



Goethe-Universität Frankfurt am Main

Fachbereich 13

Institut für theoretische Physik

**Bachelorarbeit**

# Operatoroptimierung für statische Potentialberechnungen in der Gittereichtheorie

Von Fabian Geiger

September 2023

**Erstgutachter und Betreuer:**

Prof. Dr. Marc Wagner

Institut für theoretische Physik

Goethe-Universität Frankfurt am Main

**Zweitgutachter:**

Prof. Dr. Owe Philipsen

Institut für theoretische Physik

Goethe-Universität Frankfurt am Main

## Selbstständigkeitserklärung

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 - für eine andere Prüfung verwendet wurde.

Frankfurt am Main, den 01.09.2023

(Fabian Geiger)

## Zusammenfassung

Der Fokus dieser Arbeit liegt darauf, Optimierungsmethoden bei der numerischen Berechnung des statischen Quark-Antiquark-Potentials in der  $SU(2)$  Yang-Mills-Theorie zu untersuchen. Hierbei werden verschiedene Smearing-Methoden - APE-, HYP- und STOUT-Smearing - optimiert und auf ihre Effektivität hin verglichen. Zusätzlich wird das generalisierte Eigenwertproblem verwendet, um zu untersuchen, inwiefern diese Technik dazu beitragen kann, das statische Potential im Vergleich zu den Smearing-Methoden weiter zu optimieren.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>2. Theoretische Grundlagen</b> . . . . .	<b>3</b>
2.1. Gitter-QCD . . . . .	3
2.2. Statisches Quark-Antiquark-Potential . . . . .	4
2.3. Smearing-Methoden . . . . .	6
2.3.1. APE-Smearing . . . . .	6
2.3.2. HYP-Smearing . . . . .	7
2.3.3. STOUT-Smearing . . . . .	7
2.4. Generalisiertes Eigenwertproblem . . . . .	8
2.4.1. Bestimmung der Energiezustände . . . . .	9
2.4.2. Ritz-Verfahren . . . . .	10
2.5. Statistische Fehleranalyse . . . . .	11
<b>3. Numerische Details</b> . . . . .	<b>12</b>
3.1. Smearing-Methoden . . . . .	12
3.2. Generalisiertes Eigenwertproblem . . . . .	12
<b>4. Ergebnisse</b> . . . . .	<b>13</b>
4.1. Smearing-Methoden . . . . .	13
4.1.1. Optimierung der Smearing-Methoden . . . . .	13
4.1.2. Vergleich der Smearing-Methoden . . . . .	17
4.2. Optimierung mit dem generalisierten Eigenwertproblem . . . . .	20
<b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b> . . . . .	<b>23</b>
<b>A. Anhang</b> . . . . .	<b>24</b>
A.1. Umformung des Matrixexponentials von einer Lie-Algebra $\mathfrak{su}(2)$ -Matrix . . . . .	24
A.2. Zusätzliche Ergebnisse zu den Smearing-Methoden . . . . .	25
<b>Literatur</b> . . . . .	<b>26</b>

# 1. Einleitung

Die Quantenchromodynamik (QCD) ist die fundamentale Quantenfeldtheorie (QFT) der Quarks und Gluonen. Die QCD-Wirkung weist eine Invarianz unter Rotationen im Farbraum auf, die durch die Eichgruppe  $SU(3)$  charakterisiert wird. Daher gibt es bei der Dynamik der Quarks und den Gluonen Selbstwechselwirkungen, die durch die nicht-abelsche Eichtheorie  $SU(3)$  beschrieben werden. Diese Theorie wurde erstmals im Jahr 1954 von Yang und Mills entwickelt.

Durch die Verwendung der Gitterfeldtheorie besteht die Möglichkeit, sämtliche Berechnungen numerisch durchzuführen. Hierzu wird die vierdimensionale Raumzeit diskretisiert und auf einem erzeugten euklidischen Gitter mithilfe von Monte-Carlo-Simulationen Eichfeldkonfigurationen erstellt.

In der Gitter-QCD stellt die Problematik der Eichfeld-Fluktuationen eine Herausforderung dar. Daher bedarf es geeigneter Methoden, um diese Fluktuationen zu minimieren und eine möglichst genaue Berechnung von physikalischen Größen zu ermöglichen.

Der Fokus dieser Arbeit liegt darauf, die numerische Berechnung des statischen Potentials mithilfe verschiedener Techniken zu optimieren. Dies geschieht nicht in der vollen QCD mit  $SU(3)$ , sondern in der sogenannten  $SU(2)$ -Yang-Mills-Theorie. In dieser Theorie treten keine dynamischen Quarks auf, sondern statische Quarks mit unendlich hoher Masse. Daher liefert die  $SU(2)$ -Theorie trotz der falschen Eichgruppe genaue Ergebnisse für das statische Quark-Antiquark-Potential. Außerdem ist der Rechenaufwand in der  $SU(2)$ -Theorie geringer, was es ermöglicht, Optimierungen mit vielen unterschiedlichen Parametereinstellungen genauer durchzuführen [1].

Eine Methode zur Optimierung ist das sogenannte Smearing (Verschmierung). Dabei werden zu jedem Gluon Nachbar-Gluonen hinzugefügt, um die Gluonenwolke bzw. den Fluxtube zwischen zwei Quarks auf dem Gitter zu modellieren. Dadurch wird der Operator so verändert, dass der Überlapp zwischen dem Vakuum und dem untersuchten Zustand verbessert wird. Ohne die Smearing-Methode würde ein willkürlicher Überlapp zu anderen Zuständen auftreten, die nicht von Interesse sind und somit zu starken Fluktuationen führen [2].

Wenn Korrelationsmatrizen von Operatoren verwendet werden, können die Operatoren mithilfe der Smearing-Methoden optimiert werden, um Zustände, die nicht betrachtet werden sollen, herauszufiltern, um den gewünschten Zustand reiner zu erhalten. Die Lösung der Korrelationsmatrizen erfolgt in der Gitter-QCD durch das generalisierte Eigenwertproblem [3].

Die Optimierung der Smearing-Methode spielt eine bedeutende Rolle in der Gitter-QCD. In Bachelorarbeiten der Goethe-Universität zur Gitter-QCD wurden von M. Stilger [4] mit APE-Smearing und Blocking sowie von K. Jamaly [5] mit APE- und HYP-Smearing Ansätze zur Verbesserungen des statischen Potentials erforscht. Auch an anderen Universitäten spielt die Optimierung mit den Smearing-Methoden eine wichtige Rolle. Beispielsweise hat F. Geles in seiner Diplomarbeit [2] (Karl-Franzens-Universität Graz) die Effektivität von APE-, HYP- und STOUT-Smearing getestet. Die weiterentwickelten Smearing-Methoden HYP und STOUT sind normalerweise für andere physikalische Fragestellungen als das statische Potential vorgesehen. Beispielsweise kann HYP-Smearing verwendet werden, um durch die Modellierung des Flux-Tubes Zustände mit bestimmten Symmetrien zu isolie-

ren, vgl. Referenz [6]. Mit dem STOUT-Smearing können modernere Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmen (HMC) verwendet werden, da keine Projektion erforderlich ist, wie wir später sehen werden [2]. In dieser Arbeit wird untersucht, ob die modernen Smearing-Methoden HYP und STOUT das statische Potential im Vergleich zum herkömmlichen APE-Smearing verbessern oder effektiver bestimmen können. Ebenso wird überprüft, ob das bereits in den Referenzen [3, 7–9] genutzte generalisierte Eigenwertproblem zur weiteren Optimierung herangezogen werden kann.

## 2. Theoretische Grundlagen

### 2.1. Gitter-QCD

Im Folgenden werden Aspekte der Gitter-QCD dargelegt, die für diese Arbeit relevant sind. Eine ausführlichere Diskussion ist in der einführenden Literatur zu finden, siehe [1, 10]; die unten verwendete Notation basiert hauptsächlich auf [1].

Die Gittereichtheorie, eine Anwendung der Gitterfeldtheorie auf Eichtheorien, ermöglicht die numerische Auswertung von Korrelationsfunktionen im Pfadintegralformalismus. Dabei wird der kontinuierliche Raum-Zeit-Bereich durch eine endliche Anzahl diskreter Punkte  $n \in \Lambda$  ersetzt, die sich auf einem vierdimensionalen euklidischen Gitter

$$\Lambda = \{n = (\mathbf{n}, n_t) \mid 0 \leq n_i < L, i = x, y, z; 0 \leq n_t < T\} \quad (2.1)$$

befinden.

Die vier Dimensionen entsprechen den räumlichen Koordinaten  $\mathbf{r} = a\mathbf{n}$  und der imaginären Zeit  $t = i\tau = an_t$ , die durch die Wick-Rotation aus der realen Zeit  $\tau$  abgeleitet wird. Durch die Verwendung der imaginären Zeit wird die Metrik euklidisch. Die zeitlichen und räumlichen Intervalle werden typischerweise mit demselben Gitterabstand  $a$  diskretisiert, wodurch eine hyperkubische Gitterstruktur mit dem Volumen  $T \times L^3$  entsteht. Hierbei stehen  $T$  und  $L$  für die zeitliche und räumliche Ausdehnung des Gitters  $\Lambda$ .

In der Gitter-Eichtheorie  $SU(2)$  werden die Eichfelder der kontinuierlichen Theorie durch sogenannte Link-Variablen

$$U_\mu(n) = \exp(iaA_\mu(n)) \quad (2.2)$$

dargestellt [1].

Die Link-Variablen  $U_\mu(n)$  sind Elemente der Eichgruppe  $SU(2)$  und dienen dazu, einen Gitterpunkt  $n$  mit dem benachbarten Gitterpunkt in  $\mu$ -Richtung,  $n + \hat{\mu}$ , zu verbinden. Basierend auf dem Transformationsverhalten der Link-Variablen  $U_\mu(n)$  ist es möglich, ein eichinvariantes Objekt

$$S_G[U] = \frac{\beta}{2} \sum_{n \in \Lambda} \sum_{\mu < \nu} \text{Re}[\text{tr}(\mathbf{1} - U_{\mu\nu}(n))] \quad (2.3)$$

aus der Spur einer geschlossenen Schleife von Link-Variablen zu konstruieren. Dabei entspricht

$$U_{\mu\nu}(n) = U_\mu(n)U_\nu(n + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(n + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(n) \quad (2.4)$$

einer Plakette, welche die kleinste nicht-triviale geschlossene Schleife bildet [1]. Bei der Wilson-Eich-Wirkung  $S_G[U]$  in Gleichung (2.3) wird über alle Gitterpunkte und Orientierungen summiert, wobei  $\beta = \frac{4}{g^2}$  die inverse Kopplung repräsentiert. Die Wilson-Eich-Wirkung ist ein Bestandteil der QCD-Wirkung  $S = S_F + S_G$ , wobei  $S_F$  für die Fermionen (Quarkfelder und ihre Wechselwirkung mit

Gluonen) steht und  $S_G$  für die Gluonen (Eichfeld und Selbstwechselwirkungsterme). In Szenarien ohne Quarkfelder ist es ausreichend, sich auf den gluonischen Anteil der Wirkung zu konzentrieren – dies entspricht einer reinen Eichtheorie [1].

## 2.2. Statisches Quark-Antiquark-Potential

Das statische Quark-Antiquark-Potential wird durch unendlich schwere Quarks und Antiquarks angenähert, die im Raum fixiert sind und weder dynamisch erzeugt noch vernichtet werden können. Mit dieser Annäherung lassen sich die Pfadintegrale von den statischen Quarks "integrieren", wodurch Berechnungen des statischen Potentials in der reinen SU(2) Yang-Mills-Theorie möglich werden [11].

Um Observablen mithilfe der Gittereichtheorie zu berechnen, benötigt man die euklidische Korrelationsfunktion

$$C(t) = \langle \Omega | O^\dagger(t) O(0) | \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[U] O^\dagger(t) O(0) e^{-S_G[U]}, \quad Z = \int \mathcal{D}[U] e^{-S_G[U]} \quad (2.5)$$

mit den entsprechenden Feldern  $O(t)$ , die dem Operator  $\hat{O}$  im Hilbertraum entsprechen. Diese wirken auf den Vakuumzustand  $|\Omega\rangle$ , die einen Zustand erzeugen, der ein statisches Quark-Antiquark-Paar beschreibt, das an zwei Gitterpunkten mit dem Abstand  $r$  voneinander lokalisiert ist. Hierbei ist  $Z$  die Partitionsfunktion. Die Korrelationsfunktion  $C(t)$ , die den Vakuumerwartungswert darstellt, wird über viele Konfigurationen berechnet und gemittelt. Diese Konfigurationen werden mithilfe einer Monte-Carlo-Simulation erzeugt und repräsentieren verschiedene mögliche Pfade. Mit dem Computer können nicht unendlich viele Pfade berechnet werden, daher weist das Ergebnis immer einen statistischen Fehler auf [1].

