

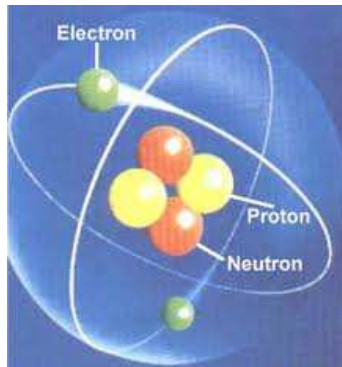
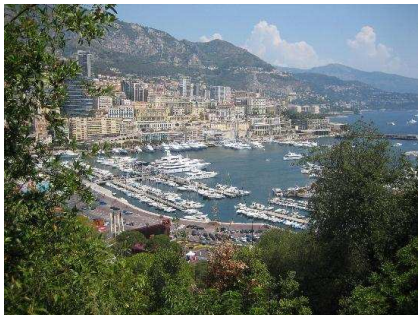
Von Monte-Carlo zur Masse des Protons

C. Urbach

HISKP und Bethe Zentrum für Theoretische Physik
Rheinische Friedrichs-Wilhelms Universität Bonn

Bonn 12/2010

Von Monte-Carlo zur Masse des Protons



was hat das beides miteinander zu tun?

Die Frage nach dem Kleinsten Teilchen

... beschäftigt die Menschheit vielleicht schon einige tausend Jahre

- die Idee, dass alle Materie aus kleinsten, unteilbaren Teilchen besteht kam zunächst in der Philosophie auf

um 1800 Dalton benutzt Atome als Erklärung dafür, dass Elemente immer in Verhältnissen ganzer Zahlen miteinander reagieren

1827 Brown entdeckt, dass sich Staubkörner in Wasser ungeordnet bewegen ⇒ Brownsche Bewegung

1897 Thomson entdeckt das Elektron und, dass es Teil des Atoms ist
⇒ Unteilbarkeit des Atoms widerlegt

Die Frage nach dem Kleinsten Teilchen

1910 Rutherford entdeckt den Atomkern

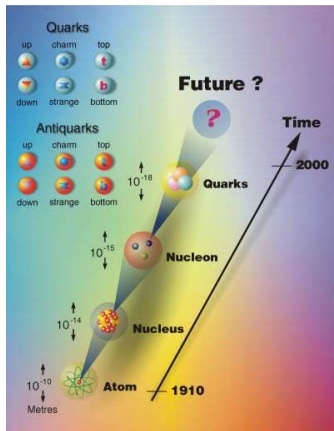
1932 Chadwick entdeckt das Neutron

⇒ Atomkern aus Protonen und Neutronen zusammengesetzt

1964 Gell-Mann und Zweig postulieren die Existenz von Quarks

1968 Streuexperimente bei hohen Energien bestätigen die Existenz von Quarks

⇒ Protonen und Neutronen aus Quarks zusammengesetzt



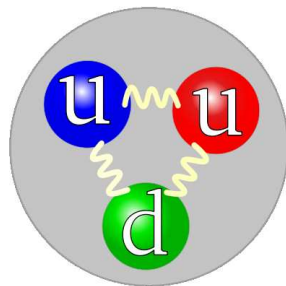
Was hält die Quarks zusammen?

⇒ die starke Kraft!

- Quarks tragen sogenannte Farbladungen ähnlich der elektrischen Ladung
 - die Kraft wird durch Gluonen vermittelt ähnlich dem Photon in der Elektrodynamik
 - das Gluon trägt selbst Farbladungen das Photon ist ungeladen
- ⇒ Gluonen können mit sich wechselwirken

- Theorie: Quanten-Chromodynamik (QCD)

Das Proton



Quanten-Chromodynamik (QCD)

Quarks verhalten sich fundamental anders als z.B. Elektron und Proton:

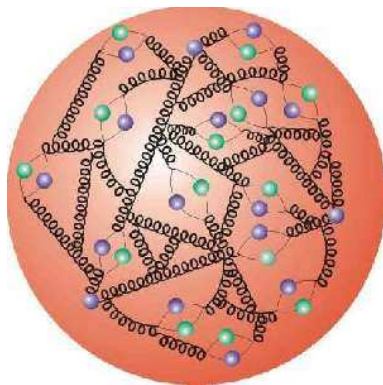
- bei sehr kleinen Abständen / großen Energien:
Quarks spüren einander fast nicht
- ⇒ sie sind asymptotisch frei

