

Новый подход к вычислению канонического производящего функционала в решеточной КХД при конечном химическом потенциале

Д. Л. Бойда^{+*×}, В. Г. Борняков^{*○1)}, В. А. Гой^{+*×}, В. И. Захаров^{+*}, А. В. Молочков^{+*}, А. Накамура^{*2)},
А. А. Николаев^{+*}

⁺Институт теоретической и экспериментальной физики НИЦ “Курчатовский институт”, 117259 Москва, Россия

^{*}Школа биомедицины, Дальневосточный федеральный университет, 690950 Владивосток, Россия

[×]Школа естественных наук, Дальневосточный федеральный университет, 690950 Владивосток

[○]Институт физики высоких энергий НИЦ “Курчатовский институт”, 142281 Протвино, Россия

Поступила в редакцию 6 октября 2016 г.

Мы предлагаем новый подход к задаче вычисления производящего функционала для канонического ансамбля в решеточной КХД при ненулевом барионном химическом потенциале. Процедура состоит из нескольких шагов. Сначала вычисляется барионная плотность для мнимых значений химического потенциала. Затем вычисляется производящий функционал для большого канонического ансамбля также для мнимых значений химического потенциала. В данной работе мы используем процедуру подгонки барионной плотности для упрощения процедуры численного интегрирования. Наконец, мы вычисляем производящий функционал для канонического ансамбля, используя численное преобразование Фурье с высокой точностью вычислений. Дополнительно мы вычислили производящий функционал для канонического ансамбля, используя известный метод разложения по параметру хоппинга, и сравнили результаты, вычисленные двумя методами в фазе деконфайнмента для решеточной КХД с числом ароматов, равным двум.

DOI: 10.7868/S0370274X1622001X

1. Введение. Одна из наиболее важных проблем физики высоких энергий и ядерной физики – изучение фазовой структуры адронной материи при конечной температуре и барионной плотности. Проводятся как экспериментальные (RHIC – Relativistic Heavy Ion Collider (релятивистский коллайдер тяжёлых ионов), LHC – Large Hadron Collider (Большой адронный коллайдер, БАК)), так и теоретические исследования по данному направлению. В ОИЯИ (Объединенный институт ядерных исследований, Дубна) строится еще одна установка, на которой будет изучаться эта проблема.

Компьютерные расчеты в решеточной квантовой хромодинамике (КХД) позволяют получить результаты для свойств адронной материи, исходя из первых принципов квантовой теории поля. При конечной температуре и нулевом химическом потенциале фазовая структура КХД исследована с помощью методов решеточной КХД достаточно хорошо. Однако исследования области с конечным барионным хи-

мическим потенциалом осложнены “проблемой знака”: фермионный детерминант при ненулевом барионном химическом потенциале μ_B , $\det\Delta(\mu_B)$, в общем случае не является действительным, что делает невозможным применение стандартных методов Монте-Карло для расчетов с производящим функционалом, соответствующим большому каноническому ансамблю:

$$Z_{GC}(\mu_q, T, V) = \int \mathcal{D}U (\det \Delta(\mu_q))^{N_f} e^{-S_G}, \quad (1)$$

где S_G – действие калибровочных полей, $T = 1/(aN_t)$ – температура, $V = (aN_s)^3$ – объем, $\mu_q = \mu_B/3$ – кварковый химический потенциал, a – шаг решетки, N_t, N_s – число узлов решетки во временном и пространственном направлениях. Были опробованы различные подходы [1, 2], однако до сих пор очень сложно получить достоверные результаты при $\mu_B/T > 1$ (см. [3]). В этой работе мы обсуждаем новый метод, основанный на использовании канонического ансамбля, который может позволить продвинуться дальше других методов. Мы предлагаем новую эффективную процедуру

¹⁾e-mail: bornvit@gmail.com

²⁾Atsushi Nakamura.

вычисления производящего функционала для канонического ансамбля $Z_C(n, T, V)$, позволяющую вычислять $Z_C(n, T, V)$ для больших значений n . На примере фазы деконфайнмента мы показываем, что результаты численных расчетов, полученные с помощью нового метода вычислений $Z_C(n, T, V)$, совпадают с результатами, полученными другим методом – методом разложения по “хоппинг” параметру κ , применимому для большой массы кварка. Мы обсуждаем преимущества и недостатки нашего метода и возможные будущие применения.

