



# Решеточные расчеты при конечном химическом потенциале

*В.Г. Борняков*

30 января 2017

Зимняя школа “Физика тяжелых ионов: от LHC к NICA”,  
Дубна, ОИЯИ

# План

- **Формулировка решеточной КХД.**
- **Примеры результатов вычислений в решеточной КХД при  $T=0$ .**
- **Алгоритмы, используемые при вычислениях.**
- **Результаты при  $T > 0$ .**
- **Проблема вычислений при  $\mu_B > 0$**

- Методы вычислений при  $\mu_B > 0$

- Результаты при  $T > 0, \mu_B > 0$ .

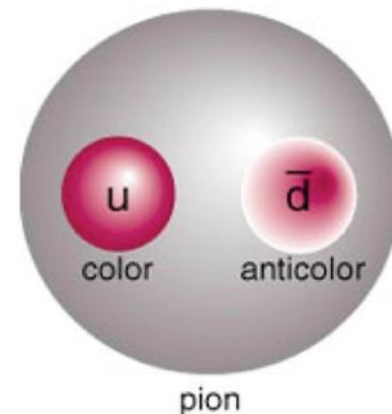
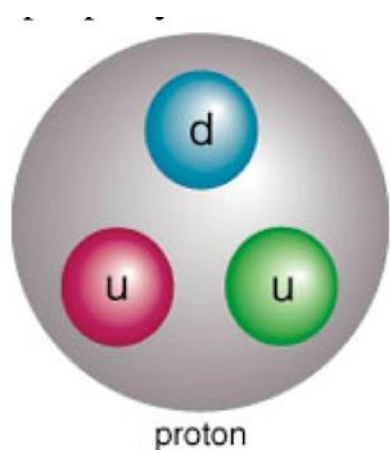
# Литература

- M. Creutz, Quarks, gluons and lattices, Cambridge Univ. Press (1983), translated into Russian
- H. Rothe, Lattice gauge theories - An introduction, World Scientific (4th ed. 2012)
- I. Montvay, G. Munster, Quantum fields on a lattice, Cambridge Univ. Press (1996)
- T. DeGrand, C. E. DeTar, Lattice methods for quantum chromodynamics, World Scientific (2006)
- C. Gattringer, C.B. Lang, Quantum Chromodynamics on the Lattice - An introductory presentation, Springer (2010)

# КХД – квантовая теория поля сильных взаимодействий элементарных частиц

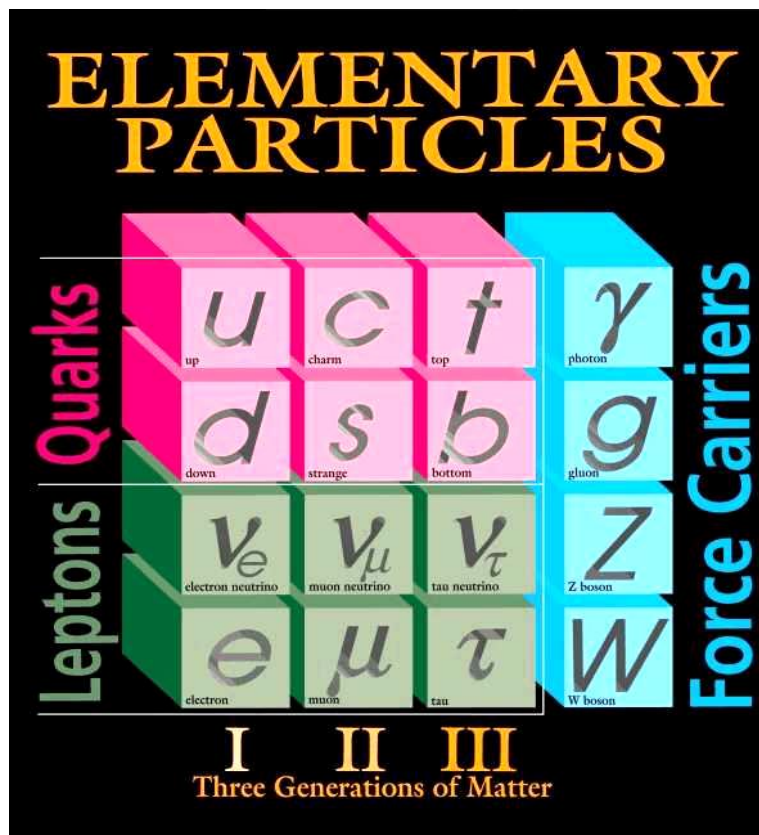
Фундаментальные частицы – кварки и глюоны

Адроны – частицы, состоящие из кварков и глюонов



# Стандартная модель

(Электрослабые и сильные взаимодействия)



# Действие КХД

$$S_G[A] = \int d^4x \frac{1}{2} \text{Tr} F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x)$$

$$S_F[\bar{\psi}, \psi, A]$$

$$= \int d^4x \sum_f \bar{\psi}_f(x) (\gamma_\mu D_\mu + m_f - \mu_f \gamma_0) \psi_f(x)$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - i[A_\mu, A_\nu]$$

$$D_\mu = \partial_\mu - iA_\mu$$

$$A_\mu = g A_\mu^a T^a$$

## Калибровочное преобразование

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \Omega(x)\psi(x)$$

$$\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x)\Omega(x)^\dagger$$

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = \Omega(x)A_\mu(x)\Omega(x)^\dagger + i(\partial_\mu\Omega(x))\Omega(x)^\dagger$$





**Kenneth Geddes Wilson**

**1936 - 2013**

the 1982 Nobel Prize in Physics for his work on phase transitions

# Confinement of Quarks

Kenneth G. Wilson

Phys.Rev. D10 (1974) 2445-2459

**28-th** in the list of  
Top Cited Articles of All Time  
(in High Energy Physics)

Сформулирована  
**КХД в решеточной регуляризации**

**Решеточная КХД (Lattice QCD)** позволяет  
выполнять непертурбативные вычисления исходя  
из первых принципов квантовой теории поля

# Задачи решеточной КХД

- 1) Проверка КХД как теории сильных взаимодействий при низких энергиях (адронный спектр, константы распада...)
- 2) Изучение необычных свойств КХД: конфайнмент, спонтанное нарушение киральной симметрии
- 3) Вычисление фундаментальных параметров КХД -  $\alpha_s$ ,  $m_q$

4) Вычисление величин, необходимых для экспериментаторов или для фиксации параметров моделей КХД.