- dagegen: mit steigender Entfernung / sinkender Energie:
die Kraft nimmt zu
- ⇒ Quarks können nicht alleine beobachtet werden
Phänomen des Quarkeinschlusses
es können nur (farblose) Bindungszustände beobachtet werden
sogenannte Hadronen wie das Proton

grob vereinfacht mit einem Gummiseil vergleichbar

- Proton als Drei-Quark Bindungszustand
2 up, ein down Quark
- up und down Quarks haben eine Masse von ca. $5 \text{ MeV}/c^2$
- Proton Masse $938 \text{ MeV}/c^2$
($1,7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$)
- sehr hoher Anteil Bindungsenergie

⇒ QCD ist eine stark gekoppelte Theorie



- wie viele physikalische Probleme:
QCD kann nicht analytisch gelöst werden
 - sehr oft kann man aber die sogenannte Störungstheorie anwenden
 - Dabei teilt man das Problem in zwei Probleme
 - eines, dass man analytisch lösen kann, z.B. freie Quarks
 - und eine Störung dieses Problems
 - Voraussetzung: **Störung ist klein**
 - QCD: Störung des freien Systems ist nicht klein
- ⇒ Benötigen Verfahren, das das volle Problem löst!

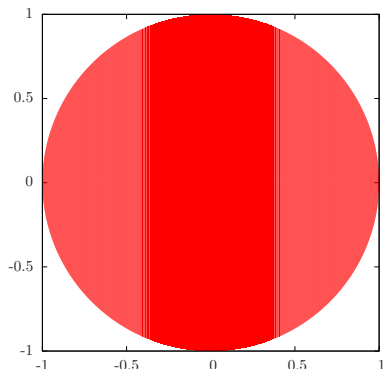
Stochastische Bestimmung von π

- Flächen-Verhältnis
Kreis zu Viereck:

$$\frac{A_{\text{Kreis}}}{A_{\text{Viereck}}} = \frac{\pi r^2}{4r^2}$$

- es folgt sofort

$$\pi = \frac{4A_{\text{Kreis}}}{A_{\text{Viereck}}}$$



- Kennt man $A_{\text{Kreis}}/A_{\text{Viereck}}$, kennt man π

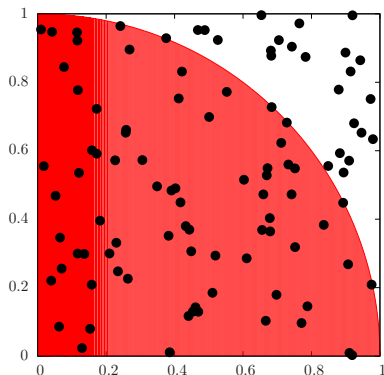
Stochastische Bestimmung von π

- Abschätzungs-Vorschrift:

- 1 Verteile zufällig N Punkte gleichmäßig auf der Viereck-Fläche
- 2 Zähle die, die im Kreis liegen
- 3 dann ist

$$\pi = \frac{4A_{\text{Kreis}}}{A_{\text{Viereck}}} \approx \frac{4N_{\text{innen}}}{N}$$

- Für sehr große N wird π sehr gut approximiert



⇒ "Wir würfeln π aus", unsere erste Monte-Carlo Methode

Monte-Carlo Integration

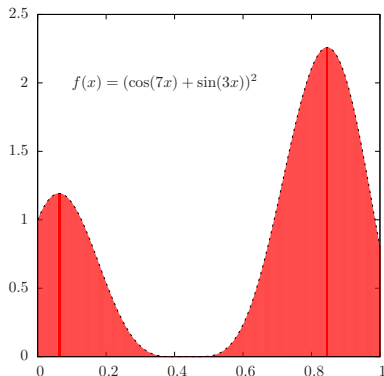
- Betrachten

$$I = \int_0^1 f(x) dx$$

- wiederum:

- 1 Verteile zufällig N Punkte gleichmäßig auf der Rechteck-Fläche
- 2 Zähle die, die unterhalb $f(x)$ liegen
- 3 dann ist

$$I \approx \langle I \rangle_N = 2,5 \times 1 \frac{N_{\text{innen}}}{N}$$



$$I = 0.8291597$$

- je größer N , desto besser die Approximation

Monte-Carlo Integration

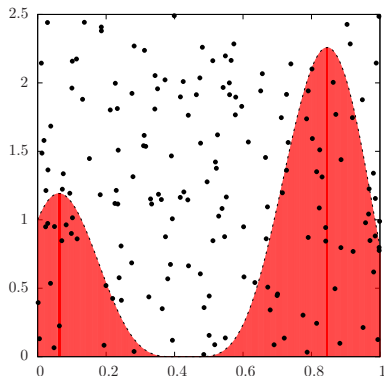
- Betrachten

$$I = \int_0^1 f(x) dx$$

- wiederum:

