

Contents

1	QCD	1
1.1	Mesonen	1
1.2	Pion 2-Punkt-Funktion	2
2	Correlator fits	6
2.1	Fit-Funktion	6
2.2	Bootstrapping der Fitfunktion	8
2.3	Umrechnung Gitter-/physikalische Einheiten	9
2.4	Effektive Masse	10

1 QCD

Wir schauen uns zunächst 2-Punkt-Funktionen für Teilchen in der Quantenchromodynamik (kur QCD) an.

In der QCD sind die elementaren Materieteilchen die **Quarks**. Es gibt 6 Arten davon, genant “flavor”, nämlich up, down, charm, strange, top und bottom. Dazu gibt es zu jedem Quark ein Antiquark, bei dem einige Eigenschaften des Quarks genau entgegengesetzt sind. Z.B.: Up-Quark u hat elektrische Ladung $+2/3$ mal die Elementarladung (= minus Elektronladung = Protonladung) und Anti-Up-Quark \bar{u} hat elektrische Ladung $-2/3$.

Uns interessieren hier zunächst nur die leichtesten Quarks, nämlich **up** und **down-Quark**.

Eine entscheidende Eigenschaft der QCD ist, dass Quarks nicht als freie Teilchen beobachtet werden können. Sie existieren nur gebunden in zusammengesetzten Elementarteilchen, den *Hadronen*.

Wichtige Beispiele sind das Proton (aus uud , zwei up und ein down Quark, Gesamtladung $2 \cdot (+\frac{2}{3}) + (-\frac{1}{3}) = +1$) und das Neutron (aus u, d, d Gesamtladung $(+\frac{2}{3}) + 2 \cdot (-\frac{1}{3}) = 0$, elektrisch neutral). Das sind die Bausteine der Atomkerne. Proton und Neutron sind im Zoo der Elementarteilchen vergleichsweise schwer, sie sind Beispiele für *Baryonen*, die immer aus 3 Quarks aufgebaut sind.

1.1 Mesonen

Eine zweite große Klasse von Elementarteilchen sind die *Mesonen*, die immer aus einem Quark und einem Antiquark aufgebaut sind. Uns interessiert zunächst das **Pion** π .

Das Pion ist ein sehr wichtiges Teilchen in der QCD:

- Es ist das leichteste Meson überhaupt.
- Mit dem Pion “steuern” wir die Masse von up und down Quark. Beide haben die gleiche Masse.
Es gilt landläufig: Je leichter up und down Quark, desto mehr kostet die Simulation.
Wir betrachten hier eine Simulation, bei der das Pion ziemlich die gleiche Masse hat, wie im Experiment beobachtet. (Genaus auch das Proton und das Neutron.)
Damit haben dann auch up und down Quark ungefähr die gleiche Masse wie aus dem Experiment abgeleitet.

Es gibt drei Pionen, die sich in den Quark-Bestandteilen und damit u.a. der elektrischen Ladung unterscheiden:

- π^+ aus up und anti-down Quark; wir schreiben kurz $\pi^+ \sim \bar{d} u$
- π^0 eine Kombination aus up mit anti-up und down mit anti-down, kurz $\pi^0 \sim (\bar{u} u - \bar{d} d) / \sqrt{2}$
- π^- aus down und anti-up Quark; kurz $\pi^- \sim \bar{u} d$

1.2 Pion 2-Punkt-Funktion

Wir berechnen zunächst die **Pion-Pion 2-Punkt-Funktion**. In der QCD beschreiben wir das Pion durch ein Feld $\pi(x)$ mit $x = (t, \vec{x})$. Diese Feld $\pi(x)$ ist vergleichbar mit der Wellenfunktion eines Teilchens in der Quantenmechanik.

Die 2-Punkt-Funktion ist definiert durch

$$C_{\pi-\pi}^{2pt}(t_f - t_i; \vec{p}) = \sum_{\vec{x}} \langle \pi^+(t_f, \vec{x}) \pi^{+\dagger}(t_i, \vec{y}) \rangle e^{i\vec{p}(\vec{x}-\vec{y})}. \quad (1)$$

Diese 2-Punkt-Funktion beschreibt die Entwicklung des Pion-Zustandes auf dem Gitter von seiner Erzeugung bei (Euklidischer) Zeit t_i (“initial”) zur Zeit der Vernichtung t_f (“final”).