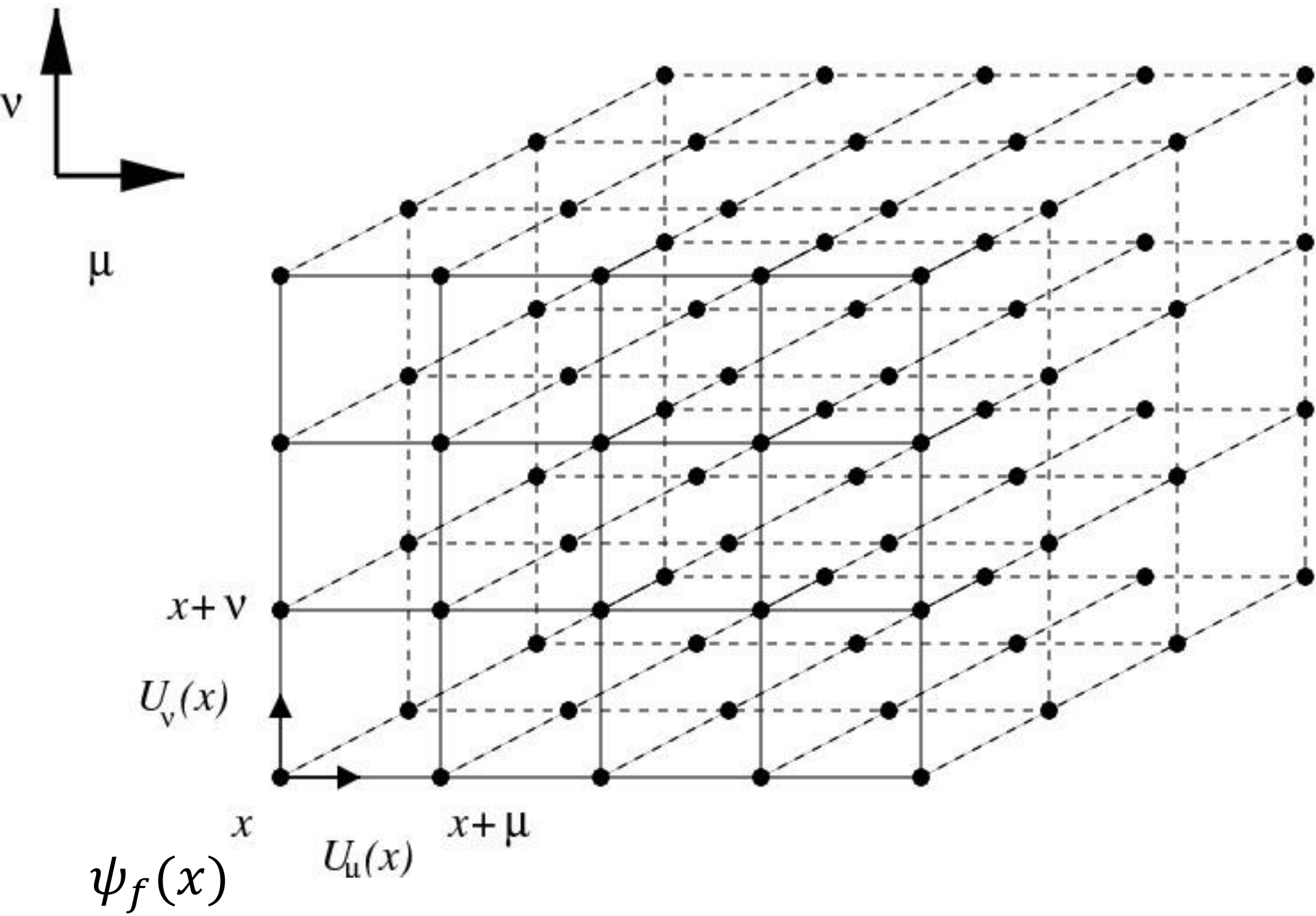
$T_c$  - температура перехода в кварк-глюонную плазму (для  $\mu_B=0$ );

уравнение состояния

5) Поиск физики за пределами стандартной модели

# Основные идеи

- Мнимое время  $t \rightarrow it$
- Дискретизация пространства
- Сохранение важной симметрии - калибровочной инвариантности
- Дискретизованное (решеточное) действие переходит в действие КХД, когда шаг решетки формально обращается в 0
- Полученная КТП выглядит как аналог статистической теории в 4-х измерениях



В дискретизованном действии появляются члены вида

$\bar{\psi}(x)\psi(x + a\hat{\mu})$ , калибровочно неинвариантны

Введем калибровочное поле  $U_\mu(x) \in SU(3)$

$$U_\mu(x) \rightarrow \Omega(x) U_\mu(x) \Omega(x + a\hat{\mu})$$

$\bar{\psi}(x) U_\mu(x) \psi(x + a\hat{\mu})$  - инвариантно

# Решеточное действие

$$S_W^G = \beta \sum_P \left( 1 - \frac{1}{3} \text{Re Tr} U_P \right)$$

$$U_{\mu\nu}(s) = U_\mu(s) U_\nu(s + \hat{e}_\mu) U_\mu^\dagger(s + \hat{e}_\nu) U_\nu^\dagger(s) .$$

$$S_W^F = \bar{\psi} M(U) \psi$$



$$U_\mu(s) = \text{P} e^{i \int_0^1 dl A_\mu(as+al\hat{\mu})}$$

$$S_W^G \xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{1}{2g^2} \int \text{Tr} F_{\mu\nu}^2(x) d^4x + O(a^2),$$

$$S_W^F \xrightarrow{a \rightarrow 0} \int \bar{\psi}_f(x) (\gamma_\mu D_\mu + m_f) \psi_f(x) d^4x + O(a)$$

## Интегрирование по фермионным полям

$$\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} e^{-\bar{\psi} M(U) \psi} = \det M(U)$$

$$\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \bar{\psi}^a(s') \psi^b(s) e^{-\bar{\psi} M(U) \psi}$$

$$= (M_{s,s'}^{-1}(U))^{ab} \det M(U)$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}U \mathcal{O}(U) e^{-S_{\text{eff}}(U)}$$

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}U e^{-S_{\text{eff}}(U)}$$

$$S_{\text{eff}}(U) = S_W^G(U) - \sum_f \ln \det M_f(U)$$

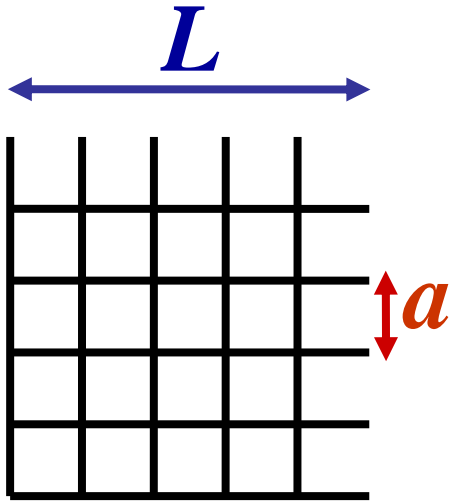
$$\mathcal{D}U = \prod_{s,\mu} dU_\mu(s)$$

$$\mathcal{O} = (\bar{\psi}\psi)(s')(\bar{\psi}\psi)(s)$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U (M_{s,s'}^{-1}(U))^{ab} (M_{s',s}^{-1}(U))^{ba} e^{-S_{\text{eff}}(U)}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle \approx \frac{1}{N_{\text{conf}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{conf}}} \mathcal{O}_i(U)$$