Im Folgenden wird die Spektralzerlegung

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} C(t) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_n \left| \langle n | \hat{O} | \Omega \rangle \right|^2 e^{-(E_n - E_\Omega)t} \\ &= \left| \langle 0 | \hat{O} | \Omega \rangle \right|^2 e^{-(E_0 - E_\Omega)t} \end{aligned} \quad (2.6)$$

der Korrelationsfunktion  $C(t)$  aus Gleichung (2.5) für große Zeiten betrachtet. Der Ausdruck in Gleichung (2.6) zeigt die asymptotische Form der Korrelationsfunktion  $C(t)$  für große Zeiten  $t \rightarrow \infty$ , wobei nur der Grundzustand mit Energie  $E_0$  und der Vakuumzustand mit Energie  $E_\Omega$  in den Beitrag einfließen. Nach Gleichung (2.6) wird erwartet, dass der Term mit der niedrigsten Energie  $E_0$  den Zustand beschreibt, der unser statisches Quark-Antiquark-Paar repräsentiert [1, 10, 12].

Des Weiteren entspricht das statische Quark-Antiquark-Potential

$$V(r) = E_0(r) - E_\Omega \quad (2.7)$$

der Energie-Differenz zwischen dem Grundzustand  $E_0(r)$  des Quark-Antiquark-Paares bei der Abstandstrennung  $r$  und der Energie  $E_\Omega$  des Vakuumzustands. Daher kann das statische Potential durch



einen exponentiellen Fit an die Korrelationsfunktion  $C(t)$  gewonnen werden. Eine häufig verwendete Methode besteht darin, das statische Potential durch einen Fit an das gebildete Plateau bei großen Zeiten  $t$  zu bestimmen.

Dabei verwendet man

$$V(r) = \lim_{t \rightarrow \infty} V_{\text{eff}}(r, t), \quad (2.8)$$

wobei das effektive Potential als

$$V_{\text{eff}}(r, t) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{C(t)}{C(t+a)} \right) \Bigg|_r \quad (2.9)$$

definiert wird. Dieses stellt eine dimensionslose Größe für einen gegebenen Abstand  $r$  dar. Für das statische Potential  $V_{\text{eff}}$  muss der Zeitbereich  $t$  sorgfältig gewählt werden, um statistische Schwankungen sowie Beiträge angeregter Zustände zu minimieren. Diese werden exponentiell  $e^{-E_n t}$  mit zunehmendem  $t$  unterdrückt. Da die Energie der angeregten Zustände  $E_n$  größer als die des Grundzustands  $E_0$  ist, werden die angeregten Zustände bei großen Zeiten stärker unterdrückt. Dennoch tragen sie signifikant zum effektiven Potential bei, wenn die zeitliche untere Grenze des Anpassungsbereichs zu niedrig gewählt wird, vgl. Gleichung (2.6). Die Extraktion angeregter Zustände kann mithilfe des generalisierten Eigenwertproblems (GEWP) erfolgen, siehe späteres Kapitel 2.4.

Gemäß dem String-Modell verhält sich das Potential in der reinen Eichtheorie für große Abstände wie

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + \sigma r. \quad (2.10)$$

Dieses Potential berücksichtigt den Coulomb-Term mit dem Koeffizienten  $B$  und den linearen Term mit dem String-Berechnungskoeffizienten  $\sigma$ , während die Konstante  $A$  eine unphysikalische Energieverschiebung ist, welche in den Gitter-Simulationen des statischen Potentials auftritt [1, 6, 10, 13].

In der Gittereichtheorie werden die Korrelationsfunktionen  $C(t)$  ausgewertet, indem die Vakuumerwartungswerte von den Wilson-Loops

$$W_{\mathcal{L}}[U] = \text{tr} \left[ S(\mathbf{m}, \mathbf{n}, n_t) T^\dagger(\mathbf{n}, n_t) S^\dagger(\mathbf{m}, \mathbf{n}, 0) T(\mathbf{m}, n_t) \right] \quad (2.11)$$

numerisch berechnet werden. Der Wilson-Loop ist ein eichinvariantes Objekt, bestehend aus einer geschlossenen Schleife, die sich aus Eichverbindungen auf dem Gitter zusammensetzt. In der Gleichung (2.11) setzt sich der Wilson-Loop aus den zeitlichen Transportern  $T$  und den räumlichen Transportern  $S$  zusammen. Der zeitliche Transporter  $T(\mathbf{m}, n_t)$  ist das Produkt der zeitlichen Links  $U_4(\mathbf{m}, n_t)$ , welche die Gitterpunkte  $(\mathbf{m}, 0)$  und  $(\mathbf{m}, n_t)$  miteinander verbinden. Der hermitesch konjugierte zeitliche Transporter  $T^\dagger$  verläuft entgegengesetzt zur zeitlichen Richtung des geschlossenen Wilson-Loops. Die räumlichen Transporter  $S$  und  $S^\dagger$  sind für die räumlichen Eichverbindungen der Gitterpunkte zuständig. In dieser Arbeit werden ausschließlich planare Wilson-Loops berechnet, wobei lediglich die Links, welche in die gleiche Richtung zeigen, für die räumlichen Transporter  $S$  und  $S^\dagger$  verwendet werden. Die

räumliche Ausdehnung der Wilson-Schleife ist der Parameter, der die räumliche Trennung  $r$  zwischen Quark und Antiquark definiert, wenn das statische Potential ausgewertet wird, also  $r = a|\mathbf{m} - \mathbf{n}|$ . Bei einem festen Abstand  $r$  verhält sich der gemittelte Wilson-Loop  $\langle W_{\mathcal{L}} \rangle$  ähnlich wie eine Korrelationsfunktion  $C(t)$ . Somit kann das effektive Potential  $V_{\text{eff}}$  mithilfe der gemittelten Wilson-Loop-Werte berechnet werden, indem man für  $C(t) = \langle W_{\mathcal{L}}(t) \rangle$  und  $C(t+a) = \langle W_{\mathcal{L}}(t+a) \rangle$  in Gleichung (2.9) verwendet [1].

### 2.3. Smearing-Methoden

Um das Potential  $V(r)$  zu bestimmen, muss gemäß Gleichung (2.8) das effektive Potential  $V_{\text{eff}}(r, t)$  für große Zeiten  $t \rightarrow \infty$  berechnet werden. Dabei entsteht für das effektive Potential ein Plateau, das gefittet wird und den Wert für das Potential liefert. Die Problematik besteht darin, dass bei großen Zeitabständen starke Fluktuationen auftreten, die dazu führen, dass bei der Berechnung des effektiven Potentials die statistischen Fehler zunehmen, sodass ein Plateau nicht mehr erkennbar ist [14].

Mithilfe des Smearings kann der Operator jedoch so verändert werden, dass eine große Überlappung zwischen dem Grundzustand  $E_0$  und dem Operator  $\hat{O}$  entsteht, sodass  $|0\rangle \approx \hat{O}|\Omega\rangle$  gilt. Dies liegt daran, dass man sich die Gluonen zwischen zwei Quarks als eine Art ausgedehnter Flux Tube (Flussschlauch) vorstellen kann. Die gesmearten Verknüpfungen können diesen Flux Tube und somit den Grundzustand besser modellieren. Gemäß Gleichung (2.6) führt dies dazu, dass die höheren Energiezustände  $E_n$  bereits bei kleinen Zeitabständen unterdrückt sind. Somit kann sich das Plateau frühzeitig bilden und ist weniger fehlerbehaftet.

Smearing, auch Smoothing genannt, bezeichnet einen rekursiven Algorithmus, der mehrmals iteriert werden kann. In jeder Iteration werden die benachbarten Links, die aus der vorherigen Iteration stammen, mit dem aktuellen Link verrechnet. Zuvor sind die benachbarten Links völlig unabhängig voneinander. Allerdings werden sie durch den Algorithmus in geringem Maße angeglichen. Aus diesem Grund wird der Algorithmus als Smearing bezeichnet, da der Link nach jeder Iteration Informationen von den Nachbarn erhält - der Link wird sozusagen "verschmiert" [15].

Im Folgenden werden drei verschiedene Smearing-Methoden behandelt: APE-Smearing, HYP-Smearing und STOUT-Smearing. Diese Methoden werden in dieser Arbeit untersucht und miteinander verglichen.

#### 2.3.1. APE-Smearing

Eine Link-Variable  $U_{\mu}(n)$ , die gesmeart wird, wird als Fat-Link  $V_{\mu}(n)$  bezeichnet, während der Thin-Link einen ungesmearten Link darstellt. Dabei werden zu jedem Link vier Staples mit einem Gewichtungsfaktor  $\alpha$  hinzugefügt. Ein Staple beschreibt den kürzesten Weg zwischen zwei Gitterpunkten, welcher ohne die Verwendung des Links zwischen den beiden Gitterpunkten erfolgt. Der Staple wird als

$$C_{\mu\nu}(n) = U_{\nu}(n)U_{\mu}(n + \hat{\nu})U_{\nu}^{\dagger}(n + \hat{\mu}) \quad (2.12)$$

definiert. Hierbei stellen  $\hat{\mu}$  und  $\hat{\nu}$  Vektoren dar, welche in die Richtung  $\mu$  und  $\nu$  zeigen. Der Staple und der ursprüngliche Link bilden zusammen eine Plakette. Durch eine Projektion nach  $SU(2)$  erhält man die Formel eines Fat-Links

$$V_\mu(n) = \text{Proj}_{SU(2)} \left[ (1 - \alpha) U_\mu(n) + \alpha \sum_{\pm\nu \neq \mu} C_{\mu\nu}(n) \right]. \quad (2.13)$$

Die Projektion nach  $SU(2)$  in Gleichung (2.13) ist notwendig, da das Smearing-Verfahren die Links aus der Eichgruppe  $SU(2)$  herausführt.

Wenn man einen Fat-Link auf die räumliche Richtung einschränkt, erhält man das APE-Smearing. Hierbei muss  $\mu, \nu \neq 0$  in der Gleichung (2.13) gelten [2, 15, 16].

### 2.3.2. HYP-Smearing

Für das hyperkubische Smearing (HYP-Smearing) werden "nested" (verschachtelte) Fat-Links gemäß Gleichung (2.13) verwendet. Dabei nutzt man Fat-Links auf mehreren Ebenen, wobei eine Ebene einem Schritt entspricht, in welchem man über die Staples mittelt.

In dieser Arbeit wird das HYP-Smearing auf das räumliche Smearing beschränkt. Aus diesem Grund erhält man zwei statt drei Ebenen in vier Dimensionen. In der ersten Ebene werden, wie in Kapitel 2.3.1 beschrieben wird, Staples gebildet, welche mit dem ursprünglichen Link  $U_\mu(n)$  summiert werden. Dadurch erhält man die dekorierten Links

$$\begin{aligned} \bar{V}_\mu(n) = \text{Proj}_{SU(2)} \left[ (1 - \alpha_2) U_\mu(n) + \frac{\alpha_2}{2} \sum_{\rho \neq \mu, \nu} \left( U_\rho(n) U_\mu(n + \hat{\rho}) U_\rho^\dagger(n + \hat{\mu}) \right. \right. \\ \left. \left. + U_\rho^\dagger(n - \hat{\rho}) U_\mu(n - \hat{\rho}) U_\rho(n - \hat{\rho} + \hat{\mu}) \right) \right]. \quad (2.14) \end{aligned}$$

Auf der zweiten Ebene werden die erhaltenen dekorierten Links  $\bar{V}_\mu$  aus Gleichung (2.14) erneut mit Staples kombiniert und wieder mit dem ursprünglichen Link  $U_\mu(n)$  summiert, was den gesmearten HYP-Fat-Link

$$\begin{aligned} V_\mu(n) = \text{Proj}_{SU(2)} \left[ (1 - \alpha_1) U_\mu(n) + \frac{\alpha_1}{4} \sum_{\nu \neq \mu} \left( \bar{V}_\nu(n) \bar{V}_\mu(n + \hat{\nu}) \bar{V}_\nu^\dagger(n + \hat{\mu}) \right. \right. \\ \left. \left. + \bar{V}_\nu^\dagger(n - \hat{\nu}) \bar{V}_\mu(n - \hat{\nu}) \bar{V}_\nu(n - \hat{\nu} + \hat{\mu}) \right) \right] \quad (2.15) \end{aligned}$$

ergibt [2, 6, 17].

