



Goethe-Universität Frankfurt am Main
Fachbereich 13
Institut für theoretische Physik

Bachelorarbeit

Operatoroptimierung mit APE-Smearing und Blocking in $SU(2)$ Yang-Mills-Theorie

von Marco Stilger

August 2020

Erstgutachter und Betreuer: Prof. Dr. Marc Wagner
Zweitgutachter: Prof. Dr. Owe Philipsen

Erklärung nach § 30 (12) Ordnung für den Bachelor- und den Masterstudiengang

Hiermit erkläre ich, dass ich die Arbeit selbstständig und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Quellen und Hilfsmittel verfasst habe. Alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen oder aus anderen fremden Texten entnommen wurden, sind von mir als solche kenntlich gemacht worden. Ferner erkläre ich, dass die Arbeit nicht - auch nicht auszugsweise - für eine andere Prüfung verwendet wurde.

Frankfurt am Main, den

(Marco Stilger)

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Methoden zur Operatoroptimierung - APE-Smearing und Blocking - auf ihre Nützlichkeit bei der numerischen Berechnung des gewöhnlichen statischen Quark-Antiquark-Potentials und der Masse des leichtesten Glueballs 0^{++} in SU(2) Yang-Mills-Theorie getestet. Dafür werden beide Methoden einzeln und in Kombination auf beide Operatoren angewandt und dabei jeweils verschiedene Einstellungen der Parameter untersucht. Für jede Variante werden dabei die besten Einstellungen bestimmt. Alle Berechnungen werden auf einem $24^3 \times 48$ Gitter in reiner Eichtheorie bei $\beta = 2.5$ getätigt.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	3
2.1	Gitter-QCD	3
2.2	Statistische Fehleranalyse	4
2.3	Operatoren	5
2.3.1	Statisches Potential	5
2.3.2	Glueball	6
2.4	Operatoroptimierung	7
2.4.1	APE-Smearing	7
2.4.2	Blocking	8
3	Vergleich APE-Smearing und Blocking	10
4	Ergebnisse	12
4.1	Statisches Potential	12
4.2	Glueball	16
5	Zusammenfassung und Ausblick	21
6	Literatur	22

1 Einleitung

Im Jahr 1954 hatten Chen Ning Yang und Robert Mills die Idee, Eichtheorien auf nicht-abelsche Gruppen zu erweitern, um die starke Wechselwirkung zu erklären. So entwickelten sie die Yang-Mills-Theorie, eine nicht-abelsche-Eichtheorie mit der speziellen unitären Gruppe $SU(N)$ [1]. Grundlage für diese Idee war die bereits vorhandene Quantenelektrodynamik (QED), welche eine abelsche Eichtheorie mit der Gruppe $U(1)$ ist und die elektromagnetische Wechselwirkung beschreibt. Theoretische Überlegungen ergaben, dass Quarks, die Bausteine hadronischer Materie, eine von drei möglichen sogenannten Farbladungen tragen und diese verantwortlich für die starke Wechselwirkung sind, ähnlich wie die elektrische Ladung verantwortlich für die elektromagnetische Wechselwirkung ist. So wurde die starke Wechselwirkung mit der $SU(3)$ Yang-Mills-Theorie beschrieben und fortan Quantenchromodynamik (QCD) genannt. Trotz vieler Analogien unterscheidet sich die QCD vor allem in einem Punkt von der QED. Die Gluonen, welche als Austauschpartikel dienen, sind selbst auch farbgeladen. Dies führt zu Selbstwechselwirkungseffekten zwischen Gluonen, was Berechnungen komplizierter macht.

Die Gitter-QCD bietet nun die Möglichkeit, alle Berechnungen numerisch durchzuführen, indem die 4-dimensionale Raumzeit diskretisiert wird und auf dem entstandenen euklidischen Gitter mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen Eichfeldkonfigurationen erstellt werden [2]. Zur Berechnung bietet sich vor allem die Verwendung von modernen Computern an, welche die Berechnungen schnell durchführen können. Jedoch ist in voller $SU(3)$ -Yang-Mills-Theorie die Laufzeit immer noch so hoch, dass oftmals auf die $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie zurückgegriffen wird. Diese liefert trotz falscher Eichgruppe immer noch akzeptable Ergebnisse und bietet somit ein solides Fundament für erste Berechnungen im Gebiet der Gitter-QCD.

Ein Problem der Gitter-QCD ist der Effekt von Fluktuationen der Eichfelder. Diese Fluktuationen können Signale im statistischen Rauschen unterdrücken. Deshalb braucht es Methoden, um diese zu minimieren und ein besseres Signal-zu-Rauschen-Verhältnis zu erhalten. Diese Methoden werden im allgemeinen Smearing oder Smoothing genannt. Dabei wird jede Link-Variable mit seinen Nachbarn auf verschiedene Weisen verrechnet und überschrieben. Eine gute Smearing-Methode verändert den Operator so, dass der Überlapp zwischen Vakuum und dem zu untersuchenden Zustand verbessert wird. Ziel dieser Arbeit ist es nun, zwei solcher Methoden genauer zu untersuchen und auf ihre Nützlichkeit zu überprüfen. Diese sind das APE-Smearing und das Blocking, welche beide unabhängig voneinander 1987 vorgestellt wurden [3, 4].

Diese werden jeweils einzeln und in Kombination getestet, ob sie eine Verbesserung bei der Berechnung des gewöhnlichen statischen Quark-Antiquark-Potentials oder des leichtesten

Glueballs 0^{++} liefern. Dazu werden die jeweiligen Parameter optimiert und die Ergebnisse verglichen. Dies dient dazu, offene Fragen wie 'Bringt Blocking eine Verbesserung bei der Berechnung des statischen Potentials?' oder 'Was sind optimale Werte der Parameter für APE-Smearing, wenn die Masse des Glueballs berechnet wird?' zu beantworten.

Motiviert ist das Ganze durch eine vorangegangene Masterarbeit an unserem Institut, durch die wir aufmerksam auf das Blocking wurden [5]. Außerdem ist es besonders im Falle der Glueballs notwendig, Methoden dieser Art anzuwenden, um bessere Signale zu erhalten, da die entsprechenden Funktionen sehr stark fluktuieren.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Gitter-QCD

Die Darstellung der theoretischen Grundlagen basiert weitestgehend auf [5–7].

Die QCD ist die Quantenfeldtheorie (QFT), welche die starke Wechselwirkung beschreibt. Sie erklärt also die Interaktion von Quarks und Gluonen. Es ist sinnvoll, die Wirkung der QCD in zwei Teile zu spalten. Der eine Teil enthält die Quarkfelder und deren Wechselwirkung mit den Gluonen, der andere Teil enthält das Eichfeld und Selbstwechselwirkungsterme der Gluonen. Werden Phänomene untersucht, bei denen die Quarkfelder keine Rolle spielen, reicht es, den gluonischen Anteil der Wirkung zu betrachten. In diesem Fall ist die Rede von reiner Eichtheorie.

Um nun numerische Berechnungen vornehmen zu können, wird die Raumzeit in ein hyperkubisches Gitter mit Gitterkonstante a diskretisiert. Der gluonische Anteil, also das Eichfeld $A_\mu(x)$, wird bei der Diskretisierung in die sogenannten *Linkvariablen* oder *Links* umgewandelt. Dabei bleiben die Links Elemente der Eichgruppe $U_\mu(n) \in SU(N)$ und sind über folgenden Zusammenhang mit dem Eichfeld verbunden:

$$U_\mu(n) = \exp(iaA_\mu(n)) \quad (2.1)$$

Diese Links verbinden den Gitterpunkt n und den benachbarten Gitterpunkt in Richtung μ miteinander. Die diskrete Version der Wirkung wird dabei zur *Wilson-Eich-Wirkung*.

$$S_G[U] = \frac{\beta}{N} \sum_{n \in \Gamma} \sum_{\mu < \nu} \text{Re Tr} [1 - U_{\mu\nu}(n)] \quad (2.2)$$

Hierbei wird über alle Gitterpunkte und Orientierungen summiert, wobei $\beta = 2N/g^2$ die inverse Kopplung darstellt. Außerdem ist die sogenannte Plakette $U_{\mu\nu}(n)$ folgendermaßen definiert:

$$U_{\mu\nu}(n) = U_\mu(n) \cdot U_\nu(n + \mu) \cdot U_\mu^\dagger(n + \nu) \cdot U_\nu^\dagger(n) \quad (2.3)$$