Dabei ist die zu π^+ adjungierte Funktion gerade π^- , also schreiben wir auch

$$C_{\pi-\pi}^{2pt}(t_f - t_i; \vec{p}) = \sum_{\vec{x}} \langle \pi^+(t_f, \vec{x}) \pi^-(t_i, \vec{y}) \rangle e^{i\vec{p}(\vec{x}-\vec{y})}. \quad (2)$$

Durch 3-dimensionale Fourier-Transformation geben wir dem Pion den (3er-) Impulsvektor \vec{p} .

Wir können das Pion-Feld durch die elementaren up und down (Ani-)Quark-Felder $u(x)$ und $d(x)$ ausdrücken:

$$\pi^+(x) = \sum_{a=0}^2 \sum_{\alpha, \beta=0}^3 \bar{d}_\alpha^a(x) (\gamma_5)_{\alpha\beta} u_\beta^a(x). \quad (3)$$

Die Indizes der Quark-Felder (und Anti-Quark-Felder) sind dabei

- $x = (t, \vec{x})$ Raum-Zeit-Punkt
- $a = 0, 1, 2$ Color-/Farb-Index (rot, grün, blau) (**Farbindex neu in QCD!**)
- $\alpha, \beta = 0, 1, 2, 3$ Spinor-Indizes.
Spinoren lernt ihr in QM beim Elektron kennen. Das Elektron hat auch eine Spin-Wellenfunktion. Es existiert in zwei Zuständen Spin “up” und “down” (diese haben aber nichts mit den Quark-Flavors up und down zu tun zu tun).

Für ist das momentan einfach lineare Algebra: ein Quark-Feld ist ein Vektor der Länge $T \times L^3$ [Raumzeit – Volumen] $\times 3$ [color] $\times 4$ [spin].

γ_5 ist eine 4×4 -Matrix im Raum der Spin-Indizes. Sie legt fest, dass sich das Pion unter Drehungen des Raumes wie ein Skalar verhält, also

$$\vec{x}' = D \vec{x} \Rightarrow \pi(t, \vec{x}') = \pi(t, D^{-1} \vec{x}') = \pi(t, \vec{x}). \quad (4)$$

(Vergleicht das mal mit dem Verhalten des elektrischen Feldes oder magnetischen Feldes unter Drehungen des Raumes. Das sind Vektor-Felder!)

Es gibt insgesamt 16 solche Matrizen wie γ_5 . Wir benutzen später auch noch andere. Die Nummer der γ -Matrix benutzen wir zur Kennzeichnung der Daten.

Welche Daten? Am Beispiel der Datei `twop_light.0500.t00x16y34z53.aff`.

Diese ist für

- Konfiguration Nr. 500;
- $t_i = 0$ und $\vec{y} = (16, 34, 53)$ in Gl. (2).
Die initial Zeit t_i und den Punkt \vec{y} legen wir jeweils fest. Beide sind zufällig gewählt.
Die einzelnen Dateien
`twop_light.0500.t00x16y34z53.aff`
`twop_light.0500.t106x59y08z69.aff`
...
unterscheiden sich nur in der Wahl dieses Raumzeitpunktes.

Ihr habt das bei der Creutz-Freedman-Simulation genauso gemacht $\langle x(t_f) x(t_i) \rangle$. Aber ihr konntet sehr einfach über alle t_i mitteln.

Wir haben hier die Entsprechung

Creutz-Freedman	p2gg
1 dimensional	1+3 dimensional
$x(t)$	$\pi(t, \vec{x})$
t_i	(t_i, \vec{y})
$\langle x(t_f) x(t_i) \rangle$	$\langle \pi(t_f, \vec{x}) \pi(t_i, \vec{y}) \rangle$