2. Новый подход к вычислению канонической статистической суммы. Канонический подход базируется на следующих соотношениях. Используется соотношение между $Z_{GC}(\mu_q, T, V)$ и $Z_C(n, T, V)$

$$Z_{GC}(\mu_q, T, V) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} Z_C(n, T, V) \xi^n, \quad (2)$$

где n – разность числа кварков и антикварков, $\xi = e^{\mu_q/T}$. Обратное соотношение может быть записано в следующей форме [4]

$$Z_C(n, T, V) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-in\theta} Z_{GC}(\theta, T, V). \quad (3)$$

В правой части соотношения (3) кварковой химический потенциал чисто мнимый: $\mu_q = i\mu_{qI} \equiv iT\theta$. Известно, что стандартные методы Монте-Карло применимы для вычисления правой части, т.к. фермионный детерминант действительный для мнимого μ_q . В работе [5] с помощью канонического подхода удалось найти фазовый переход 1-го рода в плоскости (T, μ_q) для решеточной КХД с $N_f = 4$.

Кварковая плотность n_q определяется выражением

$$\frac{n_q}{T^3} = \frac{1}{VT^2} \frac{\partial}{\partial \mu_q} \ln Z_{GC} = \quad (4)$$

$$= \frac{N_f N_s^3}{N_s^3} \int \mathcal{D}U e^{-S_G} (\det \Delta(\mu_q))^{N_f} \text{tr} \left[\Delta^{-1} \frac{\partial \Delta}{\partial \mu_q/T} \right], \quad (5)$$

и может быть численно вычислена в случае мнимого химического потенциала. В этом случае кварковая плотность тоже мнимая: $n_q = in_{qI}$.

n_{qI}/T^3 связана с $Z_C(n, T, V)$ (в дальнейшем мы будем использовать краткое обозначение Z_n для отношения $Z_C(n, T, V)/Z_C(0, T, V)$) формулой

$$n_{qI}/T^3 = C \frac{2 \sum_{n>0} n Z_n \sin(n\theta)}{1 + 2 \sum_{n>0} Z_n \cos(n\theta)}, \quad (6)$$

где C – нормировка, $C = \frac{N_s^3}{N_s^3}$. Предлагаемый в данной статье метод заключается в вычислении Z_n , используя это выражение.

Один из возможных подходов заключается в фитировании численных данных для n_{qI}/T^3 , полученных для нескольких значений θ , выражением (6) с конечным числом членов в числителе и знаменателе. В этом случае Z_n рассматриваются в качестве подгоночных параметров. Применяя этот подход, мы обнаружили, что он не позволяет вычислить Z_n .

Более перспективным является следующий подход. Используя численные результаты для n_{qI}/T^3 , можно вычислить $Z_{GC}(e^{i\theta}, T, V)$ с помощью численного интегрирования по мнимому химическому потенциалу:

$$L_Z(\theta) \equiv \log \frac{Z_{GC}(\theta)}{Z_{GC}(0)} = -V \int_0^\theta d\tilde{\theta} n_{qI}(\tilde{\theta}). \quad (7)$$

Тогда Z_n можно вычислить, используя выражение (3)

$$Z_n = \frac{\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-in\theta} e^{L_Z(\theta)}}{\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{L_Z(\theta)}}. \quad (8)$$

Мы получили хорошие результаты для плотности n_q и для Z_n , используя описанный метод (см. раздел 4).