Um nun Observablen auf dem Gitter auszurechnen, wird die *Korrelationsfunktion* $C(t)$ mit dem entsprechendem Operator ϕ benötigt, welcher den gewünschten Zustand aus dem Vakuum erschafft. Die Korrelationsfunktion, welche einen Vakuumerwartungswert (VEV) darstellt, wird über viele Konfigurationen ausgerechnet und gemittelt. Diese Konfigurationen werden über eine Monte-Carlo-Simulation erstellt und spiegeln die verschiedenen Pfade wider. In dieser Arbeit wird der sogenannte Heatbath-Algorithmus verwendet [6, 8]. Da nicht unendlich viele Konfigurationen und damit nicht alle möglichen Pfade verwendet

werden können, beinhaltet das Ergebnis immer einen statistischen Fehler.

$$C(t) = \langle \Omega | \phi^\dagger(t) \phi(0) | \Omega \rangle = \frac{1}{N} \sum_n \phi^\dagger(t) \phi(0) \pm \sigma \quad (2.4)$$

Der Zusammenhang zur Observable ergibt sich nun im Grenzwert für große Zeitseparationen t . Außerdem wurde eine 'Energie-1' und der Zeitentwicklungsoperator eingefügt. Daraus ergibt sich folgender Zusammenhang:

$$\begin{aligned} C(t) &= \sum_n \langle \Omega | e^{Ht} \phi(0) e^{-Ht} | n \rangle \langle n | \phi(0) | \Omega \rangle \\ &= \sum_n |\langle n | \phi(0) | \Omega \rangle|^2 e^{-(E_n - E_\Omega)t} \\ &\stackrel{t \rightarrow \infty}{\approx} |\langle 0 | \phi(0) | \Omega \rangle|^2 e^{-(E_0 - E_\Omega)t} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Für große Zeiten liefert nur noch der Grundzustand einen nicht verschwindenden Beitrag und die Summe kollabiert. Die Energiedifferenz zwischen Grundzustand und Vakuum wird berechnet, indem die sogenannte *effektive Masse* definiert wird, welche für große Zeitabstände t eben diesen Wert annimmt.

$$m_{\text{eff}}(t) = \frac{1}{a} \ln \frac{C(t)}{C(t+a)} \quad (2.6)$$

2.2 Statistische Fehleranalyse

In dieser Arbeit wurde der statistische Fehler ausschließlich mit der Jackknife-Methode ermittelt. Diese sei hier kurz basierend auf [6] erläutert.

Bei der Berechnung einer Variable θ , sei $\hat{\theta}$ der Mittelwert aus allen N Konfigurationen. Nun werden N Untermengen bestehend aus $N - 1$ Konfigurationen erstellt, in dem aus den ursprünglichen N Konfigurationen jeweils die n -te ($n = 1, \dots, N$) Konfiguration weggelassen wird. Aus jeder dieser Untermengen wird die Observable berechnet und den aus der n -ten Untermenge kommenden Wert θ_n genannt. Die Varianz ist damit gegeben durch

$$\sigma_{\hat{\theta}}^2 = \frac{N-1}{N} \sum_{n=1}^N (\theta_n - \hat{\theta})^2 \quad (2.7)$$

wobei $\sigma_{\hat{\theta}}$ die Standardabweichung ist. Ergebnisse sind in der vorliegenden Arbeit immer in der Form $\langle \theta \rangle = \hat{\theta} \pm \sigma_{\hat{\theta}}$ angegeben.

2.3 Operatoren

Welche Observable berechnet wird, wird durch den Operator entschieden. Im Folgenden werden die Operatoren des gewöhnlichen statischen Potentials und des einfachsten Glueballs erläutert.

2.3.1 Statisches Potential

Das statische Quark-Antiquark-Potential wird von einem statischen Quark und einem statischen Antiquark mit Abstand R hervorgerufen. Statisch bedeutet, dass angenommen wird, dass die Quarks weder bewegt noch erzeugt bzw. vernichtet werden können. Dies ist der Fall für unendlich schwere Quarks. Die schwersten Quarks, die Top- und Bottom-Quarks, erfüllen diese Bedingung in der Realität annähernd gut [7].

Da in der Natur noch nie einzelne Quarks beobachtet wurden, ist die Rede in der QCD vom *Confinement*, welches besagt, dass farbgeladene Teilchen nur in gebundenen Zuständen auftreten können, die nach Außen hin farbneutral erscheinen. Deshalb ist es wichtig, das statische Potential zu berechnen, um zu verstehen, warum dies der Fall ist. Vorangegangene Berechnungen zeigen, dass ein funktionaler Zusammenhang der Form

$$V(R) = A + \frac{B}{R} + \sigma R \quad (2.8)$$

zwischen Potential und Abstand der Quarks existiert. Der lineare Anteil sorgt dafür, dass die Energie immer größer wird, je weiter die Quarks auseinander gebracht werden. Experimente haben gezeigt, dass ein weiteres Quark-Antiquark-Paar entsteht, sobald die Energie groß genug ist [6, 7].

Die Berechnung auf dem Gitter erfolgt nun in reiner Eichtheorie, da die Energie ausschließlich im Gluonfeld steckt und die Quarks als statisch angenommen werden können. Den Operator, den es schließlich zu berechnen gilt, ist der *Wilson-Loop*. Ein Wilson-Loop ist eine durch Multiplikation verbundene Hintereinanderreihung von Links, die in einer geschlossenen Schleife im Gitter liegen. In dieser Arbeit wurde ausschließlich mit flachen Wilson-Loops gearbeitet, die aus vier geraden Linien bestehen, wobei zwei davon in zeitlicher Richtung und die anderen zwei in der gleichen räumlichen Richtung liegen, sodass die Schleife ein ebenes Rechteck bildet. In der Praxis werden Wilson-Loops mit verschiedenen räumlichen und zeitlichen Ausdehnung R bzw. T betrachtet. Dabei entspricht die räumliche Ausdehnung der Wilson-Loops dem Abstand der beiden Quarks.

Der gemittelte Wilson-Loop $\langle W(T, R) \rangle$ verhält sich für feste R wie eine Korrelationsfunktion. Das heißt für jede räumliche Ausdehnung bzw. für jeden Abstand der Quarks, lässt sich ein Wert für das Potential berechnen (vgl. Formel (2.6)). Im Rahmen des statischen

Potentials ist allerdings nicht von einer effektiven Masse die Rede, sondern von einem *effektiven Potential*.

$$V_{\text{eff}}(R, T) = \frac{1}{a} \ln \frac{\langle W(R, T) \rangle}{\langle W(R, T + a) \rangle} \quad (2.9)$$

Ist das Potential für verschiedene räumliche Ausdehnungen berechnet, können die Datenpunkte mit der Funktion aus (2.8) gefittet werden, um die Parameter zu bestimmen.

2.3.2 Glueball

Die Gluonen, die Austauscheteilchen der starken Wechselwirkung, tragen selbst Farbladung, was zu Selbstwechselwirkung zwischen Gluonen führt. Dies folgt direkt aus der Theorie der QCD. Eine Folge dessen ist die theoretische Existenz von Zuständen, die nur aus Gluonen bestehen, aber dennoch ähnliche Quantenzahlen wie Hadronen tragen. Diese gebundenen Zustände von Gluonen werden Glueballs genannt. Bisher wurden noch keine Glueballs in der Realität gefunden, weshalb die Berechnung der Glueballmassen eine wichtige Aufgabe der Gitter-QCD darstellt [9].

In dieser Arbeit wird ausschließlich der leichteste Glueball mit den Quantenzahlen $J^{PC} = 0^{++}$ thematisiert. Eine Übersicht über weitere Glueballs mit anderen Quantenzahlen und deren Operatoren findet sich in [10].

Es gibt nun zwei Möglichkeiten, den Operator des 0^{++} Glueballs im Kontinuum zu definieren.

1. $\phi_{0^{++}}^B = \text{Tr} \vec{B}^2(x)$ (2.10)

2. $\phi_{0^{++}}^E = \text{Tr} \vec{E}^2(x)$ (2.11)

Die diskretisierte Version für das Gitter besteht nun aus einer Summe von Plaketten über alle räumlichen Gitterpunkte pro Zeitebene [9].

$$\phi_{0^{++}}(t) = \text{ReTr} \sum_{n \in L^3} U_{12}(n, t) + U_{23}(n, t) + U_{31}(n, t) \quad (2.12)$$

Die Besonderheit dieses Glueballs liegt darin, dass die Quantenzahlen mit denen des Vakuums übereinstimmen. Deswegen muss bei der Berechnung darauf geachtet werden, dass der Vakuumerwartungswert des Operators vom Operator selbst subtrahiert wird.

$$\phi'_{0^{++}}(t) = \phi_{0^{++}}(t) - \langle \Omega | \phi_{0^{++}} | \Omega \rangle \quad (2.13)$$

Gemäß Gleichung (2.4) wird die Korrelationsfunktion mit dem neuen Operator $\phi'_{0++}(t)$ berechnet.