# Три предела



Шаг решетки

$$a \rightarrow 0$$

Размер

$$L \rightarrow \infty$$

Масса кварка

$$m_q \rightarrow 0$$

## Типичные значения

$$a \approx 0.05 \div 0.1 \text{ fm}$$

$$L \approx 3 \div 4 \text{ fm}$$

$$m_q \approx 10 \div 50 \text{ Mev}$$

# Типичный порядок интеграла

число узлов  $L/a=48$ ,  $(L/a)^4=5\ 308\ 416$

**Интеграл по**

$8*4* (L/a)^4 = 169\ 869\ 312$  переменным

**Интеграл по фермионным степеням  
дает детерминант матрицы**

$12L^4 \times 12L^4$

$12L^4 = 63\ 700\ 992$



Mike Creutz

Первые вычисления в 1979



# Monte Carlo Study of Quantized SU(2) Gauge Theory

M. Creutz

Phys.Rev. D21 (1980) 2308-2315

Около 1000 цитирований

**Local Organising  
Committee**

Gert Aarts (Swansea)  
Jonathan Flynn (Southampton)  
Andreas Jüttner (Southampton)  
Kurt Langfeld (Plymouth, Liverpool)  
Biagio Lucini (Swansea)  
Antonio Rago (Plymouth)  
Chris Sachrajda (Southampton)  
Mike Teper (Oxford)  
Christopher Thomas (Cambridge)  
Matthew Wingate (Cambridge)

**34th International  
Symposium on  
Lattice Field Theory**



**24-30 July  
2016**

**LATTICE  
SOUTHAMPTON UK**

**International Advisory  
Committee**

Constantia Alexandrou (Cyprus)  
Norman Christ (Columbia)  
Gilberto Colangelo (Bern)  
Will Detmold (MIT)  
Heng-Tong Ding (CCNU Wuhan)  
Robert Edwards (Jefferson Lab)  
Elvira Gamiz (Granada)  
Leonardo Giusti (Milano-Bicocca)  
Jeff Greensite (San Francisco)  
Anna Hasenfratz (Colorado)  
Sandor Katz (Budapest)  
Yoshio Kikukawa (Tokyo)  
Andreas Kronfeld (Fermilab)  
Yoshinobu Kuramashi (Tsukuba)  
Laurent Lellouch (Aix-Marseille)  
David Lin (NCTU Hsinchu)  
Agostino Patella (CERN, Plymouth)  
Owe Phillipsen (Frankfurt)  
Kari Rummukainen (Helsinki)  
Junko Shigemitsu (Ohio State)  
Hiroshi Suzuki (Kyushu)  
Mithat Ünsal (NCSU)  
James Zanotti (Adelaide)

**Algorithms and Machines  
Applications Beyond QCD  
Chiral Symmetry  
Hadron Spectroscopy and Interactions  
Hadron Structure  
Nonzero Temperature and Density  
Physics Beyond the Standard Model  
Standard Model Parameters and Renormalization  
Theoretical Developments  
Vacuum Structure and Confinement  
Weak Decays and Matrix Elements**