- 1 Verteile zufällig N Punkte gleichmäßig auf der Rechteck-Fläche
- 2 Zähle die, die unterhalb $f(x)$ liegen
- 3 dann ist

$$I \approx \langle I \rangle_N = 2,5 \times 1 \frac{N_{\text{innen}}}{N}$$



$$N = 200 : I \approx 0.7625$$

- je größer N , desto besser die Approximation

ein wenig formaler:

- ziehe zufällig x aus Intervall $[0, 1]$ und y aus $[0, 2, 5]$
- erzeuge N solcher Paare $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$
- das Integral wird dann durch

$$I/2,5 \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 1_{f(x_i) < y_i} \quad \text{mit} \quad 1_{f(x_i) < y_i} = \begin{cases} 1 & \text{falls } f(x_i) < y_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

approximiert

⇒ das Integral geht in den Mittelwert über N Zufallsexperimente über!

- aber wie schnell wird der Fehler kleiner?

ein wenig formaler:

- ziehe zufällig x aus Intervall $[0, 1]$ und y aus $[0, 2, 5]$
- erzeuge N solcher Paare $(x_1, y_1), \dots, (x_N, y_N)$
- das Integral wird dann durch

$$I/2,5 \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 1_{f(x_i) < y_i} \quad \text{mit} \quad 1_{f(x_i) < y_i} = \begin{cases} 1 & \text{falls } f(x_i) < y_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

approximiert

⇒ das Integral geht in den Mittelwert über N Zufallsexperimente über!

- **aber wie schnell wird der Fehler kleiner?**

- Monte-Carlo Verfahren sind statistische Verfahren
- N -Abhängigkeit des Standard-Fehlers ist universell
- man kann für ausreichend große N zeigen

$$\Delta_N = \sigma/\sqrt{N}$$

mit der Standardabweichung σ , einem Maß für die Streuung

- Grund: Zentraler Grenzwertsatz
- ⇒ für N groß genug sind Summen von N Zufallszahlen Gauss-verteilt
- σ ist abhängig von Problem und Verfahren

Monte-Carlo contra Numerische Integration

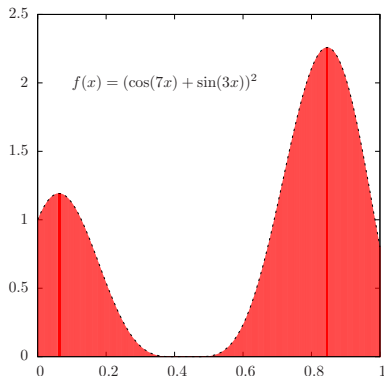
- Betrachten

$$I = \int_0^1 f(x) dx$$

- numerisch: Mittelpunktsverfahren
- äquidistante Stützstellen
 $x_0 = 0, x_1, \dots, x_N = 1$

$$I \approx \sum_{i=1}^N h f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)$$

- Approximations-Fehler zu führender Ordnung $\propto 1/N^2$
 - je größer N , desto besser die Approximation



$$I = 0.8291597$$

Monte-Carlo contra Numerische Integration

- Betrachten

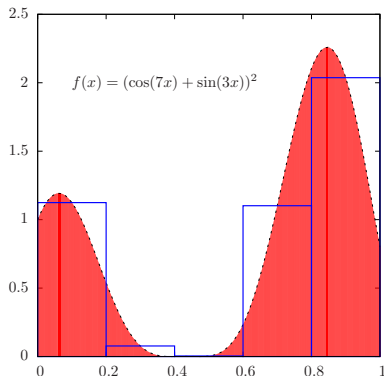
$$I = \int_0^1 f(x) dx$$

- numerisch: Mittelpunktsverfahren
- äquidistante Stützstellen
 $x_0 = 0, x_1, \dots, x_N = 1$

$$I \approx \sum_{i=1}^N h f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)$$