2.4 Operatoroptimierung

Die Operatoroptimierung besteht darin, Algorithmen auf die Eichfeldkonfigurationen anzuwenden, um die Fluktuationen zu verringern, die bei geringem Abstand auftreten. Diese Fluktuationen sorgen dafür, dass bei der Berechnung der effektiven Masse die statistischen Fehler mit dem Zeitabstand wachsen. Bei großen Zeitabständen, bei denen die effektive Masse ein Plateau erreichen sollte, sind die Fehler dann teilweise so groß, dass es schwierig ist, ein Plateau zu erkennen. Durch die Methoden der Operatoroptimierung lässt es sich allerdings erreichen, den Operator so zu verändern, dass schon bei kleineren Zeitabständen das Plateau beginnt, lässt sich die Energiedifferenz bestimmen, ohne die stark fehlerbehafteten Werte berücksichtigen zu müssen.

Diese Algorithmen sind rekursiv definiert, sodass sie mehrmals iteriert werden können. Pro Iteration wird jeder Link der Konfiguration erneuert, indem er mit seinen nächsten Nachbarn verrechnet wird, die aus der Iteration zuvor stammen. Deswegen werden sie auch Smoothing oder Smearing-Algorithmen genannt, denn ein Link erhält in jeder Iteration ein wenig Information von seinen Nachbarn. Er wird sozusagen verschmiert. Wo vorher zwei benachbarte Links noch komplett unabhängig sind, werden sie durch den Algorithmus etwas angeglichen, da sie Informationen von gemeinsamen Nachbarn bekommen.

Außerdem gibt es meist einen oder mehrere Gewichtungsfaktoren, die es als Parameter zusätzlich zur Iterationsanzahl zu optimieren gilt. Es ist dabei durchaus möglich, verschiedene Algorithmen hintereinander auszuführen und zu kombinieren.

Die in dieser Arbeit untersuchten Methoden sind das APE-Smearing [3] und das Blocking [4]. Eine Übersicht über weitere Algorithmen findet sich in [11].

2.4.1 APE-Smearing

$$\begin{array}{c}
 (n + \hat{\mu}, t) \\
 \bullet \\
 \uparrow \\
 U_{\mu}^{(N)}(n, t) \\
 \uparrow \\
 (t, n)
 \end{array}
 =
 \begin{array}{c}
 (n + \hat{\mu}, t) \\
 \bullet \\
 \uparrow \\
 U_{\mu}^{(N-1)}(n, t) \\
 \uparrow \\
 (t, n)
 \end{array}
 +
 \alpha_s \sum_{\substack{\pm\nu \neq \mu \\ \nu \neq 0}}
 \begin{array}{c}
 U_{-\nu}^{(N-1)}(n, t) \\
 (n + \hat{\mu}, t) \leftarrow \bullet \\
 \uparrow \\
 U_{\mu}^{(N-1)}(n + \hat{\nu}, t) \\
 \bullet \\
 (n + \hat{\nu}, t) \\
 \leftarrow \bullet \\
 U_{\nu}^{(N-1)}(n, t) \\
 (n, t)
 \end{array}$$

Abbildung 1: Veranschaulichung der Updateformel eines Links bei APE-Smearing

Beim APE-Smearing werden zu jedem räumlichen Link die vier räumlichen *Staples* mit einem Gewichtungsfaktor α_s hinzu addiert. Dabei werden die Links aus der vorherigen Iteration benutzt. Ein Staple ist die kürzeste Verbindung zweier Gitterpunkte ohne den direkten Link zu benutzen. Daher gibt es zu jedem Link vier verschiedene Staples, ohne zeitliche Links zu benutzen. Beim APE-Smearing besteht ein Staple also aus einem Produkt aus drei Links. Zusammen mit dem Gewichtungsfaktor α_s ist die Anzahl der Iterationen N_s ein zu optimierender Parameter.

Die Formel für den N -ten Iterationsschritt ist wie folgt definiert.

$$\begin{aligned} \tilde{U}_\mu^{(N)}(n, t) &= U_\mu^{(N-1)}(n, t) \\ &+ \alpha_s \sum_{\substack{\pm\nu \neq \mu \\ \nu \neq 0}} U_\nu^{(N-1)}(n, t) \cdot U_\mu^{(N-1)}(n + \hat{\nu}, t) \cdot U_\nu^{(N-1)\dagger}(n + \hat{\mu}, t) \end{aligned} \quad (2.14)$$

wobei $\tilde{U}_\mu^{(N)}(n, t)$ zurück nach $SU(N)$ projiziert werden muss:

$$U_\mu^{(N)}(n, t) = P_{SU(N)} \left(\tilde{U}_\mu^{(N)}(n, t) \right) \quad (2.15)$$

Die Formel ist in Abbildung 1 veranschaulicht. Wichtig ist, dass beim APE-Smearing nur die räumlichen Links verändert werden. Außerdem werden auch die beiden Staples ignoriert, die aus der ursprünglichen Zeitebene herausragen. Deswegen gilt immer $\mu, \nu \neq 0$.

2.4.2 Blocking

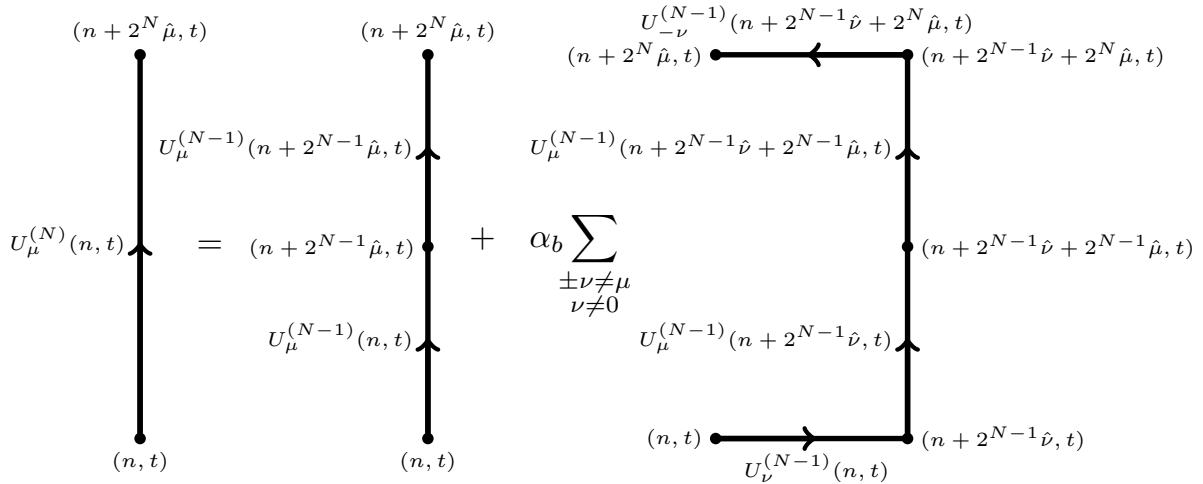


Abbildung 2: Veranschaulichung der Updateformel eines Links bei Blocking

Der größte Unterschied zwischen APE-Smearing und Blocking ist, dass beim Blocking, statt einzelne Links mit den Staples zu addieren, zwei aufeinanderstehende Links verschmelzen und mit entsprechend verlängerten Staples zu einem Superlink addiert werden. Das bedeutet, nach den N_b Iterationsschritten zeigt ein Link nicht mehr zu seinem direkten Nachbarn, sondern zu seinem 2^{N_b} -ten Nachbarn in der gleichen Richtung. Wieder besteht die Möglichkeit, die Anzahl der Iterationen N_b und den Gewichtungsfaktor α_b zu optimieren.

Die Updateformel ist wie folgt definiert.

$$\begin{aligned}
\tilde{U}_\mu^{(N)}(n, t) &= U_\mu^{(N-1)}(n, t) U_\mu^{(N-1)}(n + 2^{N-1} \hat{\mu}, t) \\
&+ \alpha_b \sum_{\substack{\pm \nu \neq \mu \\ \nu \neq 0}} U_\nu^{(N-1)}(n, t) \cdot U_\mu^{(N-1)}(n + 2^{N-1} \hat{\nu}, t) \\
&\cdot U_\mu^{(N-1)}(n + 2^{N-1} \hat{\nu} + 2^{N-1} \hat{\mu}, t) \cdot U_\nu^{(N-1)\dagger}(n + 2^{N-1} \hat{\mu}, t)
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Wieder muss der Link zurück nach $SU(N)$ projiziert werden.

$$U_\mu^{(N)}(n, t) = P_{SU(N)} \left(\tilde{U}_\mu^{(N)}(n, t) \right) \tag{2.17}$$

In Abbildung 2 ist die Formel wieder veranschaulicht. Auch hier werden nur die räumlichen Links geblockt und Staples in zeitlicher Richtung ignoriert.