UNIVERSITY OF  
**Southampton**

**SHEP** Southampton  
High Energy  
Physics

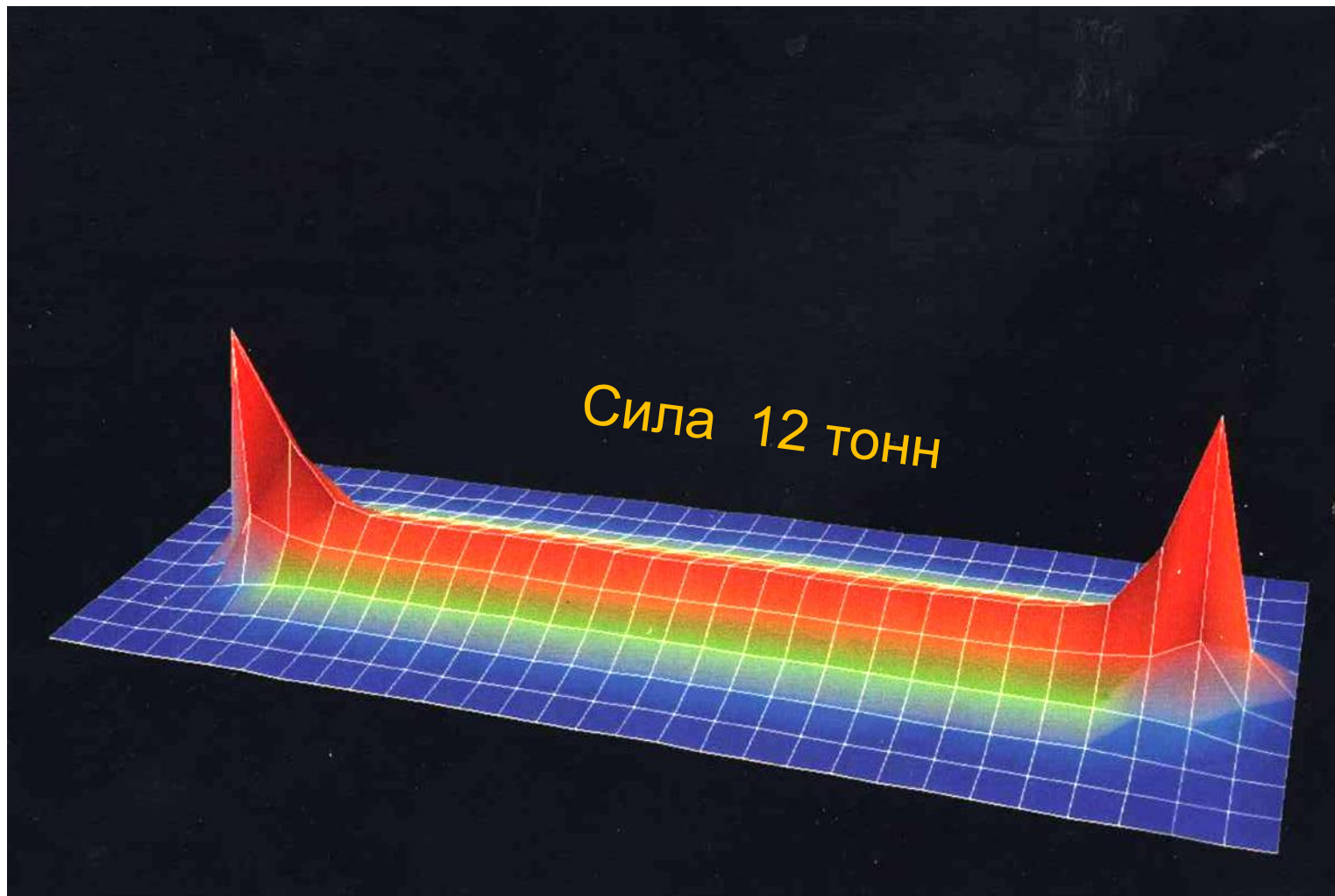


Science & Technology  
Facilities Council

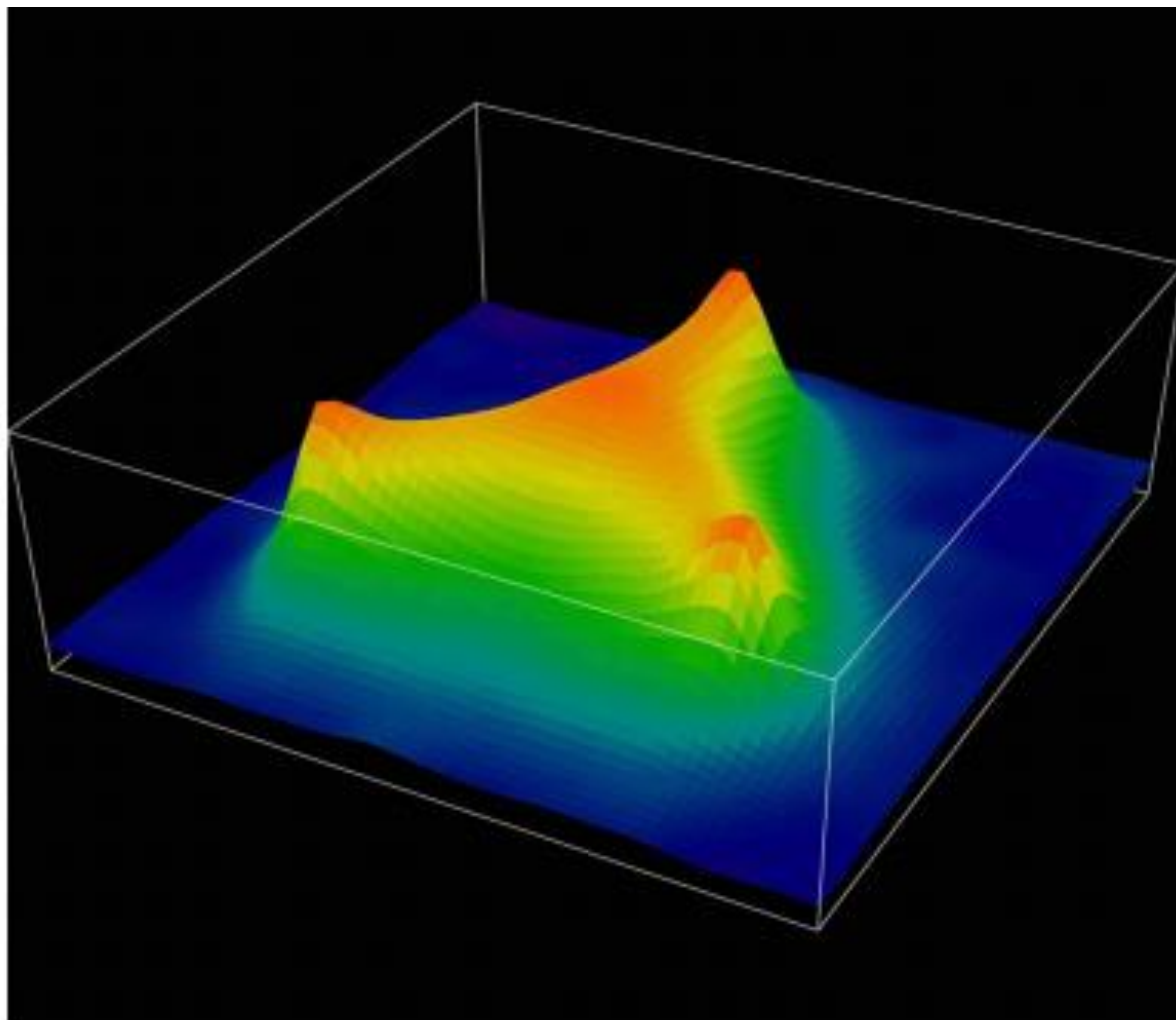


<http://www.southampton.ac.uk/lattice2016/>  
[lattice2016@soton.ac.uk](mailto:lattice2016@soton.ac.uk)

