korrigieren die fehlerhaften Angaben in [4, Abb. 4.21, S. 67]: Die dort dargestellten Werte wurden für positive Randbedingungen kalkuliert (vgl. xx-ref). Der daraus resultierende Fehler ist für kleine Werte von t_1 zu vernachlässigen (weil der Beitrag des reflektierten Terms dies ist). Unglücklicherweise sind die Abweichungen für $t_1 \geq 12$ umso größer und haben in [4] zu einer Fehlinterpretation geführt. So schienen die effektiven Massen am rechten Rand ein Plateau zu bestätigen, die Situation ist aber ungleich schlechter: Für $t_1 \geq 12$ ist das jeweilige Gleichungssystem (xx-rf) nicht lösbar.

Gluino Glue, $\text{Tr}[C_{\tilde{g}\tilde{g}}\gamma_0]$

N-Massen-Fit, χ_D^2 - case



N-Massen-Fit, χ^2 - case

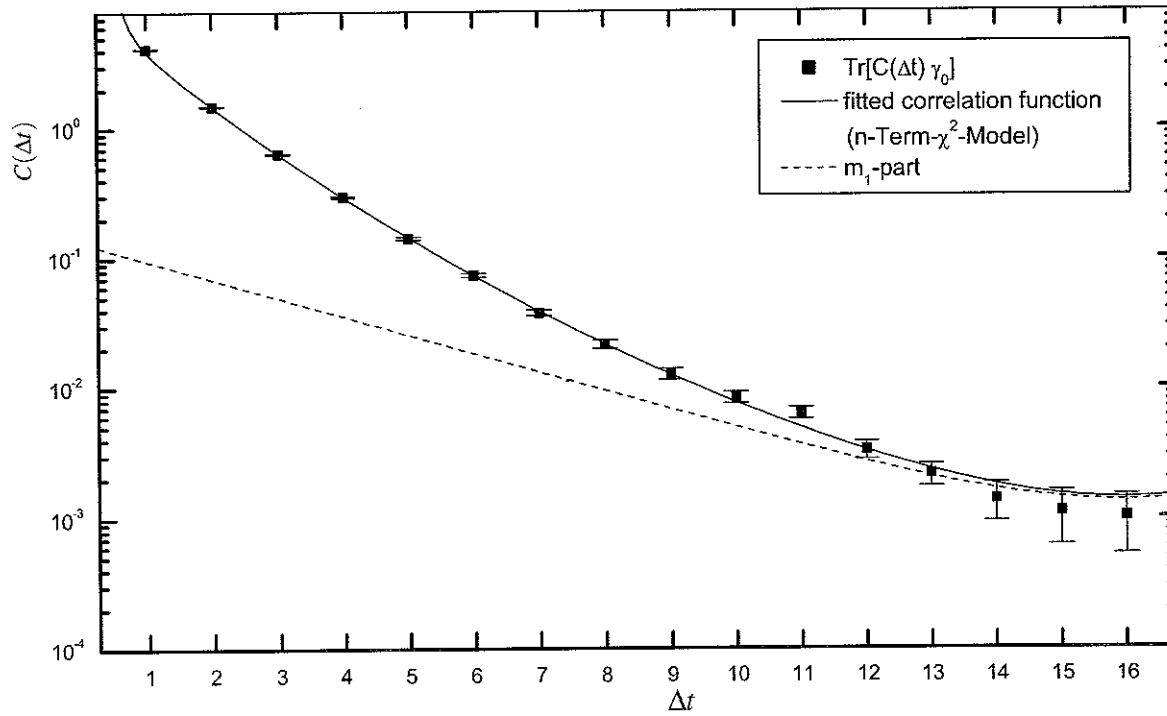
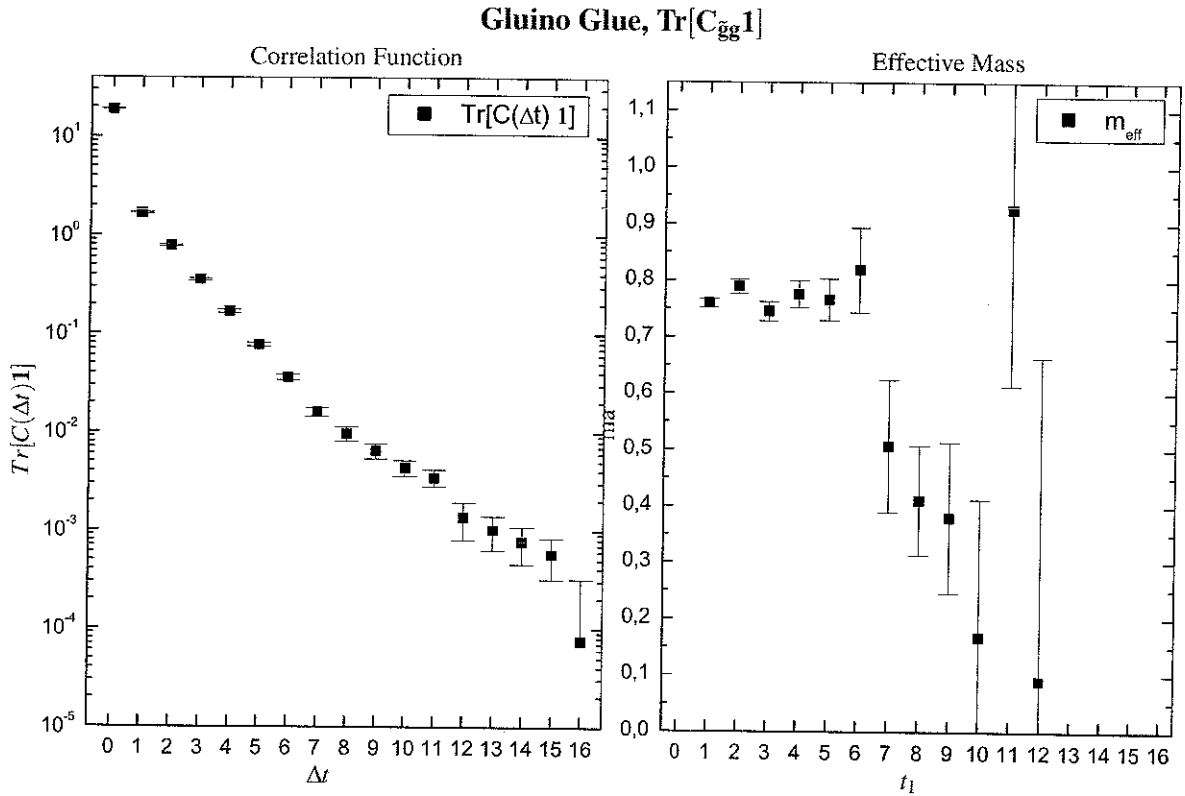


Abbildung 3.6: C_{γ_0} Gluino Glue Korrelationsfunktion.

Abbildung 3.7: $\text{Tr}[C_{\tilde{g}g}1]$ correlator.Abbildung 3.8: Effektive Massen der C_1 Korrelationsfunktion.

Die, im Kalkulationsverfahren der effektiven Massen nicht zugängliche, beste Approximation stellt noch der Grenzfall $m_{\text{eff}} \rightarrow 0$ dar. Dieses läßt sich sehr gut aus den Ein-Massen-Fits in Abbildung 3.9 ablesen: die gefitteten Werte für $t_{\min} \geq 12$ liegen nur marginal über null, es handelt es sich bei ihnen allerdings nur um numerische Artefakte: Im Falle negativer Randbedingungen wäre das Signal eines masselosen Zustandes mit null identisch. Der iterative Minimierungsalgorithmus findet in der Approximation $m_1 \rightarrow 0$ und gleichzeitig $w_1 \rightarrow \infty$ die beste Annäherung an den Bereich der großen Zeitscheibendistanzen des Korrelators. Der Übergang erfolgt dabei in der Weise, daß noch ein (sehr kleines) Signal erhalten bleibt. Die Prozedur kommt spätestens dann zum Erliegen, wenn die Veränderungen im χ^2 unter die Rechnergenauigkeit fallen. Ferner führen auch die Minimierungsversuche für jedes einzelne Jackknife-Sample auf das gleiche asymptotische Verhalten, so daß sich für die Masse $m_1 \approx 0$ rechnerisch ein verschwindend kleiner Fehler ableitet. Die auf diese Weise erhaltenen Fit-Ergebnisse liegen natürlich fernab jeglicher Diskussion, wir haben es an dieser Stelle tatsächlich mit einem singulären Fit zu tun.

Der Übergang zu einem Zwei-Massen-Ansatz (Abbildung 3.10) verschafft keine Abhilfe, die Fit-Prozedur liefert bereits für $t_{\min} = 0$ singuläre Ergebnisse. Naheliegenderweise gilt das gleiche auch für jedweden Versuch eines Fits mit noch mehr Termen. Selbst die Einschränkung des Zeitscheibendistanzintervalls von der rechten Seite, hin zu einem Maximalwert von 10, 11 oder

12 führt in keinem Fall zu Verbesserungen.

Als einzige Informationsquelle bleiben die Ergebnisse des Ein-Mass-Fits unter Vernachlässigung der Werte für $t_{min} \geq 12$. Wie im Falle der C_{γ_0} -Komponente unterscheiden sich die Ergebnisse der χ_D^2 bzw. χ^2 -Minimierung deutlich (die Korrelationskoeffizienten finden sich in Tabelle A.2). Die Auswertung sollte sich also auf den χ^2 -Ansatz stützen. Der Autor verzichtet allerdings auf den Versuch, aus dem Fit oder den widersprüchlichen Ergebnissen der effektiven Massen ein Plateau abzulesen und verbleibt für die C_1 -Komponente *ohne* jegliche Schätzung des Massenspektrums.

3.2.2 Adjungierte Mesonen

Den zweiten Block dieser Auswertung bilden die adjungierten Mesonen $a - \eta'$ und $a - f_0$.

Meson $a - \eta'$

Vorweggenommen sei, daß sich der Korrelationsfunktion des pseudoskalaren Mesons $a - \eta'$ wider Erwarten - Hinweise auf einen kleinen, aber von null verschiedenen Vakuum-Erwartungswert entnehmen lassen. Die Struktur dieser Auswertung trägt vor allem der Illustration dieses noch zu diskutierenden Effektes Rechnung. Von besonderem Interesse wird auch ein Vergleich mit der Analyse in [4] sein, in dessen Rahmen der Korrelator nicht auf die Möglichkeit eines Signals $\omega_0 > 0$ getestet wurde. Für einen Blick auf die Korrelationsfunktion wird auf Seite 45, Abbildung 3.18 verwiesen.

Den Anfang der Untersuchung machen die Kalkulation der effektiven Massen und ein Ein-Massen-Fit in Abbildung 3.11. Aufgetragen wurden jeweils die Ergebnisse bei expliziter Berücksichtigung bzw. der Vernachlässigung des Summanden ω_0 in unserem Ansatz. Für $\omega_0 = 0$ stabilisieren sich die ermittelten Werte auch für große Zeitscheibendistanzen nicht zu einem Plateau einer Grundzustandsmasse. Dieses könnte zunächst durch ein starkes Signal höherer Moden verursacht sein (dies war die Interpretation in [4]). Die sich stabilisierenden Ergebnisse bei Inbetrachtung eines Vakuum-Erwartungswertes verdeutlichen aber noch eine andere Interpretationsmöglichkeit: Enthält der Korrelator ein Signal $\omega_0 > 0$, wird das Abklingverhältnis des Restsignals, also die Höhe der abzuleiteten Massen, unterschätzt. Dieser Effekt nimmt für zunehmende Zeitscheibendistanzen zu, weil der Offset ω_0 entsprechend an Gewicht in der Korrelationsfunktion gewinnt. Einen ersten durchaus beeindruckenden Plausibilitätsnachweis erfährt diese These durch den Verlauf der aus den jeweiligen effektiven Massen abgeleiteten Werte für ω_0 (für die leider auf Seite 40, Abbildung 3.15 verwiesen werden muß). Die Werte stabilisieren sich ähnlich wie die effektiven Massen selbst. Als eine erste Schätzung der Größenordnung läßt

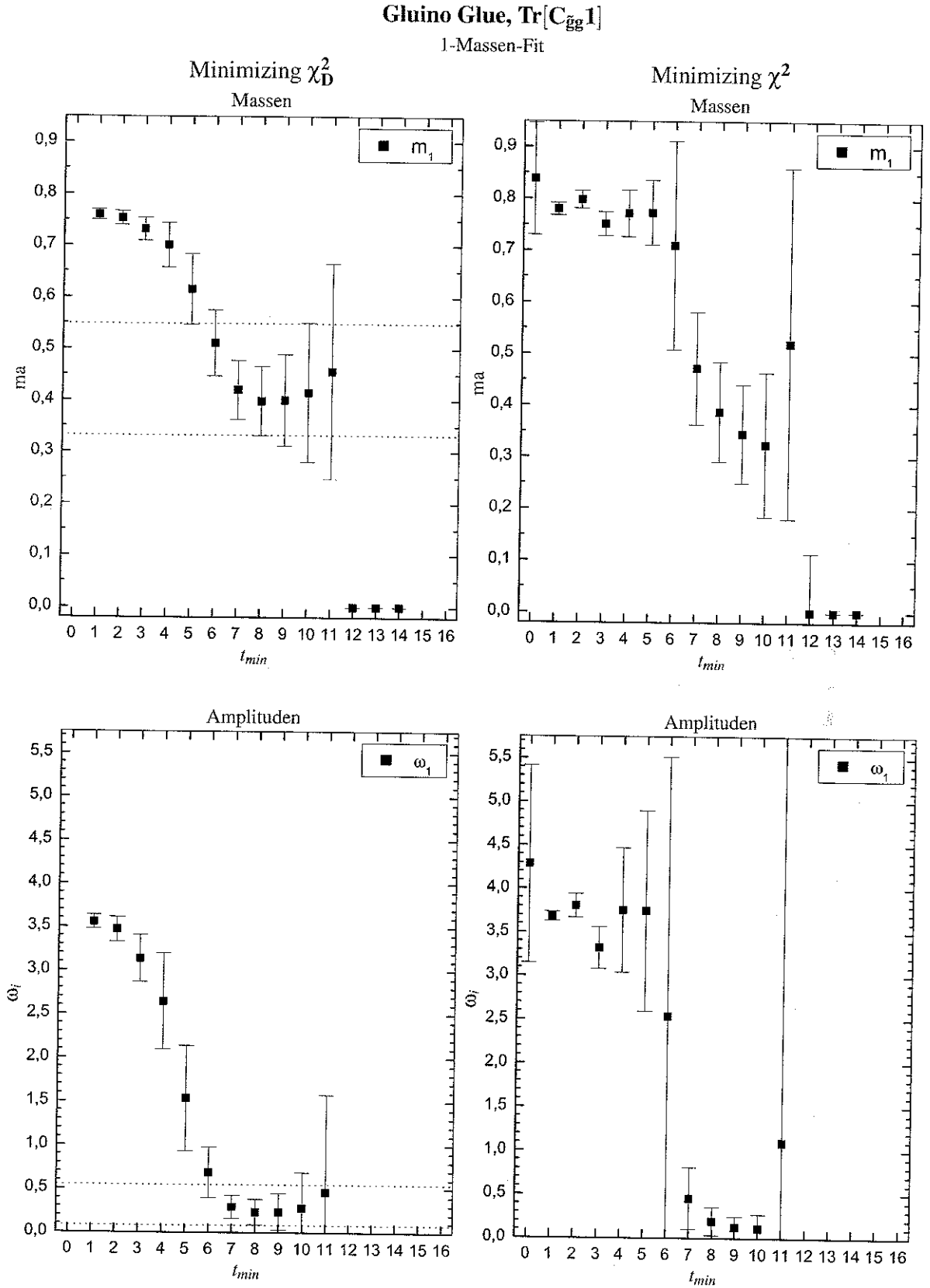


Abbildung 3.9: Ein-Massen-Fit an die C_1 Glino Glue Korrelationsfunktion.