3 Vergleich APE-Smearing und Blocking

Dieser Abschnitt dient dazu, die Gemeinsamkeiten und Unterschiede zwischen Blocking und APE-Smearing in ihrer Wirkung zu erklären und ein Fundament für die Ergebnisdiskussion zu bieten.

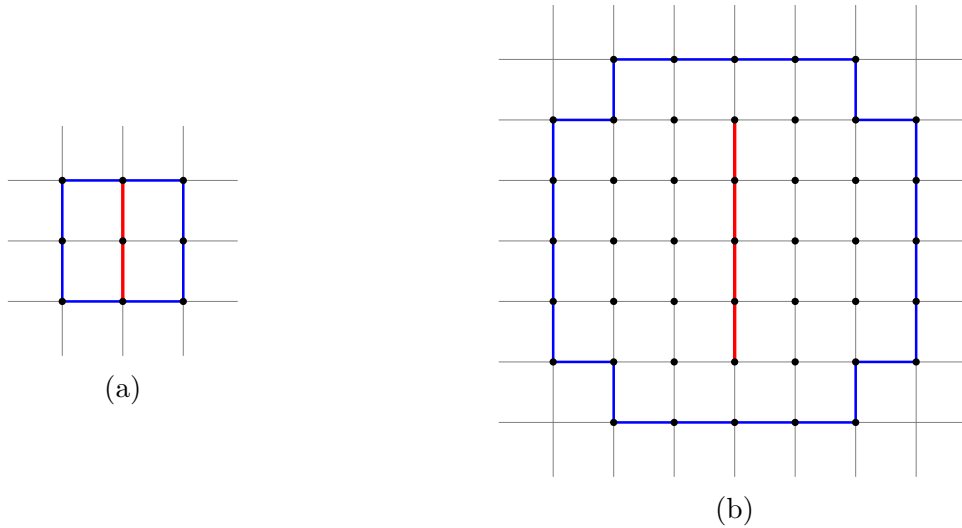


Abbildung 3: Größe eines Links, nach der a) ersten und b) zweiten Iteration Blocking

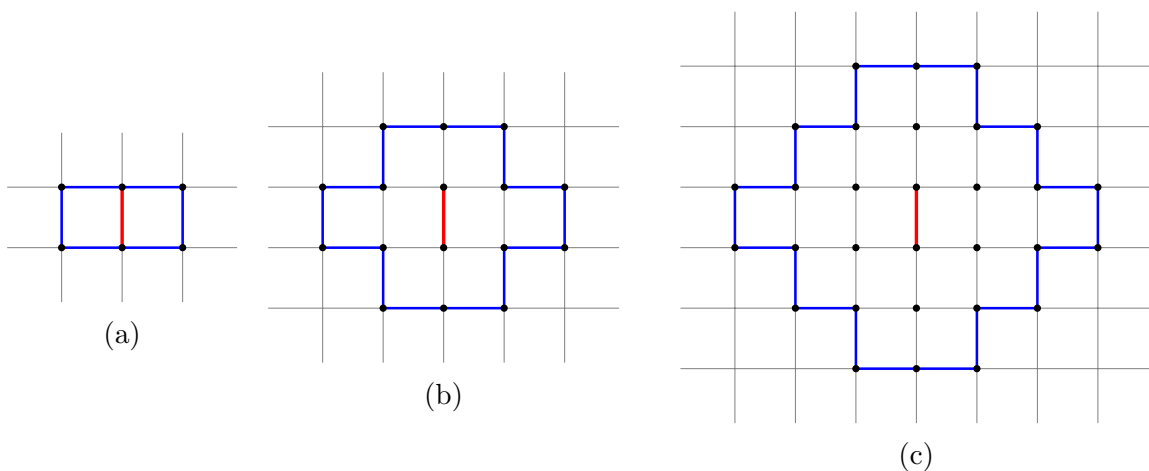


Abbildung 4: Größe eines Links, nach der a) ersten, b) zweiten und c) dritten Iteration APE-Smearing

In den Abbildungen 3 und 4 ist die Größe eines einzelnen Links nach N Iterationsschritten dargestellt. Der Link, der in diesem Schritt berechnet wurde, ist rot eingefärbt. Alle Links, die innerhalb des blauen Rahmens liegen, tragen zu der Berechnung des roten Links bei, indem sie entweder im aktuellen oder in vorangegangenen Iterationsschritten benutzt wurden.

Das heißt nach einer Iteration APE-Smearing oder Blocking, tragen nur die Staples direkt bei. Wenn dann in der zweiten Iteration der rote Link über die Staples berechnet wird, wurden die Links der Staples selbst bereits einmal neu berechnet, sodass sie neue Informationen an den roten Link liefern.

Daraus ergeben sich zwei Folgerungen. Zum einen wächst ein Link immer mit den Iterationsschritten mit, indem Information mit jedem Schritt von Außen nach Innen fließt, bis sie bei dem Link angekommen ist. Zum anderen werden Links, die näher am eigentlichen Link liegen, öfter benutzt. Im Umkehrschluss bedeutet es, dass die Links, die genau auf dem blauen Rahmen liegen im aktuellen Schritt neu dazugekommen sind und nur einmal beitragen. Der Gewichtungsfaktor bestimmt nun, wie stark Information weitergegeben wird.

Der große Unterschied zwischen beiden Methoden liegt aber in der Wachstumsgeschwindigkeit. So wächst ein Link beim APE-Smearing mit konstanter Geschwindigkeit, das heißt bei jedem Iterationsschritt wird der Link zwei Gitterabstände breiter. Beim Blocking hingegen steigt nach jedem Schritt die Geschwindigkeit, da die Links selber länger werden, und so auch die Staples breiter. So lässt sich anhand der Abbildungen 4c und 3b erkennen, dass der rote Link nach 2 Iterationen Blocking, schon deutlich mehr Informationen enthält, als nach 3 Iterationen APE-Smearing.

Das bedeutet, dass mit APE-Smearing sehr genau gearbeitet werden kann, da der Link nur langsam wächst. Wird aber reines Blocking angewendet, so kann es sein, dass die ideale Größe des Operators verpasst wird, da er sprunghaft wächst. Dies hat Konsequenzen für Laufzeit des Computerprogramms. Um eine gewisse Größe des Operators zu erreichen, braucht werden beim APE-Smearing mehr Iterationen als beim Blocking gebraucht.

4 Ergebnisse

Alle Berechnungen wurden in einem $24^3 \times 48$ Gitter mit $\beta = 2.5$ in $SU(2)$ durchgeführt und über 100 Konfigurationen gemittelt.

Ziel ist es, zu überprüfen, welche die optimalen Einstellungen der Parameter von APE-Smearing und Blocking für die Berechnung des statischen Potential und des 0^{++} Glueballs sind. Die Parameter sind die Gewichtungsfaktoren α_s und α_b und die Anzahl der Iterationsschritte N_s und N_b . Zusätzlich wurde beim Blocking noch die Breite der Staples variiert. Weiteres Interesse liegt darin, ob die Methode des Blocking überhaupt eine Verbesserung im Vergleich zu APE-Smearing mit optimalen Einstellungen bringt.

Das Kriterium, ob eine Parameterkombination einer anderen gegenüber überlegen ist, liegt in der Berechnung des ersten Punktes bei $T = 0$ der effektiven Masse bzw. des effektiven Potentials. Wird die effektive Masse gegenüber der Zeitabstände aufgetragen, so nähert sich die effektive Masse von oben einem Plateau. Das Ziel ist es, dass die Funktion sich möglichst früh auf dem Plateau befindet. Deshalb gilt eine Parameterkombination als besser, wenn der erste Wert der effektiven Masse niedriger ist.

Im Folgenden wird immer wieder eben dieser Wert in Einheiten des Gitters berechnet. Dabei wird bei beiden Observablen gleich vorgegangen. Zuerst wird das APE-Smearing einzeln getestet, anschließend einzeln das Blocking und zuletzt eine Kombination aus beidem, wobei zuerst das APE-Smearing auf die Konfigurationen angewandt wird.

4.1 Statisches Potential

Zur Berechnung des statischen Potentials wurde sich für einen räumlichen Abstand $R = 8$ entschieden, da zum einen für große Abstände die Fehler größer und somit die Verbesserungen deutlicher werden, und zum anderen es Sinn macht, für die Berechnung mit Blocking einen Wert zu nehmen, der mit den verschiedenen Längen der Links kompatibel ist, da während des Blockings die Länge der Links mit jeder Iteration verdoppelt wird.