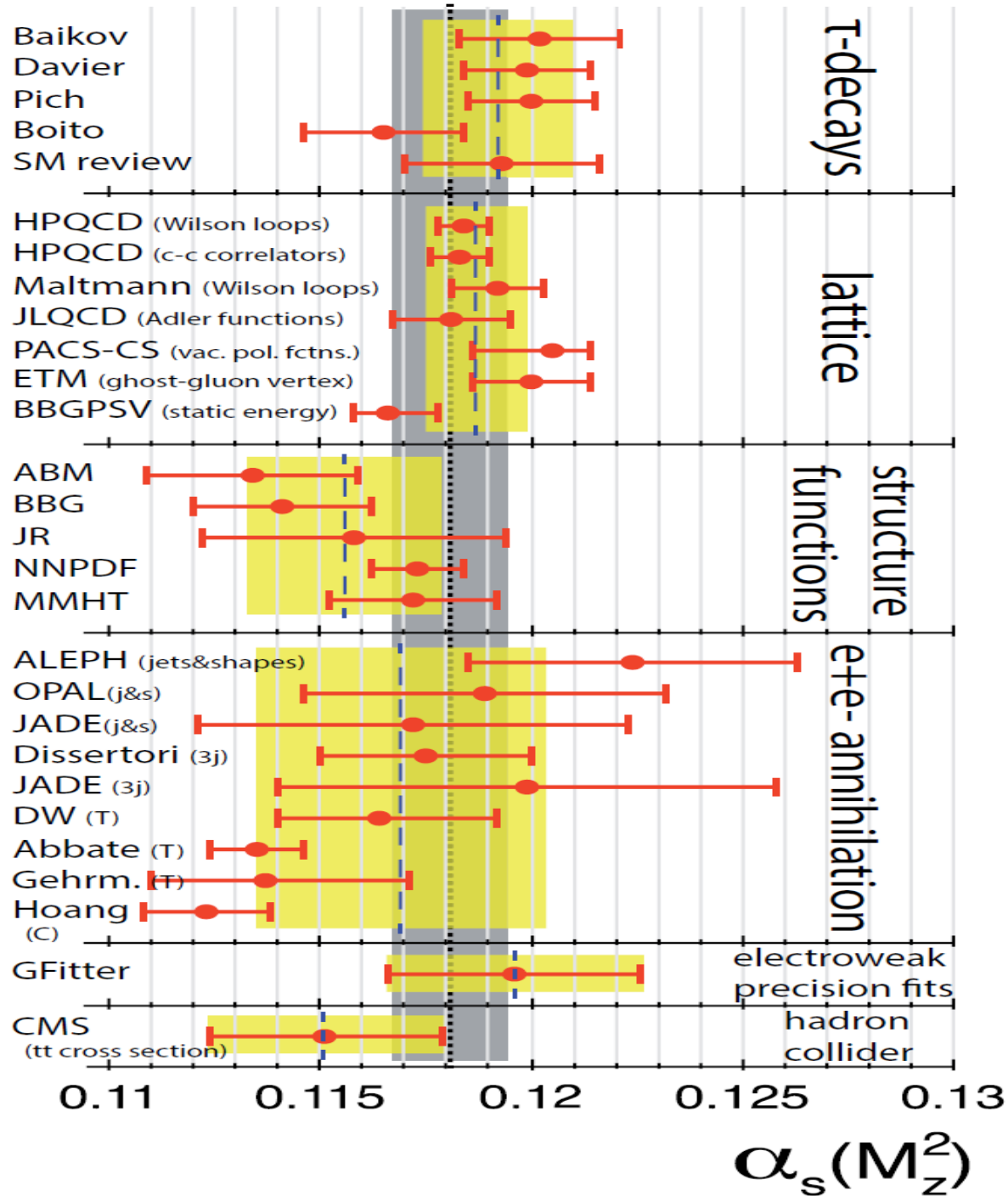
# Проблема ненаблюдаемости кварков



Профиль адронной струны в мезоне



Профиль адронной струны в барионе.

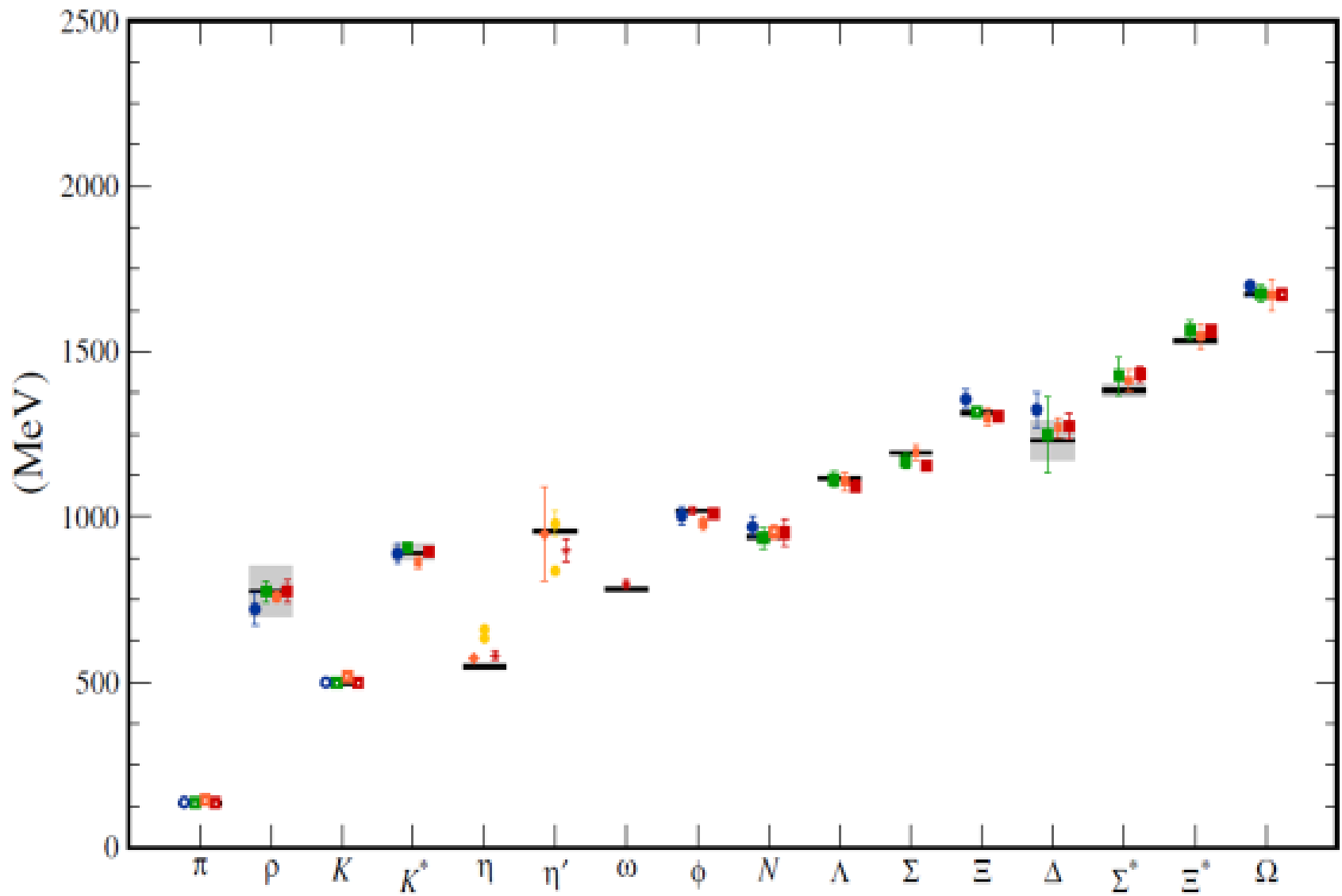


# Массы кварков

$$\overline{m}_s = (93.8 \pm 1.5 \pm 1.9) \text{ MeV}$$

$$\overline{m}_{ud} = (3.42 \pm 0.06 \pm 0.07) \text{ MeV}$$

$$\frac{\overline{m}_s}{\overline{m}_{ud}} = 27.46 \pm 0.15 \pm 0.41 .$$



Адронный спектр масс

# Вычисление разности масс нейтрона и протона

Ab initio calculation of the neutron-proton mass difference

Fodor et al. Science, 347(2015) 1452

Это очень важная величина для существования материи во Вселенной. Ее небольшое уменьшение привело бы к распаду протона, а увеличение - к нестабильности дейтрона.