Das AFF-Dateiformat funktioniert wie ein Verzeichnisbaum. Mit binary tool `lhpc-aff ls` kann man schrittweise den Inhalt anschauen (ohne Daten auszugeben)

```
[petschlies1@judac03 500]$ lhpc-aff ls twop_light.0500.t00x16y34z53.aff
/: void[0]
  void[0]      hvp
  void[0]      local-local
```

und dann immer den Zweigen nach

```
[petschlies1@judac03 500]$ lhpc-aff ls twop_light.0500.t00x16y34z53.aff /local-local/
/local-local: void[0]
  void[0]      u-gf-d-gi
  void[0]      d-gf-u-gi
  void[0]      u-gf-u-gi
```

```
[petschlies1@judac03 500]$ lhpc-aff ls twop_light.0500.t00x16y34z53.aff /local-local/u-gf-d-gi/
/local-local/u-gf-d-gi: void[0]
  void[0]      t00x16y34z53
```

...

```
[petschlies1@judac03 500]$ lhpc-aff ls twop_light.0500.t00x16y34z53.aff /local-local/u-gf-d-gi/t00x16y34z53/gf05/gi05/px0py0pz0:
/local-local/u-gf-d-gi/t00x16y34z53/gf05/gi05/px0py0pz0: complex[160]
```

Der letzte Pfad ist genau der Datensatz, den wir jetzt brauchen. `t00x16y34z53` ist der initial Punkt, `px0py0pz0` bedeutet $\vec{p} = (0, 0, 0)$ und `gf05/gi05` bedeutet γ_5 in beiden Feldern bei t_i und t_f .

`u-gf-d-gi` gitb die Quark-Flavor Zusammensetzung der 2-Punkt-Funktion an.

`complex[160]` gibt an, dass hinter diesem Pfad ein Datensatz von 160 komplexen Zahlen gespeichert ist. Das ist die Zeitabhängigkeit der Pion-Pion 2-Punkt-Funktion bei Impuls $\vec{p} = 0$ für die *Zeit-Differenzen* $0 \leq t_f - t_i \leq T - 1$ mit $T = 160$.

In einfaches Textformat auslesen könnt ihr den Datensatz mit

```
[petschlies1@judac03 500]$ lhpc-aff cat -cR twop_light.0500.t00x16y34z53.aff /local-local/u-gf-d-gi/t00x16y34z53/gf05/gi05/px0py0pz0
# complex[160] /local-local/u-gf-d-gi/t00x16y34z53/gf05/gi05/px0py0pz0
-1.4060058721240927e+00 -2.3585078686749289e-19
```

```
-2.8644576868854210e-01    2.1044715479208025e-19  
-1.5325155191613374e-01    -2.9744502351932908e-20  
...
```

Spalte 1 Realteil, Spalte 2 Imaginärteil. Wir benötigen nur den Realteil.

Es gibt auch ein Python-Interface für AFF. Können wir uns anschauen. Aber geht erstmal diese Schritte.

Erster Schritt: Auslesen der 200 $C_{\pi-\pi}(t, \vec{p} = 0)$, Mittelung und graphische Darstellung dieses Korrelators.

Wenn das funktioniert, ist der Rest für die anderen Konfigurationen nur Wiederholung.

Danach kommt der Exponential-Fit an die Daten. Et voilà: Damit könnt ihr den Pion-Korrelator analysieren.

2 Correlator fits

2.1 Fit-Funktion

Wir brechnen eine Korrelation durch zwei *interpolierende Felder*, auch *Operatoren* genannt, z.B. für den Pion-Pion-Korrelator

$$C(t_f - t_i) = \langle \pi(t_f) \pi(t_i)^\dagger \rangle \quad (5)$$

Die Fit-Funktion für $C(t_f - t_i)$ in Gl. (5) ist — unter der Annahme eines einzelnen Zustandes —

$$F(t_f - t_i) = C \left(e^{-(t_f - t_i)E} + e^{-(T - (t_f - t_i))E} \right) \quad (6)$$

mit Fitparametern C und E .

Warum diese Form der Fitfunktion? Das folgt aus der Interpretation der Korrelationsfunktion in Quantenmechanik. Die Zustände = Teilchenanregungen bilden den *Hilbert-Raum*, das ist ein verallgemeinerter Vektorraum.

Ein ausgezeichneter Zustandsvektor ist der Vakuum-Zustand $|0\rangle$, in dem es keine Teilchenanregung gibt.