Abbildung 5 zeigt die Ergebnisse der Berechnung des effektiven Potentials mit verschiedenen Parametereinstellungen des APE-Smearings. Es wurden alle Kombinationen von $N_s = 1, \dots, 30$ und $\alpha_s = 0.0, 0.1, \dots, 1.0$ getestet. Für jedes N_s wurde das beste α_s und der entsprechende Wert des Potentials in Gittereinheiten ermittelt. Abbildung 5a zeigt dabei für jede Iterationszahl den optimalen Gewichtungsfaktor. So lässt sich erkennen, dass der optimale Gewichtungsfaktor kleiner wird, je öfter der Algorithmus angewendet wird. Gleichzeitig zeigt Abbildung 5b für jedes N_s den zugehörigen Wert des ersten Punktes des effektiven Potentials, wobei jeweils der optimale Gewichtungsfaktor verwendet wurde. Für steigende N_s wird der Wert des effektiven Potentials immer besser, wobei der Wert

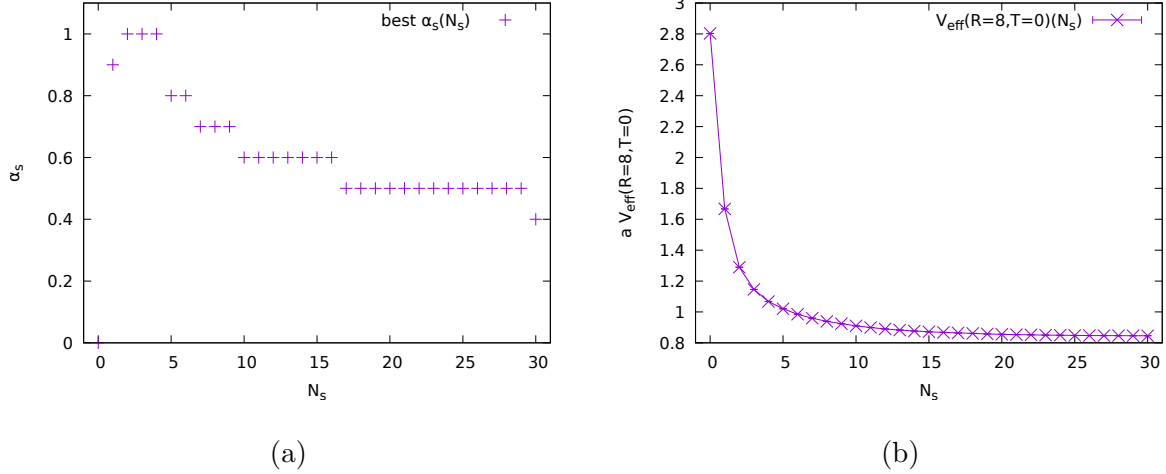


Abbildung 5: Statisches Potential mit APE-Smearing: a) zeigt für jedes N_s das beste α_s , b) zeigt für jedes N_s den Wert von $V_{\text{eff}}(R = 8, T = 0)$, wobei das jeweils beste α_s aus a) benutzt wurde.

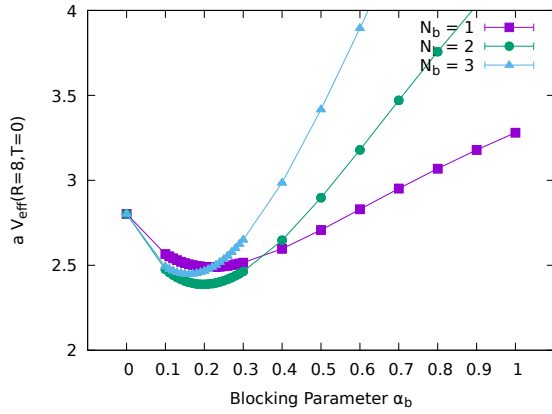
bei $N_s = 0$ dem Wert entspricht, der ohne jegliches APE-Smearing zustande kommt. So bringt jede der gezeigten Einstellungen eine signifikante Verbesserung im Vergleich zu einem nichtoptimierten Operator. Es scheint jedoch einen Wert zu geben, der nicht unterschritten werden kann, da für große N_s die Verbesserung im Vergleich zu $N_s - 1$ immer kleiner wird. Auch wenn die Erhöhung der Anzahl der Iterationsschritte immer noch kleine Verbesserungen bringt, stellt sich die Frage, ob es ab einem gewissen Punkt noch effizient ist, da die Laufzeit des Programms mit der steigenden Anzahl auch länger wird.

Bei der Berechnung mit Blocking aber ohne APE-Smearing wurde wieder der Gewichtungsfaktor $\alpha_b = 0.0, 0.1, \dots, 1.0$ mit der Anzahl der Iterationsschritte $N_b = 1, 2, 3$ kombiniert. Die maximale Anzahl an Iterationsschritten liegt hier bei $N_b = 3$, da nach 3 Iterationen die räumlichen Links bereits $8a$ lang sind. Weitere Iterationen würden es unmöglich machen, dass effektive Potential für $R = 8$ auszurechnen, da keine halben Links existieren. Außerdem wurde die Breite der Staples $l = 1, 2, 3$ variiert. Damit ist die Menge an Links gemeint, die am Ende und zu Beginn bei der Berechnung des Staples in ν -Richtung ragen (2.16). Die Variante mit $l = 1$ entspricht dabei der Darstellung in Abbildung 2.

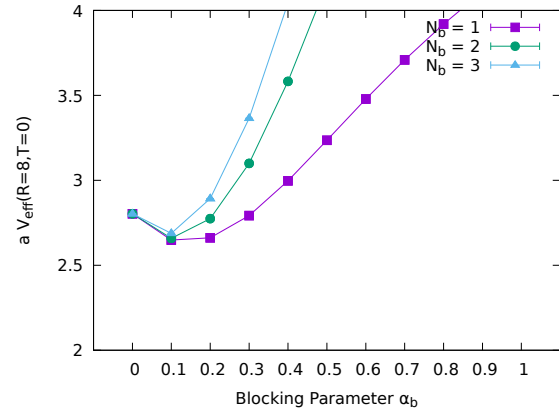
Die Abbildung 6 zeigt die Werte des effektiven Potentials aller möglichen Kombinationen der Parameter, wobei die Werte mit $\alpha_b = 0.0$ dem Wert des unoptimierten Operators entsprechen. Mit steigendem Gewichtungsfaktor bringt in allen Fällen das Blocking zunächst eine Verbesserung, bevor es danach wieder schlechter wird. Die deutlichste Verbesserung wird allerdings mit einer Stapelbreite von $l = 1$ erreicht, wobei der absolut beste Wert bei zweimaligem Blocking erreicht wird. Um den optimalen Gewichtungsfaktor genauer zu

bestimmen wurde für den Fall von $l = 1$ der Bereich um die Minima noch etwas genauer aufgelöst.

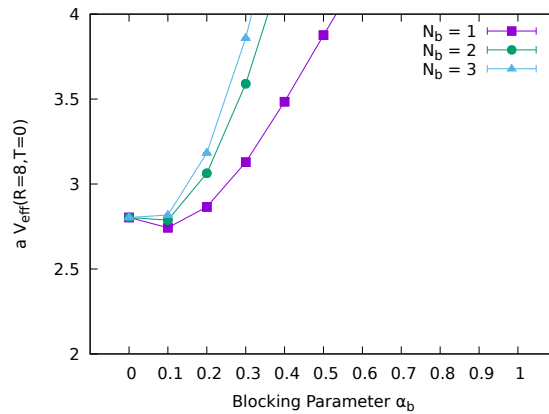
Im Vergleich zum APE-Smearing, bei dem der Wert des effektiven Potentials auf unter 1 gedrückt werden konnte, ist das Blocking nicht in der Lage, den Wert so stark zu verbessern. Es wird lediglich ein Wert von knapp unter 2.5 erreicht.



(a) $l=1$



(b) $l=2$



(c) $l=3$

Abbildung 6: Statisches Potential mit Blocking: Die drei Abbildungen zeigen das Verhalten von $V_{eff}(R = 8, T = 0)$ für jedes N_b bei wachsendem α_b mit a) $l = 1$, b) $l = 2$ und c) $l = 3$

Zum Abschluss des statischen Potentials wird eine Kombination aus APE-Smearing und Blocking getestet, wobei der Blocking-Algorithmus nach dem APE-Smearing angewendet wird. Aus Gründen der Laufzeit, konnten nicht alle Werte der fünf Parameter in Kombination getestet werden. So wurden nur die beiden Iterationsschrittzahlen $N_s = 0, \dots, 30$ und $N_b = 0, \dots, 3$ variiert. Basierend auf den bisherigen Ergebnissen wurde die Breite der Staples beim Blocking auf $l = 1$, festgelegt. Für die Gewichtungsfaktoren wurde sich für $\alpha_s = 0.5$ und $\alpha_b = 0.2$ entschieden, da diese in den Einzeltests die besten Werte

hervorgebracht hatten.