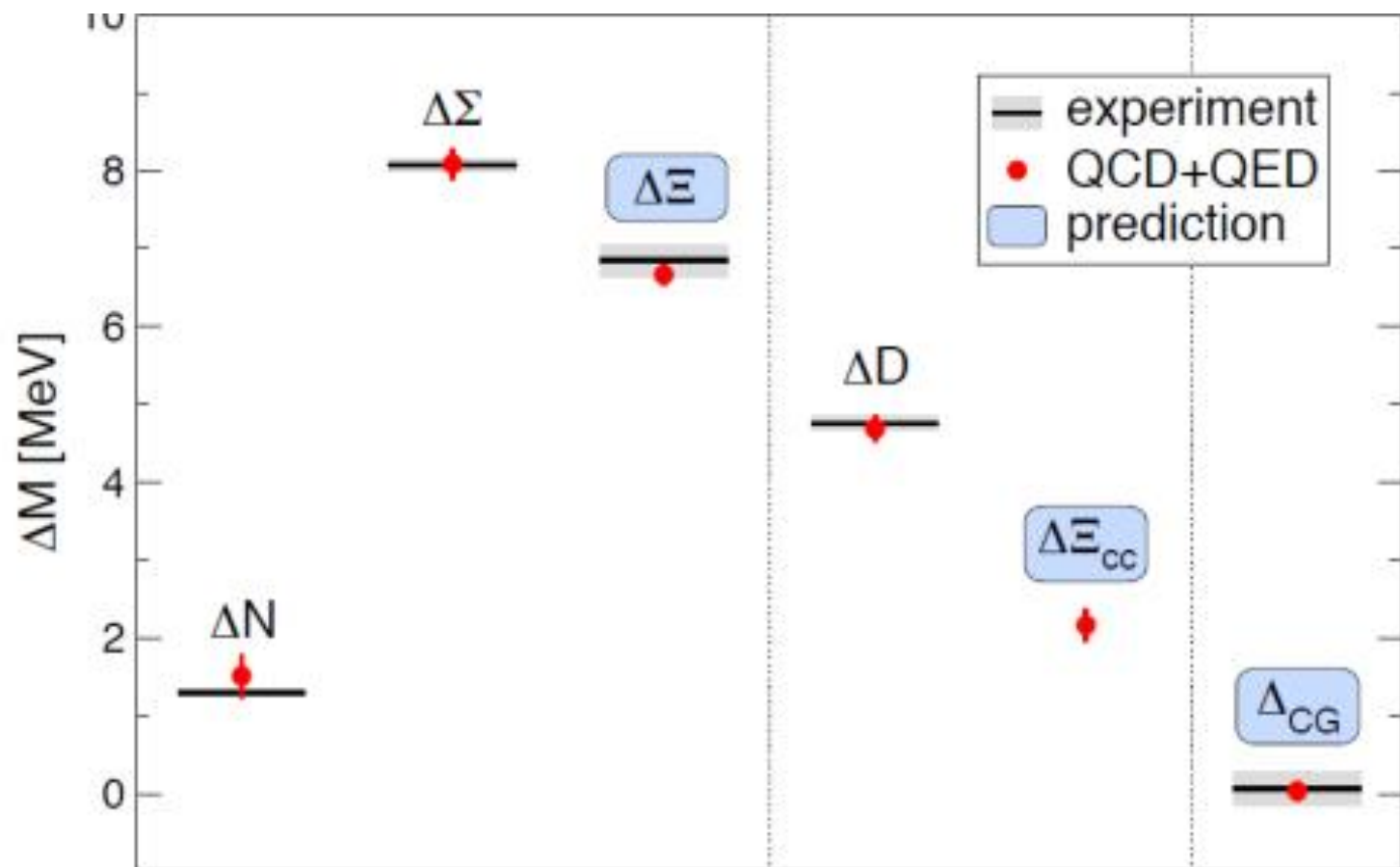


Figure 2: **Mass splittings in channels that are stable under the strong and electromagnetic interactions.** Both of these interactions are fully unquenched in our 1+1+1+1 flavor calculation. The horizontal lines are the experimental values and the grey shaded regions represent the experimental error (2). Our results are shown by red dots with their uncertainties. The error bars are the squared sums of the statistical and systematic errors. The results for the  $\Delta M_N$ ,  $\Delta M_\Sigma$ , and  $\Delta M_D$  mass splittings are post-dictions, in the sense that their values are known experimentally with higher precision than from our calculation. On the other hand, our calculations yield  $\Delta M_\Xi$ ,  $\Delta M_{\Xi_{cc}}$  splittings, and the Coleman-Glashow difference  $\Delta_{CG}$ , which have either not been measured in experiment or are measured with less precision than obtained here. This feature is represented by a blue shaded region around the label.

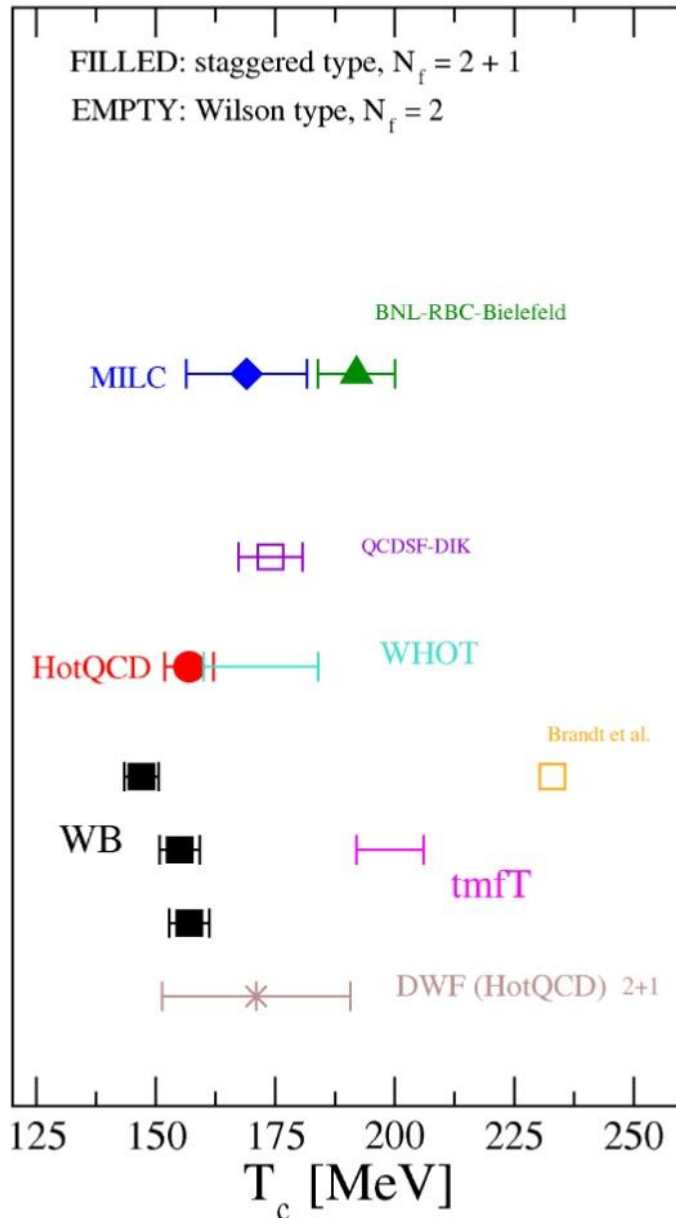
**The neutron–proton mass difference, one of the most consequential parameters of physics, has now been calculated from fundamental theories. This landmark calculation portends revolutionary progress in nuclear physics.**