В данной работе мы использовали модифицированный вариант описанного выше подхода. Мы используем вариант, основанный на фитировании численных значений плотности n_{qI}/T^3 . Известно, что в приближении невзаимодействующего кварк-глюонного газа кварковая плотность описывается полиномом по μ_q/T

$$n_q/T^3 = N_f \left(2 \frac{\mu_q}{T} + \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{\mu_q}{T} \right)^3 \right). \quad (9)$$

Это позволяет предположить, что в фазе деконфайнмента при достаточно высокой температуре кварковая плотность также описывается полиномом по μ_q/T , соответственно, n_{qI} описывается полиномом по θ . Действительно, в работе [6] было показано, что в фазе деконфайнмента при $T > T_{RW}$ плотность числа частиц n_{qI} хорошо фитируется полиномом по θ в интервале, равном периоду, т.е. $[-\pi/3, \pi/3]$. В фазе деконфайнмента, которая рассматривается в данной работе, мы также фитируем n_{qI}/T^3 полиномом по θ

$$n_{qI}/T^3(\theta) = \sum_{n=1}^{n_{\max}} a_{2n-1} \theta^{2n-1}. \quad (10)$$

3. Детали вычислений. Для проверки описанного выше метода вычисления Z_n мы выполнили моделирование решеточной КХД с $N_f = 2$, используя улучшенное Вильсоновское действие для кварков и улучшенное калибровочное действие Ивасаки. Мы использовали решетку размером $16^3 \times 4$ при температуре $T/T_c = 1.35(7)$ (T_c – температура перехода

в кварк-глюонную плазму при нулевом химическом потенциале) для массы кварков, определяемой соотношением $m_\pi/m_\rho = 0.8$. Все параметры решеточного действия, включая значение c_{sw} , были взяты из работы [7] коллаборации WHOT-QCD. Для расчета плотности частиц мы использовали N_{conf} конфигураций ($N_{\text{conf}} = 1000$ или 2000), при этом используя только каждую 10 траекторию, сгенерированную в процессе выполнения гибридного алгоритма Монте-Карло с длиной траектории, равной 1.

Оператор Дирака в (1) в случае Вильсоновских фермионов может быть представлен в виде

$$\Delta = I - \kappa Q, \tag{11}$$

причем данное представление справедливо как для обычного, так и для улучшенного фермионного действия [8]. Соответственно, фермионный детерминант может быть записан как

$$\det \Delta = \exp \left[\text{tr} \ln (I - \kappa Q) \right] = \exp \left[- \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\kappa^n}{n} \text{tr} Q^n \right], \tag{12}$$

что называется разложением по параметру хоппинга. Химический потенциал в решеточной формулировке вводится в оператор Дирака в виде множителей $e^{\pm a\mu_q}$ в членах, соответствующих временному направлению, и разложение (12) принимает вид:

$$\det \Delta = \exp \left[\sum_{n=-\infty}^{\infty} W_n \xi^n \right], \tag{13}$$

где W_n представляют собой зависящие от калибровочных полей комплексные числа, $W_{-n} = W_n^*$. В случае мнимого химического потенциала разложение (13) примет вид

$$\det \Delta = e^{W_0} \exp \left[\sum_{n=1}^{\infty} \text{Re}[W_n] \cos(n\theta) - \text{Im}[W_n] \sin(n\theta) \right]. \tag{14}$$

Важно отметить, что разложение фермионного детерминанта сходится только при достаточно больших массах кварков. В данной работе вычисления выполнены для массы кварка, попадающей в этот диапазон. В случае масс кварков, близких к физическим, необходимо использовать другой метод вычисления фермионного детерминанта.

4. Фитирование кварковой плотности числа частиц. Как сказано выше, мы используем фит (10) в нашей работе. Наш анализ превосходит анализ, выполненный в [6] в нескольких направлениях. Наша статистика намного выше, что позволило значительно уменьшить статистическую погрешность вычислений n_{qI} . Мы выполнили вычисления для значительно большего числа значений θ . Эти два фактора

позволили выполнить фитирование с намного более высокой точностью, чем в [6]. Кроме того, решетка, используемая в наших расчетах $-16^3 \times 4$ значительно превосходит по размеру решетку $8^2 \times 16 \times 4$, использованную в [6], что, без сомнения, уменьшает эффекты конечного размера. Но самым главным отличием нашей работы от [6] является то, что мы предлагаем новый метод вычисления Z_n , основанный на интегрировании плотности числа частиц, выражение (7).

