

# Bachelor- oder Masterarbeit

In der Gitter-Quanten-Chromodynamik werden Elementarteilchen und ihre Wechselwirkungen auf Hochleistungsrechnern simuliert. Die so gewonnenen Ergebnisse werden dann benutzt, um die Auswertung einiger Experimente zum Nachweis der Teilchen (z.B. am Large Hadron Collider am CERN) zu erleichtern.

Üblicherweise wird das Hybride Monte-Carlo Verfahren bei der Simulation eingesetzt. Es besteht aus einem Markov- und einem Molekulardynamik-Schritt, bei dem numerische Integration auf Lie-Gruppen erforderlich ist.

Bei der Integration werden die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{Y} = \frac{\partial H(Y, A)}{\partial A} \quad \dot{A} = \frac{\partial H(Y, A)}{\partial Y}$$

gelöst, wobei  $Y$  ein Element aus der Lie-Gruppe  $SU(N)$  und  $A$  ein Element aus der zugehörigen Lie-Algebra  $\mathfrak{su}(N)$  ist.

Um die physikalischen Eigenschaften des Systems zu erhalten, muss der Integrator bestimmte Bedingungen erfüllen: Er muss die Lie-Gruppenstruktur erhalten und zeit-reversibel und volumen-erhaltend sein.

Ein Standardverfahren ist das *Leapfrog*-Verfahren. Hier wird  $Y$  mit der Abbildung

$$\mathfrak{g} \rightarrow G, \quad \Omega \mapsto Y = \exp(\Omega)Y_0 \quad (1)$$

aus der Lie-Algebra  $\mathfrak{g}$  in die Lie-Gruppe  $G$  identifiziert, wobei  $\Omega$  die Lösung von  $\dot{\Omega} = d\exp_{\Omega}^{-1}$  ist.

Prinzipiell kann die Abbildung (1) durch jede beliebige Abbildung  $\mathfrak{g} \rightarrow G$  aus der Lie-Algebra in die Lie-Gruppe ersetzt werden, zum Beispiel die Cayley-Abbildung  $(I - \Omega)^{-1}(I + \Omega)$ . Dann ist  $\Omega$  die Lösung der Differentialgleichung

$$\dot{\Omega} = dcay_{\Omega}^{-1}(H) = \frac{1}{2}(I - \Omega)H(I + \Omega). \quad (2)$$

## Aufgabenstellung:

- In dieser **Bachelorarbeit** soll das Leapfrog-Verfahren unter Verwendung der Cayley-Abbildung (2) untersucht werden. Dabei soll das Verfahren zur Lösung der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen implementiert und getestet werden.
- In einer **Masterarbeit** könnte darauf aufbauend ein Verfahren mit höherer Konvergenzordnung entwickelt werden.

## Benötigte Vorkenntnisse:

- Numerische Integration von Differentialgleichungen (Einschritt-Verfahren)
- Programmierkenntnisse, z.B. in MATLAB oder C

## Ansprechpartner:

- Prof. Dr. Michael Günther (guenther at math.uni-wuppertal.de)
- Dipl.-Math. Michèle Wandelt, M. Sc. (wandelt at math.uni-wuppertal.de)