**Frank Wilczek**

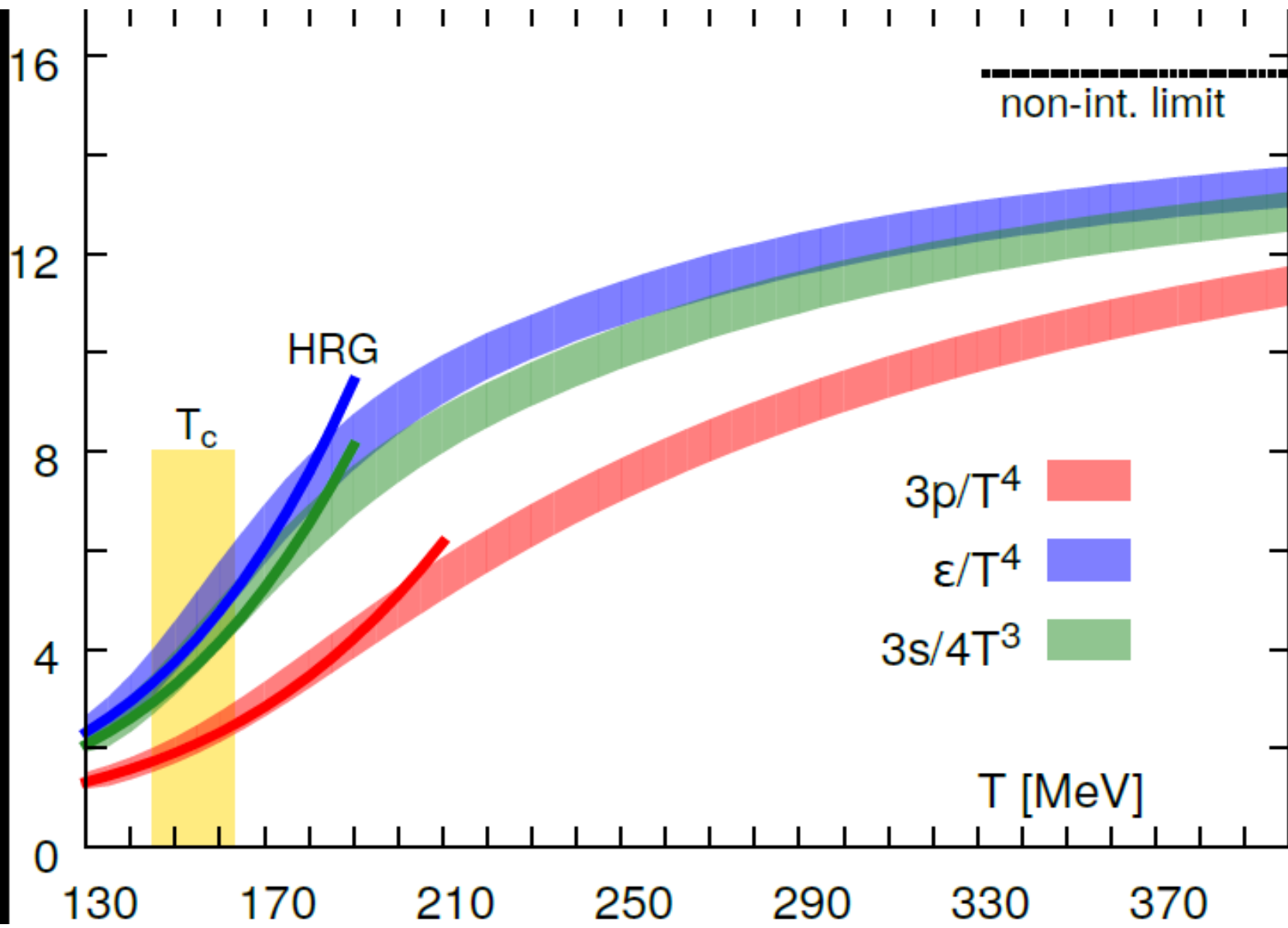
**(Нобелевская премия 2004 года, свойство асимптот. свободы КХД)**

**Nature, 520, 303 (2015)**

# Transition temperature from a variety of studies



- ▶ Staggered types,  $N_f = 2 + 1$ : p4, asqtad, HISQ, stout — already introduced. Data from only chiral type observables.
- ▶ Wilson types,  $N_f = 2$ :
  - ▷ QCDSF-DIK [arXiv:0910.2392], clover + plaquette,  $N_t = 8 - 14$
  - ▷ WHOT-QCD [arXiv:0909.2121], clover + Iwasaki,  $N_t = 4 - 6$
  - ▷ Brandt et al. [arXiv:1011.6172], clover,  $N_t = 16$
  - ▷ tmfT (Florian Burger talk), mtmWilson + tree-level Symanzik,  $N_t = 8 - 12$
- ▶ DWF (HotQCD),  $N_f = 2+1$ :+Iwasaki,  $N_t = 8$ ,  $L_s = 32 - 96$



# Алгоритмы, используемые при вычислениях

N. Metropolis, S. Ulam,  
The Monte Carlo method  
J.of Am. Stat. Ass., 1948

Алгоритм Метрополиса для статистической механики был опубликован в 1953 году

N. Metropolis, et al. Equation of State  
Calculations by Fast Computing Machines,  
Journal of Chemical Physics 21 (1953) 1087.

# Алгоритм Метрополиса

Генерация многомерной случайной величины  $U$  с распределением  $S(U)$

$U_{i+1}$  из  $U_i$  :

$$P(U_{i+1}) = \min\{1, e^{-\Delta S}\},$$

$$\Delta S = S(U_{i+1}) - S(U_i)$$

MCMC – Markov chain Monte Carlo

Вычисления в решеточной КХД состоят из нескольких этапов.

Первый этап заключается в генерации конфигураций калибровочного поля. Эти конфигурации генерируются последовательно и образуют марковскую цепь с распределением вероятности, пропорциональным

$$e^{-S_{eff}(U)}$$

Вычисление интегралов с точностью несколько процентов - весьма непростая задача:

- используются самые современные суперкомпьютеры ;

- разработка новых алгоритмов для повышения эффективности вычислений является одной из основных задач;

- для решения физических и программистских задач создаются коллаборации.