### 2.3.3. STOUT-Smearing

Eine wichtige Komponente eines Smearing-Algorithmus ist die Rückprojektion in  $SU(2)$ . Solche Projektionen sind nicht eindeutig. Allerdings sollte eine Projektion derart definiert sein, dass alle Sym-

metrieeigenschaften der Link-Variablen erhalten bleiben. Als Projektion für  $SU(2)$  kann man die zu projizierende Matrix durch die Wurzel ihrer Determinante teilen. Eine ausführliche Diskussion zur Projektion findet sich in der Literatur [2] auf Seite 34.

Genauso wie beim APE-Smearing wird über die Staples  $C_{\mu\nu}$  aus Gleichung (2.12) summiert und mit dem adjungierten Link multipliziert,

$$\Omega_\mu(n) = \left( \sum_{\pm\nu \neq \mu} \alpha_{\mu\nu} C_{\mu\nu} \right) U_\mu^\dagger(n), \quad (2.16)$$

wobei  $\alpha_{\mu\nu}$  der Gewichtungsfaktor ist. Wie beim APE- und HYP-Smearing werden in dieser Arbeit lediglich die räumlichen Links gesmeart. Dabei werden alle Links in den Staples unabhängig von ihrer Ausrichtung gleich stark gesmeart. Daher wird in Gleichung (2.16)  $\alpha_{\mu\nu} = \alpha$  gesetzt, wobei  $\mu, \nu \neq 0$  gilt.

Danach wird eine Matrix

$$Q_\mu(n) = \frac{i}{2} \left[ \Omega_\mu^\dagger(n) - \Omega_\mu(n) \right] - \frac{i}{4} \text{tr} \left[ \Omega_\mu^\dagger(n) - \Omega_\mu(n) \right] \quad (2.17)$$

definiert, welche die Eigenschaften der Lie-Algebra  $\mathfrak{su}(2)$  erfüllt, nämlich  $Q_\mu + Q_\mu^\dagger = 0$  und  $\text{tr}(Q_\mu) = 0$ . Im letzten Schritt wird von der Matrix  $Q_\mu(n)$  aus Gleichung (2.17) das Matrixexponential gebildet und an den ursprünglichen Link  $U_\mu(n)$  multipliziert, was den gesmearten Link

$$V_\mu(n) = \exp(iQ_\mu(n)) U_\mu(n) \quad (2.18)$$

ergibt. Indem man im letzten Schritt die Lie-Algebra  $\mathfrak{su}(2)$ -Matrix  $Q_\mu(n)$  durch das Matrixexponential abbildet, erhält man ein Element der Lie-Gruppe  $SU(2)$ , bzw. ein Element aus  $SU(2)$  [18]. In Gleichung (2.18) wird das Matrixexponential mit dem ursprünglichen Link  $U_\mu(n)$  multipliziert. Da beide Elemente in  $SU(2)$  liegen, stellt der gesmearte Link  $V_\mu(n)$  ebenfalls ein Element von  $SU(2)$  dar. Der gesmearte Link hat dieselben Symmetrietransformationseigenschaften wie der ursprüngliche Link [2, 19, 20].

Um die Gleichung (2.18) im Code zu implementieren, kann man das Matrixexponential als

$$V_\mu(n) = \left[ \cos(\|iQ_\mu(n)\|) \mathbb{1} + \sin(\|iQ_\mu(n)\|) \frac{iQ_\mu(n)}{\|iQ_\mu(n)\|} \right] U_\mu(n) \quad (2.19)$$

umschreiben, wobei  $\|iQ_\mu(n)\|$  die Normierung der Matrix darstellt (siehe Anhang A.1). Die Herleitung des Matrixexponentials aus Gleichung (2.19) ist im Anhang A.1 zu finden.

## 2.4. Generalisiertes Eigenwertproblem

Das generalisierte Eigenwertproblem (GEWP) ist eine Technik zur Analyse von Korrelationsmatrizen, welche die Extraktion mehrerer Energieniveaus ermöglicht. Durch das Lösen des GEWP einer gegebenen  $(N \times N)$ -Korrelationsmatrix können  $N$  Energiezustände  $E_n$  mit  $n = 0, \dots, N - 1$  berechnet werden [3, 8]. Andererseits können mit dem GEWP  $N - 1$  angeregte Zustände aus dem Grundzustand  $E_0$  elimi-

niert werden, wodurch das Plateau zu früheren Zeiten betrachtet werden kann. Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Optimierung des Grundzustands  $E_0$ , wofür das GEWP verwendet wird, während die höheren Zustände weitgehend irrelevant sind. Im Folgenden wird dargestellt, wie die Energiezustände bestimmt werden können. Anschließend wird das Ritz-Verfahren im Bezug auf das GEWP erläutert.

### 2.4.1. Bestimmung der Energiezustände

Indem man die Korrelationsfunktion  $C(t)$  aus Gleichung (2.5) mit zwei verschiedenen Operatoren  $\hat{O}_i$  und  $\hat{O}_j$  betrachtet, erhält man nach [3, 8] eine  $(N \times N)$ -Korrelationsmatrix  $C_M(t)$  mit den Einträgen

$$C_{ij,M}(t) = \langle O_i(t) O_j^*(0) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_{ni} \psi_{nj}^* e^{-E_n t}, \quad i, j = 1, \dots, N, \\ \psi_{ni} = \langle 0 | \hat{O}_i | n \rangle, \quad E_n < E_{n+1}. \quad (2.20)$$

In dieser Gleichung wird von nicht entarteten Energieniveaus ausgegangen. Dabei sind die Zustände  $|n\rangle$  mit  $\langle m | n \rangle = \delta_{mn}$  Eigenzustände des Hamiltonians. Bei allen Energiezuständen  $E_n$  ist die Vakuumenergie  $E_\Omega$  abgezogen worden.

Für das GEWP nehmen wir nach [7] an, dass lediglich  $N$  Zustände zur Korrelationsmatrix beitragen, wodurch sich die Gleichung (2.20) zu

$$C_{ij,M}(t) = \sum_{n=0}^{N-1} \psi_{ni} \psi_{nj}^* e^{-E_n t} \quad (2.21)$$

vereinfacht. Diese Vereinfachung approximiert die  $(N \times N)$ -Korrelationsmatrix  $C_M(t)$  aus Gleichung (2.21) recht gut, weshalb wir sie im Weiteren zu (2.20) als äquivalent betrachten. Nun können wir die Gleichung des GEWP als

$$C_M(t) \mathbf{v}_n(t, t_0) = \lambda_n(t, t_0) C_M(t_0) \mathbf{v}_n(t, t_0), \quad n = 0, \dots, N-1 \quad (2.22)$$

auffassen [3, 8].

Durch das Lösen des GEWP kann man die Eigenwerte  $\lambda_n(t, t_0) = \exp(-E_n(t - t_0))$  berechnen, die eine Korrelation zur Energie aufweisen. Des Weiteren lässt sich aus der Korrelationsmatrix  $C_M(t)$  mithilfe der Eigenvektoren  $\mathbf{v}_n$  des GEWP die Korrelationsfunktion

$$\tilde{C}_n(t_C) = \mathbf{v}_n^\dagger C_M(t_C) \mathbf{v}_n \propto e^{-E_n t_C} \quad (2.23)$$

bestimmen. Dadurch kann man, wie in Gleichung (2.9) in Kapitel 2.2 beschrieben wurde, die effektive Energie mit

$$E_n^{\text{eff}}(t, t_0) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{\lambda_n(t, t_0)}{\lambda_n(t+a, t_0)} \right) \quad \text{oder} \quad E_n^{\text{eff}}(t_C) = \frac{1}{a} \ln \left( \frac{\tilde{C}_n(t_C)}{\tilde{C}_n(t_C + a)} \right) \quad (2.24)$$

berechnen. Die Energie erhält man durch  $E_n = \lim_{t \rightarrow \infty} E_n^{\text{eff}}(t, t_0)$  oder  $E_n = \lim_{t_C \rightarrow \infty} E_n^{\text{eff}}(t_C)$ .

### 2.4.2. Ritz-Verfahren

Das Ritz-Verfahren ist ein Variationsprinzip zur Ermittlung des kleinsten Eigenwerts in einem Eigenwertproblem. Im Kontext der Quantenmechanik besagt dieses Prinzip, dass die Gesamtenergie  $E_0$  des Systems im Grundzustand  $|\alpha_0\rangle$  sowie für beliebige Zustände  $|\alpha\rangle$  die Beziehung

$$\frac{\langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle} \geq E_0 \quad (2.25)$$

gemäß [21] erfüllt. Dabei können Testvektoren

$$|\alpha_{\mathbf{c}}\rangle = \sum_n c_n |\beta_n\rangle \quad (2.26)$$

als Linearkombinationen von der Menge  $\{|\beta_n\rangle\}$  gebildet werden, die eine Orthonormalbasis von Eigenzuständen  $\hat{H}|\beta_n\rangle = E_n|\beta_n\rangle$  mit  $n \in \mathbb{N}_0$  darstellen. Diese werden über den Parameter  $\mathbf{c}$  variiert. Ziel ist es, die linke Seite der Gleichung (2.25) zu minimieren. Das erhaltene Minimum  $|\alpha_{\mathbf{c},\text{min}}\rangle$  liefert eine Näherung des Zustandsvektors des Grundzustands  $E_0$  [22].

Im Zusammenhang mit dem GEWP betrachten wir einen beliebigen Testzustand  $|\psi\rangle$  als Linearkombination der Komponenten des Vektors  $\mathbf{a}$  und der Zustände  $|\phi_j\rangle$ , die den N-dimensionalen Raum bilden, welcher in der Korrelationsmatrix  $C_M$  enthalten ist. Hierbei nehmen wir an, dass der Vektor  $\mathbf{a}$  proportional zum Eigenvektor des Grundzustands  $\mathbf{v}_0(t, t_0)$  ist. Dabei gilt

$$|\psi\rangle = \sum_j a_j |\phi_j\rangle, \quad \mathbf{a} \propto \mathbf{v}_0(t, t_0). \quad (2.27)$$

Wenn wir für  $t_0 = t - a$  wählen und die Korrelationsfunktionen

$$\tilde{C}_\psi(t) = \mathbf{a}^\dagger C_M(t) \mathbf{a} = \langle \psi | e^{-\hat{H}(t-t_0)} | \psi \rangle = \langle \psi | e^{\hat{H}} | \psi \rangle \quad (2.28)$$

sowie

$$\tilde{C}_\psi(t-a) = \mathbf{a}^\dagger C_M(t-a) \mathbf{a} = \langle \psi | e^{-\hat{H}(t-a-t_0)} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \quad (2.29)$$

aus der Korrelationsmatrix  $C_M$  berechnen, können wir zeigen, dass für die effektive Energie gemäß Gleichung (2.24) das Ritz-Verfahren erhalten wird:

$$\exp(aE_\psi^{\text{eff}}(t-a)) = \frac{\tilde{C}_\psi(t-a)}{\tilde{C}_\psi(t)} = \frac{\langle \psi | e^{\hat{H}} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq \exp(aE_0). \quad (2.30)$$

Gemäß des Anhangs der Referenz [9] wurde gezeigt, dass die effektive Energie  $E_\psi^{\text{eff}}$  für  $\mathbf{a} \propto \mathbf{v}_0(t, t_0)$  minimiert wird. Dadurch wird in Gleichung (2.30) die Ungleichung  $E_\psi^{\text{eff}}(t-a) \geq E_0$  begründet. Somit sind

die Koeffizienten des Testzustands mit minimaler effektiver Energie identisch mit den Komponenten der Eigenvektoren  $\mathbf{v}_0(t, t_0)$  aus dem GEWP mit  $t_0 = t - a$ .

## 2.5. Statistische Fehleranalyse

Alle statistischen Fehler in dieser Arbeit wurden mithilfe der Jackknife-Methode analysiert. Die relevanten Formeln, die für diese Arbeit von Bedeutung sind, werden im Folgenden behandelt. Weitere Informationen finden sich in den Quellen [1, 23, 24].