На рис.1 показаны результаты вычисления n_{qI}/T^3 для различных значений θ при $T/T_c = 1.35$

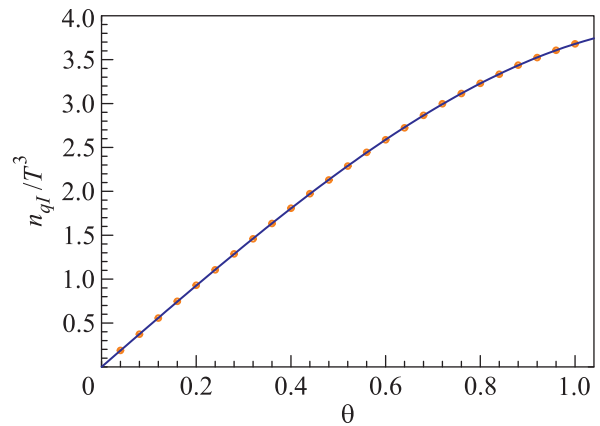


Рис. 1. (Цветной онлайн) Мнимая плотность n_{qI}/T^3 как функция θ , $T/T_c = 1.35$. Сплошная линия показывает результат фита функцией (10) с $n_{\text{max}} = 2$

в интервале $[0, \pi/3]$. Известно, что n_{qI} является непрерывной функцией θ в этом интервале. Также показаны результаты фитирования значений n_{qI}/T^3 функцией (10) с $n_{\text{max}} = 2$. Мы получили очень хороший фит с $a_1 = 4.671(2), a_3 = -0.9907(41)$ при $\chi/N_{\text{dof}} = 0.67$, где $N_{\text{dof}} = 24$. В работе [6] было получено $a_1 = 4.675(3), a_3 = -0.9973(49)$ при $\chi/N_{\text{dof}} = 6.0, N_{\text{dof}} = 9$. Таким образом, хотя результаты совпадают в пределах погрешностей, выводы следуют разные. В [6] фит с двумя параметрами дал плохие результаты, а у нас – отличные. Попытка вычислить a_5 , используя фит с $n_{\text{max}} = 3$ дала $a_5 = 0.008(20)$, при этом значения параметров a_1 и a_3 практически не изменились. В работе [6] фит с ненулевым a_5 дал $a_5 = -0.06736(1956)$ и заметное изменение значений коэффициентов a_1 и a_3 . Поскольку наши результаты для n_{qI}/T^3 имеют более высокую точность и вычислены для 26 значений мнимого химпотенциала (в работе [6] – для 11), наши результаты фитирования более точные.

Затем мы вычислили Z_n , используя процедуру, описанную в предыдущем разделе. Соотношение (8) теперь выглядит так:

$$Z_n = \frac{\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos(n\theta) e^{-N_s^3(a_1\theta^2/2 + a_3\theta^4/4)}}{\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-N_s^3(a_1\theta^2/2 + a_3\theta^4/4)}}. \quad (15)$$

Интегрирование было выполнено численно с использованием библиотеки FMlib [http://myweb.lmu.edu/dmsmith/fmlib.html], позволяющей проводить вычисления с большим числом значащих цифр (до 100). Нам удалось получить Z_n до $n = 300$. Результаты представлены на рис. 2.

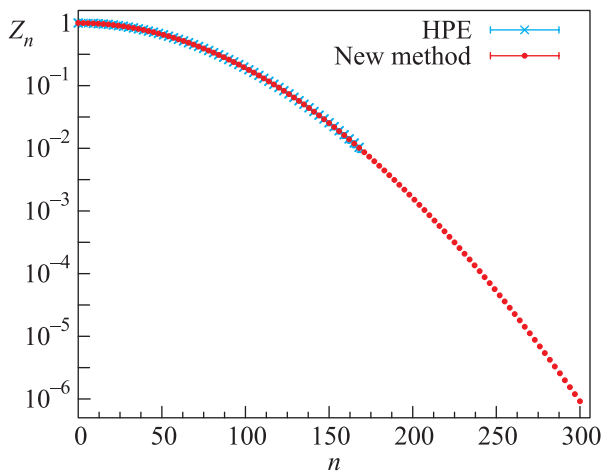


Рис. 2. (Цветной онлайн) Z_n , вычисленные двумя методами

Для проверки точности наших вычислений интеграла (15) мы использовали полученные значения Z_n в (6) для вычисления n_{qI}/T^3 . Мы получили очень хорошее согласие с исходными данными для n_{qI}/T^3 , показанными на рис. 1. Для всех значений θ в интервале $[0.0; 1.0]$ относительное отклонение для мнимой кварковой плотности не превышает 0.6%.