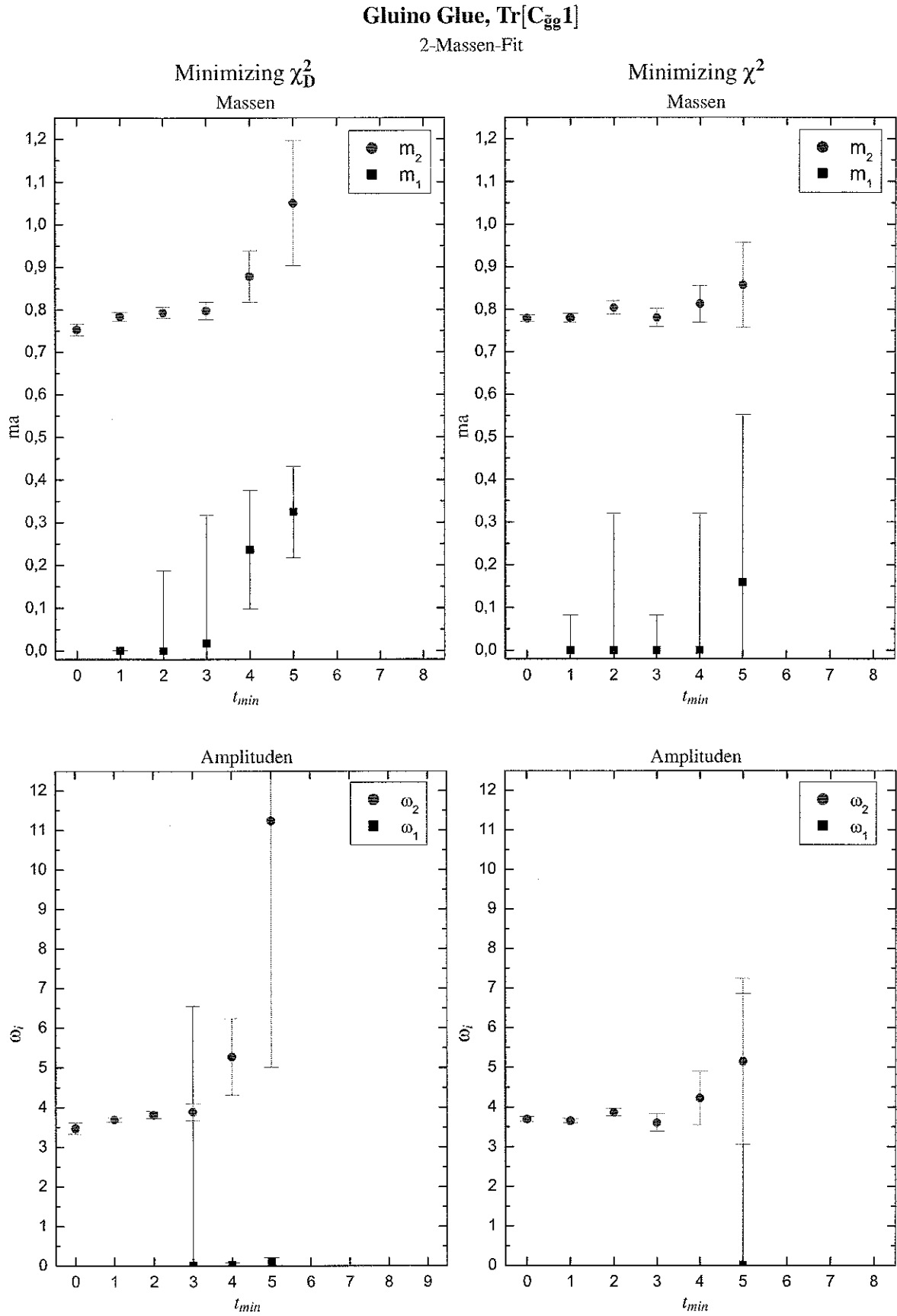
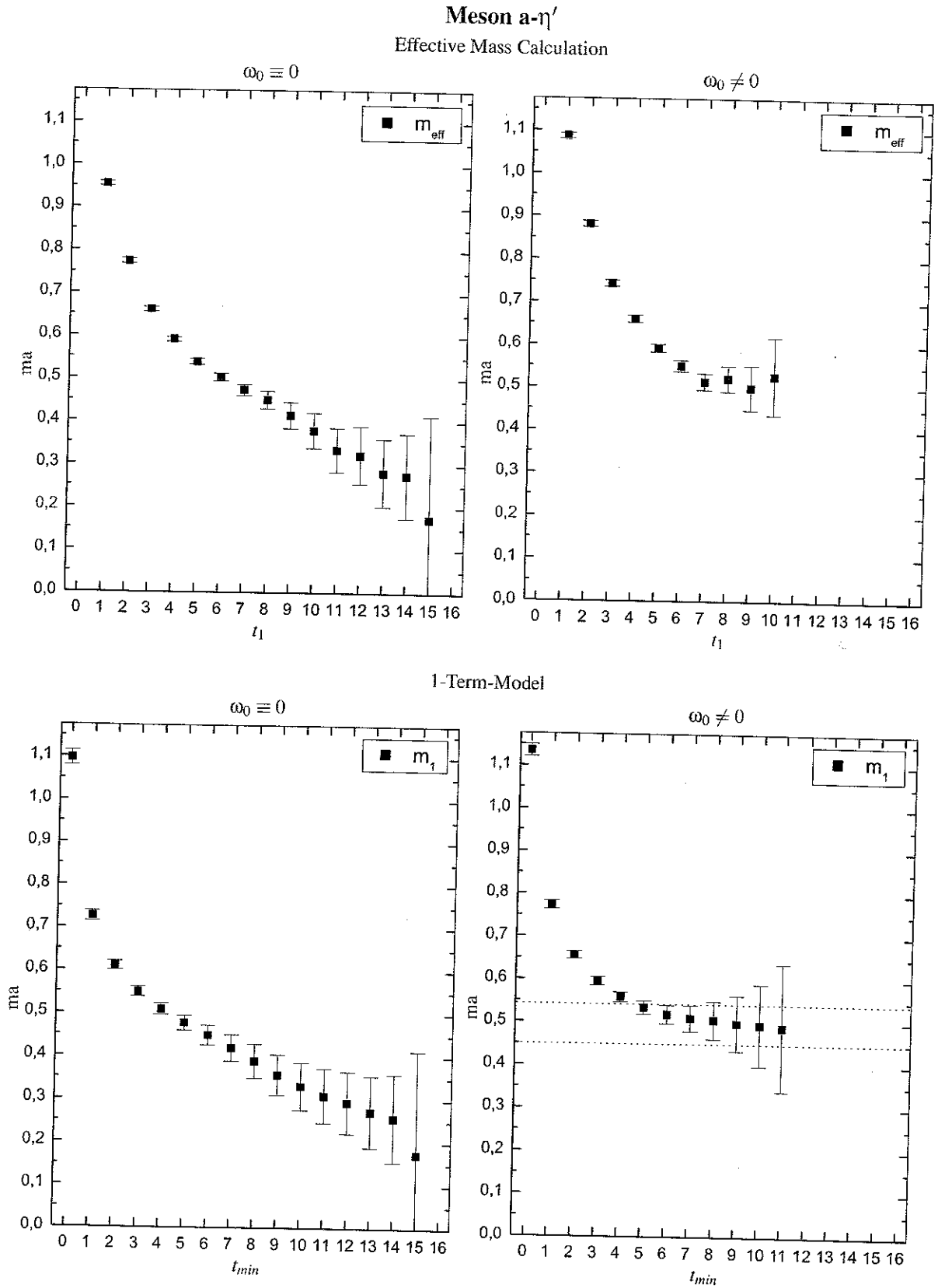


Abbildung 3.10: Zwei-Massen-Fit an die C_1 Gluino Glue Korrelationsfunktion.

Abbildung 3.11: Effektive Massen der $a\text{-}\eta'$ Korrelationsfunktion.

sich $\omega_0 \approx 0,011$ festhalten.

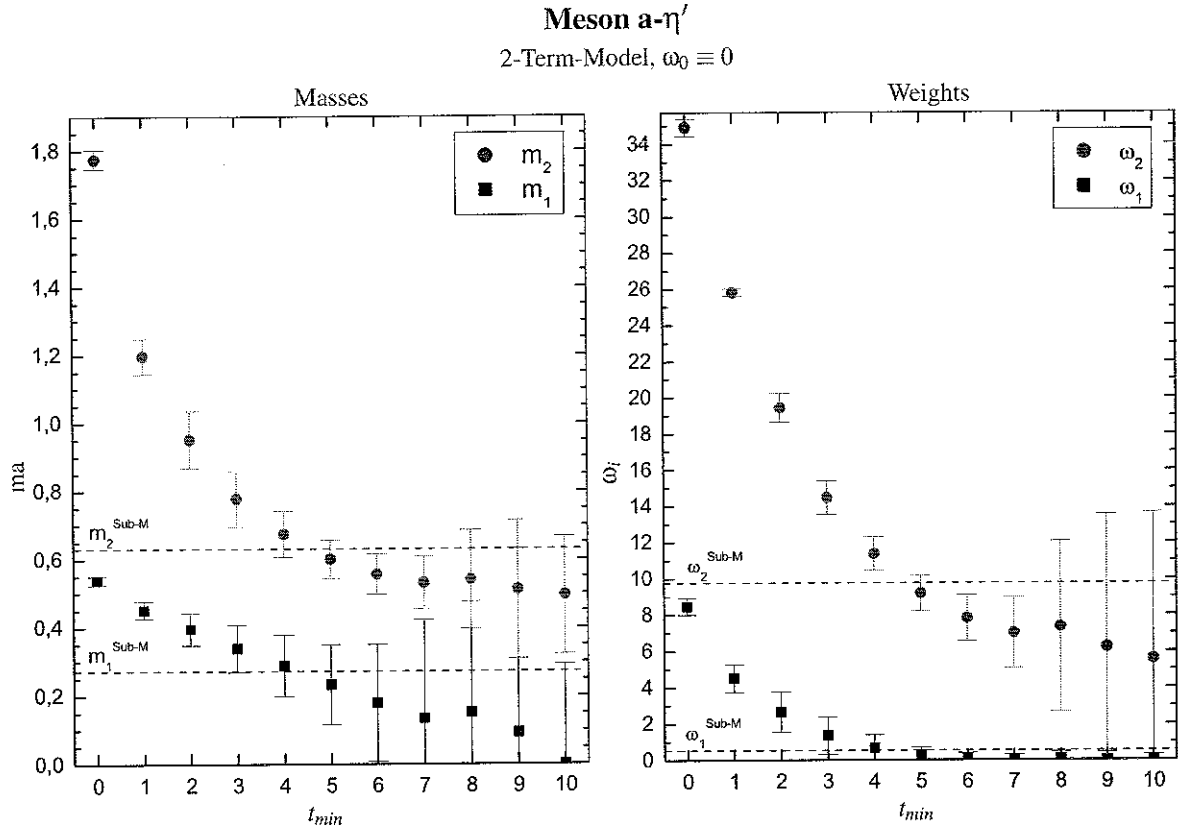


Abbildung 3.12: Zwei-Massen-Fit an die $a\eta'$ Korrelationsfunktion für $\omega_0 \equiv 0$.

Einen sehr interessanten Effekt veranschaulicht der in 3.12 dargestellte Zwei-Massen-Fit, für den $\omega_0 = 0$ gesetzt wurde. Die gefitteten Werte fallen für beide Massen bei ansteigendem t_{min} stark ab, für $t_{min} = 10$ sinkt m_1 schließlich bis auf null. Unter periodischen Randbedingungen degeneriert das Signal eines Teilchens verschwindend kleiner Masse m_1 aber gerade zu einem konstanten Beitrag (von $2 \cdot \omega_1$) in der Korrelationsfunktion. Das Doppelte der für $t_{min} = 10$ gefitteten Amplitude stimmt in guter Näherung mit der obigen Schätzung $\omega_0 \approx 0,011$ überein. Genauer entsprechen die Ergebnisse für $(2 \cdot \omega_1)$ bzw. m_2 hier exakt den gefitteten Werten für ω_0 bzw. m_1 aus dem Ein-Massen- ω_0 -Ansatz³ in Abbildung 3.11! Lediglich die abgeleiteten statistischen Fehler unterscheiden sich: Für den vier-parametrischen Zwei-Massen-Ansatz hier resultieren plausiblerweise größere Fehlerschätzungen als für den drei-parametrischen Ein-Massen- ω_0 -Ansatz. In diesem Sinne ist die Entscheidung für oder gegen eine explizite Berücksichtigung eines möglichen Vakuum Erwartungswert im Ansatz also nicht prinzipieller Natur. Wenn ausreichend viele Massen-Terme zur Verfügung stehen, ist zumindest die Möglichkeit einer additiven Konstante inbegriffen. Vielmehr führt die Berücksichtigung von ω_0 zu einer erheblichen Stabilisierung der Fitergebnisse und in Folge auch zu kleineren statistischen Fehlern. Im vorliegenden

³Die Ergebnisse für ω_0 werden hier nicht gezeigt.

Fall führt das Ergebnis des Zwei-Massen-Fits in natürlicher Weise auf einen ω_0 einschließenden Ansatz.