Die grundlegende Idee der Jackknife-Methode besteht darin, aus dem ursprünglichen Datensatz  $\theta_1, \dots, \theta_N$  reduzierte Jackknife-Werte

$$\theta_n^J = \frac{1}{N-1} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N \theta_m \quad (2.31)$$

zu erstellen. Dabei wird der Mittelwert unter Auslassung des jeweiligen  $n$ -ten Werts gebildet. Mithilfe dieser Untergruppe kann die Standardabweichung mit

$$\sigma = \sqrt{\frac{N-1}{N} \sum_{n=1}^N (\theta_n^J - \bar{\theta})^2}, \quad \bar{\theta} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \theta_n^J \quad (2.32)$$

bestimmt werden. Hierbei sei angemerkt, dass  $\bar{\theta}$  der Mittelwert ist, der aus den Jackknife-Werten berechnet werden kann [1, 24].

Des Weiteren hängt der Fehler auch mit der Rechenzeit  $t_R$  zusammen, da mit zunehmender Rechenzeit mehr Datensätze  $N$  berechnet werden können. Der Fehler hängt gemäß  $\sigma \propto 1/\sqrt{N}$  von der Anzahl  $N$  ab. Dabei lässt sich der über die Rechenzeit normierte Fehler mit  $\sigma_R = \sqrt{t_R} \sigma$  berechnen [23].

### **3. Numerische Details**

Das statische Potential wurde in der reinen  $SU(2)$  Eichtheorie optimiert. Dabei wurden Eichfeldkonfigurationen mithilfe von Monte-Carlo-Simulationen mit dem Heat Bath Algorithmus auf einem  $24^4$ -Gitter und  $\beta = 2.5$  erstellt. Das effektive Potential wurde aus dem gemittelten Wert des Wilson-Loops von 100 Konfigurationen ermittelt. Das Programm für die Simulation und Berechnung wurde von der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Wagner zur Verfügung gestellt.

#### **3.1. Smearing-Methoden**

Das APE-Smearing aus dem Kapitel 2.3.1 ist bereits in das Programm integriert und wird für die numerischen Berechnungen verwendet. Ein vorhandenes Programm von Prof. Dr. Wagner, das ursprünglich sowohl räumliches als auch zeitliches HYP-Smearing durchführte, wurde angepasst, um ausschließlich räumliches HYP-Smearing gemäß Kapitel 2.3.2 zu verwenden. Die Implementierung des STOUT-Smearing-Programms und die zugehörige Herleitung aus Anhang A.1 wurden von mir umgesetzt. Die Monte-Carlo-Simulations- und Wilson-Loop-Berechnungsprogramme sowie die Smearing-Methoden wurden in C/C++ entwickelt. Für die Datenanalyse wurde ein eigener Python-Code unter Verwendung der Jackknife-Methode genutzt.

#### **3.2. Generalisiertes Eigenwertproblem**

Für das generalisierte Eigenwertproblem wurde ein Programm von Prof. Dr. Wagner verwendet. Die Analyse der Korrelationsmatrix wurde eigenständig in Python durchgeführt, unter Verwendung der Bibliothek "pyerrors" gemäß [25], um die statistischen Fehlerberechnungen mittels der Jackknife-Methode durchzuführen.



## 4. Ergebnisse

### 4.1. Smearing-Methoden

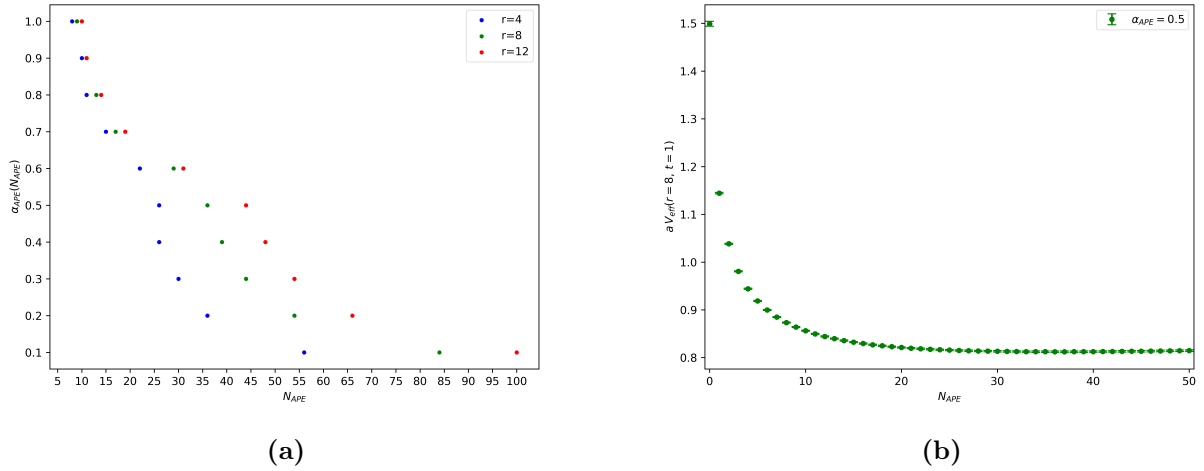
Das Ziel ist, eine Optimierung für die Smearing-Verfahren APE, HYP und STOUT zu erreichen. Dabei sollen die optimalen Parametereinstellungen für die Smearing-Verfahren ermittelt werden. Die zu optimierenden Parameter umfassen die Gewichtungsfaktoren  $\alpha_{\text{APE}}$ ,  $\alpha_{1,\text{HYP}}$ ,  $\alpha_{2,\text{HYP}}$  und  $\alpha_{\text{STOUT}}$  sowie die Anzahl der Smearing-Schritte  $N_{\text{APE}}$ ,  $N_{\text{HYP}}$  und  $N_{\text{STOUT}}$ . Ein weiterer Aspekt ist die Überprüfung, ob die moderneren Smearing-Methoden HYP- und STOUT-Smearing bei optimaler Einstellung eine Verbesserung im Vergleich zum gängigen APE-Smearing bringen.

Hierfür wird die Gleichung (2.9) verwendet, um das effektive Potential zu bestimmen. Beim Plotten des effektiven Potentials über die Zeit  $t$  ergibt sich ein Plateau für große Zeiten. Wie bereits in Kapitel 2.3 erwähnt wurde, ist das Ziel der Smearing-Methoden, das Plateau früher zu erreichen. Für die Optimierung wird das effektive Potential zu einem frühen und festen Zeitpunkt  $t = 1$  betrachtet und über die genannten Parameter variiert. Eine Parametereinstellung wird als geeigneter angesehen, wenn sie einen niedrigeren Wert des effektiven Potentials liefert und dabei einen möglichst geringen Fehler aufweist.

Zunächst wird die Optimierung der verschiedenen Smearing-Methoden durchgeführt. Anschließend erfolgt ein Vergleich dieser Methoden hinsichtlich der optimalen Parametereinstellungen und der benötigten Rechenzeit.

#### 4.1.1. Optimierung der Smearing-Methoden

Zuerst betrachten wir die Optimierung des APE-Smearing. Dafür wurden alle Kombinationen von  $N_{\text{APE}} = 0, 1, \dots, 100$  und  $\alpha_{\text{APE}} = 0.1, 0.2, \dots, 1.0$  durchgeführt. Für jedes  $\alpha_{\text{APE}}$  wurde die optimale Anzahl an Iterationsschritten gefunden. Dabei wurden so viele Iterationsschritte durchgeführt bis ein Minimum erreicht wurde. Dies wurde für die räumlichen Ausdehnungen  $r = 4$ ,  $r = 8$  und  $r = 12$  umgesetzt, wobei die Auswahl der Ausdehnungen einem kleinen, mittleren und großen Wilson-Loop entspricht. In der linken Abbildung 4.1a sind für die genannten räumlichen Ausdehnungen die optimale Anzahl von Smearing-Schritten  $N_{\text{APE}}$  für jedes  $\alpha_{\text{APE}}$  in Gittereinheiten dargestellt. In der rechten Abbildung ist das effektive Potential für einen festen Gewichtungsfaktor  $\alpha_{\text{APE}} = 0.5$  und Ausdehnung  $r = 8$  in Abhängigkeit von den Smearing-Schritten  $N_{\text{APE}}$  zu erkennen.

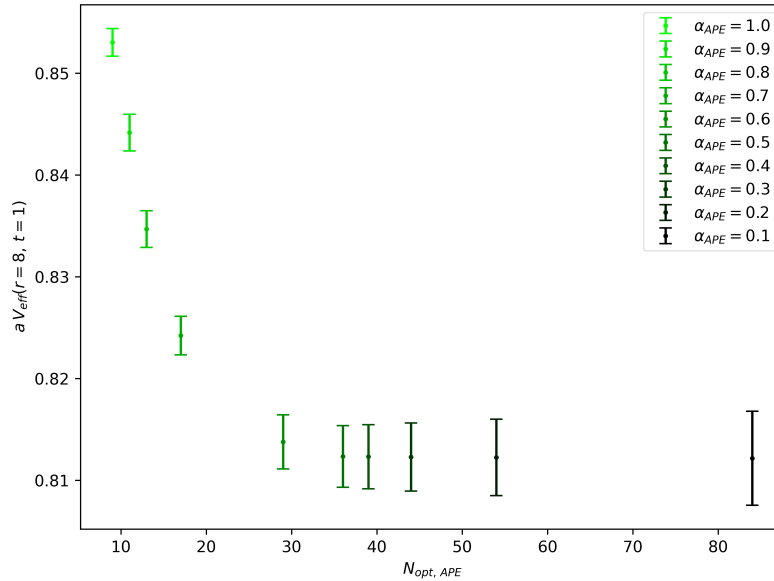


**Abb. 4.1:** Statisches Potential mit APE-Smearing: a) Optimale Parametereinstellung von  $\alpha_{\text{APE}}$  und  $N_{\text{APE}}$  für  $r = 4, 8, 12$ . b) Effektives Potential in Abhängigkeit der Anzahl der Smearing-Schritte für  $\alpha_{\text{APE}} = 0.5$  und  $r = 8$ .

Anhand der Abbildung 4.1a lässt sich erkennen, dass bei größerer räumlicher Ausdehnung eine höhere Anzahl von Smearing-Schritten  $N_{\text{APE}}$  bei einem festen  $\alpha_{\text{APE}}$  erforderlich ist. Der Grund dafür ist, dass ein ausgedehnter Flux-Tube zwischen den Gitterpunkten bzw. den Quarks erzeugt werden soll, um eine bessere Überlappung mit dem Grundzustand zu erreichen. Bei größerer räumlicher Ausdehnung müssen mehr Nachbar-Links an den ursprünglichen Link angehängt werden.

Abbildung 4.1b zeigt eine exponentiell abfallende Kurve, die ab ca. 40 Smearing-Schritten leicht ansteigt. Aufgrund der Fehlerbalken ist kein signifikantes Minimum erkennbar. Allerdings wurde der Einfachheit halber die optimale Parametereinstellung mithilfe eines Algorithmus über das Minimum ohne Berücksichtigung der Fehler automatisch ermittelt. Dies wurde beim HYP- und STOUT-Smearing ebenfalls so gehandhabt. Das hat zur Folge, dass ab einer bestimmten Anzahl von Iterationsschritten keine signifikante Verbesserung mehr erzielt wird und die Iteration daher gestoppt werden sollte, da mit zunehmender Iterationsanzahl auch der Rechenaufwand bzw. die Rechenzeit wächst (siehe Abbildung 4.6).

Bisher haben wir für jeden Gewichtungsfaktor  $\alpha_{\text{APE}}$  die optimale Anzahl an Iterationsschritten  $N_{\text{APE}}$  gefunden. Nun wollen wir herausfinden, welche Gewichtungsfaktoren  $\alpha_{\text{APE}}$  optimal sind. Abbildung 4.2 verdeutlicht, dass der Wert des effektiven Potentials mit einem kleineren  $\alpha_{\text{APE}}$  und mehr Iterationsschritten  $N_{\text{APE}}$  verbessert werden kann.