Но решающей проверкой предложенного в этой работе нового метода вычисления Z_n является сравнение результатов, полученных этим методом, с результатами, полученными известным методом – методом разложения по хоппинг параметру, который был описан выше. Результаты двух вычислений показаны на рис. 2. Для вычислений методом разложения по хоппинг параметру использовано только 40 конфигураций при $\theta = 0$. Поэтому статистическая погрешность для результатов, полученных этим методом, сравнительно большая, и на рис. 2 показаны данные только для n до 150. Из рис. 2 видно, что два независимых метода дают отличное согласие, хотя значения

Z_n меняются на 20 порядков. Для всех значений n относительное отклонение результатов, полученных двумя методами, равно нулю в пределах статистической погрешности.

Хотя оба метода являются приближенными, они имеют систематические погрешности разной природы и совпадение результатов не может быть случайным. Таким образом, мы можем сделать вывод, что предложенный метод работает, во всяком случае в фазе деконфайнмента. Отметим, что для нового метода нет ограничений на массу кварка, в отличие от метода разложения по хоппинг-параметру. Более того, наши вычисления новым методом потребовали значительно меньше компьютерного времени (для одинаковой статистики). Мы планируем использовать новый метод для вычислений как в фазе деконфайнмента, так и в фазе конфайнмента при значительно уменьшенной массе кварка с последующей экстраполяцией к ее физическому значению.

На рис. 3 мы показываем кварковую плотность n_q , полученную из мнимой плотности n_{qI} с помощью

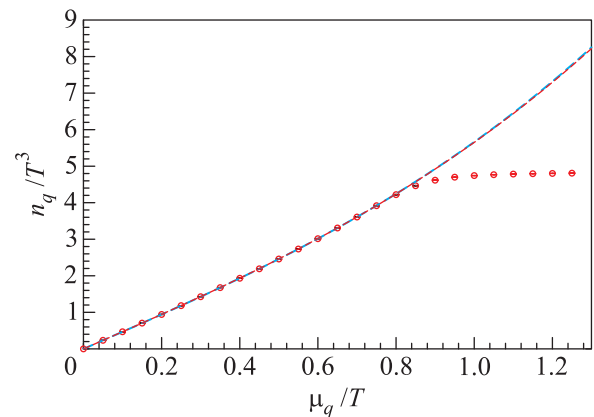


Рис. 3. (Цветной онлайн) Кварковая плотность как функция μ_q/T : аналитическое продолжение мнимой кварковой плотности (длинный пунктир); результат вычисления ряда Тейлора (короткий пунктир); вычисление с использованием Z_n (пустые круги)

аналитического продолжения:

$$n_q = a_1(m_q/T) - a_3(m_q/T)^3. \quad (16)$$

На этом рисунке мы также приводим результат вычисления методом разложения в ряд Тейлора по химическому потенциалу. В этом методе вычисляются производные $\log Z_{GC}$ при нулевом значении химического потенциала. В работе [7] коэффициенты c_2 (соответствует нашему a_1) и c_4 (соответствует $-6a_3$) были вычислены для решеточного действия и параметров, использованных в нашей работе. Было по-

лучено: $c_2 = 4.682(11)$, $-c_4/6 = -0.97(8)$. Таким образом, наши результаты совпадают с результатами, полученными с помощью разложения в ряд Тейлора в пределах статистической погрешности. Это объясняет тот факт, что на рис. 3 кривая, соответствующая методу разложения в ряд Тейлора, совпадает с кривой, полученной новым методом.

Коэффициент c_6 (соответствует $120a_5$) не вычислялся в работе [7] ввиду сложности задачи. Отметим, что этот коэффициент вычислялся в работе [9], но для другого типа решеточного действия и других параметров. В этой работе было получено, что в фазе деконфайнмента при температурах выше $1.3T_c$ c_6 очень мал и равен нулю в пределах статистической ошибки. Этот вывод согласуется с нашим результатом.