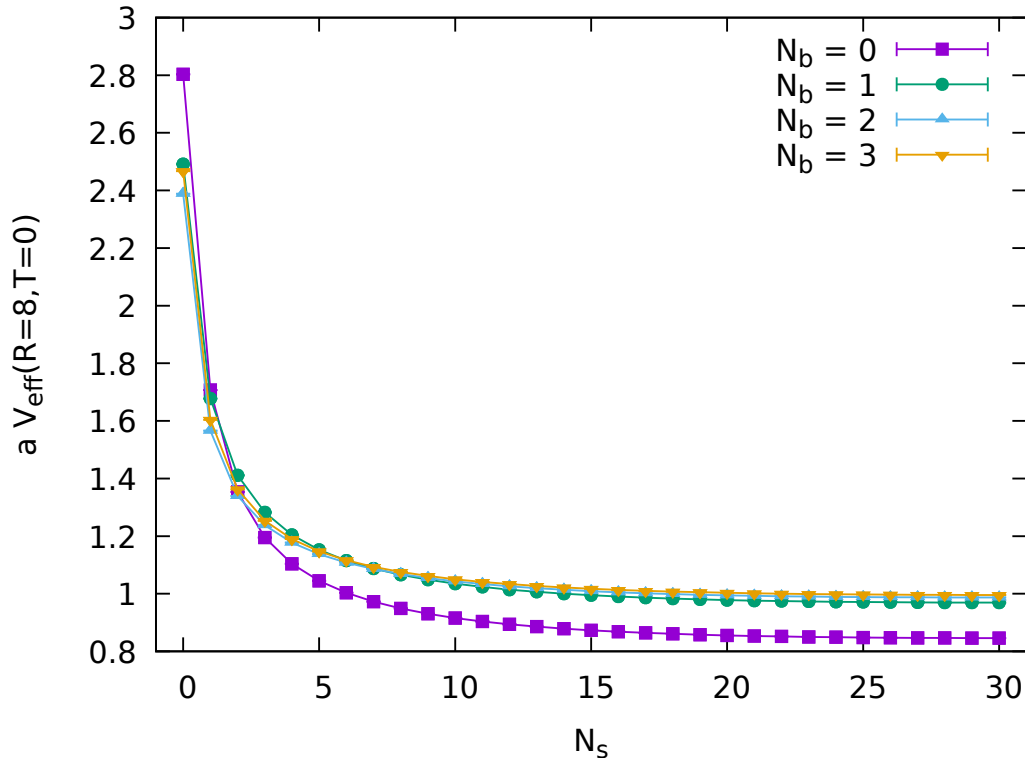


Abbildung 7: Statisches Potential mit APE-Smearing und Blocking; $\alpha_s = 0.5$, $\alpha_b = 0.2$ und $l = 1$

Jede der vier Kurven in Abbildung 7 zeigt die Abhängigkeit des effektiven Potentials von N_s bei den verschiedenen N_b . Es lässt sich erkennen, dass die Kurve mit $N_b = 0$ die mit Abstand besten Werte liefert. Das bedeutet, dass für das statische Potential der Blocking-Algorithmus nutzlos ist, da unabhängig von der Anzahl der Iterationen von APE-Smearing ohne Blocking deutlich bessere Werte als mit Blocking zustande kommen. Es ist sogar so, dass das Blocking die Werte, die durch das vorangegangene APE-Smearing erstellt wurden, wieder verschlechtert hat.

Die Ergebnisse aus dem Einzeltest des APE-Smearing zeigen, dass der Operator des statischen Potentials eine gewisse Größe hat, da mit steigendem N_s der Gewichtungsfaktor immer kleiner wurde, während der Wert des Potentials nicht wesentlich verbessert wurde. So scheint es, dass der Operator bei mittelgroßen N_s bereits die richtige Ausdehnung erreicht hat. Um bei weiteren Iterationen den Operator nicht zu groß werden zu lassen, muss der Gewichtungsfaktor verringert werden.

Ein ähnliches Verhalten zeigt der Test des Blockings. Auch hier wird der optimale Gewichtungsfaktor kleiner mit steigender Iterationszahl. Jedoch wird der entsprechende Wert des

effektiven Potentials schon nach dem zweiten Schritt wieder schlechter. Es scheint, als ob der Operator nicht nur eine gewisse Größe braucht, sondern auch eine gewissen Dichte, welche das Blocking durch das schnelle Wachstum nicht bereitstellen kann.

4.2 Glueball

Wie beim statischen Potential wurde für den Glueball zunächst das APE-Smearing getestet. Dabei wurden wieder alle Kombinationen aus Gewichtungsfaktor $\alpha_s = 0.0, 0.1, \dots, 1.0$ und Iterationsanzahl $N_s = 0, \dots, 30$ berechnet.

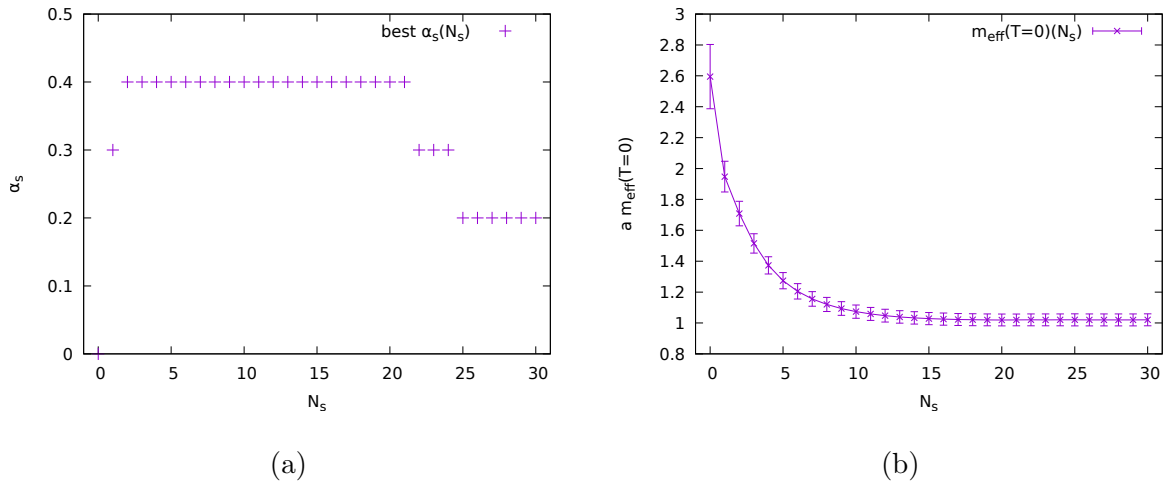


Abbildung 8: Glueball mit APE-Smearing: a) zeigt für jedes N_s das beste α_s , b) zeigt für jedes N_s den Wert von $m_{\text{eff}}(T = 0)$, wobei das jeweils beste α_s aus a) benutzt wurde.

Abbildung 8 zeigt die Ergebnisse dieser Berechnung. Dabei ist die gleiche Darstellung wie beim statischen Potential gewählt.

Prinzipiell scheint die Berechnung ähnliche Resultate wie beim statischen Potential aufzuzeigen. Je größer die Anzahl der Iterationsschritte wird, desto kleiner wird der dazu passende Gewichtungsfaktor. Jedoch hat der optimale Gewichtungsfaktor bei kleinen N_s nur einen Wert von $\alpha_s = 0.4$. Diesen behält er auch bis hin zu mittelgroßen N_s bevor er kleiner wird. Auch mit steigender Iterationszahl wird der Wert der effektiven Masse bis hin zu einer unteren Schranke immer kleiner. Dies wirft wieder die Frage der Effizienz auf. Ein Unterschied ist nun, dass die Fehler beim Glueball deutlich ausgeprägter sind. So lässt sich erkennen, dass mit besseren Parametereinstellungen auch der Fehler verringert wird.