- Approximations-Fehler zu führender Ordnung $\propto 1/N^2$

- je größer N , desto besser die Approximation



$$N = 5, \quad I \approx 0.8689142$$

Monte-Carlo contra Numerische Integration

- Betrachten

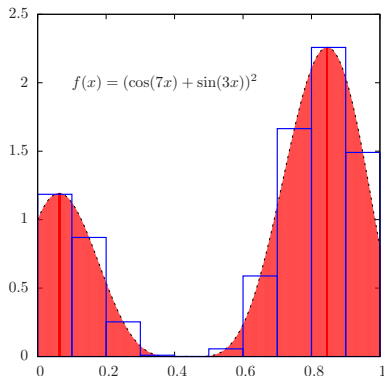
$$I = \int_0^1 f(x) dx$$

- numerisch: Mittelpunktsverfahren
- äquidistante Stützstellen
 $x_0 = 0, x_1, \dots, x_N = 1$

$$I \approx \sum_{i=1}^N h f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)$$

- Approximations-Fehler zu führender Ordnung $\propto 1/N^2$

- je größer N , desto besser die Approximation



$$N = 10, \quad I \approx 0.8376995$$

Monte-Carlo contra Numerische Integration

- Betrachten

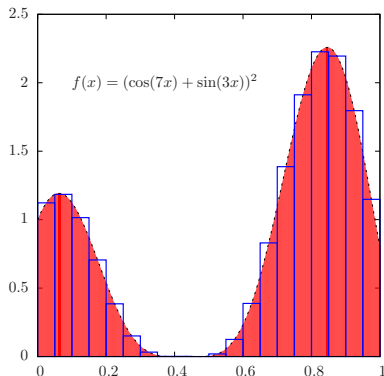
$$I = \int_0^1 f(x) dx$$

- numerisch: Mittelpunktsverfahren
- äquidistante Stützstellen
 $x_0 = 0, x_1, \dots, x_N = 1$

$$I \approx \sum_{i=1}^N h f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)$$

- Approximations-Fehler zu führender Ordnung $\propto 1/N^2$

- je größer N , desto besser die Approximation



$$N = 20, \quad I \approx 0.83112$$

Monte-Carlo contra Numerische Integration

- Fehler Mittelpunktsverfahren für eindimensionale Integrale

$$\propto 1/N^2$$

- statistischer Fehler Monte-Carlo Integration

$$\propto 1/\sqrt{N} = 1/N^{1/2}$$

unabhängig von der Dimension des Integrals!

- Mittelpunktsverfahren in d Dimensionen

$$\propto 1/N^{2/d}$$

⇒ für $d > 4$ ist Monte-Carlo besser!

Monte-Carlo contra Numerische Integration

- Fehler Mittelpunktsverfahren für eindimensionale Integrale

$$\propto 1/N^2$$

- statistischer Fehler Monte-Carlo Integration

$$\propto 1/\sqrt{N} = 1/N^{1/2}$$

unabhängig von der Dimension des Integrals!

- Mittelpunktsverfahren in d Dimensionen

$$\propto 1/N^{2/d}$$

⇒ für $d > 4$ ist Monte-Carlo besser!

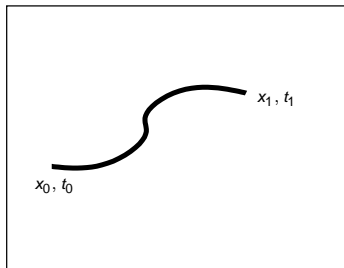
Zusammenfassung Monte-Carlo Integration

- Zufallsexperimente können genutzt werden, um Integrale zu lösen
- Integrale gehen dabei in Mittelwerte über die Zufallsexperimente über
- für hochdimensionale Integrale sind Monte-Carlo Verfahren effizienter als herkömmliche Verfahren
- universell einsetzbar

- Beispiel: Harmonischer Oszillator (Federschwinger)
- klassische Mechanik: Bewegung eines mechanischen Systems von (x_0, t_0) nach (x_1, t_1) verläuft derart, dass die Wirkung minimal (extremal) wird

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \frac{1}{2} m [\dot{x}(t)^2 - \omega^2 x(t)^2] dt$$

- Wirkung hat Einheit Energie mal Zeit
- Vereinfacht gesagt: Eine Art Effizienzprinzip

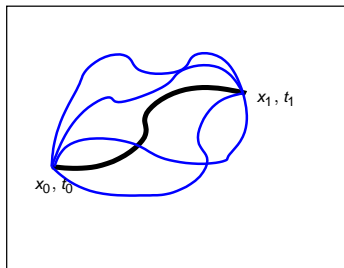


- Bei sehr kleinen Abständen nicht mehr richtig
- Übergang zur Quantenmechanik nach Feynman:
alle Wege tragen bei
- Übergangsamplitude:

$$\langle x_1, t_1 | x_0, t_0 \rangle \propto \int_{x_0}^{x_1} \mathcal{D}x(t) e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}$$