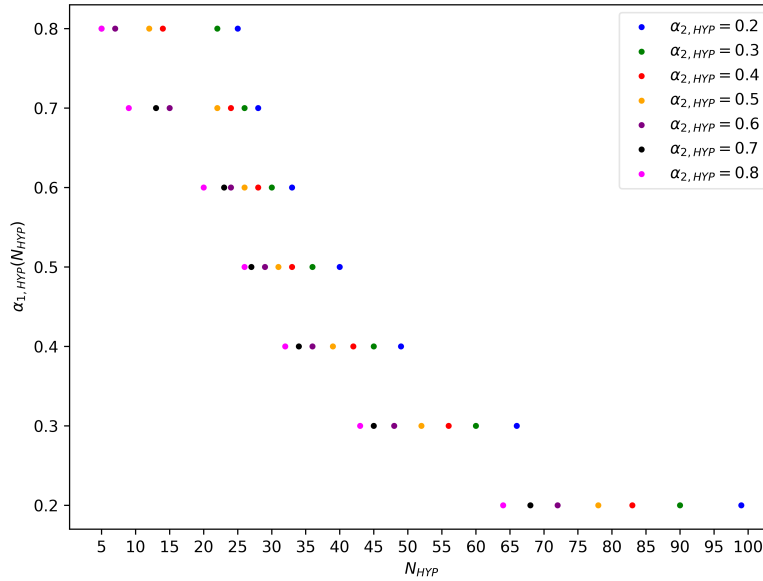


**Abb. 4.2:** Statisches Potential mit APE-Smearing in Abhängigkeit der Smearing-Schritte.

Hierbei wurde der über die Rechenzeit normierte Fehler  $\sigma_R$  aus Kapitel 2.5 verwendet. Anhand der Abbildung 4.2 ist erkennbar, dass sich ein Plateau bildet, welches für Gewichtungsfaktoren von  $\alpha_{APE} \leq 0.6$  erreicht wird. Aufgrund der Rechenzeit steigt der Fehler  $\sigma_R$  mit zunehmender Anzahl an Iterationsschritten an, die bei einem kleineren Gewichtungsfaktor erforderlich sind. Daher sollte man keinen zu kleinen Gewichtungsfaktor wählen, da dieser keine weitere Verbesserung bringt und aufgrund der hohen Anzahl an Smearing-Schritten große Rechenzeiten verursachen kann. Basierend auf meinen Berechnungen finden wir anhand der Abbildung 4.2 eine geeignete Einstellung des Gewichtungsfaktors im Bereich von  $0.4 \leq \alpha_{APE} \leq 0.6$ .

In Referenz [26] wird angegeben, dass ein Gewichtungsfaktor über 0.6 in der Praxis die Links nicht gut smearen kann. Diese Aussage kann durch Abbildung 4.2 bestätigt werden, da wir sehen, dass ein  $\alpha_{APE} > 0.6$  die Links immer schlechter smearen lässt.

Nun betrachten wir die Optimierung des HYP-Smearings. Dafür wurden alle Kombinationen von  $N_{HYP} = 0, 1, \dots, 100$  und  $\alpha_{1,2,HYP} = 0.2, 0.3, \dots, 0.8$  durchgeführt, um das Minimum zu finden. Aufgrund der Beobachtungen beim APE-Smearing wissen wir, dass ein zu kleiner Gewichtungsfaktor von unter 0.2 zu vielen Iterationsschritten führt und ein großer Faktor über 0.8 die Smearing-Eigenschaften beeinträchtigt, wie in Abbildung 4.2 gezeigt wird. In Abbildung 4.3 wird die optimale Anzahl von Smearing-Schritten  $N_{HYP}$  für jedes  $\alpha_{1,2,HYP}$  für die mittlere räumliche Ausdehnung  $r = 8$  in Gittereinheiten dargestellt.

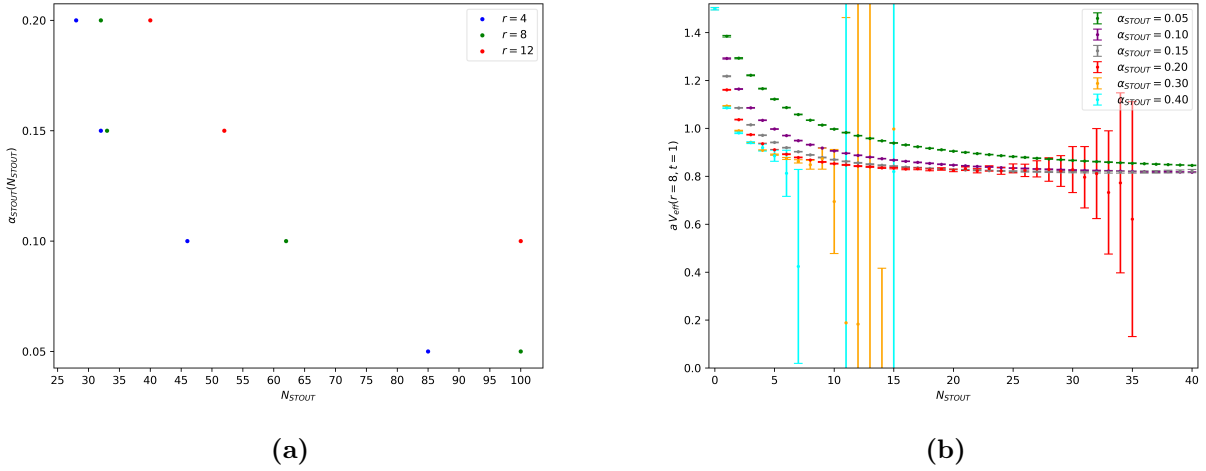


**Abb. 4.3:** Statisches Potential des HYP-Smearings mit der optimalen Parametereinstellung von  $\alpha_{1,2,HYP}$  und  $N_{HYP}$  für eine räumlichen Ausdehnung von  $r = 8$ .

Anhand dieser Abbildung ist erkennbar, dass bei einer Verringerung des Gewichtungsfaktors  $\alpha_{1,HYP}$  bei gleichzeitig festem  $\alpha_{2,HYP}$  mehr Smearing-Schritte erforderlich sind, verglichen mit der gegenteiligen Situation, bei der  $\alpha_{2,HYP}$  verringert wird, während  $\alpha_{1,HYP}$  konstant bleibt. Dies liegt daran, dass der Gewichtungsfaktor  $\alpha_{1,HYP}$  im Gegensatz zu  $\alpha_{2,HYP}$  einen stärkeren Einfluss auf das HYP-Smearing hat. Wie in Kapitel 2.3.2 beschrieben wird, tragen auf der ersten Ebene des HYP-Smearings 12 Nachbar-Links mit dem Gewichtungsfaktor  $\alpha_{2,HYP}$  zum ursprünglichen Link bei. Auf der zweiten Ebene werden 24 Nachbar-Links mit dem Gewichtungsfaktor  $\alpha_{1,HYP}$  hinzugefügt. Eigentlich sollten nach Kapitel 2.3.2 lediglich 20 Nachbar-Links auf der zweiten Ebene mit dem Gewichtungsfaktor  $\alpha_{1,HYP}$  hinzugefügt werden. Jedoch werden aus Vereinfachungsgründen im Programm 4 Nachbar-Links aus der ersten Ebene doppelt verrechnet und dabei mit dem Gewichtungsfaktor  $\alpha_{1,HYP}$  versehen. Die Ergebnisse für die kleine und große räumliche Ausdehnung sind im Anhang A.2 zu finden.

Zuletzt befassen wir uns mit der Optimierung des STOUT-Smearings. Beim STOUT-Smearing muss der Gewichtungsfaktor  $\alpha_{STOUT}$  sorgfältig gewählt werden, da bei einem hohen Gewichtungsfaktor ein Over-Smearing auftreten kann. Aus Abbildung 4.4b lässt sich entnehmen, dass ab einem Wert von  $\alpha_{STOUT} > 0.2$  das Minimum der Kurve aufgrund der starken Fluktuationen nicht mehr erreicht werden kann. Somit wird insgesamt durch die Verwendung eines kleinen Gewichtungsfaktors eine stärkere Verbesserung mit dem STOUT-Smearing erzielt als mit einem großen Faktor. Anhand von Abbildung 4.4b erkennt man, dass bei  $\alpha_{STOUT} = 0.2$  ab einer Iterationsanzahl von 25 der Wert stark fluktuiert und die Fehler dadurch stark ansteigen, was aufgrund der Anzahl der Iterationen auf ein Over-Smearing hinweist. Das Phänomen des Over-Smearings kann durch die Gleichung (2.18) erklärt werden, da der Gewichtungsfaktor  $\alpha_{STOUT}$  hier in das Matrixexponential einfließt und dieses bei hohen Werten von

$\alpha_{\text{STOUT}}$  rapide ansteigt. Eine ausführliche Diskussion zum Phänomen des Over-Smearings findet sich in Referenz [20].



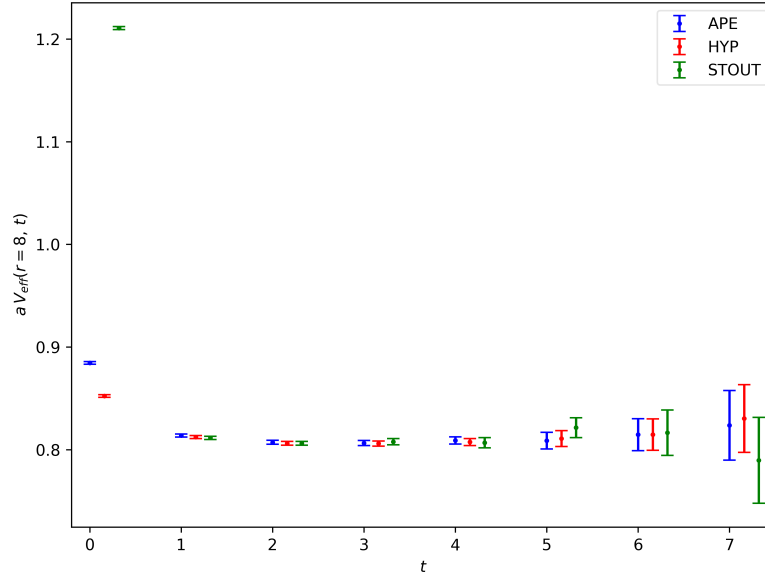
**Abb. 4.4:** Statisches Potential mit STOUT-Smearing: a) Optimale Parametereinstellung von  $\alpha_{\text{STOUT}}$  und  $N_{\text{STOUT}}$  für  $r = 4, 8, 12$ . b) Effektives Potential in Abhängigkeit der Anzahl der Smearing-Schritte für  $r = 8$  und  $t = 1$  für verschiedene Gewichtungsfaktoren  $\alpha_{\text{STOUT}}$ .

Aus diesem Grund wurden für die Optimierung des STOUT-Smearings alle Kombinationen von  $N_{\text{STOUT}} = 0, 1, \dots, 100$  und  $\alpha_{\text{STOUT}} = 0.05, 0.1, \dots, 0.2$  betrachtet und das Minimum gesucht. In der Abbildung 4.4a wird die optimale Anzahl von Smearing-Schritten  $N_{\text{STOUT}}$  für jedes  $\alpha_{\text{STOUT}}$  für den kleinen, den mittleren und den großen Wilson-Loop dargestellt.

#### 4.1.2. Vergleich der Smearing-Methoden

In Kapitel 4.1.1 wurden die Parameter für die Smearing-Methoden APE, HYP und STOUT optimiert. In diesem Kapitel sollen die Wirksamkeit und die Rechenzeit der Smearing-Methoden verglichen werden.

In der Abbildung 4.5 ist das effektive Potential über die Zeit für eine optimale Einstellung von APE-, HYP- und STOUT-Smearing dargestellt.



**Abb. 4.5:** Statisches Potential in Abhängigkeit der Zeit  $t$  bei einer Ausdehnung von  $r = 8$  im Vergleich zwischen APE-, HYP- und STOUT-Smearing (Die Werte auf der x-Achse sind für bessere Sichtbarkeit verschoben.).