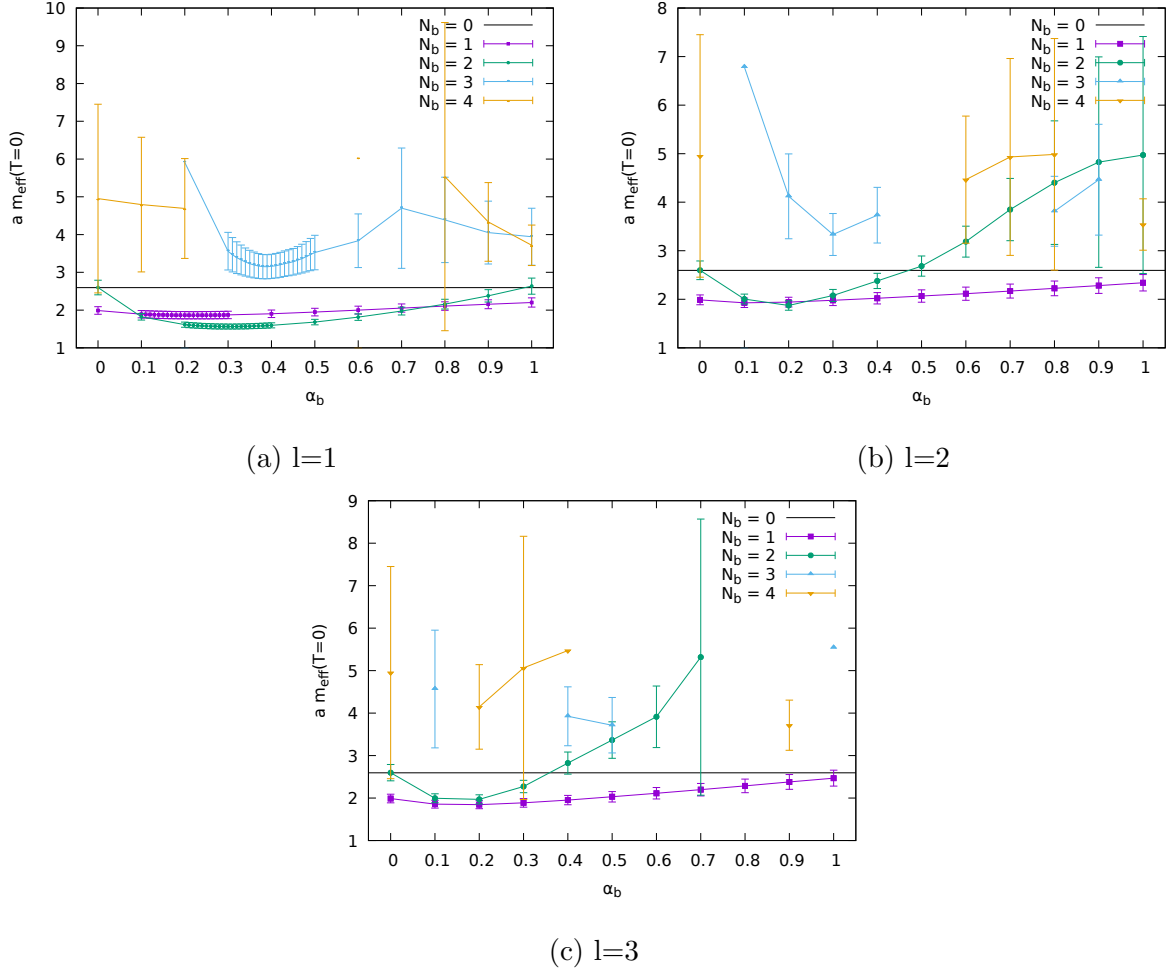


Abbildung 9: Glueball mit Blocking: Die drei Abbildungen zeigen das Verhalten von $m_{\text{eff}}(T=0)$ für jedes N_b bei wachsendem α_b mit a) $l=1$, b) $l=2$ und c) $l=3$

Bei der Berechnung des Glueballs ist die Iterationsanzahl des Blockings nun nicht mehr limitiert durch den Abstand der Quarks. Jedoch sollte darauf geachtet werden, dass nicht zu viele Iterationsschritte gewählt werden, denn es kann passieren, dass ein Link größer als die räumliche Ausdehnung des Gitters wird und sich so wegen der periodischen Randbedingungen um das Gitter windet. Dies sollte vermieden werden, da sonst manche ursprünglichen Links innerhalb eines Superlinks doppelt vorkommen. Da die räumliche Ausdehnung des Gitters $L=24$ beträgt, ist die maximale Anzahl an Iterationen $N_b=4$. Als Folge dessen werden alle Kombinationen aus $\alpha_b = 0.0, 0.1, \dots, 1.0$, $N_b = 0, \dots, 4$ und $l = 1, 2, 3$ in Abbildung 9 dargestellt.

Zunächst lässt sich erkennen, dass manche Datenpunkte fehlen. Dies liegt daran, dass der Glueball-Operator sehr stark unter den Fluktuationen des Gitters leidet. Bei der Berechnung der effektiven Masse nach (2.6) passiert es durch stark ausgeprägte statistische

Fehler, dass die beiden Werte der Korrelationsfunktion unterschiedliche Vorzeichen aufweisen, obwohl sie theoretisch immer positiv sein sollten (2.4). Da der Logarithmus einer negativen Zahl nicht definiert ist, liefert solch ein Fall keinen Wert. Dies trifft meist dann zu, wenn die Parameter unpassend gewählt sind.

Wieder liefern die Berechnungen mit $l = 1$ als Breite der Staples die besten Ergebnisse, da dort der absolute beste Wert erreicht wurde. Außerdem fehlen bei dieser Berechnung weniger Datenpunkte, als bei den anderen, unabhängig von den anderen Parametern. Deshalb wurde der Bereich um die Minima in Abbildung 9a genauer aufgelöst. Eine Ausnahme bildet die Kurve für $N_b = 4$, da dort zu viele Datenpunkte fehlen, um ein Minimum zu erkennen. Man sieht in allen Abbildungen, dass die Minima der Kurven für $N_b = 1$ und $N_b = 2$ unterhalb der schwarzen Linie liegen. Da die schwarze Linie den Wert ohne Blocking darstellt, spiegeln diese Minima Verbesserungen wider. Ähnlich wie beim statischen Potential verbessern sich bei allen klar erkennbaren Kurven die Werte der effektiven Masse bis zu einem Minimum bevor sie wieder schlechter werden.

Im Vergleich mit APE-Smearing beim Glueball erreicht das Blocking nicht so gute Werte. Der beste Wert des Tests mit Blocking liegt bei etwa 1.5 mit den Parametern $l = 1$, $N_b = 2$ und $\alpha_b = 0.3$, wobei sich der Wert beim APE-Smearing sich etwa 1 annähert. Damit ist reines APE-Smearing gegenüber reinem Blocking im Vorteil, ähnlich wie beim statischen Potential. Jedoch ist die Diskrepanz beim Glueball deutlich kleiner.

Schließlich wird wieder die Kombination aus APE-Smearing und Blocking getestet. Die Gewichtungsfaktoren und die Breite der Staples wurden wieder festgelegt. Aus den bereits besprochenen Gründen wurde $l = 1$ gewählt. Außerdem befinden sich die Minima in Abbildung 9a rund um $\alpha_b = 0.3$, weshalb dieser Wert genommen wurde. Weiterhin wurde nach Abbildung 8a $\alpha_s = 0.4$ gesetzt, da dieser Wert für eine große Anzahl von N_s optimal ist. Abbildung 10 zeigt nun die Werte der effektiven Masse des Glueballs, wenn $N_s = 0, \dots, 30$ und $N_b = 0, \dots, 4$ kombiniert werden. Wieder wird das APE-Smearing vor dem Blocking angewendet.

Alle Kurven fallen zunächst stark ab, bevor manche im untersuchten Bereich wieder langsam ansteigen. So gibt es lokale Minima für die Kurven zu $N_b = 1, 2, 3$. Interessanterweise liegt das Minimum der Kurve für $N_b = 1$ mit einem Wert von etwa 1.2 über der Kurve für $N_b = 0$. Die Kurve für $N_b = 4$ liegt über allen anderen Kurven. Jedoch liegen die Kurven für $N_b = 2$ und $N_b = 3$ unter der Kurve ohne Blocking und liefern damit eine Verbesserung gegenüber dieser. Der beste Wert von $am_{eff}(T = 0) = 0.918 \pm 0.029$ wurde mit $N_s = 13$ und $N_b = 3$ erreicht. Dieser ist nicht nur der beste Wert dieses letzten Tests, sondern ist im Vergleich mit dem reinen APE-Smearing auch eine Verbesserung, da sich dort die Kurve einem Wert von etwa $am_{eff}(T = 0) = 1.02$ angenähert hat. Damit ist gezeigt, dass das Blocking durchaus das Potential besitzt in Kombination mit APE-Smearing den