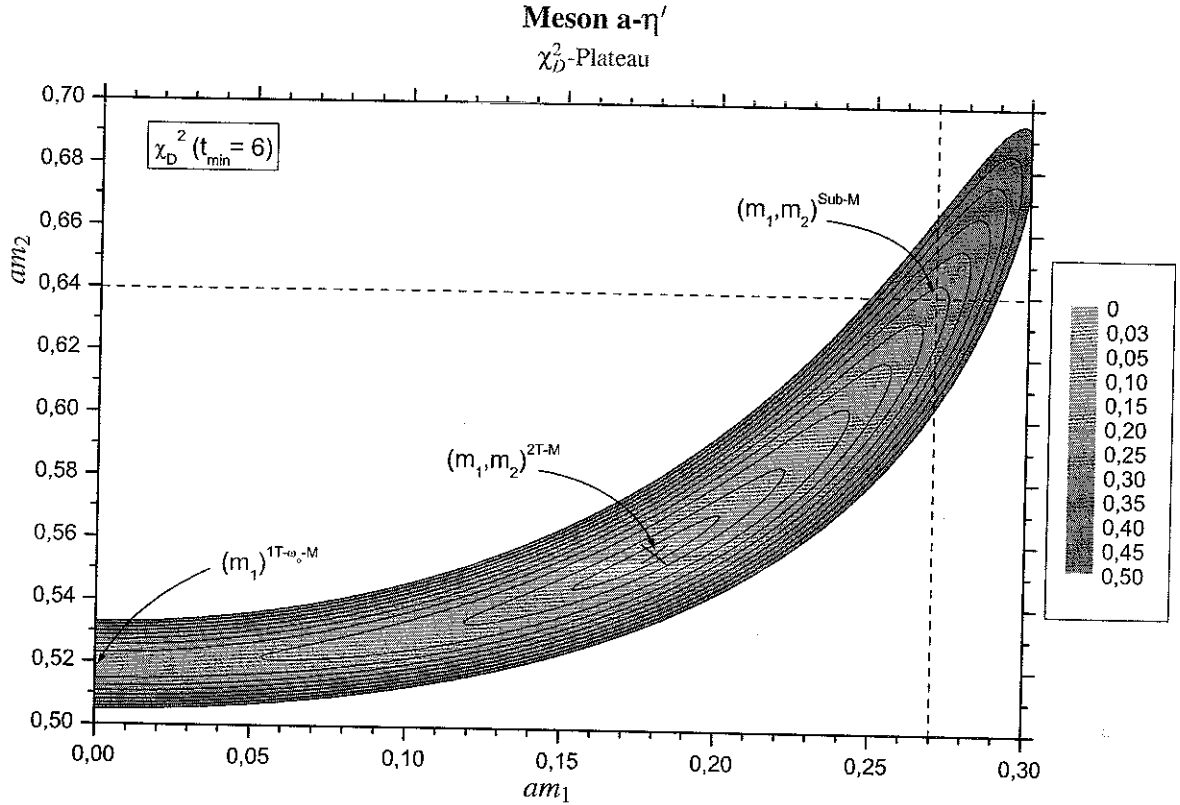


Abbildung 3.13: Höhenlinien von χ_D^2 für $t_{min} = 6$.

Der Zwei-Massen-Fit aus Abbildung 3.12 wurde, wie auch der Ein-Massen-Fit zuvor, auf Basis einer χ_D^2 -Minimierung gewonnen. Dies ermöglicht uns einen direkten Vergleich mit den Ergebnissen der vorangegangenen Analyse auf Grundlage des iterativen Subtraktionsverfahrens. Die Ergebnisse unterscheiden sich essentiell: In [4, Abb. 4.30, S. 76] zeigen sich für beide Massen hervorragend ausgeprägte Plateaus bis zu einer Zeitscheibendistanz von $\Delta t = 9$ (!). Die resultierenden Plateauwerte sind in Abbildung 3.12 durch gestrichelte Linien gekennzeichnet. Wie kommt es zu derartig unterschiedlichen Ergebnissen? Verantwortlich für die Abweichungen ist die Tatsache, daß die mit Hilfe des Subtraktionsverfahrens ausgemachten Fixpunkte durchgehend *nicht* dem Minimum von χ_D^2 entsprachen. Die auf dieser Basis abgeleiteten Werte waren also systematisch falsch.

Am Beispiel des Fits für $t_{min} = 6$ wird das unglückliche Scheitern des Subtraktionsverfahrens in Abbildung 3.13 durch ein Höhenliniendiagramm für χ_D^2 verdeutlicht. Dieses bedarf noch einiger Erklärungen: Weil dem Autor keine anschauliche Darstellung des vierparametrischen Raums $\chi_D^2(m_1, m_2, \omega_1, \omega_2)$ gelungen ist, wurde wie folgt vorgegangen. Für festgesetzte Kombinationen von $(m_1, m_2) \in [0; 0,3] \times [0,5; 0,7]$ wurden die beiden Amplituden an die Korrelationsfunktion gefittet. Im Höhenliniendiagramm wird also das zu einer festen Kombinationen (m_1, m_2)

gehörendene bestmögliche Fitergebnis für χ_D^2 dargestellt⁴. Die Auflösung des Diagramms entspricht 300×200 Punkten - Grundlage bilden also insgesamt 60000 zweiparametrische Fits. Das Studium der Höhenlinien ist äußerst aufschlußreich, was diesen Aufwand rechtfertigt:

- Es läßt sich erkennen, daß die Ergebnisse des Subtraktionsverfahrens, $(m_1, m_2)^{Sub-M}$, tatsächlich einen Fixpunkt darstellen, weil das Verfahren Variationen nur entlang der gestrichelten Linien erlaubt. Vom Minimum im χ_D^2 ist dieser Fixpunkt allerdings weit entfernt.
- Es gibt eine ganz Schar von Fixpunkten - insbesondere ist natürlich das Minimum, also das Ergebnis des Zwei-Massen-Fits $(m_1, m_2)^{2T-M}$, einer.
- Es läßt sich bereits die attraktive Wirkung des Wertes $m_1 = 0$, also des Degenerierens des ersten Massen-Terms zu einer Konstante erkennen. Insbesondere ist natürlich am linken Rand, für $m_1 = 0$, das Ergebnis des Ein-Massen-Fits bei Berücksichtigung von ω_0 , $(m_1)^{1T-\omega_0-M}$, wiederzufinden. Der Wert von χ_D^2 ist selbst an dieser Stelle noch um zwei Drittel kleiner, als für das Ergebnis des Subtraktionsverfahrens.

Entsprechende Diagramme haben auch für $t_{min} \neq 6$ den qualitativ gleichen Charakter.

Nach den vorangegangenen Erfahrungen ist die explizite Berücksichtigung eines Vakuum-Erwartungswertes ω_0 in unserem Ansatz hinreichend motiviert, um für die weitere Auswertung vorausgesetzt zu werden. In Abbildung 3.14 finden sich die entsprechenden Zwei-Massen-Fits, für die neben dem χ_D^2 -Ansatz hier erstmalig auch die Ergebnisse einer Minimierung des vollen χ^2 - gezeigt sind. Die Ergebnisse stimmen für beide Fälle recht gut überein. Die Fits für die Grundzustandsmasse und die Masse des ersten angeregten Zustandes bilden gut ablesbare Plateaus, wobei die statistischen Fehler für den χ^2 -Fall durchweg kleiner sind. Für diesen Fall sind in Abbildung 3.15 die Fit-Ergebnisse für ω_0 separat ausgewiesen. Zu beachten sind hier die relativ großen Fehlerbereiche, die einen Wert von null fast überdecken. Die Schätzung für m_1 stimmt sehr gut mit den Ergebnissen des Ein-Massen-Ansatzes überein, auch die abzulesenen statistischen Fehler sind nahezu identisch.

Die Fit-Ergebnisse für die Masse m_2 fallen für den Verlauf von $t_{min} = 0$ bis $t_{min} = 3$ stark ab. Dies läßt auf einen großen, abklingenden, Einfluß noch höherer Massenterme schließen. Nach den guten Erfahrungen mit dem bereits beschriebenen N-Massen-Fit-Verfahren im Falle der $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ -Komponente des Gluino-Gluon, bietet sich eine entsprechende Analyse auch hier an.

Die Ergebnisse des N-Fit-Verfahrens sind in Abbildung 3.16 dargestellt. Wieder wurde für die Fits die gesamte Korrelationsfunktion ($\Delta t \in [0, 16]$) ausgewertet. Auch in diesem Fall konnten

⁴zur Beurteilung der Qualität eines Fits ist es vielfach üblich, $\chi^2/(n-p)$ zu betrachten, wobei n für die Anzahl der Datenpunkte und p für die Anzahl der Fitparameter steht. Die Frage der Normierung ist an dieser Stelle aber irrelevant.

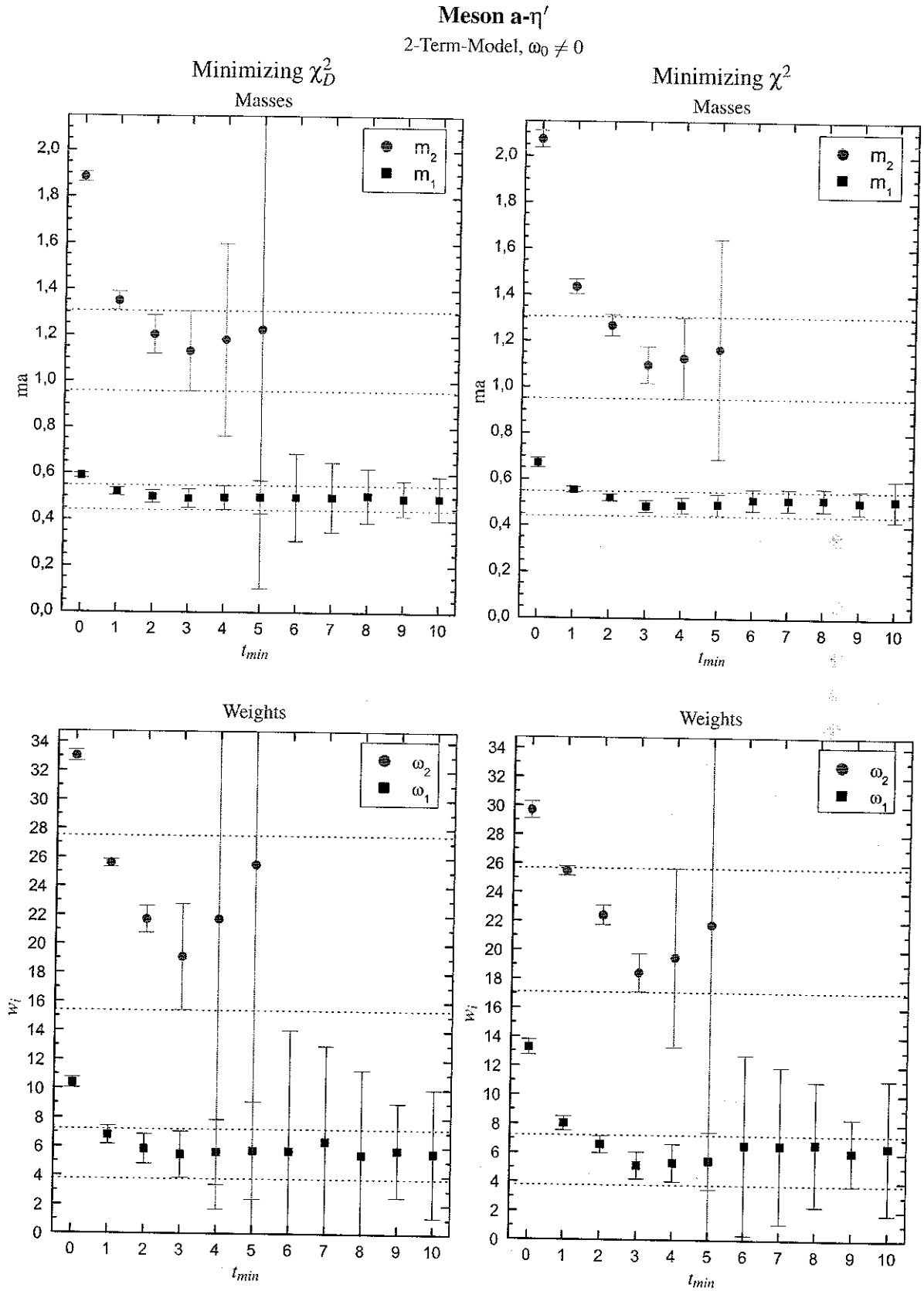


Abbildung 3.14: Zwei-Massen-Fit an die $a\text{'}\eta$ Korrelationsfunktion für $\omega_0 \neq 0$.

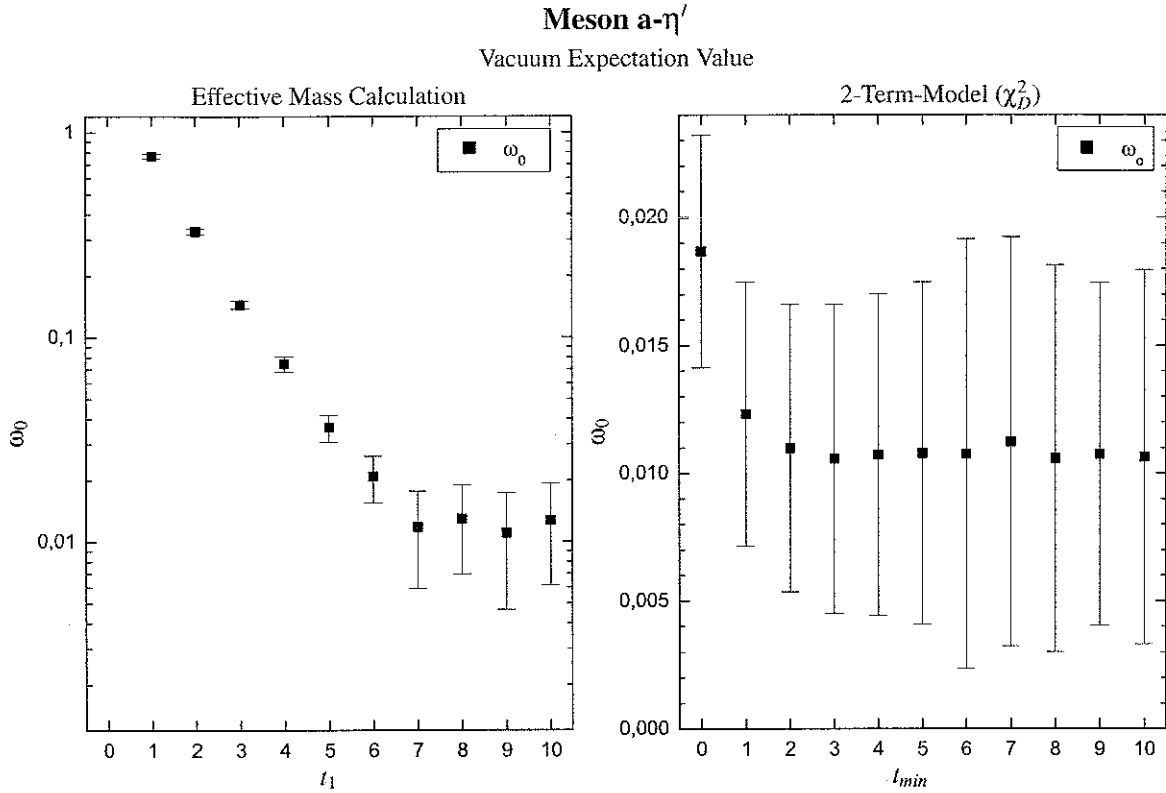


Abbildung 3.15: Vakuum-Erwartungswert für das Meson $a - \eta'$.