Der Operator $\pi(t, \vec{p})^\dagger$ erzeugt einen Teilchenanregung, nämlich den Zustandsvektor eines Pions, wenn er auf das Vakuum wirkt, $\pi(t, \vec{p})^\dagger |0\rangle \propto |\pi, \vec{p}, t\rangle$. Und der Operator $\pi(t, \vec{p})$ vernichtet diesen Zustand, $\pi(t, \vec{p}) |\pi, \vec{p}, t\rangle \propto |0\rangle$.

Zur Vereinfachung der Notation zählen wir die möglichen Energie-Zustände einfach ab und nennen sie $|n\rangle$ mit $n = 0, 1, 2, \dots$. Diese Zustandsvektoren sind Eigenvektoren des Hamilton-Operators, und damit paarweise orthogonal. Es gilt also vereinfacht $\langle n | m \rangle \propto \delta_{n,m}$ mit Kronecker- δ .

Drei wichtige Konzepte benutzen wir, die in der Quantenmechanik noch hergeleitet werden:

1. Der Erwartungswert $\langle \dots \rangle$ ist bei endlicher Zeitausdehnung T die Spur über alle Zustände. Die Spur können wir schreiben als

$$\langle \pi(t_f) \pi(t_i)^\dagger \rangle = \sum_n \langle n | e^{-HT} \pi(t_f) \pi(t_i)^\dagger | n \rangle \quad (7)$$

mit Hamilton-Operator H für die Zeitentwicklung.

Das ist wie bei einer Matrix A , deren Spur wir über eine Orthonormalbasis $\{\vec{e}_i\}$ berechnen können

$$\text{Spur}(A) = \sum_i \vec{e}_i^T A \vec{e}_i \quad (8)$$

2. Die Identität / “Einheitsmatrix” im Hilbert-Raum können wir wegen der Vollständigkeit der Energie-Eigenzustände schreiben als

$$\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n| \quad (9)$$

Das ist analog in der linearen Algebra, wo wir die Einheitsmatrix auch über eine ONB ausdrücken können

$$\mathbb{1} = \sum_i \vec{e}_i \vec{e}_i^T \quad (10)$$

3. Wir können die Zeitabhängigkeit der Erzeugungs-/Vernichtungsoperatoren aus diesen “herausziehen”

$$\pi(t) = e^{Ht} \pi(0) e^{-Ht} \quad (11)$$

Das folgt aus der Schrödinger-Gleichung.

Damit formen wir die Korrelationsfunktion um

$$\begin{aligned} C(t_f - t_i) &= \sum_n \langle n | e^{-H^T} \pi(t_f) \pi(t_i)^\dagger | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | e^{-H(T-t_f)} \pi(0) e^{-H(t_f-t_i)} \pi(0)^\dagger e^{-Ht_i} | n \rangle \end{aligned} \quad (12)$$

Die Zustände $|n\rangle$ sind Eigenzustände (= Eigenvektoren) von H zum Eigenwert E_n . Es gilt also $H |n\rangle = E_n |n\rangle$. Das benutzen wir und setzen auch die Identität ein

$$\begin{aligned} C(t_f - t_i) &= \sum_{n,m} \langle n | e^{-H(T-t_f)} \pi(0) e^{-H(t_f-t_i)} \mathbb{1} \pi(0)^\dagger e^{-Ht_i} | n \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle n | e^{-E_n(T-t_f)} \pi(0) e^{-E_m(t_f-t_i)} | m \rangle \langle m | \pi(0)^\dagger e^{-E_n t_i} | n \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle n | \pi(0) | m \rangle \langle m | \pi(0)^\dagger | n \rangle e^{-E_n(T-(t_f-t_i))} e^{-E_m(t_f-t_i)} \\ &= \sum_{n,m} |\langle n | \pi(0) | m \rangle|^2 e^{-E_n(T-(t_f-t_i))} e^{-E_m(t_f-t_i)} \end{aligned} \quad (13)$$

Die beiden Beiträge mit *niedrigster Energie*, also langsamstem exponentiellem Abklingen sind für $|n\rangle = |0\rangle$, $|m\rangle = |\pi\rangle$ und $|n\rangle = |\pi\rangle$, $|m\rangle = |0\rangle$, wobei der Energie-Eigenwert des Vakuumzustandes auf Null gesetzt wird.

$$C(t_f - t_i) = |\langle 0 | \pi(0) | \pi \rangle|^2 \left\{ e^{-E_\pi(t_f-t_i)} + e^{-E_\pi(T-(t_f-t_i))} \right\} + \dots \quad (14)$$

Das gibt die Fitfunktion in Gl. (6) (wenn alle Kombinationen mit höherer Energie vernachlässigt werden) mit $C = |\langle 0 | \pi(0) | \pi \rangle|^2$.