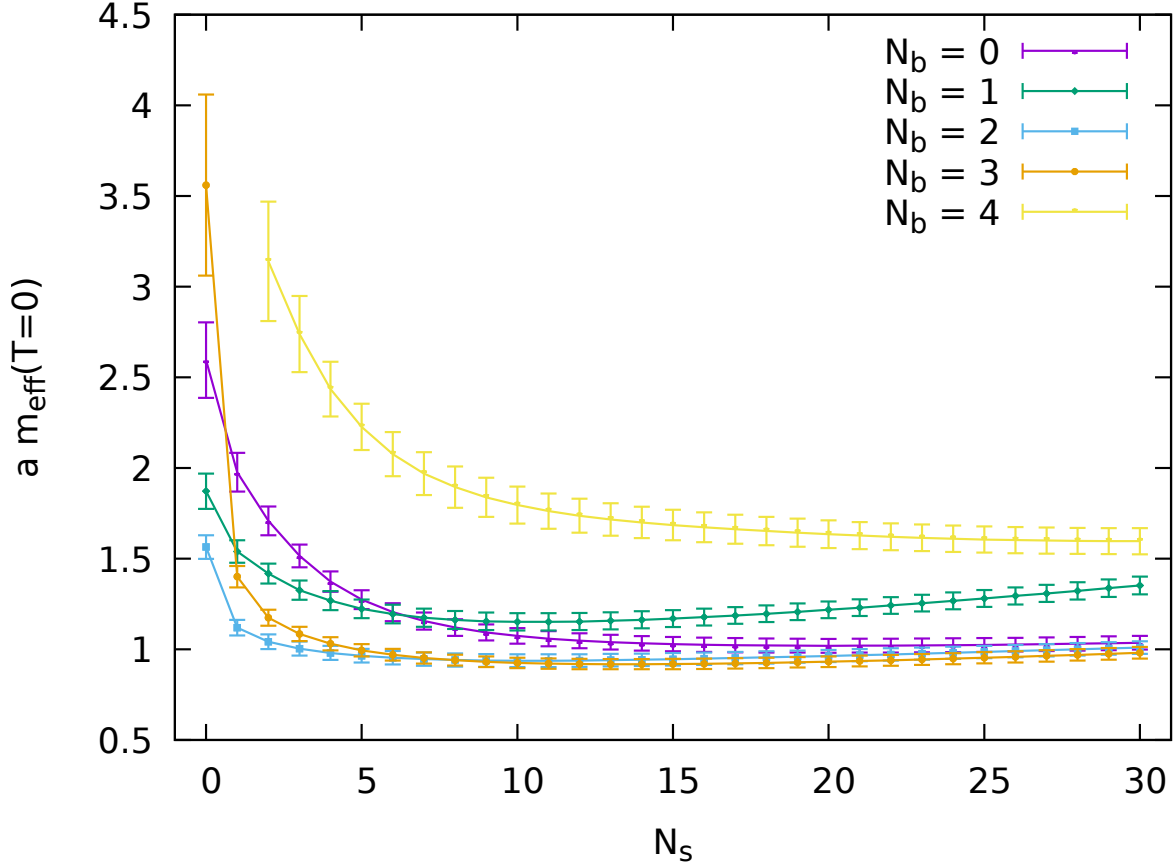


Abbildung 10: Glueball mit APE-Smearing und Blocking; $\alpha_s = 0.4$, $\alpha_b = 0.3$ und $l = 1$

Operator besser zu optimieren als es mit reinem APE-Smearing möglich wäre.

Im Gegensatz zum statischen Potential gestaltet sich die Interpretation des Glueball-Operators schwieriger. Bei reinem APE-Smearing ist die Argumentation ähnlich wie beim statischen Potential. Wieder verbessert sich der Wert der effektiven Masse mit steigender Iterationszahl und gleichzeitig sinkendem Gewichtungsfaktor, was dafür spricht, dass der Operator eine gewisse Größe hat, diese aber nicht überschreiten darf.

Der Unterschied ist nun bei der Kombination aus APE-Smearing und Blocking. Diese Berechnung lieferte den besten Wert aller Glueball-Berechnungen bei $N_s = 13$ und $N_b = 3$. Bei der reinen Berechnung mit APE-Smearing war der Wert bei $N_s = 13$ aber schon fast bei der unteren Schranke angekommen. Für die weitere Verbesserung muss also das Blocking verantwortlich sein. Der Glueball-Operator besteht im Wesentlichen aus Plaketten. Eine Plakette ist als die kleinstmögliche Schleife aus Links definiert (Gl.(2.3)). Da mit jeder Iteration Blocking ein Link nicht nur breiter, sondern auch länger wird, wird die kleinstmögliche Schleife auch größer. Die zusätzlichen $N_b = 3$ Blockingiteratio-

nen vergrößern nun die Plakette auf eine Kantenlänge von $8a$. Dies sorgt dafür, dass die Links in der Mitte der Plakette mit gewissem Abstand zur Schleife weniger gewichtet sind. Die Form einer Plakette erinnert an einen verschmierten Torus. Dies wäre bei der ursprünglichen Plakette mit kurzen Links nicht möglich.

5 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel dieser Arbeit war es, zu untersuchen, welche Kombination aus Methoden und Parametern bei der Operatoroptimierung die besten Ergebnisse liefert. Dies wurde durch mehrere Tests erreicht. So hat bei beiden Observablen das APE-Smearing allein schon große Verbesserungen geliefert. Es stellt sich aber die Frage der Effizienz, da mit wachsender Iterationsanzahl die zusätzlichen Verbesserungen immer geringer wurden, die Laufzeit aber kontinuierlich ansteigt.

Das Blocking ohne vorangegangenes APE-Smearing hat den Operator in beiden Fällen nur leicht verbessert. Die Kombination aus APE-Smearing gefolgt von anschließendem Blocking hat beim gewöhnlichen statischen Potential, keine weiteren Verbesserungen geliefert. Beim Glueball hingegen hat dieses Verfahren noch einiges bewirken können, was die Ergebnisse aus [5] bestätigt. Hier konnten sogar die eindeutig besten Parameterinstellungen bestimmt werden.

Aus Zeitgründen wurde bei der kombinierten Variante darauf verzichtet, alle vier bzw. fünf Parameter gleichzeitig laufen zu lassen. Dies könnte in Zukunft nachgeholt werden, um zu überprüfen, ob noch weitere Verbesserungen möglich sind.

Anstatt alle Kombinationen der Parameter auszutesten und manuell auszuwerten, könnte auch ein numerischer Algorithmus zur Minimierung von Funktionen benutzt werden. Die Funktion würde als Argument die Parameter entgegennehmen und damit wie in dieser Arbeit den ersten Punkt der effektiven Masse berechnen. Nach manueller Eingabe der Startwerte für die Parameter würde der Algorithmus selbstständig und intelligent nach der besten Kombination suchen. Dies hätte den Vorteil, dass nur ausgewählte Kombinationen getestet werden, was die Laufzeit deutlich verringert. So könnten auch weitere Methoden wie das HYP-Smearing eingebunden und getestet werden.

Das Ziel sollte sein, das globale Minimum der Funktion zu finden. Ein Problem besteht darin, dass kein globales Minimum existieren muss, wie beim statischen Potential mit APE-Smearing zusehen ist. Für diesen Fall sollten eine weitere Abbruchbedingung in Erwägung gezogen werden.

Eine Vision ist es, ein Programm zu entwickeln, das dieses Problem und weitere löst und das nach Eingabe des Operators, der gewünschten Methoden und gegebenenfalls weiteren Vorgaben selbstständig die besten Parameter wählt und die optimierte Observable berechnet.

6 Literatur

- [1] C. N. Yang and R. Mills, “Conservation of isotopic spin and isotopic gauge invariance,” *Phys. Rev.*, vol. 96, 1954.
- [2] M. Creutz, “Monte carlo study of quantized $su(2)$ gauge theory,” *Phys. Rev. D*, vol. 21, 1980.
- [3] M. Albanese, F. Costantini, G. Fiorentini, F. Flore, M. Lombardo, R. Tripiccione, P. Bacilieri, L. Fonti, P. Giacomelli, E. Remiddi, M. Bernaschi, N. Cabibbo, E. Marinari, G. Parisi, G. Salina, S. Cabasino, F. Marzano, P. Paolucci, S. Petrarca, F. Rapuano, P. Marchesini, and R. Rusack, “Glueball masses and string tension in lattice qcd,” *Physics Letters B*, vol. 192, no. 1, pp. 163 – 169, 1987.
- [4] M. Teper, “An improved method for lattice glueball calculations,” *Physics Letters B*, vol. 183, no. 3, pp. 345 – 350, 1987.
- [5] C. Riehl, “Hybrid static potentials at small lattice spacings and possible glueball decay,” 2019.
- [6] C. Gattringer and C. B. Lang, *Quantum Chromodynamics on the Lattice - An Introductory Presentation*. Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 2009.
- [7] H. J. Rothe, *Lattice Gauge Theories - An Introduction*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd, 2005.
- [8] I. Montvay and G. Münster, *Quantum Fields on a Lattice*. Cambridge University Press, 1994.
- [9] A. Uenver-Thiele, “Numerische bestimmung von glueball-massen mit $su(2)$ gittertheorie,” 2012.
- [10] Y. Chen, A. Alexandru, S. J. Dong, T. Draper, I. Horváth, F. X. Lee, K. F. Liu, N. Mathur, C. Morningstar, M. Peardon, and et al., “Glueball spectrum and matrix elements on anisotropic lattices,” *Physical Review D*, vol. 73, Jan 2006.
- [11] F. Geles, “Effectiveness of smearing methods studied with monte carlo renormalization group tools,” 2011.