äußerst stabile Ergebnisse erreicht werden, insgesamt werden die Signale von vier verschiedenen Massen-Termen *aufgelöst* - d.h. auch bei Bereitstellung weiterer Terme lieferte der Minimierungsalgorithmus nur diese Massen (bei konstantem Fehler!) als Fitergebnis. Auf die Abbildung des mit Sicherheit stark verfälschten Signals des vierten Terms wurde verzichtet.

Es sei noch einmal ausdrücklich darauf hingewiesen, daß inklusive des in Abbildung 3.18 dargestellten Wertes für ω_0 insgesamt neun (!) Parameter stabil (!) aus nur 17 Datenpunkten abgeleitet werden. Zwar ist der ebenfalls in Abbildung 3.18 dargestellte Fit an die Korrelationsfunktion von hervorragender Qualität, ein solches Ergebnis muß trotzdem zur Vorsicht mahnen. Die abgeleiteten Größen sollen hier für den χ^2 -Fall genauer diskutiert werden. Die ermittelten Fehlerbereiche für die niedrigsten beiden Massen m_1 und m_2 sind leicht kleiner als die aus dem Plateau des Zwei-Massen-Fits abgelesenen Fehlerschätzungen. Das gleiche gilt auch für die beiden Massen selbst. Im Falle des N-Massen-Fits an den Gluino-Gluon Korrelator $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ wurde bereits ein ähnliches Verhalten beobachtet und unter anderem als Argument für einen akzeptierbar kleinen systematischen Fehler durch das begrenzte Auflösungsvermögen angeführt. Hier empfiehlt sich, insbesondere für die Masse des ersten angeregten Zustandes, ein genauerer Blick. Das Ergebnis sinkt ab einer Anzahl von vier berücksichtigten Termen auf $am_2 \approx 1,0$, während aus dem Zwei-Massen-Fit in Abbildung 3.14 über den gesamten stabilen Bereich von $t_{min} \in [0, 5]$ nur größere

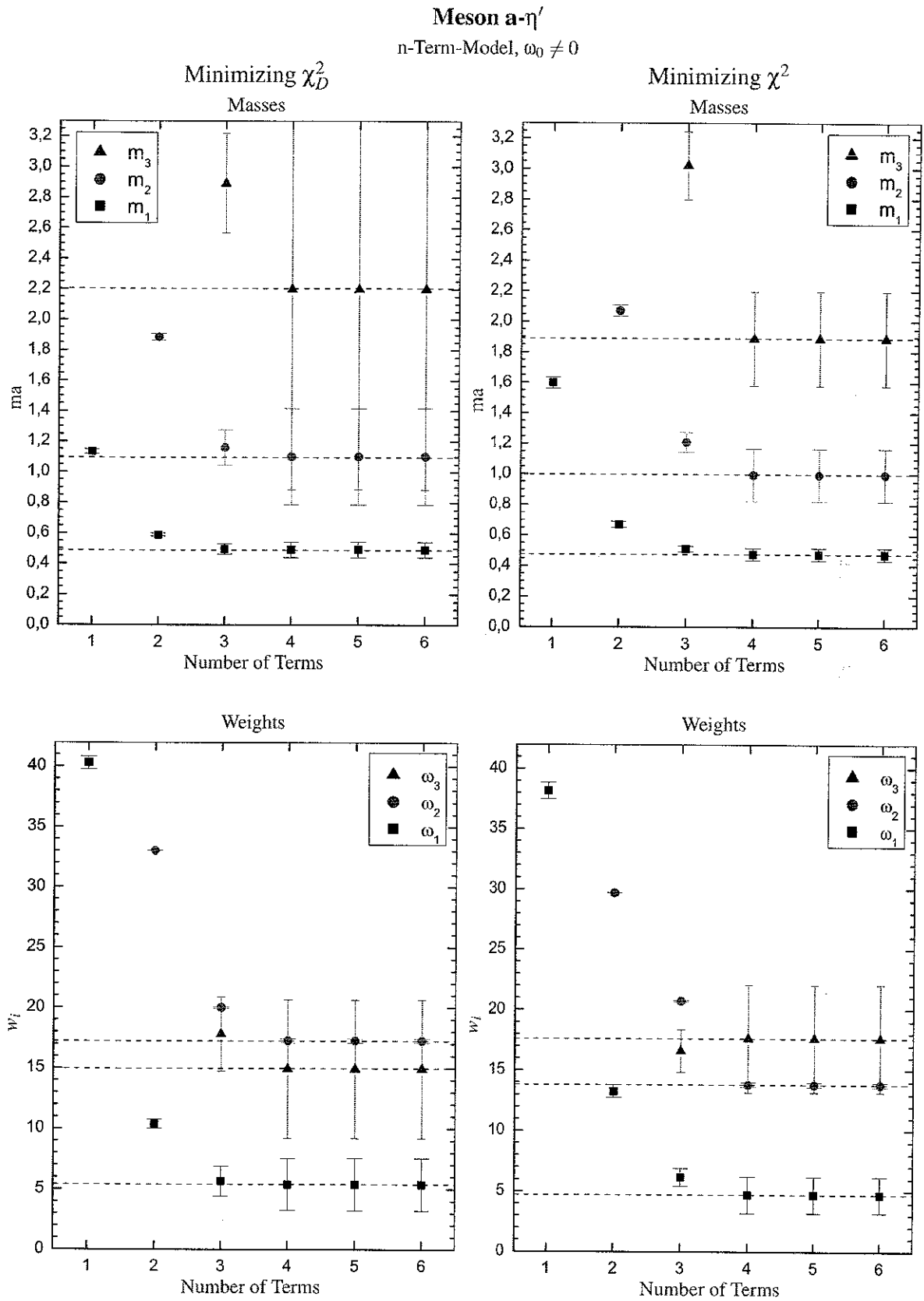


Abbildung 3.16: N-Massen-Fit an die $a - \eta'$ Korrelationsfunktion.

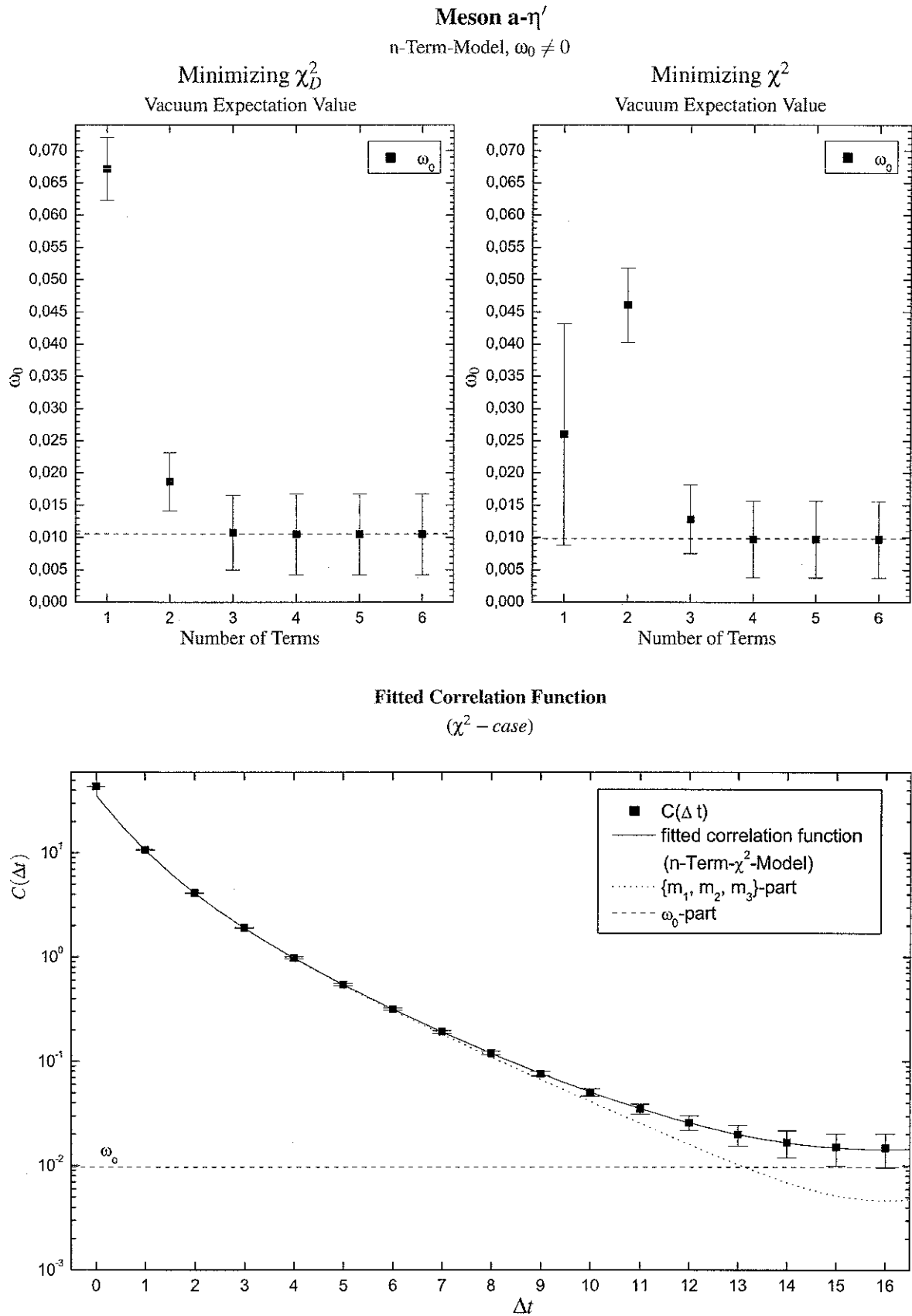


Abbildung 3.17: Korrelator.

Werte abzulesen sind. Als niedrigster Wert läßt sich hier noch $m_2(t_{\min} = 3) = 1,10(8)$ ablesen. Die Ursache für das noch kleinere Resultat aus dem N-Massen-Fit liegt darin, daß auch der Fitwert für ω_0 ab vier berücksichtigten Massentermen auf einen Wert von $\omega_0 \approx 0,0097(59)$ absinkt - und damit ebenfalls auf ein Niveau, daß für den Zwei-Massen-Fit durchgängig übertroffen wird: der kleinste Wert findet sich wieder für $t_{\min} = 3$, er liegt bei $0,0106(60)$. Die Differenz erscheint in Relation zu den angegebenen Fehlern sehr klein, für Fits mit vielen Massentermen hängen aber die Resultate, gerade für die hohen Massen, sehr sensibel von dem genauen Fit-Ergebnis für den Vakuum-Erwartungswert ab. Die genauen Abweichungen zwischen den Ergebnissen des Zwei- bzw. N-Massen-Fits können natürlich als Warnung für den einen wie auch den anderen Fall interpretiert werden, was die Frage nach dem vertrauenswürdigsten Ergebnis erneut stellt. Die Entscheidung des Autors orientiert sich an einer noch nicht diskutierten Beobachtung. Sehr auffällig sind die schon unplausibel klein erscheinenden Fehlerbereiche für die Amplitude des zweiten Terms, ω_2 , aus dem N-Massen-Fit. Eine genaue Erklärung für dieses Phänomen konnte nicht gefunden werden, gerade deshalb verweist der Autor aber auf die oben bereits festgehaltenen Ergebnisse des 2-Massen-Fits als die besten Schätzungen des niedrigen Teil des Massenspektrums.

Bis zu diesem Zeitpunkt wurde eine Interpretation des aus der Korrelationsfunktion sehr klar zu extrahierenden Signals für ω ausgeklammert (auch wenn bereits vielfach von einem "Vakuum-Erwartungswert" geschrieben wurde). Eine genauere Diskussion soll an dieser Stelle folgen.

Wie dem Fit aus Abbildung 3.18 sehr anschaulich zu entnehmen ist, macht der Summand ω_0 nur einen verschwindend kleinen Anteil der Korrelationsfunktion für kleine Zeitscheibendistanzen aus. Durch die exponentielle Dämpfung der Massen-Terme wird diese aber für $\Delta t \geq 13$ sehr stark durch ω_0 dominiert, so daß wie oben ausführlich gezeigt wurde die Berücksichtigung des Terms einen großen Einfluß auf die Ergebnisse von Fits an den Korrelator ausübt.

Es ist prinzipiell nicht auszuschließen, daß das nachgewiesene Signal für ω_0 durch eine (in Gittereinheiten) sehr kleine Masse $am_1 \approx 0$ des Spektrums verursacht wird, für dessen doppelte Amplitude sich dann eine Schätzung von ω_0 ergeben würde. Auf diese Ambivalenz wurde bereits oben hingewiesen. Wesentlich wahrscheinlicher erscheint aber die Interpretation, daß sich im Korrelator tatsächlich ein (*Rest*-)Signal eines Vakuumerwartungswertes findet, obwohl die Operatoren für $a - \eta'$ einen solchen nicht aufweisen. Dieses heißt im Rahmen der Simulation auf dem Gitter nur, daß der *Erwartungswert* für ω_0 verschwindet, während der *Momentanwert* im Laufe des Updating-Prozesses um null fluktuiert. Erst im Grenzfall einer unendlich langen Simulationszeit entspräche der Anteil von ω_0 am Gesamtkorrelator genau null. Es ist denkbar, daß die für das vorliegende Ensemble verwendete Simulationszeit nicht ausgereicht hat, um einen Wert von $\omega_0 = 0$ mit hinreichender Genauigkeit zu gewährleisten. Nun scheint die Datenqualität ansonsten aber von ausgezeichneter Güte zu sein (vgl. Abbildung 3.18). Ein tieferer Grund hierfür könnte darin liegen, daß die aus dem Updating-Prozess sukzessive gewonnenen

Konfigurationen in Bezug auf ihren Momentanwert von ω_0 zu stark korrelierten, um durch die für den kleinsten Eigenwert der Fermionenmatrix λ_{min} geschätzte Autokorrelationszeit hinreichend voneinander getrennt worden zu sein.