На рис. 3 показаны также результаты вычисления плотности n_q с помощью Z_n , с использованием соотношения

$$n_q/T^3 = C \frac{2 \sum_{n>0} n Z_n \sinh(n\mu_q/T)}{1 + 2 \sum_{n>0} Z_n \cosh(n\mu_q/T)}. \quad (17)$$

Эти результаты отклоняются от правильного значения для $\mu_q/T > 0.8$, т.к. мы использовали конечное число членов ($n_{\max} = 300$) при суммировании по n в (17). Это сравнение показывает, что даже такое большое число членов в (17) позволяет вычислять n_q/T^3 в довольно ограниченном диапазоне значений μ_q/T . Заметим, что вычисление Z_n для $n > 300$ возможно при увеличении числа значащих цифр, используемых при интегрировании в (8).

Выводы. Мы представили новый метод вычисления производящего функционала (статистической суммы) для канонического ансамбля Z_n , основанный на численном интегрировании кварковой плотности частиц n_{qI} в области мнимого химического потенциала, соотношение (7). Для численного интегрирования в (7) был использован результат фитирования численных значений кварковой плотности частиц n_{qI} полиномом (6). Подставив результаты фитирования в (7), мы вычислили Z_n при $T/T_c = 1.35$, используя преобразование Фурье (8). Было проверено, что n_{qI} отлично воспроизводится с помощью вычисленных значений Z_n , подставленных в соотношение (6).

Сравнивая значения Z_n , вычисленные предложенным методом, со значениями, вычисленными с помощью разложения по параметру хопшинга, мы продемонстрировали, что новый метод отлично работает: значения, полученные с помощью двух независимых методов, полностью согласуются. Следует

отметить, что наш метод применим для любых значений массы кварка, в отличие от метода разложения по параметру хопшинга, который применим только для больших значений.

Мы также показали согласие наших результатов для кварковой плотности n_q с результатами метода разложения в ряд Тейлора. В отличие от метода разложения в ряд Тейлора область применимости нашего метода не ограничена малыми значениями параметра μ/T .

Согласие результатов, полученных новым методом и двумя уже известными методами, говорит о том, что предложенный новый метод работает. Он позволяет вычислять зависимость от кваркового химического потенциала производящего функционала Z_{GC} , а следовательно давления p , производных от Z_{GC} по химическому потенциалу – кварковой плотности, ее восприимчивости и более высоких моментов. После выполнения вычислений при других значениях температуры мы сможем также вычислять зависимость от температуры перечисленных выше физических величин, а, следовательно, определить линию в фазовой плоскости, разделяющую адронную фазу и фазу кварк-глюонной плазмы. Мы планируем применить наш подход к более низким значениям температуры и массы кварков.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект 15-12-20008). Вычисления выполнены на GPU кластере “Восток 1” ДВФУ и на суперкомпьютере “Ломоносов” НИВЦ МГУ.

1. S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, and T. Takaishi, Prog. Theor. Phys. **110**, 615 (2003).
2. P. de Forcrand, PoS Latt. **2009**, 010 (2009); arXiv:1005.0539.
3. K. Nagata and A. Nakamura, JHEP **04**, 092 (2012).
4. A. Hasenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys. B **371**, 539 (1992).
5. P. de Forcrand and S. Kratochvila, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **153**, 62 (2006); arXiv:hep-lat/0602024.
6. J. Takahashi, H. Kouno, and M. Yahiro, Phys. Rev. D **91**, 014501 (2015).
7. S. Ejiri, Y. Maezawa, N. Ukita, S. Aoki, T. Hatsuda, N. Ishii, K. Kanaya, and T. Umeda (WHOT-QCD), Phys. Rev. D **82**, 014508 (2010).
8. A. Nakamura, S. Oka, and Y. Taniguchi, JHEP **02**, 054 (2016).
9. C. R. Allton, M. Doring, S. Ejiri, S.J. Hands, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, and K. Redlich, Phys. Rev. D **71**, 054508 (2005).