Man erkennt, dass das STOUT-Smearing zu Beginn bei  $t = 0$  im Vergleich zu den anderen Smearing-Methoden ein schlechtes Ergebnis liefert. Doch wenn man den ungesmearten Wert des effektiven Potentials  $V_{\text{eff}}(r = 8, t = 0) = 2.8039 \pm 0.0013$  mit dem des STOUT-Smearings vergleicht, zeigt sich eine Verbesserung. In Abbildung 4.5 wird ein Gewichtungsfaktor  $\alpha_{\text{STOUT}} = 0.05$  für das STOUT-Smearing verwendet. Wenn man jedoch einen Gewichtungsfaktor von  $\alpha_{\text{STOUT}} = 0.1$  wählt, wie in Abbildung A.2a des Anhangs A.2 zu sehen ist, erhöht sich der Wert des effektiven Potentials bei  $t = 0$ . Bei einem Gewichtungsfaktor von  $\alpha_{\text{STOUT}} = 0.15$  wird der Wert des effektiven Potentials zum Zeitpunkt  $t = 0$ , sogar größer als beim ungesmearten Fall (vgl. Abbildung A.2b). Das STOUT-Smearing zeigt ab  $t = 5$  größere Fluktuationen und Fehler, vor allem bei einem höheren Gewichtungsfaktor wie  $\alpha_{\text{STOUT}} = 0.1$  oder  $0.15$  (vgl. Abbildungen A.2a, A.2b), im Vergleich zu den anderen Smearing-Methoden. Sowohl das APE- als auch das HYP-Smearing schneiden insgesamt ähnlich gut ab. Beim Zeitpunkt  $t = 0$  liefert das HYP-Smearing einen leicht kleineren Wert.

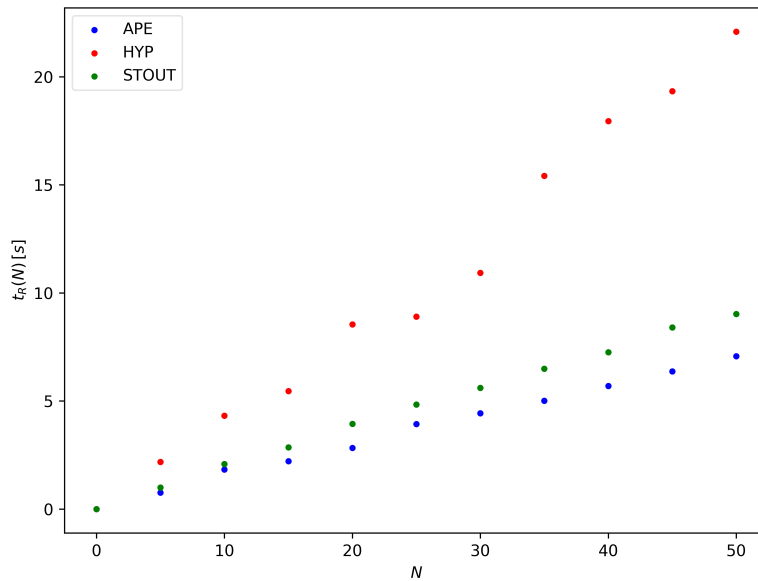
Dennoch sollte beachtet werden, dass die Bestimmung des statischen Potentials über ein Plateau erfolgt. Das bedeutet, dass in Abbildung 4.5 im Zeitbereich  $t = 1, 2, \dots, 4$  für alle Smearing-Methoden das statische Potential durch einen Fit an das Plateau bestimmt werden würde. Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle einzusehen:

Smearing-Methode	$V(r = 8)$
APE	$0.8091 \pm 0.0016$
HYP	$0.8080 \pm 0.0015$
STOUT	$0.8081 \pm 0.0012$

**Tab. 4.1:** Statisches Potential durch Fit im Zeitbereich  $t = 1, 2, \dots, 4$  an das Plateau aus Abbildung 4.5 der Smearing-Methoden APE, HYP und STOUT.

Es ist ersichtlich, dass alle drei Methoden innerhalb des Fehlerbereichs gleiche Ergebnisse für das statische Potential liefern.

Beim Vergleich der Smearing-Methoden wurde bisher lediglich analysiert, wie die drei Smearing-Methoden performen. Nun soll die Rechenzeit in Betracht gezogen werden. In der Gittereichtheorie werden aufwendige Berechnungen durchgeführt. Daher besteht das Interesse, eine Smearing-Methode mit geringer Rechenzeit zu verwenden. In der folgenden Abbildung ist die Rechenzeit für die verschiedenen Smearing-Methoden dargestellt.



**Abb. 4.6:** Rechenzeit  $t_R$  der Smearing-Dauer in Sekunden [s] in Abhängigkeit von der Anzahl von Iterationen  $N$  für die drei Smearing-Methoden APE, HYP und STOUT.

Die Abbildung zeigt, dass die Rechenzeit mit zunehmender Anzahl von Iterationen  $N$  linear ansteigt. Das HYP-Smearing benötigt etwa dreimal so viel Rechenzeit wie das APE-Smearing. Beim HYP-Smearing werden im Programm in einer Iteration auf der ersten Ebene 12 Nachbar-Links und auf der zweiten Ebene 24 Nachbar-Links anstelle von 20, wie bereits im Kapitel 4.1.1 diskutiert, hinzugefügt. Dabei werden 4 Nachbar-Links doppelt berechnet. Insgesamt werden 36 Links im Programm verrechnet, wobei lediglich 32 Links effektiv zum HYP-Smearing beitragen. Dies führt dazu, dass das

HYP-Smearing ineffizienter ist, da es dreimal so viel Rechenzeit benötigt, aber nur eine 2.7-fache Erhöhung des Smearing im Vergleich zum APE-Smearing bietet.

Gemäß Kapitel 2.3.3 ist für das STOUT-Smearing keine Projektion erforderlich. Bei der Projektion in  $SU(2)$  muss die Wurzel der Determinante berechnet werden. Da das Wurzelziehen für den Computer eine langsame Rechenoperation ist, könnte beim STOUT-Smearing Rechenzeit eingespart werden. Interessanterweise benötigt das STOUT-Smearing trotz des Wegfalls der Projektion etwas mehr Zeit als das APE-Smearing. Dies ist auf die Berechnung einer  $\mathfrak{su}(2)$ -Algebra-Matrix und anschließend auf das Matrixexponential beim STOUT-Smearing zurückzuführen (siehe Kapitel 2.3.3). Darüber hinaus ist das APE-Smearing im Vergleich zu den anderen Methoden am einfachsten zu implementieren.

## 4.2. Optimierung mit dem generalisierten Eigenwertproblem

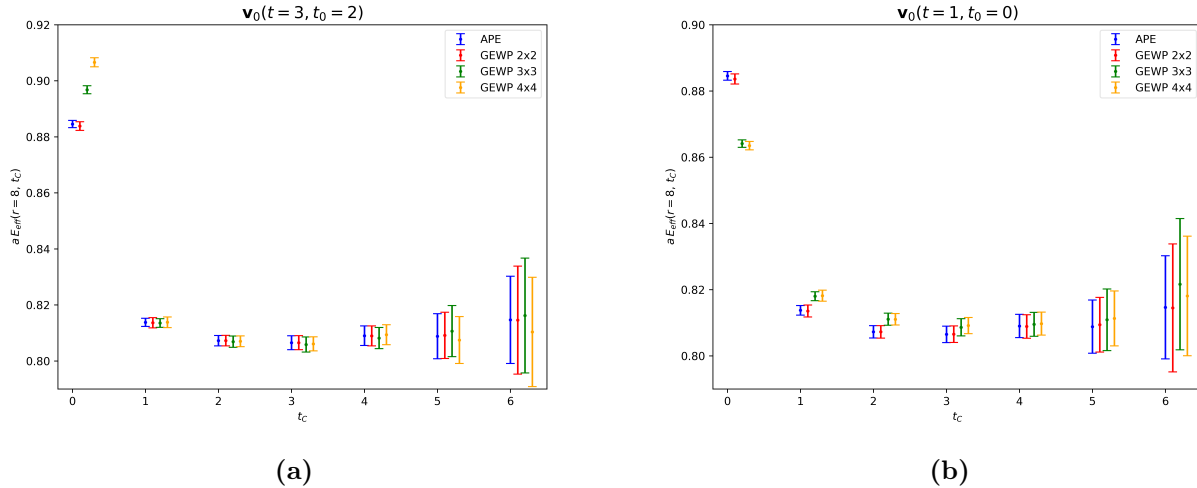
Gemäß Kapitel 2.4 sind im Rahmen des GEWP zwei verschiedene Operatoren  $\hat{O}_i$  und  $\hat{O}_j$  erforderlich. Dies wird dadurch erreicht, indem die räumlichen Transporter  $S$  und  $S^\dagger$  des Wilson-Loops  $W_{\mathcal{L}}$  aus Kapitel 2.2 unterschiedlich gesmeart werden. Hierfür kommt das APE-Smearing zum Einsatz, wobei die Anzahl der Smearing-Schritte bei einem festen Gewichtungsfaktor variiert wird. Die zu optimierenden Parameter sind die Smearing-Schritte  $N_k$  mit  $k = 1, \dots, N$  sowie die Matrixgröße  $N \times N$ .

Die Optimierung des statischen Potentials erfolgt durch die Betrachtung der effektiven Energie des Grundzustands  $E_0$  zu einer frühen Zeit  $t = 0$ . Das Ziel besteht darin, durch Verwendung größerer Matrizen einen kleineren Wert für den Grundzustand zu finden, um eine Abflachung des Potentials zu erreichen, ähnlich wie bei den Smearing-Methoden aus Kapitel 4.1.

Da die direkte Berechnung der effektiven Energie des Grundzustands über die Eigenwerte aufgrund großer Fehler bei kleinen Zeiten nicht möglich war, wurden die Eigenvektoren verwendet, um aus der Korrelationsmatrix eine Korrelationsfunktion mit Gleichung (2.23) zu ermitteln. Dabei wurde ein fester Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t, t_0)$  mit  $t = 3$  und  $t_0 = 2$  gewählt, da dieser sich im Plateau der anderen Eigenvektoren befindet.

Weiterhin wurde für die  $(2 \times 2)$ -Matrix der erste Parameter  $N_1$  auf den besten Wert des APE-Smearing in Bezug auf den gewählten Gewichtungsfaktor  $\alpha_{\text{APE}} = 0.6$  festgelegt (siehe Abbildung 4.1a). Der zweite Parameter  $N_2$  wurde variiert. Dabei wurde der beste Parameter ausgewählt. Der gefundene beste zweite Parameter sowie der zuvor festgelegte erste Parameter wurden für die nächst größere  $(3 \times 3)$ -Matrix beibehalten. Der dritte Parameter  $N_3$  wurde variiert. Dabei wurde erneut der beste Parameter ermittelt. Dieser Prozess wurde bis zur Matrixgröße  $4 \times 4$  durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.7a zu sehen, wobei auffällt, dass die größeren Matrizen für den Zeitpunkt  $t_C = 0$  größere und somit schlechtere Werte liefern. Gleichzeitig zeigt sich, dass für größere Zeiten keine Verbesserung durch die Verwendung größerer Matrizen erzielt wird.





**Abb. 4.7:** Effektive Energie des Grundzustands  $E_0$  über die Zeit  $t_C$  bei einer räumlichen Ausdehnung von  $r = 8$  im Vergleich für verschiedene Matrixgrößen: a) Mit dem Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 3, t_0 = 2)$  des GEWP. b) Mit dem Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 1, t_0 = 0)$  des GEWP. (Die Werte auf der x-Achse sind für bessere Sichtbarkeit verschoben.)

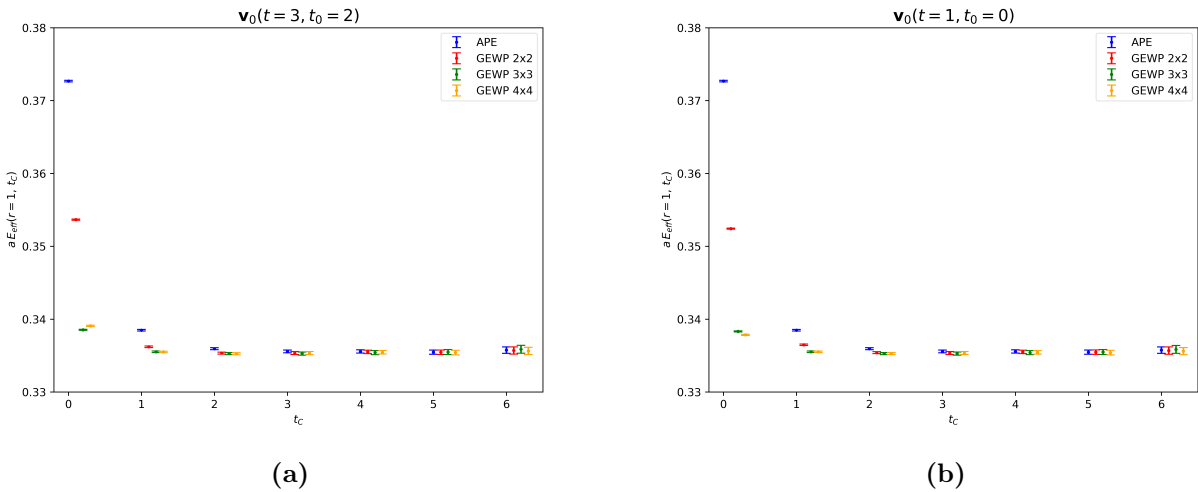
Dies führt insgesamt zu einem Widerspruch, da bei der Verwendung von mehr Freiheitsgraden, die eine größere Matrix bereitstellt, das Ergebnis mindestens genauso gut sein sollte wie das Ursprüngliche. Der Grund dafür ist, dass die Ritz-Bedingung aus Gleichung (2.30) mit einem Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 3, t_0 = 2)$  für den Wert  $E_n^{\text{eff}}(t_0 = 2)$  gilt und diesen optimiert. Außerhalb von  $t_C = 2$  wird die Ritz-Bedingung mit diesem Eigenvektor nicht erfüllt, wodurch die Werte einer größeren Matrix schlechter abschneiden können. Man müsste einen Eigenvektor mit  $\mathbf{v}_0(t = 1, t_0 = 0)$  wählen, was in Abbildung 4.7b der Fall ist. Hierbei sieht man, dass für den Zeitpunkt  $t_C = 0$  die größeren Matrizen einen niedrigeren Wert liefern und somit eine Verbesserung erzielen. Jedoch zeigt sich, dass für größere Zeiten  $t_C$  mit dieser Einstellung keine Verbesserung der Werte erzielt wird, sondern dass teilweise sogar schlechtere Ergebnisse erzielt werden.