Zwischen den beiden vorgestellten Interpretationen des Signals für ω_0 könnte also durch Wiederholung der Simulation bei einer Verlängerung der Simulationszeit unterschieden werden: Der Beitrag einer in Gittereinheiten sehr kleinen Masse bliebe hierbei konstant, wohingegen ein Restsignal eines Vakuum-Erwartungswertes gegen null gehen sollte.

Meson $a - f_0$

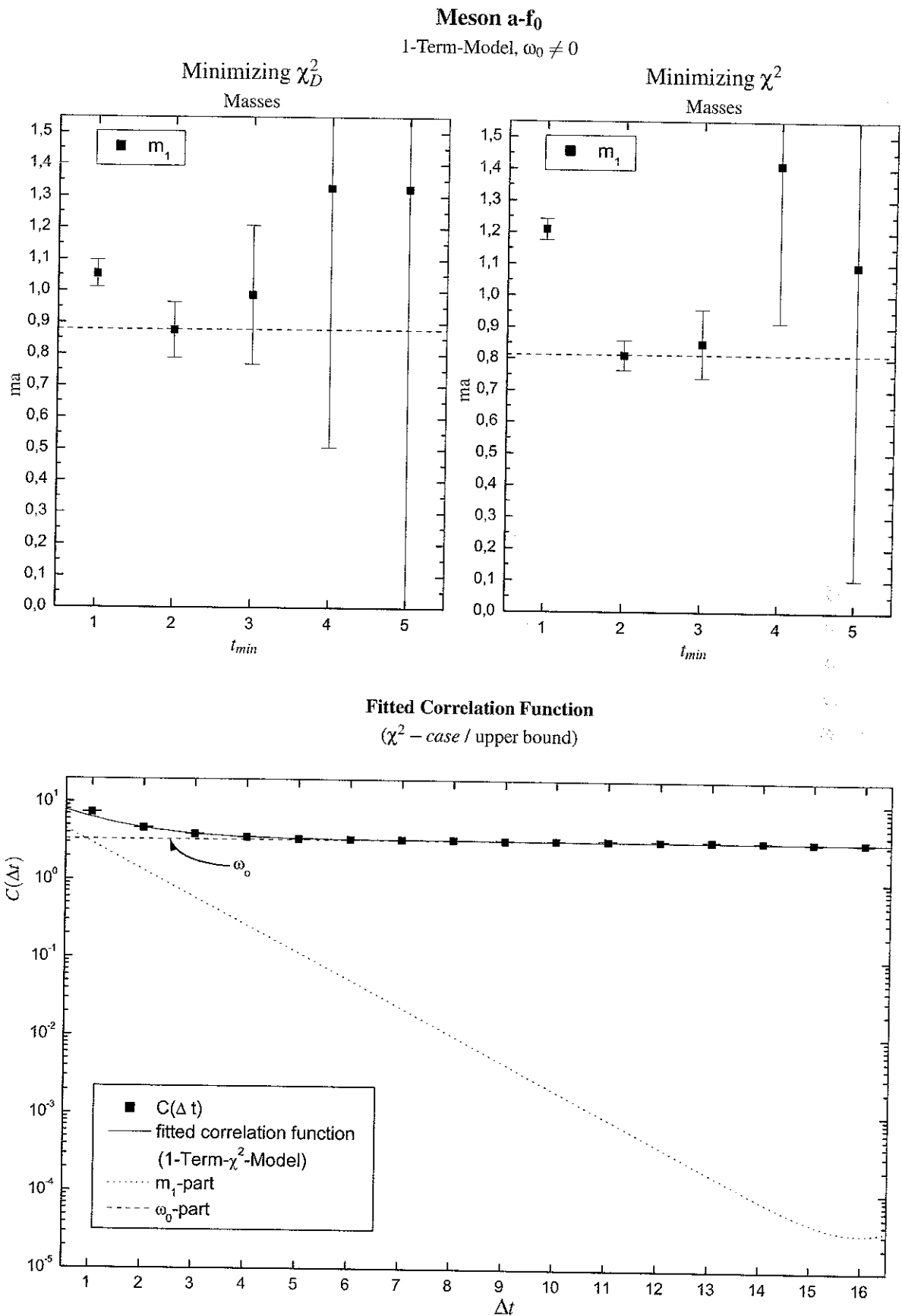
Die Korrelationsfunktion des skalaren Mesons $a - f_0$ bildet den vierten Untersuchungsgegenstand dieser Auswertung. Für das $a - f_0$ weist der 2-loop Anteil des Korrelators einen Vakuum-erwartungswert auf. Dieser wurde im Rahmen der Gittersimulation durch Kalkulation des Terms

$$\langle Tr[Q^{-1}] \rangle^2 \quad (3.11)$$

bereits konfigurationsweise abgezogen, so daß im verbleibenden Korrelator mit keinem Signal eines Vakuum-Erwartungswertes zu rechnen wäre. Wie bereits ausführlich in [4] diskutiert, verrät aber bereits ein erster Blick auf die Korrelationsfunktion in Abbildung 3.18, daß diese massiv durch eine additive Konstante dominiert wird. Entsprechend wurde für alle Fits (Fitsversuche) im Ansatz ein entsprechender Term ω_0 berücksichtigt. Eine ausführliche Diskussion dieses Terms erfolgt an dieser Stelle nicht: ohne den Abzug von (3.11) aus dem Gesamtkorrelator liegt der Vakuum-Erwartungswert bei einem Wert von ungefähr 18000, es verbleibt, wie auch immer, ein Restbetrag in der Größenordnung von 3. Der additive Term ω_0 erreicht damit, anders als im Fall des $a - \eta'$, leider eine Größenordnung, bei welcher das Abklingverhältnis des Restsignals stark verrauscht wird.

Der in Abbildung 3.18 dargestellte Ein-Massen- ω_0 -Fit stellt eine technische Verbesserung gegenüber der Auswertung in [4] dar, wo stabile Ergebnisse nur durch einen Abzug des Beitrags ω_0 von Hand erreicht wurden. Die beiden Fits für den χ_D^2 - bzw. χ^2 -Ansatz sind allerdings auch hier die einzigen Ergebnisse, die abgeleitet werden konnten. Aus dem Verlauf der gefitteten Massen läßt sich kaum ein Plateau ablesen, weil überhaupt nur bis $t_{min} = 5$ ein Signal der Grundzustandsmasse zu extrahieren ist. Weil die Auflösung höherer Terme nicht möglich ist, die Masse m_1 für kleine Werte von t_{min} aber tendenziell überschätzt wird, soll hier wie üblich der jeweils kleinste im Fit auftauchende Wert als eine obere Grenze der Grundzustandsmasse interpretiert werden. Dabei wird, wie in den Fällen zuvor, das Ergebnis für den χ^2 -Fall festgehalten:

$$am_1 < 0,81. \quad (3.12)$$

Abbildung 3.18: $a-f_0$ Korrelationsfunktion.

Diese Schätzung liegt leicht über der aus [4], weil an dieser Stelle auf die Einschränkung des Fit-Intervalls von der rechten Seite durch eine maximale Zeischeibendistanz $\Delta t_{max} < 16$ verzichtet wurde. Die sich ergebenden Verbesserungen sind marginal.

3.2.3 Anmerkungen

Im Rahmen der bisherigen Auswertung konnten Ergebnisse vorgestellt werden, die weit über die in [4] erzielten Resultate hinausgehen. Insbesondere konnten zur Analyse des Massenspektrums des $a - \eta'$ Mesons sowie der $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ -Komponente des Gluino-Gluon echte Zwei-Massen-Fits zu Rate gezogen werden. Selbst der Übergang zu einer noch höheren Anzahl von Termen konnte im Rahmen des vorgestellten N-Massen-Fits-Verfahrens in stabiler Art und Weise vollzogen werden. Das Fenster zu den stabilen Fits aufgestoßen haben dabei Verbesserungen im programmierten Minimierungsalgorithmus. Die Veränderungen scheinen eher unscheinbar, spielen aber eine überaus entscheidende Rolle und sollen im folgenden kurz vorgestellt werden. In diesem Rahmen wird auch das N-Fit-Verfahren noch einmal von einer prinzipiellen Seite motiviert.

...zur Parametrisierung

Es wurde bereits angedeutet, daß die in [4] gewählte Parametrisierung (3.9) mittelbar den Weg zu stabilen Zwei-Massen-Fits versperrt hatte. Genauer hatte diese Parametrisierung - soweit reproduzierbar - zur Wahl äußerst ungünstiger Startwerte für die Minimierungsprozedur verleitet. Dazu sei noch angemerkt, daß der Levenber-Marquandt-Solver zur Initialisierung eine erste Schätzung der zu bestimmenden Parameter als Startwerte für das iterative Lösungsverfahren verlangt. Programmierseitig wurde diese Initialisierung über die Implementierung von Startwerten für $\{m_i, \tilde{c}_i^2\}$ realisiert. Das Transformationsverhalten von $\tilde{c}_i^2$ aus (3.9) und den Amplituden der Zustände ω_i liest sich wie folgt:

$$\tilde{c}_i^2 = 2 \cdot \omega_i \cdot e^{-\frac{T}{2}m_i} \quad ; \quad \omega_i = \frac{1}{2} \cdot \tilde{c}_i^2 \cdot e^{\frac{T}{2}m_i}. \quad (3.13)$$

Zur genauen Setzung der Startwerte für einen Zwei-Massen-Fit liegen in der Regel, nämlich durch die Analyse eines Ein-Massen-Fits, plausible Schätzungen für m_1 und $\tilde{c}_1^2$ vor. Ein nicht allzu unplausibler Startwert für m_2 ist leicht ergänzt. Die intuitiv naheliegende Startwertsetzung $\tilde{c}_2^2 \stackrel{!}{=} \tilde{c}_1^2$ führt allerdings in die Irre, weil sie den iterativen Algorithmus mit einem Wert von

$$\omega_2 = e^{\frac{T}{2}(m_2 - m_1)} \cdot \omega_1 \quad (3.14)$$

für die Amplitude des angeregten Zustandes starten läßt. Mit m_1 und $\tilde{c}_1^2$ ist zwar auch ω_1 plausibel geschätzt, der Initialisierungswert für ω_2 aber schnell um drei Größenordnungen zu hoch.

Leider verfällt der Minimierungsalgorithmus auf dieser Grundlage häufig in folgendes Verhalten: Für einen Zwei-Massen-Fit an ein Zeitscheibendistanzintervall mit linker Grenze t_{min} streben die Werte für m_1 und ω_1 im Laufe der Iteration in Richtung der besten Ein-Massen-Fit-Ergebnisse für eine linke Intervallgrenze von $t'_{min} = t_{min} + 1$. Das Signal dieses Grundzustands ist zwar in der Regel an der Stelle $\Delta t = t_{min}$ kleiner als der Wert der Korrelationsfunktion $C(\Delta t = t_{min})$. Genau diese Differenz D wird aber durch den Beitrag der zweiten Masse in Form von $m_2 \rightarrow \infty$ und $\omega_2 \rightarrow \infty$ ausgeglichen, wobei der Übergang gemäß

$$\begin{aligned} \omega_2 \cdot \left(e^{-m_2 t_{min}} \pm e^{-m_2 (T - t_{min})} \right) &\rightarrow D \quad \text{und} \\ \omega_2 \cdot \left(e^{-m_2 \Delta t} \pm e^{-m_2 (T - \Delta t)} \right) &\rightarrow 0 \quad \text{für } \Delta t > t_{min} \end{aligned}$$

erfolgt. Die Iteration verläuft also singular.

In der Tat konnten im nachhinein auch mit der Parametrisierung (3.9) stabile Zwei-Massen-Fits erreicht werden, indem zu intuitiven Schätzungen für die zwei Massen und Amplituden die korrespondierenden Startwerte für $\tilde{c}_1^2$ und $\tilde{c}_2^2$ abgeleitet wurden.

...zum Auflösungsvermögen

Im Zusammenhang mit den in zwei Fällen angewendeten N-Massen-Fits ist an verschiedener Stelle bereits von dem *Auflösungsvermögen* der Korrelationsfunktionen geschrieben worden. Die Begrifflichkeit soll an dieser Stelle motiviert werden. Im Anschluß daran werden kurz einige numerische Feinheiten vorgestellt, welche die stabilen Ergebnisse des N-Massen-Verfahrens ermöglicht haben.