- $S[x(t)]$ klassische Wirkung

- $h = 2\pi\hbar = 6,626 \dots \cdot 10^{-34}$ Js Planck'sches Wirkungsquantum
- alle Pfade tragen bei mit Gewicht $\exp(iS[x(t)]/\hbar)$ bei

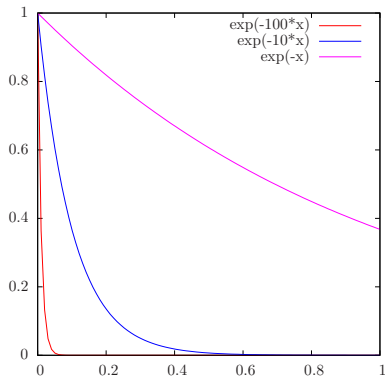


- mathematischer Trick: Übergang von $t \rightarrow i\tau$

$$\int_{x_0}^{x_1} \mathcal{D}x(\tau) e^{-\frac{S_E[x(\tau)]}{\hbar}}$$

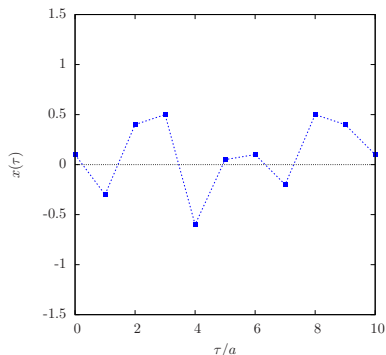
- mit

$$S_E = \int_{\tau_0}^{\tau_1} \frac{1}{2} m [\dot{x}(\tau)^2 + \omega^2 x(\tau)^2] d\tau$$



- Wirkung groß gegen \hbar : nur wenige Wege tragen bei
- Wirkung klein gegen \hbar : viele Wege tragen bei

- wie ist nun die Integration über alle Pfade zu verstehen?
 - diskretisiere die Zeit in n Teilstücke der Länge a
- $$\int \mathcal{D}\mathbf{x}(\tau) \rightarrow \int d\mathbf{x}(\tau_1) \cdot \dots \cdot d\mathbf{x}(\tau_{n-1})$$
- für n groß genug:
gute Approximation ($a \rightarrow 0$)



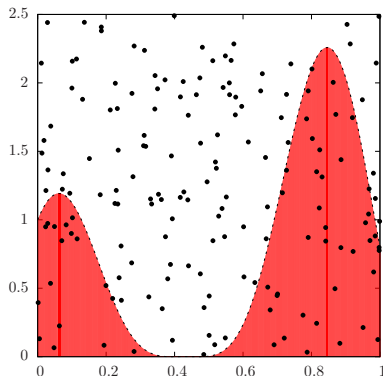
- man muss ein n -dimensionales Integral lösen
- ⇒ Monte-Carlo Methoden

- wir hatten eben: ziehe zufällig x aus Intervall $[0, 1]$ und y aus $[0, 2, 5]$

- wie überträgt sich das auf

$$\int dx(\tau_1) \cdot \dots \cdot dx(\tau_{n-1}) e^{-S[x]/\hbar} ?$$

- jedes $x(\tau_i)$ ist unbeschränkt
- der Wertebereich von $\exp(-S/\hbar)$ ist nicht ohne weiteres bekannt
- $\exp(-S/\hbar)$ wird meistens sehr klein sein
- Idee: wähle bevorzugt solche Pfade aus, die ein großes Gewicht haben



Dazu hat N. Metropolis folgende Vorschrift erfunden:

beginnend von einem Pfad x

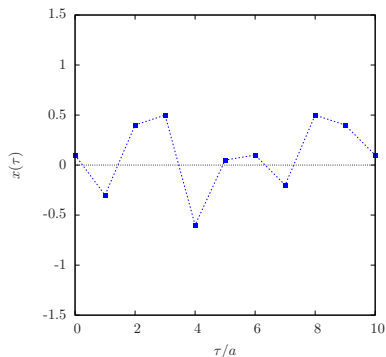
- 1 erzeuge zufällig einen neuen Pfad x'
- 2 akzeptiere x' mit der Wahrscheinlichkeit

$$P = \min(1, \exp(-\Delta S))$$

mit

$$\Delta S = S(x') - S(x)$$

- 3 sonst bleibe bei x .
 - dann mittele über alle Pfade ohne Gewicht!