Daraus folgt, dass die Optimierung zum Zeitpunkt  $t_C = 0$  mit dem Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 1, t_0 = 0)$  kein verlässlicher Indikator ist. Zum Zeitpunkt  $t_C = 0$  sind auch höhere Zustände  $n > N$  vorhanden, da diese mit  $\exp(-E_n t_C)$  unterdrückt werden, wobei  $E_{n+1} > E_n$  gilt (vgl. Gleichung 2.21). Somit werden bei einer Optimierung zum Zeitpunkt  $t_C = 0$  auch sehr hoch angeregte Zustände  $n > N$  mithilfe der  $N$  Freiheitsgrade der  $(N \times N)$ -Matrix herausgefiltert. Dabei hat die  $(N \times N)$ -Matrix nicht genügend Freiheitsgrade, um alle unendlich vielen Zustände herauszufiltern. Es kann also der Fall eintreten, dass sehr hoch angeregte Zustände  $n > N$  herausgefiltert, während die niedriger angeregten Zustände  $n < N$  nicht gut herausgefiltert werden. Wenn man die effektive Energie des Grundzustands bei größeren Zeiten  $t_C$  betrachtet, tragen die sehr hoch angeregten Zustände  $n > N$  aufgrund der Unterdrückung weniger zur effektiven Energie bei. Währenddessen tragen die niedriger angeregten Zustände  $n < N$  noch bedeutsam bei. Somit werden bei der Optimierung zu einer kleinen Zeit, in diesem Fall  $t_C = 0$ , die sehr hoch angeregten Zustände  $n > N$  durch das GEWP herausgefiltert. Jedoch trifft dies nicht auf die niedriger angeregten Zustände  $n < N$  zu, denn diese sind bei größeren Zeiten weniger unterdrückt.

Letztendlich ist das Ziel, die Energie des Grundzustands im Plateau-Bereich bei größeren Zeiten zu bestimmen. Daher sollte die Optimierung nicht bei zu kleinen Zeiten durchgeführt werden, da dies kontraproduktiv ist.

Wenn man den Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 3, t_0 = 2)$  verwendet, erfüllt man nach Kapitel 2.4.2 zum Zeitpunkt  $t_C = 2$  die Ritz-Bedingung. Bei größeren Zeiten  $t_C > 0$  erkennt man anhand von Abbildung 4.7a, dass die Verwendung größerer Matrizen in meiner Simulation keine signifikante Verbesserung bringt.

Im Folgenden betrachten wir das Gleiche, jedoch mit einem geringen räumlichen Abstand von  $r = 1$ . In Abbildung 4.8a ist zu sehen, dass zum Zeitpunkt  $t_C = 0$  die größeren Matrizen zwar niedrigere Werte aufweisen und somit besser sind. Jedoch schneidet die  $(4 \times 4)$ -Matrix schlechter als die  $(3 \times 3)$ -Matrix ab. Hierbei wurde der Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 3, t_0 = 2)$  verwendet, der nicht zum Zeitpunkt  $t_C = 0$  die Ritz-Bedingung nach Kapitel 2.4.2 erfüllt. Wenn nun der Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 1, t_0 = 0)$  verwendet wird, bei dem zum Zeitpunkt  $t_C = 0$  die Ritz-Bedingung erfüllt ist, zeigt Abbildung 4.8b, dass größere Matrizen bei  $t_C = 0$  tiefere und somit bessere Ergebnisse liefern. Der Grund dafür, warum im Vergleich zu den Ergebnissen mit einer räumlichen Ausdehnung von  $r = 8$  eine Verbesserung mit größeren Matrizen sichtbar ist, liegt vermutlich darin, dass bei einem kleinen räumlichen Abstand von  $r = 1$  die Fehler sehr gering sind. Dadurch wird die Verbesserung erkennbar.



**Abb. 4.8:** Effektive Energie des Grundzustands  $E_0$  über die Zeit  $t_C$  bei einer räumlichen Ausdehnung von  $r = 1$  im Vergleich für verschiedene Matrixgrößen: a) Mit dem Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 3, t_0 = 2)$  des GEWP. b) Mit dem Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 1, t_0 = 0)$  des GEWP. (Die Werte auf der x-Achse sind für bessere Sichtbarkeit verschoben.)

Im Vergleich zum Ergebnis mit räumlichem Abstand  $r = 8$  zeigt sich, dass es keinen Effekt für die Zeiten  $t_C > 0$  gibt, wenn man den Eigenvektor  $\mathbf{v}_0(t = 1, t_0 = 0)$  statt  $\mathbf{v}_0(t = 3, t_0 = 2)$  verwendet, bzw. ob die Ritz-Bedingung bei  $t_C = 0$  oder  $t_C = 2$  erfüllt ist. Dies liegt daran, dass bei einem geringen räumlichen Abstand von  $r = 1$  die Gitterpunkte bzw. Quarks näher beieinander liegen. Dadurch entsteht eine gute Überlappung zwischen den Operatoren und den niedrigeren Zuständen. Das APE-Smearing kann die sphärische Verteilung von Gluonen, die bei diesem kleinen Abstand vorliegt, gut modellieren.

## 5. Zusammenfassung und Ausblick

Insgesamt lässt sich feststellen, dass alle drei Smearing-Methoden (APE, HYP und STOUT) zuverlässige Algorithmen sind, um das Quark-Antiquark-Potential zu bestimmen. Berücksichtigt man jedoch die Rechenzeit und die Implementierungskomplexität beim Programmieren, ergibt sich, dass das APE-Smearing unter den drei Methoden am besten abschneidet. Die beiden anderen Methoden, HYP- und STOUT-Smearing, sind eher für andere physikalische Fragestellungen vorgesehen (vgl. Referenzen [6, 20]), liefern jedoch ebenso gute Ergebnisse. Insbesondere beim STOUT-Smearing muss die Over-Smearing-Problematik berücksichtigt werden, wobei es ratsam ist, einen Gewichtungsfaktor von nicht mehr als 0.2 zu verwenden. Beim APE-Smearing sollte der Gewichtungsfaktor idealerweise nicht größer als 0.6 sein.

In der Bachelorarbeit von Marco Stilger [4] wurde im Ausblick erwähnt, dass das Minimum der Optimierung automatisiert gesucht werden sollte. Dies wurde in dieser Arbeit umgesetzt, jedoch wurde der Fehler dabei nicht berücksichtigt, wodurch unnötig viele Iterationen durchgeführt wurden. Bei der automatisierten Suche des Minimums sollte der Fehler in der Form  $\Delta P/P > k$  für  $k \in (0, 1)$  berücksichtigt werden, wobei  $P = V_{\text{eff}}(N) - V_{\text{eff}}(N + 1)$  und  $N$  die Anzahl der Iterationen ist. Der Faktor  $k$  gibt die Toleranz des Fehlers an. In dieser Arbeit wurde die Optimierung nicht vollständig automatisiert, sondern lediglich die Bestimmung des Minimums. Es wäre möglich, dies in eine vollständig automatisierte Form umzusetzen, bei der das Programm nach Eingabe des Operators automatisch die besten Parameter auswählt.

Beim generalisierten Eigenwertproblem stellt sich heraus, dass die Optimierung zum Zeitpunkt  $t_C = 0$  bei großen räumlichen Ausdehnungen wie  $r = 8$  kein verlässlicher Indikator ist. Idealerweise würde man die effektive Energie im Plateau-Bereich bei größeren Zeiten optimieren, jedoch sind die Fehler dort sehr groß. Daher wäre es notwendig, mehr Statistik zu verwenden, was zusätzliche Rechenleistung erfordert. Aus diesem Grund sollte ein geeigneter Indikator gesucht werden, der nicht zu aufwendig ist, jedoch eine verlässliche Optimierung für größere räumliche Ausdehnungen ermöglicht. Bei kleinen räumlichen Ausdehnungen wie  $r = 1$  ist eine Optimierung zu geringen Zeiten zuverlässig. Auch bei der Optimierung der Smearing-Methoden könnte die Frage aufkommen, ob eine Optimierung zu einem kleinen Zeitpunkt in dieser Arbeit, nämlich bei  $t = 1$ , ein aussagekräftiger Indikator für die Optimierung ist.

In dieser Arbeit wurde die Korrelationsmatrix ausschließlich mit dem APE-Smearing behandelt. Als Ausblick wäre es interessant, verschiedene Smearing-Methoden wie das HYP- oder STOUT-Smearing zu verwenden, um durch deren Eigenschaften der Modellierung neue Zustände zu bestimmen. Hierbei könnte ein komplett automatisiertes Programm entwickelt werden, das automatisch die besten Parametereinstellungen für eine gegebene Matrixgröße sucht.

## A. Anhang

### A.1. Umformung des Matrixexponentialis von einer Lie-Algebra $\mathfrak{su}(2)$ -Matrix

Im Folgenden wird das Matrixexponential für eine Lie-Algebra  $\mathfrak{su}(2)$ -Matrix umgeformt.

*Herleitung.* Gemäß [27] hat eine  $\mathfrak{su}(2)$ -Matrix die Form

$$A = i \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ic & ia + b \\ ia - b & -ic \end{pmatrix}, \quad \sigma_j = \begin{pmatrix} \delta_{j3} & \delta_{j1} - i\delta_{j2} \\ \delta_{j1} + i\delta_{j2} & -\delta_{j3} \end{pmatrix}, \quad j = 1, 2, 3. \quad (\text{A.1})$$

Hierbei sind die  $\sigma_j$  die Pauli-Matrizen. Die Normierung der Matrix  $A$  wird als  $\|A\| = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}$  definiert.

Die exponentielle Taylorentwicklung von einer Matrix  $A$  ist

$$\exp(A) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!} = \mathbb{1} + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \dots \quad (\text{A.2})$$

Wenn man nun das Quadrat der Matrix  $A$  bildet, lässt sich erkennen, dass das Quadrat

$$\begin{aligned} A^2 &= \begin{pmatrix} ic & b + ia \\ b - ia & -ic \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} -(a^2 + b^2 + c^2) & 0 \\ 0 & -(a^2 + b^2 + c^2) \end{pmatrix} \\ &= -(a^2 + b^2 + c^2)\mathbb{1} = -\|A\|^2\mathbb{1} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

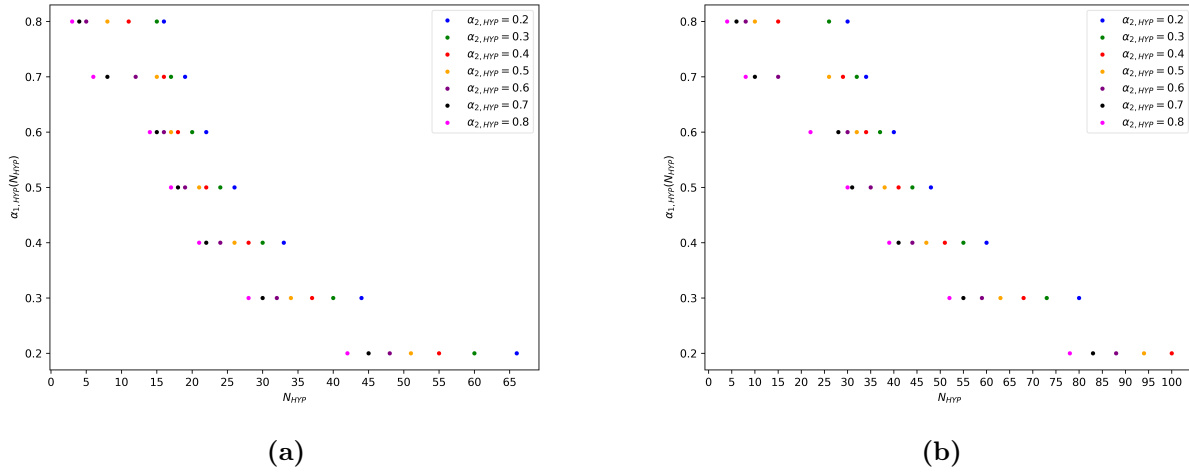
einem Produkt aus der Einheitsmatrix  $\mathbb{1}$  und der quadrierten Normierung  $\|A\|^2$  mit negativem Vorzeichen entspricht.