Die Strategie des N-Massen-Fits war es, zum einen die gesamte Information über die Korrelationsfunktion auszunutzen, also alle Zeitscheibendistanzen in die Fits einzuschließen, und zum anderen die Anzahl der berücksichtigten Terme sukzessive zu erhöhen. Im Gegensatz zum Standardverfahren, bei einer festen Anzahl von Termen t_{min} sukzessive zu erhöhen und so den betrachteten Datenbereich an den Ansatz anzupassen, ist es also die Idee des N-Massen-Fits, den Ansatz sukzessive an die vorliegenden Daten anzupassen. Diese Idee ist nicht neu, sondern es ist gerade die hinter den Ansätzen für Fits mit Zwangsbedingungen stehende Strategie. Neu ist hingegen die Tatsache, daß das Verfahren auch ohne Zwangsbedingungen in zwei Fällen stabil realisiert werden konnte. Diese Tatsache ist vielleicht weniger verwunderlich als es auf den ersten Blick scheint. Das Augenmerk sei dabei zunächst auf die Folge der zu gegebener Korrelationsfunktion $C(\Delta t)$ mit dem N-Massen-Verfahren sukzessive erreichten Werte von χ^2

$$(a_n)_{n \in \mathbb{N}_1} := \text{Min}(\chi^2(C(\Delta t); m_1, \dots, m_n, \omega_1, \dots, \omega_n)) \quad (3.15)$$

gelenkt. Die Folge (a_n) ist durch null nach unten beschränkt und monoton fallend (ein Fit mit p Termen schließt einen Fit mit $p-1$ Termen als Spezialfall ein, wenn eine Amplitude auf null gesetzt wird), also konvergent. Ihr Grenzwert

$$A := \lim_{n \rightarrow \infty} (a_n) \quad (3.16)$$

wird aber im allgemeinen von null verschiedenen sein, weil die zu fittende Korrelationsfunktion nicht vollständig mit dem theoretischen Verlauf kompatibel ist. Die spannendere Frage ist, ob A nur approximativ erreicht wird, oder ob es einen kleinsten Wert $r \in \mathbf{N}_1$ gibt, so daß bei einem Fit mit r Termen für χ^2 bereits ein Wert von A erzielt wird. Schließt man den approximativen Fall in intuitiver Schreibweise ein, läßt sich vermöge

$$R := \text{Min} \{ r \in \mathbf{N}_1 \cup \infty \mid \chi^2(C(\Delta t); m_1, \dots, m_n, \omega_1, \dots, \omega_n) = A \} \quad (3.17)$$

ein *Auflösungsvermögen* R der Korrelationsfunktion $C(\Delta t)$ (wohl)definieren. Dieses wird zwar im allgemeinen Fall nicht zu bestimmen sein (außer, es gelingt χ^2 auf null zu drücken), angesichts der Tatsache, daß es sich hier allerdings um Fits an nur eine geringe Anzahl von Datenpunkten handelt, darf man vielleicht auf ein Verhalten der Form

$$a_k = a_{k+1} = a_{k+2} \quad (3.18)$$

hoffen. Daß also ab einer Anzahl von k Termen eine Stagnation von χ^2 eintritt, welche durch Fits mit z.B. $k+1$ und $k+2$ (oder noch mehr) Termen bis hin zu einer bestimmten Anzahl Terme bewiesen werden kann. Genau dieses ist dem Autor im Falle des $a - \eta'$ Mesons sowie der $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ -Komponente des Gluino-Gluon geglückt - in beiden Fällen in der Form

$$a_4 = a_5 = a_6, \quad (3.19)$$

was aus Stetigkeitsüberlegungen die Vermutung $R = 4$ für beide Fälle motiviert. Nun war es aber die oben erklärte Absicht, unseren Ansatz sukzessive an die Daten anzupassen. In diesem Sinne waren es also die Daten selber, die in beiden Fällen die Aussage geliefert haben, daß vier Terme zur ihrer Beschreibung ausreichen.

Dieses heißt natürlich nicht, daß die Fitergebnisse in jedem Fall belastbare Schätzungen darstellen müssen. Der systematische Fehler liegt gerade in dem beschränkten Auflösungsvermögen: Im Rahmen der Auswertung waren aus diesem Grunde die Ergebnisse für den höchsten Term von vornherein vernachlässigt worden - diese resultieren mit Sicherheit aus einer Mischung der Signale vieler weiterer, nicht mehr aufgelöster Terme. Zur Plausibilisierung, inwieweit dies auch für die niedrigeren Terme galt (oder eben gerade nicht) waren weiter die Sprünge der

kalkulierten Werte zwischen Fits mit $R - 1$ und R Termen betrachtet worden. Ferner wurde jeweils ein Vergleich mit den Ergebnissen eines Zwei-Massen-Fits bei Variation von t_{min} zu Rate gezogen. Die Aussage, daß bei einer größeren Auflösung die gefitteten Massen alle tendenziell sinken würden, ist im allgemeinen natürlich falsch - dennoch ist dies sicherlich *typischerweise* der Fall und es wurde für das Meson $a - \eta'$ und das Gluino-Gluon im Verlauf des N-Massen-Fits, bei Berücksichtigung einer sukzessive erhöhten Anzahl von Termen, auch so beobachtet.

Einer Plausibilitätsprüfung bedürfen weiter die kalkulierten Fehlerbereiche der gefitteten Werte. Auch für die Schätzung dieser liegt der systematische Fehler gerade im beschränkten Auflösungsvermögen. Plausibilitätsargumente für oder gegen ein Vertrauen in die kalkulierten Werte sind für diesen Fall leider schwerer fassbar, der Autor hat sich im Falle des Mesons $a - \eta'$ auf seine Intuition verlassen: die ermittelten Fehlerbereich erscheinen zu klein. Aus diesem Grunde hätte man die Fitergebnisse für die Massen und Amplituden selbst sicherlich nicht verwerfen müssen - ein Ausweis ohne Fehlerbereich wäre aber wertlos gewesen.

In jedem Fall liefert das N-Massen-Fit-Verfahren einen sehr tiefen Einblick in die Eigenschaften der Korrelationsfunktion.

An dieser Stelle sollen jetzt noch einige numerische Aspekte behandelt werden, die für stabile Fit-Ergebnisse unabdingbar sind. Es empfiehlt sich eine zielorientierte Betrachtung. Um ein beschränktes Auflösungsvermögen vermuten zu können, war in (3.19) der Nachweis einer χ^2 -Stagnation vorgeschlagen worden. Dies kann nur gelingen, wenn der Minimierungsalgorithmus auch beim Vorhandensein redundanten Parameter stabil arbeitet, weil ja schon weniger Massenterme zum Erreichen des Minimums im χ^2 ausreichen als bereitgestellt werden⁵. Dem Algorithmus bleiben zum Vernachlässigen eines einzelnen Terms $\{m_j, \omega_j\}$ nur 2 bzw. 3 Möglichkeiten:

- Eine Amplitude von null ($\omega_j = 0$)
- Eine Signalaufspaltung: $m_j = m_k$, wobei dann die Summe $\omega_j + \omega_k$ gerade dem besten Fitergebnis für die Amplitude der Masse m_k entspricht.
- Im Fall, daß die linke Grenze des betrachteten Zeitscheibendistanzintervalls ungleich null ist (für die $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ -Komponente des Gluino-Gluon lag sie bei $\Delta t = 1$), ist noch die Approximation $m_j \rightarrow \infty$ möglich.

In der Praxis ist vor allem der zweite Fall zu beobachten, für die $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ -Komponente des Gluino-Gluon auch der dritte. Für die Minimierungsprozedur ergeben sich daraus folgende Schwachpunkte:

⁵Die Möglichkeit mehrblättriger Lösungen zum Erreichen des Minimums, also etwa durch einen 4-Term-Fit und gleichzeitig durch einen echten 5-Term-Fit mit anderen Massen, kann intuitiv vernachlässigt werden, solange die Anzahl freier Parameter kleiner als die Anzahl der Datenpunkte bleibt. Insbesondere konnte in den hier untersuchten Korrelatoren ein solcher Fall nicht beobachtet werden

- Bei einer Signalaufspaltung bricht der iterative Algorithmus häufig schon zu früh (d.h. bei einer nicht hinreichend guten Approximation $m_j \approx m_k$) ab, weil die Verbesserungen im χ^2 sehr klein werden. Für den Wert der Masse entstehen so Fluktuationen. Dies gilt insbesondere auch den Bereich des Jackknife-Fehlerkalkulation, wo dieser Effekt für jedes Sample auftreten kann. Die resultierende Fehlerschätzung wird dadurch aufgefüchert. Schlimmer noch ist der Fall einer Signalaufspaltung auf die Fehlerkalkulation der Amplituden: Weil das genaue Aufspaltungsverhältnis in der Summe $\omega_j + \omega_k$ nicht definiert ist, resultieren für unterschiedliche Jackknife-Sample auch unterschiedliche Summanden.
- Es ist im allgemeinen äußerst nichttrivial in der Jackknife-Fehlerrechnung die zueinander korrespondierenden Werte zu matchen, weil einzelne Massen doppelt vorkommen können. Vor allem liefert der Fit aber im allgemeinen auch unsortierte Massen - auch dann wenn die Startwerte aufsteigend sortiert waren (in den Variablen).

In der Praxis zum Glück relativ leichte Kniffe ausgereicht, um diese Schwachpunkte zu umgehen:

- Die (einstellbare) Genauigkeit zur Identifikation eines Minimums wurde nur leicht über die Rechnergenauigkeit gestellt, so daß im Falle einer Signalaufspaltung die Approximation $m_j \approx m_k$ hinreichend genau erfüllt wurde.
- Im Rahmen der Jackknife-Fehlerrechnung wurden für jedes Sample die Terme $\{m_i, \omega_i\}$ nach aufsteigenden Massen sortiert.

Diese kleinen Anpassungen reichen aus, weil in der Regel die auftretenden Effekte für alle Jackknife-Sample gleich sind, also zum Beispiel für alle Sample das Signal der Grundzustandsmasse aufgespalten wird. Zumindest konnten immer Startwerte gefunden werden, für die dies der Fall war⁶.

⁶Ungelöst bleibt offensichtlich das Problem der Fehlerschätzung für die Amplituden im Falle einer Signalaufspaltung. Der Effekt ist aber sehr leicht zu identifizieren.

3.3 Fits mit Zwangsbedingungen

Die weitere Auswertung wendet sich der methodischen Analyse von *constrained* Fit-Verfahren. Wie bereits mehrfach beschrieben, zielen die Zwangsbedingungen

$$\lambda_i \approx \tilde{\lambda}_i \pm \tilde{\sigma}_i, \quad (3.20)$$

welche den Minimierungsansatz der Maximum Likelihood Methode um einen Zusatzterm χ_{prior}^2 ergänzen,

$$\chi^2 \rightarrow \chi_{aug}^2 = \chi^2 + \chi_{prior}^2 \quad ; \quad \chi_{prior}^2 = \sum_i \frac{(\lambda_i - \tilde{\lambda}_i)^2}{\tilde{\sigma}_i^2}, \quad (3.21)$$

auf eine Stabilisierung von Fits mit vielen Termen.

Dem Konzept der SEB Methode folgend, werden wir eine Teilmenge der Daten $\tilde{C}(\Delta t)$ nutzen, um iterativ "Prior" Informationen $\lambda_i = \tilde{\lambda}_i \pm \tilde{\sigma}_i$ zur weiteren Auswertung der gleichen Daten zu verwenden, was den Bayes'en Ansatz explizit verletzt. Die finale Anzahl der betrachteten Massenterme ist dabei nicht fest vorgegeben, sondern es ist gerade das Ziel des Ansatzes, die Daten selbst über die Anzahl der zu ihrer Beschreibung hinreichenden Terme entscheiden zu lassen. Mit anderen Worten: Ziel ist ein stabiler N-Massen-Fit, was einen Vergleich mit den bereits ausführlich diskutierten Ergebnisse natürlich besonders reizvoll erscheinen läßt.

Zur Motivation von *constrained* Fits soll zunächst eine Imitation des Subtraktionsverfahrens aus [4] mit der Hilfe von Zwangsbedingungen vorgestellt werden. Das pseudo-skalare Meson $a - \eta'$ wird dabei als Fallstudie dienen.

3.3.1 Imitation des Subtraktionsverfahrens

In allen Variationen von *constrained* Fits dienen die Zwangsbedingungen in χ_{prior} einem "Geleiten" des Fits: Der Algorithmus favorisiert Werte nahe der zentralen Schätzung $\tilde{\lambda}_i$; der Fehler $\tilde{\sigma}_i$ bestimmt die Stärke dieser Abhängigkeit. Ein Standardfit ohne Zwangsbedingungen kann als Extremfall infinitesimal breiter Priors ($\tilde{\sigma}_i \rightarrow \infty$) gesehen werden. Der andere Extremfall infinitesimal schmaler Priors ($\tilde{\sigma}_i \rightarrow 0$) zwingt die entsprechenden Parameter, exakt die zentralen Werte $\tilde{\lambda}_i$ anzunehmen

Wir werden diese beiden Extremfälle am Beispiel des Mesons $a - \eta'$ näher untersuchen. Das Scheitern des Subtraktionsverfahrens wurde bereits ausführlich diskutiert, wie im Falle des zur Illustration gezeigten Höhenliniendiagramms soll auch hier $t_{min} = 6$ gesetzt werden. Betrachtet

wird ein Zwei-Massen-Fit, wobei jeweils einer der beiden Zustände mit Zwangsbedingungen belegt wird:

$$C(\Delta t) = \sum_{i=1}^2 \omega_i \cdot \left(e^{-m_i \Delta t} + e^{-m_i(T-\Delta t)} \right) \quad \text{und} \quad (3.22)$$

$$\chi_{aug}^2 = \chi^2 + \frac{(m_j - \tilde{m}_j)^2}{\tilde{\sigma}_{m_j}} + \frac{(\omega_j - \tilde{\omega}_j)^2}{\tilde{\sigma}_{\omega_j}} \quad ; \quad j \in \{1, 2\}. \quad (3.23)$$

Entsprechend der Setzung

$$\tilde{\sigma}_{m_j} \equiv \tilde{\sigma}_{m_j}(\lambda) = 10^{-\lambda} \tilde{m}_j \quad \text{und} \quad \tilde{\sigma}_{\omega_j} \equiv \tilde{\sigma}_{\omega_j}(\lambda) = 10^{-\lambda} \tilde{\omega}_j \quad (3.24)$$

wird die Stärke der Zwangsbedingungen über einen freien Parameter λ variiert. Die Ergebnisse (in Gittereinheiten) des Subtraktionsverfahrens aus [4]:

$$m_1^{(SM)} \approx 0,282 \quad , \quad \omega_1^{(SM)} \approx 0,57 \quad (3.25)$$

$$m_2^{(SM)} \approx 0,640 \quad , \quad \omega_2^{(SM)} \approx 9,81, \quad (3.26)$$

werden als zentrale Werte für die Priors gewählt:

$$\tilde{m}_j := m_j^{(SM)}, \quad \tilde{\omega}_j := \omega_j^{(SM)}; \quad j \in \{1, 2\}. \quad (3.27)$$

Die Abbildung 3.19 zeigt die Ergebnisse für das Belegen von $\{m_2, \omega_2\}$ resp. $\{m_1, \omega_1\}$ mit Zwangsbedingungen.

Werte von $\lambda > 2$, also präzise Priors, zwingen die assoziierten Parameter exakt auf die zentralen Werte $\tilde{m}_j$ und $\tilde{\omega}_j$. Im Rahmen der Minimierungsprozedur verbleiben effektiv nur zwei freie Parameter, die χ_{aug}^2 unter den Nebenbedingungen $m_j = \tilde{m}_j$ und $\omega_j = \tilde{\omega}_j$ minimieren. Dies ist offensichtlich äquivalent zum Vorgehen, das Signal der Masse m_j vom Korrelator abzuziehen und das Restsignal einem Ein-Massen-Fit zu unterziehen, also gerade einem Schritt des iterativen Subtraktionsverfahrens. Die Ergebnisse können in der Tat von $\lambda \approx 2$ an reproduziert werden. Das Fixpunktverhalten läßt sich aus der Abbildung 3.19 sehr gut ablesen. Werden die Werte aus (3.25) als Priors gesetzt, strebt der von Zwangsbedingungen freigestellte Term auf (3.26) und andersherum. Ferner läßt sich auch der durch das Subtraktionsverfahren massiv unterschätzte statistische Fehler erkennen.