2.2 Bootstrapping der Fitfunktion

Fit an die Originaldaten Wir fitten zunächst an die Originaldaten des Korrelators für das Ensemble, *bevor wir mit dem Resampling anfangen*.

Aus diesem Fit merken wir uns die Werte für E und C , diese nennen wir E_o und C_o . Subskript o für “original”. Dazu merken wir uns den Wert für χ^2 und χ^2/dof , wobei dof gleich der Anzahl der Freiheitsgrade des Fits ist, nämlich Anzahl der gefitteten Datenpunkte minus Anzahl der Fitparameter. χ^2/dof ist ein Maß für die Güte des Fits.

Resampling Danach bootstrappen wir den Fit. Daraus erhalten wir N_B Wertepaare für die Fitparameter C_b, E_b mit $b = 1, \dots, N_B$.

Daraus berechnen wir den Mittelwert für C und E aus der Bootstrap-Verteilung, sowie den Fehler für die Fitparameter aus der Varianz der Bootstrap-Verteilung

$$\bar{E}^B = \frac{1}{N_B} \sum_{b=1}^{N_B} E_b, \quad \delta E^B = \left[\frac{1}{N_B - 1} \sum_{b=1}^{N_B} (E_b - \bar{E}^B)^2 \right]^{1/2} \quad (15)$$

Die Differenz $E_o - \bar{E}^B$ bezeichnen wir als *Bootstrap-Bias*, eine “Verfälschung” aufgrund des (nicht perfekten) Resamplings der empirischen Verteilung des Korrelators. Solange dieses Biases kleiner ist als der statistische Fehler ist das kein Problem.

Aus den N_B Wertepaaren (C_b, E_b) berechnen wir die Bootstrap-Verteilung der Fitfunktion ausgewertet bei einer Zeit t . Zunächst per Bootstrap-Sample b

$$F_b(t) = C_b \left(e^{-t E_b} + e^{-(T-t) E_b} \right) \quad (16)$$

für jeden Wert von t .

Damit bekommen wir die Fitfunktion aus dem Bootstrapping des Fits an die Daten

$$\bar{F}^B(t) = \frac{1}{N_B} \sum_{b=1}^{N_B} F_b(t), \quad \delta F^B(t) = \left[\frac{1}{N_B - 1} \sum_{b=1}^{N_B} (F_b(t) - \bar{F}^B(t))^2 \right]^{1/2}, \quad \forall t \quad (17)$$

Stabilitätsanalyse Für jeden Fit müssen wir ein Fitintervall $[t_{\min}, t_{\max}]$ wählen. Das Fitresultat *hängt systematisch ab* von der Wahl t_{\min}, t_{\max} . Daraus folgt eine systematische Unsicherheit.

Diese systematische Unsicherheit schätzen wir ab durch die Variation des Fitfensters. Besonders wichtig ist dabei die Variation von t_{\min} .

Warum gerade t_{\min} ? Liegt an der Summe über die Zustände, die sich hinter der Korrelationsfunktion verbirgt

$$C(t) = \sum_{n \geq 0} A_n e^{-E_n t} \quad (18)$$

Wir gehen davon aus, dass die Zustände in der Energie der Größe nach aufsteigend geordnet sind, also $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$.

Dann folgt aus Gl. (18)

$$C(t) = A_0 e^{-E_0 t} \left\{ 1 + \sum_{n \geq 1} a_n e^{-(E_n - E_0) t} \right\} \xrightarrow{t \text{ groß}} A_0 e^{-E_0 t} \{1 + \text{exponentiell kleine Korrekturen}\} \quad (19)$$

weil alle $E_n - E_0 > 0$ für $n \geq 1$.