Dazu hat N. Metropolis folgende Vorschrift erfunden:

beginnend von einem Pfad x

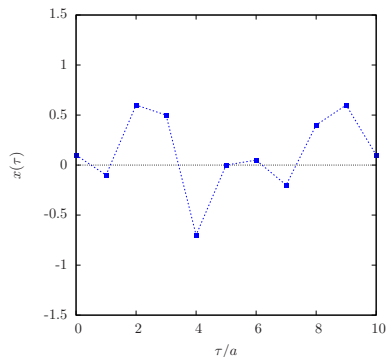
- 1 erzeuge zufällig einen neuen Pfad x'
- 2 akzeptiere x' mit der Wahrscheinlichkeit

$$P = \min(1, \exp(-\Delta S))$$

mit

$$\Delta S = S(x') - S(x)$$

- 3 sonst bleibe bei x .
 - dann mittele über alle Pfade ohne Gewicht!



- QCD ist eine Quanten-Feldtheorie in drei Raum und der Zeitrichtung
- Quarks und Gluonen werden durch Felder beschrieben
- trotzdem überträgt sich der Pfadintegral-Formalismus praktisch unverändert

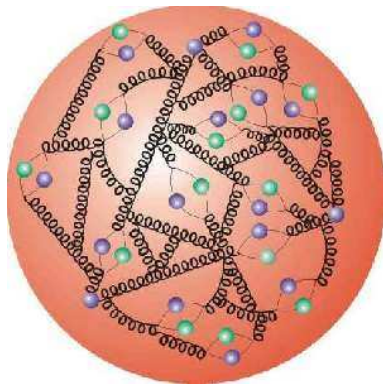
⇒ eine physikalische Größe O berechnet sich aus

$$\langle O \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \int \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{D}q \mathcal{D}A_\mu O[\bar{q}, q, A_\mu] e^{iS[\bar{q}, q, A_\mu]/\hbar}$$

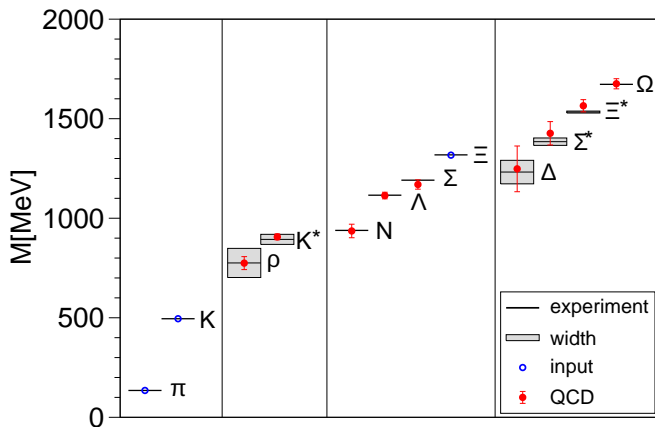
- \bar{q}, q beschreiben die Freiheitsgrade der Quarks
- A_μ die Freiheitsgrade der Gluonen
- $S[\bar{q}, q, A_\mu]$ ist die QCD Wirkung

Die Masse des Protons

- der Metropolis Algorithmus bleibt unverändert
- diskretisiere die Raum-Zeit
- ersetze die Pfade durch die Felder \bar{q} , q , A_μ
- erzeuge N solche Feld-Konfigurationen nach Metropolis
- bestimme die Masse des Protons auf allen N Feld-Konfigurationen mittele über alle diese



Hadron Spectrum



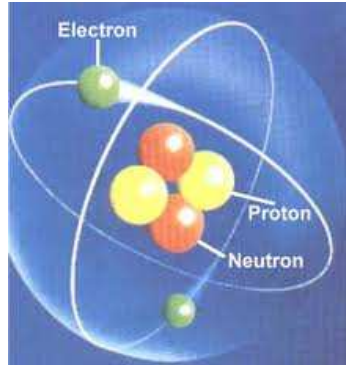
[S. Dürr et al., Science 322:1224-1227,2008]

- der Zufall kann zur Hilfe genommen werden, um deterministische Probleme zu lösen
- Monte-Carlo Methoden sind oft effizienter als herkömmliche numerische Verfahren
- sie stellen das vielleicht einzige Verfahren dar, mit dem die QCD ab-initio angegangen werden kann

... und was hat das mit Monte-Carlo zu tun?



Toni Lozano



Der Name geht zurück auf Nick Metropolis, John von Neuman und Stanislav Ulam