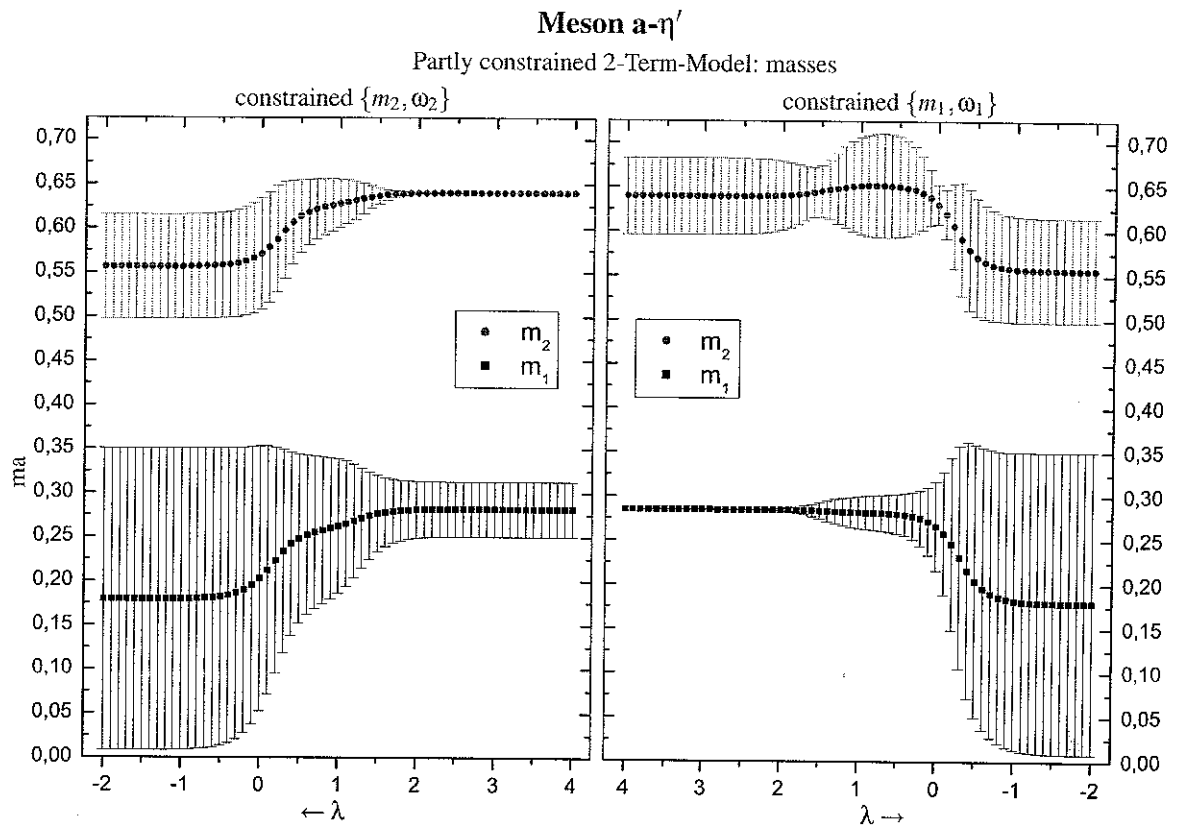


Abbildung 3.19: Zwei-Massen-Fit an die $a\text{-}\eta'$ Korrelationsfunktion (eine Zwangsbedingung).

3.3.2 Die SEB Methode

Die im folgenden beschriebene Anwendung der SEB Methode soll zunächst einmal einer genaueren Darstellung des iterativen Prozesses dienen. Speziellere Fragen werden im Anschluß auf dieser Grundlage erfolgen. Die hier vorgestellte Vorgehensweise entspricht dabei der in [8] *Not too Soon* bezeichneten Variante.

Anwendung des Verfahrens

Betrachtet werden soll hier nur die $C_{\gamma_0}(\Delta t)$ -Komponente der Gluino Glue Korrelationsfunktion. Für diese liegen aus dem vorangegangenen Kapitel vollständige Vergleichsergebnisse auf Basis eines Ein-, Zwei- bzw. N-Massen-Fits vor.

Den **Beginn** des iterativen SEB Verfahrens macht in jedem Fall ein einfacher Ein-Massen-Fit. Die linke Intervallgrenze des zugrundegelegten Zeitscheibenintervalls $[t_1, \frac{T}{2}]$ sollte dabei einerseits möglichst klein gewählt werden, andererseits aber noch groß genug, daß der Ansatz gerechtfertigt wird. Zur Beurteilung bietet sich natürlich ein Blick auf den bereits dargestellten Ein-Massen-Fit in Abbildung 3.3 an: für einen Wert von $t_{min} = 9$ an bestätigt der Verlauf im Rahmen der Fehler in etwa eine Plateaubildung. Für den Wert $t_1 = 9$ ergibt sich auf Basis des Ein-Massen-Fits:

$$m_1^{(1)} = 0,443 \pm 0,017 (JK : \pm 0,022) \quad \omega_1^{(1)} = 0,70 \pm 0,12 (JK : \pm 0,16) \quad (3.28)$$

Die angegebenen Fehlerschätzungen sind dabei auf Grundlage der Fitting-Fehler-Approximation aus (2.31) berechnet worden, diese Fehler werden im folgenden auch mit $\sigma_{m_1^{(1)}}$ bzw. $\sigma_{\omega_1^{(1)}}$ abgekürzt. Für einen Vergleich wurden oben zusätzlich noch die entsprechenden Jackknife-Fehler angegeben (diese waren zum Beispiel auch bei dem Standard Ein-Massen-Fit aus Abbildung 3.3 zugrundegelegt): Die Jackknife-Fehler sind konservativer, aber zumindest von einer vergleichbaren Größenordnung.

Im **zweiten Schritt** des SEB Prozesses wird die Anzahl der berücksichtigten Massenterme auf zwei erhöht und das betrachtete Zeitscheibendistanzintervall nach links ausgedehnt (dieses sei mit $[t_2, \frac{T}{2}]$ bezeichnet, wobei $t_2 < t_1$). Gleichzeitig dienen die zuvor gewonnenen Fit-Ergebnisse des ersten Schrittes (3.28) als Zwangsbedingungen für einen der beiden Terme. Insgesamt lautet der Ansatz also:

$$C(\Delta t) = \sum_{i=1}^2 \omega_i \cdot \left(e^{-m_i \Delta t} + e^{-m_i (T - \Delta t)} \right)$$

$$\chi_{aug}^2 = \chi^2 + \frac{(m_1 - m_1^{(1)})^2}{\sigma_{m_1^{(1)}}^2} + \frac{(\omega_1 - \omega_1^{(1)})^2}{\sigma_{\omega_1^{(1)}}^2}. \quad (3.29)$$

Es sei noch einmal betont, daß $\sigma_{m_1^{(1)}}$ und $\sigma_{\omega_1^{(1)}}$ die zuvor berechneten *Fit-Fehler* wie in (2.31) definiert bezeichnen. Diese Wahl ist eine wesentliche Eigenschaft der SEB Methode, sie wird weiter unten diskutiert werden.

Wie im vorangegangenen Schritt zielt das Verfahren darauf, einen möglichst großes Intervall $[t_2, \frac{T}{2}]$ auszumachen, ohne dabei allerdings einen durch höhere Moden signifikant beeinflussten Bereich einzuschließen. Um einen geeigneten Wert von t_2 zu identifizieren, werden nacheinander Fits für $t_2 = (t_1 - 1), (t_1 - 2), \dots$ getestet. Beobachtet wird dabei der Verlauf der erzielten χ^2 -Werte pro Anzahl der jeweiligen Datenpunkte $d := \frac{T}{2} - t_2$. Kommt es im Verlauf der erzielten Werte von χ^2/d zu einem Sprung, etwa bei $\tilde{t}_2$, so wird dies als ein Scheitern des Ansatzes mit nur zwei Termen gewertet. Entsprechend wird zur Fortsetzung des Prozesses $t_2 = \tilde{t}_2 + 1$ gewählt.

Entsprechende Testläufe führen im vorliegenden Fall zu einer Wahl von $t_2 = 5$. Die Ergebnisse des Fits lauten:

$$\begin{aligned} m_1^{(2)} &= 0.437 \pm 0.013 & \omega_1^{(2)} &= 0.63 \pm 0.10 \\ m_2^{(2)} &= 0.971 \pm 0.076 & \omega_2^{(2)} &= 9.19 \pm 2.66, \end{aligned} \quad (3.30)$$

wobei wieder *Fit-Fehler* angegeben sind. Die Werte unterscheiden sich signifikant von den Ergebnissen des Zwei-Massen-Fit *ohne* Zwangsbedingungen für $t_{min} = 5$ (vgl. Abbildung 3.4): beide Massen und beide Amplituden sind bei letzterem niedriger, die Fehlerbereiche überschneiden sich nicht.

Der **dritte Schritt** entspricht der naheliegenden, iterativen Fortzung: Berücksichtigt werden die Terme von drei Massen; das Zeitscheibenintervall wird weiter nach links zu $[t_3, \frac{T}{2}]$ mit $t_3 < t_2$ ausdehnt. Die Ergebnisse aus dem vorangegangenen Schritt (3.30) dienen als Zwangsbedingungen, der Ansatz lautet

$$\begin{aligned} C(\Delta t) &= \sum_{i=1}^3 \omega_i \cdot (e^{-m_i \Delta t} + e^{-m_i (T - \Delta t)}) \\ \chi_{aug}^2 &= \chi^2 + \sum_{i=1}^2 \left(\frac{(m_i - m_i^{(2)})^2}{\sigma_{m_i^{(2)}}^2} + \frac{(\omega_i - \omega_i^{(2)})^2}{\sigma_{\omega_i^{(2)}}^2} \right). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Dies bedeutet insbesondere, daß die Zwangsbedingungen für den Grundzustand gegenüber dem

vorangegangenen Schritt *aktualisiert* werden. Weil bis hin zum linken Rand $t_3 = 1$ kein spürbarer Anstieg von χ^2/d zu beobachten ist, endet das iterative Verfahren in diesem Fall mit dem dritten Schritt, für den der gesamte Datenbereich ausgewertet wird. Die Ergebnisse lauten:

$$\begin{aligned} m_1^{(3)} &= 0.427 \pm 0.012 & \omega_1^{(3)} &= 0.53 \pm 0.08 \\ m_2^{(3)} &= 0.891 \pm 0.023 & \omega_2^{(3)} &= 7.03 \pm 0.42 \\ m_3^{(3)} &= 2.329 \pm 0.239 & \omega_3^{(3)} &= 9.35 \pm 0.97, \end{aligned} \quad (3.32)$$

diese stellen aber noch nicht die finalen Schätzungen dar: so dienen die in (3.32) angegebenen *Fit-Fehler* dienen lediglich Vergleichszwecken - sie stellen nicht die finale Fehlerschätzung für den letzten Schritt der Iteration dar!

Vielmehr beruht die endgültige Fehlerschätzung auf einem Jackknife-Verfahren für den **Gesamtprozeß**. Dafür werden die oben beschriebenen Schritte für jedes Jackknife-Sample durchlaufen - der sich daraus berechnende Jackknife-Fehler wird als Fehlerschätzung für die Ergebnisse aus (3.32) verwendet. Im vorliegenden Fall resultiert daraus folgende Schätzung:

$$\begin{aligned} m_1^{(3)} &= 0.427 \pm 0.022(JK) & \omega_1^{(3)} &= 0.53 \pm 0.13(JK) \\ m_2^{(3)} &= 0.891 \pm 0.030(JK) & \omega_2^{(3)} &= 7.03 \pm 0.55(JK) \\ m_3^{(3)} &= 2.329 \pm 0.316(JK) & \omega_3^{(3)} &= 9.35 \pm 1.41(JK), \end{aligned} \quad (3.33)$$

Zur Berechnung der Fit-Fehler

Für die Berechnung der Fit-Fehler (diese werden nur in den inneren Schleifen des Verfahrens benötigt), werden die Zwangsbedingungen quasi als Meßwerte für die Fitparameter behandelt: Es stehen dann also zur Ableitung von (2.31) nicht nur Korrelationsfunktionen für $\frac{T}{2} - t_i + 1$ verschiedene Zeitscheiben zur Verfügung, sondern diese werden entsprechend um $2 \cdot c$ Meßwerte ergänzt, wenn c die Anzahl der Terme mit Zwangsbedingungen bezeichnet (der Faktor 2 resultiert daher, daß jeweils sowohl für die Masse als auch die Amplitude Zwangsbedingungen vorliegen). Die Motivation liefert eine Grenzfallbetrachtung: wenn die Unsicherheit der Korrelationsfunktion im Vergleich zur Breite der Zwangsbedingungen $\tilde{\sigma}_i$ sehr groß sind, entsprechen die Fit-Fehler für die jeweiligen Parameter gerade den Werten $\tilde{\sigma}_i$. Eine Jackknife-Kalkulation würde hingegen einen Fehler von 0 liefern - es sei denn, es wird die Ableitung der Zwangsbedingungen im Rahmen des Gesamtprozesses in die Kalkulation mit eingezogen. An den inneren Schleifen wäre nach diesem Verfahren natürlich auch eine stabile Jackknife-Schätzung möglich - diese würde aber bei jedem Schritt eine Verschachtelung der Sample erfordern.

3.4 Zusammenfassung

An dieser Stelle bleiben zunächst einige Verbesserungen technischer Natur festzuhalten, von denen zukünftige Auswertungen profitieren sollten. Zu nennen ist vor allem die in dieser Arbeit durchgängig genutzte Parametrisierung der Fitfunktion durch die Wurzeln der Massen und Amplituden. Wie gezeigt wurde, hatte allein diese Wahl die Ableitung von reichhaltigen Ergebnissen ermöglicht, zu denen der Weg zuvor verschlossen war.

Ferner ist bei der Implementierung des (Jackknife-)Block-Bildens ein systematischer Fehler behoben worden.

Vom methodischen Standpunkt aus hat vor allem die Diskussion des N-Fit-Verfahrens einen äußerst tiefen Einblick in die Eigenschaften der Korrelationsfunktionen ermöglicht. Die abgeleiteten Ergebnisse bedürfen sicherlich in jedem Fall einer Plausibilitätsprüfung, dieses gilt aber in gleichem Maß für jeden anderen Fit auch. Der Autor hält den in diesem Zusammenhang eingeführten Begriff des Auflösungsvermögens für äußerst nützlich.

In ausführlicher Weise ist das Scheitern des Subtraktionsverfahrens diskutiert worden: Durch die Vernachlässigung der Kopplung zwei Termen wird der statistische Fehler durchgängig unterschätzt. Auch hat das Verfahren in einem Fall das Minimum χ_D^2 verfehlt.