Wir automatisieren also in den Fits die Wahl von t_{\min} , t_{\max} und stellen die Abhängigkeit von E_0 mit Fehler vom Fitintervall dar (Tabelle / Plot).

2.3 Umrechnung Gitter-/physikalische Einheiten

Zunächst mal: **Alle Größen**, mit denen wir in der Gittersimulation rechnen sind **dimensionslos**.

Zum Beispiel: eine Korrelationsfunktion $C(t) \propto e^{-tE}$ kennen wir eigentlich als $e^{-(t/a)(aE)}$, wobei t/a ganzzahlig ist (die Gitterpunkte entlang der Zeitachse) und aE ist die Energie “in Gittereinheiten”, also in Einheiten des *inversen Gitterabstandes* a^{-1} .

Wir benutzen den Gitterabstand a

$$a = 0.06821 \text{ (13) fm} \quad (20)$$

Woher kommt der Gitterabstand? Wir bestimmen einfach eine dimensionsbehaftete Größe in Gittereinheiten. Dass kann z.B. die Pion-Masse selbst sein

$$C_{\pi\pi}(t) \approx A e^{-(t/a)am_\pi} + \text{excited state contamination} \quad (21)$$

Aus dem Fit bestimmen wir am_π . Dann schauen wir den experimentell bestimmten Wert m_π^{exp} der Pion-Masse (in MeV) nach, z.B. bei der Particle Data Group.

Daraus bekommen wir den Gitterabstand

$$a = (am_\pi)^{\text{lat}} / m_\pi^{\text{exp}} \quad (22)$$

in Einheiten MeV^{-1} .

Wir benutzen natürliche Einheiten, in denen gilt die Relation

$$\begin{aligned} \text{natürliche Einheiten: } c = 1, \quad \hbar = 1 &\Rightarrow \hbar c = 1, \\ \text{Umrechnung: } \hbar c &= 197.3269804 \dots \text{ MeV fm} \end{aligned} \quad (23)$$

Damit folgt

$$1 \text{ MeV} = \frac{1 \text{ MeV}}{1} = \frac{1 \text{ MeV}}{\hbar c} = \frac{1 \text{ MeV}}{197.3 \text{ MeV fm}} = \frac{1}{197.3} \text{ fm}^{-1}, \quad (24)$$

oder für den inversen Gitterabstand

$$a^{-1} = 2892.5 \text{ MeV} = 2.8925 \text{ GeV}. \quad (25)$$

Für das Ensemble cC211.06.80 erwarten wir eine Pion-Masse in physikalischen Einheiten von $m_\pi^{\text{lat}} \approx 136.7(2) \text{ MeV}$, also

$$(am_\pi)^{\text{lat}} \approx 0.047259 \dots \quad (26)$$

2.4 Effektive Masse

Wenn wir für eine 2-Punkt-Korrelationsfunktion die Zeitabhängigkeit annehmen

$$C(t) = A \left\{ e^{-mt} + e^{-m(T-t)} \right\} = \left[2 A e^{-mT/2} \right] \cosh((t - T/2) m) = \tilde{A} \cosh((t - T/2) m) \quad (27)$$

dann können wir m extrahieren

$$\frac{C(t + \tau) - C(t - \tau)}{2 C(t)} = \frac{\cosh((t - T/2) m + \tau m) + \cosh((t - T/2) m - \tau m)}{2 \cosh((t - T/2) m)} = \cosh(\tau m) \quad (28)$$

und damit definieren die effektive Masse m_{eff}

$$m_{\text{eff}}(t | \tau) = \frac{1}{\tau} \text{arcosh} \left(\frac{C(t + \tau) - C(t - \tau)}{2 C(t)} \right) \quad (29)$$

Dabei vernachlässigen wir wieder höher-energetische Zustände. Daher die Bezeichnung “effektiv”. Die effektive Masse ist extrem nützlich zur Beurteilung der *Plateau-Region*, also in welchem Zeitintervall die Näherung mit einem einzelnen Zustand vernünftig ist. Das hilft bei der Eingrenzung von Fit-Intervallen.