Mit diesem Ergebnis lassen sich nun das Kubik  $A^3 = A^2A = -\|A\|^2A$  sowie die höheren Ordnungen von  $A$  bestimmen. Somit kann man die Taylorentwicklung der Exponentialfunktion aus Gleichung (A.2) zu

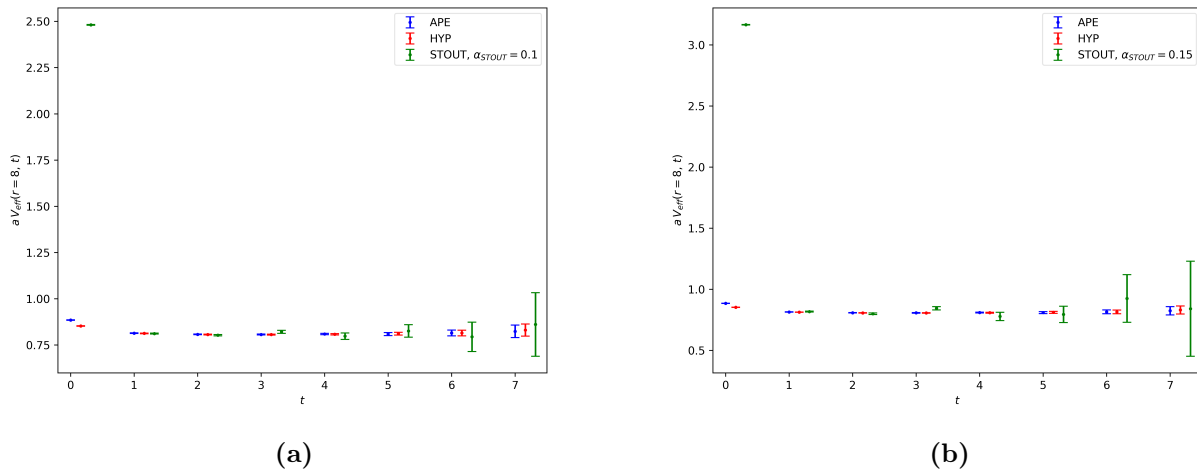
$$\begin{aligned} \exp(A) &= \left( \mathbb{1} - \frac{\|A\|^2}{2!}\mathbb{1} + \dots \right) + \left( A - \frac{\|A\|^2}{3!}A + \dots \right) \\ &= \left( 1 - \frac{\|A\|^2}{2!} + \dots \right) \mathbb{1} \\ &\quad + \left( \|A\| - \frac{\|A\|^3}{3!} + \dots \right) \frac{A}{\|A\|} \\ &= \cos(\|A\|)\mathbb{1} + \sin(\|A\|)\frac{A}{\|A\|} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

umformen. □

## A.2. Zusätzliche Ergebnisse zu den Smearing-Methoden



**Abb. A.1:** Statistisches Potential des HYP-Smearings mit der optimalen Parametereinstellung von  $\alpha_{1,2,HYP}$  und  $N_{HYP}$ : a) Für eine räumliche Ausdehnung von  $r = 4$ . b) Für eine räumliche Ausdehnung von  $r = 12$ .



**Abb. A.2:** Statistisches Potential im Vergleich mit APE-, HYP- und STOUT-Smearing: a) Mit  $\alpha_{STOUT} = 0.1$  für STOUT-Smearing. b) Mit  $\alpha_{STOUT} = 0.15$  für STOUT-Smearing.

## Literatur

- [1] C. Gattringer, C. B. Lang, “Quantum Chromodynamics on the lattice,” *Springer*, S. 25–70, Berlin Heidelberg 2010.
- [2] F. Geles, “Effectiveness of smearing methods studied with monte carlo renormalization group tools,” 2011, [Online; Stand 28. Juli 2023]. Adresse: <https://unipub.uni-graz.at/obvugrhs/download/pdf/213264?originalFilename=true>.
- [3] B. Blossier, M. Della Morte, G. von Hippel, T. Mendes und R. Sommer, “On the generalized eigenvalue method for energies and matrix elements in lattice field theory,” *JHEP*, Jg. 04, S. 094, 2009. DOI: 10.1088/1126-6708/2009/04/094. arXiv: 0902.1265 [hep-lat].
- [4] M. Stilger, “Operatoroptimierung mit APE-Smearing und Blocking in SU(2) Yang-Mills-Theorie,” Frankfurt am Main, 2020, [Online; Stand 24. August 2023]. Adresse: [https://itp.uni-frankfurt.de/~mwagner/theses/BA\\_Stilger.pdf](https://itp.uni-frankfurt.de/~mwagner/theses/BA_Stilger.pdf).
- [5] K. Jamaly, “The impact of smearing on the static potential in pure SU(2) lattice gauge theory,” Frankfurt am Main, 2021.
- [6] A. Hasenfratz und F. Knechtli, “Flavor symmetry and the static potential with hypercubic blocking,” *Physical Review D*, Jg. 64, Nr. 3, Juli 2001. DOI: 10.1103/physrevd.64.034504. Adresse: <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevd.64.034504>.
- [7] M. Lüscher und U. Wolff, “How to calculate the elastic scattering matrix in two-dimensional quantum field theories by numerical simulation,” *Nuclear Physics B*, Jg. 339, Nr. 1, S. 222–252, 1990, ISSN: 0550-3213. DOI: [https://doi.org/10.1016/0550-3213\(90\)90540-T](https://doi.org/10.1016/0550-3213(90)90540-T). Adresse: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/055032139090540T>.
- [8] B. Blossier, G. von Hippel, T. Mendes, R. Sommer und M. D. Morte, “Efficient use of the Generalized Eigenvalue Problem,” 2008. arXiv: 0808.1017 [hep-lat].
- [9] P. Bicudo, A. Peters, S. Velten und M. Wagner, “Importance of meson-meson and of diquark-antidiquark creation operators for a  $\bar{b}bud$  tetraquark,” *Physical Review D*, Jg. 103, Nr. 11, Juni 2021. DOI: 10.1103/physrevd.103.114506. Adresse: <https://doi.org/10.1103%2Fphysrevd.103.114506>.
- [10] H. J. Rothe, “Lattice Gauge Theories: An Introduction,” *World Scientific*, S. 7–114, Singapore 2012.
- [11] Prof. Dr. O. Philipsen, “Quantenfeldtheorie II,” *Vorlesungsskript*, Frankfurt am Main 2023.
- [12] Y. Liang, K. Liu, B. Li, S. Dong und K. Ishikawa, “Lattice calculation of glueball matrix elements,” *Physics Letters B*, Jg. 307, Nr. 3, S. 375–382, 1993, ISSN: 0370-2693. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(93\)90236-B](https://doi.org/10.1016/0370-2693(93)90236-B). Adresse: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037026939390236B>.

- [13] R. Edwards, U. Heller und T. Klassen, “Accurate scale determinations for the Wilson gauge action,” *Nuclear Physics B*, Jg. 517, Nr. 1-3, S. 377–392, Apr. 1998. DOI: 10.1016/S0550-3213(98)80003-5. Adresse: [https://doi.org/10.1016/S0550-3213\(98\)80003-5](https://doi.org/10.1016/S0550-3213(98)80003-5).
- [14] M. -. Chu, J. M. Grandy, S. Huang und J. W. Negele, “Evidence for the role of instantons in hadron structure from lattice QCD,” *Phys. Rev. D*, Jg. 49, S. 6039–6050, 11 Juni 1994. DOI: 10.1103/PhysRevD.49.6039. Adresse: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.49.6039>.
- [15] G. S. Bali, B. Lang, B. U. Musch und A. S. and, “Novel quark smearing for hadrons with high momenta in lattice QCD,” *Physical Review D*, Jg. 93, Nr. 9, Mai 2016. DOI: 10.1103/physrevd.93.094515. Adresse: <https://doi.org/10.1103/physrevd.93.094515>.
- [16] M. Albanese u. a., “Glueball masses and string tension in lattice QCD,” *Physics Letters B*, Jg. 192, Nr. 1, S. 163–169, 1987, ISSN: 0370-2693. DOI: [https://doi.org/10.1016/0370-2693\(87\)91160-9](https://doi.org/10.1016/0370-2693(87)91160-9). Adresse: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370269387911609>.
- [17] A. Hasenfratz, R. Hoffmann und F. Knechtli, “The static potential with hypercubic blocking,” *Nuclear Physics B - Proceedings Supplements*, Jg. 106-107, S. 418–420, 2002, LATTICE 2001 Proceedings of the XIXth International Symposium on Lattice Field Theory, ISSN: 0920-5632. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0920-5632\(01\)01733-9](https://doi.org/10.1016/S0920-5632(01)01733-9). Adresse: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920563201017339>.
- [18] U. of Pennsylvania, “Basics of Classical Lie Groups: The Exponential Map, Lie Groups, and Lie Algebras,” unbekannt, [Online; Stand 02. August 2023]. Adresse: <https://www.cis.upenn.edu/~cis6100/geombchap14.pdf>.
- [19] J. Schwichtenberg, “Physics from Symmetry,” *Springer*, S. 25–54, Schweiz 2015.
- [20] C. Morningstar und M. J. Peardon, “Analytic smearing of SU(3) link variables in lattice QCD,” *Phys. Rev. D*, Jg. 69, S. 054501, 2004. DOI: 10.1103/PhysRevD.69.054501. arXiv: hep-lat/0311018.
- [21] Wikipedia, “Rayleigh-Ritz-Prinzip — Wikipedia, die freie Enzyklopädie,” 2023, [Online; Stand 4. August 2023]. Adresse: <https://de.wikipedia.org/w/index.php?title=Rayleigh-Ritz-Prinzip&oldid=230203870>.
- [22] U. Bielefeld, “Näherungsmethoden in der Quantenmechanik: Ritz-Variationsverfahren,” unbekannt, [Online; Stand 04. August 2023]. Adresse: [https://www.physik.uni-bielefeld.de/~borghini/Teaching/Theorie-II\\_17/07\\_18.pdf](https://www.physik.uni-bielefeld.de/~borghini/Teaching/Theorie-II_17/07_18.pdf).
- [23] P. Young, “Everything you wanted to know about Data Analysis and Fitting but were afraid to ask,” Okt. 2012. arXiv: 1210.3781 [physics.data-an].
- [24] A. McIntosh, “The Jackknife Estimation Method,” 2016. arXiv: 1606.00497 [stat.ME].

- [25] F. Joswig, S. Kuberski, J. T. Kuhlmann und J. Neuendorf, “pyerrors: A python framework for error analysis of Monte Carlo data,” *Comput. Phys. Commun.*, Jg. 288, S. 108 750, 2023. DOI: 10.1016/j.cpc.2023.108750. arXiv: 2209.14371 [hep-lat].
- [26] F. D. R. Bonnet, D. B. Leinweber, A. G. Williams und J. M. Zanotti, “Improved smoothing algorithms for lattice gauge theory,” *Physical Review D*, Jg. 65, Nr. 11, Juni 2002. DOI: 10.1103/physrevd.65.114510. Adresse: <https://doi.org/10.1103/physrevd.65.114510>.
- [27] nLab, “SU(2),” 2023, [Online; Stand 24. Juli 2023]. Adresse: <https://ncatlab.org/nlab/show/SU%282%29>.