Gluino Glue, $\text{Tr}[C_{\text{gg}}\mathbf{1}]$
 $\rho_{\Delta r_1, \Delta r_2}$ (block size 90)

	Δr_1																
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
0	1,00	0,90	0,78	0,54	0,53	0,45	0,40	0,23	-0,13	-0,15	-0,27	-0,30	-0,42	-0,40	-0,35	-0,47	0,22
1	0,90	1,00	0,93	0,76	0,65	0,60	0,53	0,24	-0,07	-0,10	-0,22	-0,29	-0,43	-0,44	-0,33	-0,41	0,13
2	0,78	0,93	1,00	0,87	0,75	0,72	0,63	0,40	0,16	0,14	-0,02	-0,07	-0,24	-0,30	-0,21	-0,26	0,01
3	0,54	0,76	0,87	1,00	0,87	0,80	0,60	0,28	0,22	0,23	0,10	0,07	-0,01	-0,07	0,01	-0,02	-0,17
4	0,53	0,65	0,75	0,87	1,00	0,85	0,61	0,28	0,19	0,22	0,12	0,11	-0,03	-0,13	-0,14	-0,12	-0,07
5	0,45	0,60	0,72	0,80	0,85	1,00	0,78	0,40	0,21	0,21	0,11	0,16	0,00	-0,11	-0,18	-0,20	-0,20
6	0,40	0,53	0,63	0,60	0,61	0,78	1,00	0,66	0,43	0,38	0,29	0,15	0,01	-0,09	-0,19	-0,11	-0,17
7	0,23	0,24	0,40	0,28	0,28	0,40	0,66	1,00	0,74	0,65	0,32	0,29	0,24	0,18	0,03	-0,00	-0,20
8	-0,13	-0,07	0,16	0,22	0,19	0,21	0,43	0,74	1,00	0,85	0,55	0,52	0,52	0,45	0,33	0,39	-0,26
9	-0,15	-0,10	0,14	0,23	0,22	0,21	0,38	0,65	0,85	1,00	0,76	0,70	0,54	0,51	0,40	0,46	-0,15
10	-0,27	-0,22	-0,02	0,10	0,12	0,11	0,29	0,32	0,55	0,76	1,00	0,81	0,51	0,47	0,28	0,38	-0,14
11	-0,30	-0,29	-0,07	0,07	0,11	0,16	0,15	0,29	0,52	0,70	0,81	1,00	0,70	0,61	0,35	0,35	-0,21
12	-0,42	-0,43	-0,24	-0,01	-0,03	0,00	0,01	0,24	0,52	0,54	0,51	0,70	1,00	0,86	0,69	0,59	-0,33
13	-0,40	-0,44	-0,30	-0,07	-0,13	-0,11	-0,09	0,18	0,45	0,51	0,47	0,61	0,86	1,00	0,78	0,62	-0,21
14	-0,35	-0,33	-0,21	0,01	-0,14	-0,18	-0,19	0,03	0,33	0,40	0,28	0,35	0,69	0,78	1,00	0,82	-0,07
15	-0,47	-0,41	-0,26	-0,02	-0,12	-0,20	-0,11	-0,00	0,39	0,46	0,38	0,35	0,59	0,62	0,82	1,00	-0,15
16	0,22	0,13	0,01	-0,17	-0,07	-0,20	-0,17	-0,20	-0,26	-0,15	-0,14	-0,21	-0,33	-0,21	-0,07	-0,15	1,00

Tabelle A.2: Korrelationskoeffizienten $\rho(C(\Delta r_1), C(\Delta r_2))$ für die C_1 Gluino Glue Korrelationsfunktion.

A.2 Adjungierte Mesonen

Meson $a-\eta'$
 $\rho_{\Delta_1, \Delta_2}$ (block size 1)

Δ_2	Δ_1																
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
0	1,00	0,53	0,46	0,39	0,34	0,31	0,28	0,24	0,20	0,16	0,12	0,08	0,05	0,03	0,00	-0,02	-0,03
1	0,53	1,00	0,92	0,84	0,77	0,70	0,61	0,49	0,37	0,24	0,13	0,08	0,06	0,05	0,04	0,04	0,03
2	0,46	0,92	1,00	0,95	0,88	0,80	0,71	0,58	0,43	0,28	0,16	0,07	0,04	0,02	0,01	0,01	0,00
3	0,39	0,84	0,95	1,00	0,97	0,91	0,82	0,69	0,53	0,36	0,21	0,10	0,06	0,03	0,02	0,00	-0,00
4	0,34	0,77	0,88	0,97	1,00	0,98	0,91	0,79	0,63	0,44	0,27	0,14	0,08	0,04	0,02	-0,00	-0,01
5	0,31	0,70	0,80	0,91	0,98	1,00	0,97	0,87	0,72	0,52	0,34	0,19	0,11	0,06	0,03	0,00	-0,01
6	0,28	0,61	0,71	0,82	0,91	0,97	1,00	0,96	0,84	0,66	0,46	0,29	0,19	0,11	0,06	0,02	0,01
7	0,24	0,49	0,58	0,69	0,79	0,87	0,96	1,00	0,95	0,81	0,63	0,45	0,31	0,21	0,13	0,09	0,06
8	0,20	0,37	0,43	0,53	0,63	0,72	0,84	0,95	1,00	0,94	0,81	0,64	0,49	0,36	0,27	0,20	0,17
9	0,16	0,24	0,28	0,36	0,44	0,52	0,66	0,81	0,94	1,00	0,95	0,83	0,69	0,56	0,45	0,37	0,34
10	0,12	0,13	0,16	0,21	0,27	0,34	0,46	0,63	0,81	0,95	1,00	0,95	0,85	0,73	0,63	0,56	0,53
11	0,08	0,08	0,07	0,10	0,14	0,19	0,29	0,45	0,64	0,83	0,95	1,00	0,96	0,88	0,79	0,73	0,70
12	0,05	0,06	0,04	0,06	0,08	0,11	0,19	0,31	0,49	0,69	0,85	0,96	1,00	0,97	0,91	0,86	0,84
13	0,03	0,05	0,02	0,03	0,04	0,06	0,11	0,21	0,36	0,56	0,73	0,88	0,97	1,00	0,98	0,95	0,93
14	0,00	0,04	0,01	0,02	0,02	0,03	0,06	0,13	0,27	0,45	0,63	0,79	0,91	0,98	1,00	0,99	0,97
15	-0,02	0,04	0,01	0,00	-0,00	0,00	0,02	0,09	0,20	0,37	0,56	0,73	0,86	0,95	0,99	1,00	0,99
16	-0,03	0,03	0,00	-0,00	-0,01	-0,01	0,01	0,06	0,17	0,34	0,53	0,70	0,84	0,93	0,97	0,99	1,00

Tabelle A.3: Korrelationskoeffizienten $\rho(C(\Delta_1), C(\Delta_2))$ für die $a-\eta'$ Korrelationsfunktion.

Meson $a-f_0$ $\rho_{\Delta t_1, \Delta t_2}$ (block size 1)

Δ_2	Δ_1															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	1,00	0,78	0,51	0,31	0,14	0,04	0,02	0,03	0,04	-0,01	-0,11	-0,16	-0,19	-0,19	-0,17	-0,16
2	0,78	1,00	0,81	0,54	0,27	0,09	0,02	-0,02	-0,06	-0,16	-0,29	-0,34	-0,32	-0,26	-0,21	-0,20
3	0,51	0,81	1,00	0,86	0,55	0,27	0,14	0,03	-0,10	-0,21	-0,33	-0,40	-0,37	-0,31	-0,24	-0,22
4	0,31	0,54	0,86	1,00	0,82	0,55	0,35	0,20	0,01	-0,12	-0,24	-0,33	-0,35	-0,33	-0,29	-0,28
5	0,14	0,27	0,55	0,82	1,00	0,85	0,60	0,39	0,15	0,01	-0,08	-0,17	-0,22	-0,28	-0,27	-0,25
6	0,04	0,09	0,27	0,55	0,85	1,00	0,86	0,62	0,31	0,15	0,07	-0,03	-0,13	-0,23	-0,25	-0,23
7	0,02	0,02	0,14	0,35	0,60	0,86	1,00	0,86	0,52	0,33	0,21	0,02	-0,14	-0,28	-0,31	-0,29
8	0,03	-0,02	0,03	0,20	0,39	0,62	0,86	1,00	0,81	0,60	0,40	0,14	-0,08	-0,24	-0,29	-0,27
9	0,04	-0,06	-0,10	0,01	0,15	0,31	0,52	0,81	1,00	0,89	0,66	0,35	0,07	-0,17	-0,24	-0,23
10	-0,01	-0,16	-0,21	-0,12	0,01	0,15	0,33	0,60	0,89	1,00	0,87	0,57	0,23	-0,07	-0,19	-0,19
11	-0,11	-0,29	-0,33	-0,24	-0,08	0,07	0,21	0,40	0,66	0,87	1,00	0,85	0,51	0,14	-0,05	-0,09
12	-0,16	-0,34	-0,40	-0,33	-0,17	-0,03	0,02	0,14	0,35	0,57	0,85	1,00	0,82	0,46	0,22	0,15
13	-0,19	-0,32	-0,37	-0,35	-0,22	-0,13	-0,14	-0,08	0,07	0,23	0,51	0,82	1,00	0,81	0,58	0,48
14	-0,19	-0,26	-0,31	-0,33	-0,28	-0,23	-0,28	-0,24	-0,17	-0,07	0,14	0,46	0,81	1,00	0,90	0,80
15	-0,17	-0,21	-0,24	-0,29	-0,27	-0,25	-0,31	-0,29	-0,24	-0,19	-0,05	0,22	0,58	0,90	1,00	0,96
16	-0,16	-0,20	-0,22	-0,28	-0,25	-0,23	-0,29	-0,27	-0,23	-0,19	-0,09	0,15	0,48	0,80	0,96	1,00

Tabelle A.4: Korrelationskoeffizienten $\rho(C(\Delta t_1), C(\Delta t_2))$ für die $a - f_0$ Korrelationsfunktion.

Literaturverzeichnis

- [1] G. Veneziano and S. Yankielowicz, Phys. Lett. B **113** (1982) 231.
- [2] G. R. Farrar, G. Gabadadze and M. Schwetz, Phys. Rev. D **58** (1998) 015009 [arXiv:hep-th/9711116].
- [3] I. Monvay und G. Münster, *Quantum Fields On A Lattice*, Cambridge, UK: Univ. Pr., 1994.
- [4] R. Peetz, *Spectrum of $N = 1$ Super Yang Mills Theory on the Lattice with a Light Gluino*, Dissertation, Universität Münster, 2003.
- [5] GNU Scientific Library, <http://www.gnu.org/software/gsl/>
- [6] G. P. Lepage et al., Nul. Phys. Proc. Suppl. **106**, 12, 2002 [arXiv:hep-lat/0110175].
- [7] C. Morningstar, Nul. Phys. Proc. Suppl. **109**, 185, 2002 [arXiv:hep-lat/0112023].
- [8] T. Draper et al., 2004 [arXiv:hep-lat/0405001].
- [9] F.Farchioni, G.Münster und R. Peetz [arXiv:hep-lat/0404004].
- [10] G.A.F. Seber, C.J. Wild, *Nonlinear Regression*, John Wiley and Sons.
- [11] G. P. Lepage *et al.*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **106**, 12 (2002), [arXiv:hep-lat/01100175].
- [12] C. Morningstar, Nucl. Phys. Suppl. **109**, 185 (2002), [arXiv:hep-lat/0112023].
- [13] M. Asakawa, T. Hatsuda and Y. Nakahara, Prog. Part. Nucl. Phys. **46**, 459 (2001) [arXiv:hep-lat/0011040].
- [14] Y. Nakahara, M. Asakawa, and T. Hatsuda, Phys. Rev. **D60**, 091503 (1999) [arXiv:hep-lat/9905034].
- [15] H. R. Fiebig, Phys. Rev. **D65**, 094512 (2002), [arXiv:hep-lat/0204004].

Abbildungsverzeichnis

3.1	Gluino-Glue Korrelationsfunktion C_{γ_0}	24
3.2	Effektive Massen der Gluino-Glue Korrelationsfunktion C_{γ_0}	24
3.3	Ein-Massen-Fit an die Gluino-Glue Korrelationsfunktion C_{γ_0}	25
3.4	Zwei-Massen-Fit an die C_{γ_0} Gluino Glue Korrelationsfunktion	26
3.5	N-Massen-Fit an die C_{γ_0} Gluino Glue Korrelationsfunktion	28
3.6	C_{γ_0} Gluino Glue Korrelationsfunktion	30
3.7	$\text{Tr}[C_{gg}\mathbf{1}]$ correlator	31
3.8	Effektive Massen der C_1 Korrelationsfunktion	31
3.9	Ein-Massen-Fit an die C_1 Gluino Glue Korrelationsfunktion	33
3.10	Zwei-Massen-Fit an die C_1 Gluino Glue Korrelationsfunktion	34
3.11	Effektive Massen der $a-\eta'$ Korrelationsfunktion	35
3.12	Zwei-Massen-Fit an die a'_η Korrelationsfunktion für $\omega_0 \equiv 0$	36
3.13	Höhenlinien von χ^2_D für $t_{min} = 6$	37
3.14	Zwei-Massen-Fit an die a'_η Korrelationsfunktion für $\omega_0 \neq 0$	39
3.15	Vakuum-Erwartungswert für das Meson $a - \eta'$	40
3.16	N-Massen-Fit an die $a - \eta'$ Korrelationsfunktion	41
3.17	Korrelator	42
3.18	$a - f_0$ Korrelationsfunktion	45
3.19	Zwei-Massen-Fit an die $a-\eta'$ Korrelationsfunktion (eine Zwangsbedingung) . .	53

Tabellenverzeichnis

3.1	Geschätze Standardabweichungen der Gluino Glue Korrelationsfunktion	21
A.1	Korrelationskoeffizienten $\rho(C(\Delta t_1), C(\Delta t_2))$ für die C_{γ_0} Gluino Glue Korrelati- onsfunktion	59
A.2	Korrelationskoeffizienten $\rho(C(\Delta t_1), C(\Delta t_2))$ für die C_1 Gluino Glue Korrelati- onsfunktion	60
A.3	Korrelationskoeffizienten $\rho(C(\Delta t_1), C(\Delta t_2))$ für die $a - \eta'$ Korrelationsfunktion	61
A.4	Korrelationskoeffizienten $\rho(C(\Delta t_1), C(\Delta t_2))$ für die $a - f_0$ Korrelationsfunktion	62