Примеры коллабораций:

MILC

USQCD

UKQCD

JLQCD

QCDSF



Россия

1981 г.

ОИЯИ

Митрюшкин, Гердт, Мюллер-Пройскер,  
Ильгенфритц

ИТЭФ

Макеенко, Поликарпов

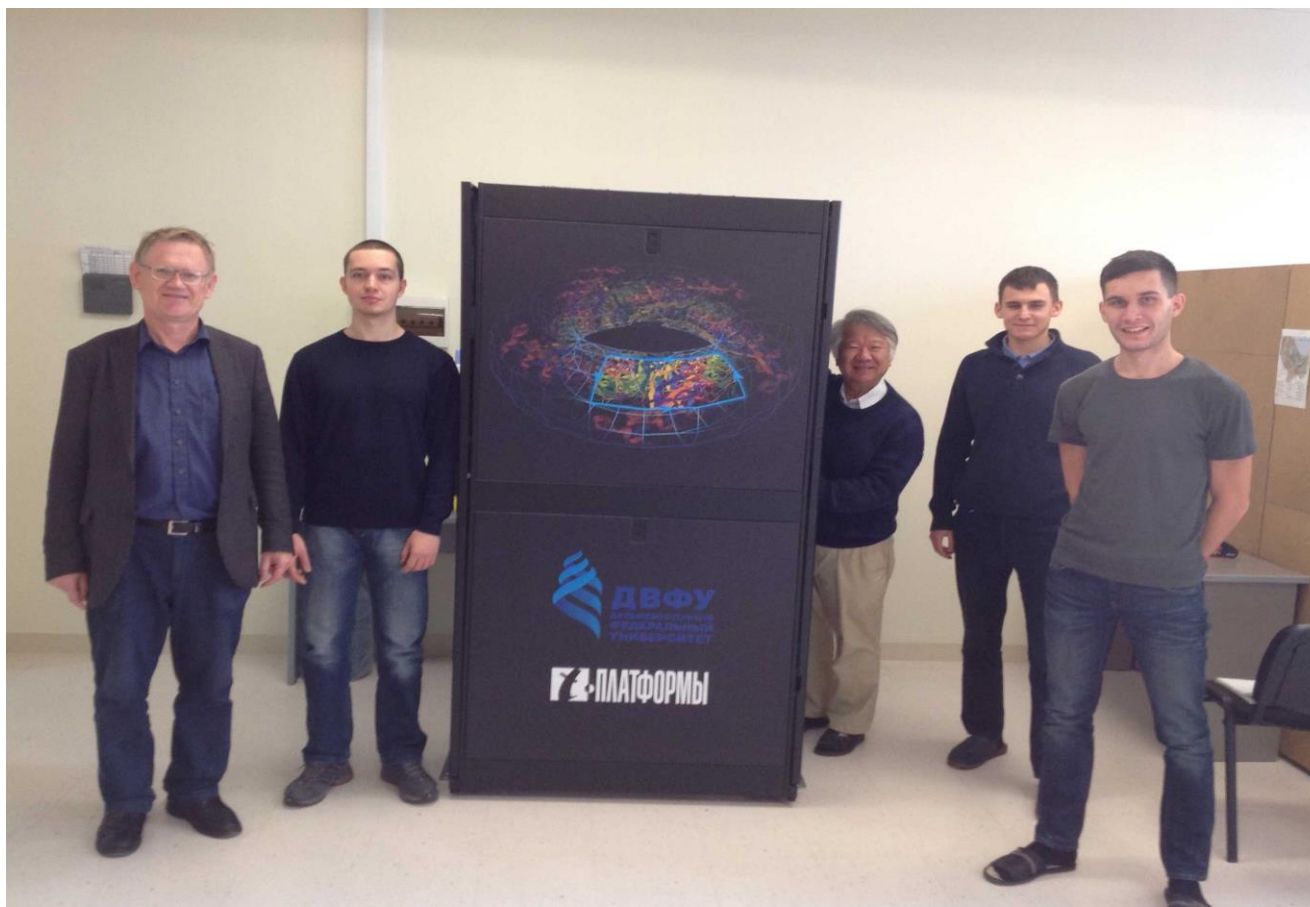
Лаборатория 191 ИТЭФ,

Решеточные калибровочные теории

создана М.И. Поликарповым в 2000 году

Сейчас руководитель – В. В. Брагута

Новая лаборатория - **ДВФУ**, Владивосток  
Основной проект – **КХД с ненулевым  
химическим потенциалом**, грант РФФ,  
руководитель – профессор А. Накамура



## Проблема – фермионный детерминант

Наивный подход — включение детерминантов в наблюдаемую. Очень неэффективно.

Правильно — определить плотность вероятности для калибровочного поля  $U$  как

$$\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}U \exp(iS[\psi, \bar{\psi}, U])$$

Проблема положительности правой части.

## Проблема – фермионный детерминант

Наивный подход — включение детерминантов в наблюдаемую. Очень неэффективно.

Правильно — определить плотность вероятности для калибровочного поля  $U$  как

$$P(U) = \frac{1}{Z} e^{-S_G(U)} \det M_u \det M_d$$

Проблема положительности правой части.

Положим

$$m_u = m_d$$

Физически это оправдано (изоспиновая SU(2) симметрия).

Тогда

$$\det M_u(U) = \det M_d(U)$$

$$P(U) = \frac{1}{Z} e^{-S_G(U)} [\det M_u]^2$$

Используется гибридный алгоритм Монте Карло (ГМК, иногда называемый гамильтонов Монте Карло) объединяет алгоритм Монте Карло и алгоритм молекулярной динамики.

Алгоритм предложен для решения проблем решеточной КХД

Hybrid Monte Carlo.

Duane, Kennedy, Pendleton, Roweth,

Phys. Lett. B195 (1987) 216-222.

Интегрирование гамильтоновых уравнений движения (МД) используется для создания пробной конфигурации калибровочных полей  $U$

Для точного интегрирования энергия сохраняется:  $\delta H = 0$

Ошибки численного интегрирования  $\Rightarrow \delta H \neq 0$

Пробная конфигурация принимается или отвергается - Метрополис

## Уравнения МД

$$\dot{\phi} = \frac{\partial H}{\partial \pi} \qquad \dot{\pi} = -\frac{\partial H}{\partial \phi}$$

где  $\pi$  – сопряженный импульс, вспомогательный гамильтониан

$$H = S + \frac{1}{2} \pi^2$$

Для решения МД уравнений обычно используется интегратор leap frog

Удовлетворяет требованиям обратимости и сохранения фазового объема



Проблема детерминанта в  $S_{eff}$  решается с помощью введения вспомогательных псевдофермионных переменных

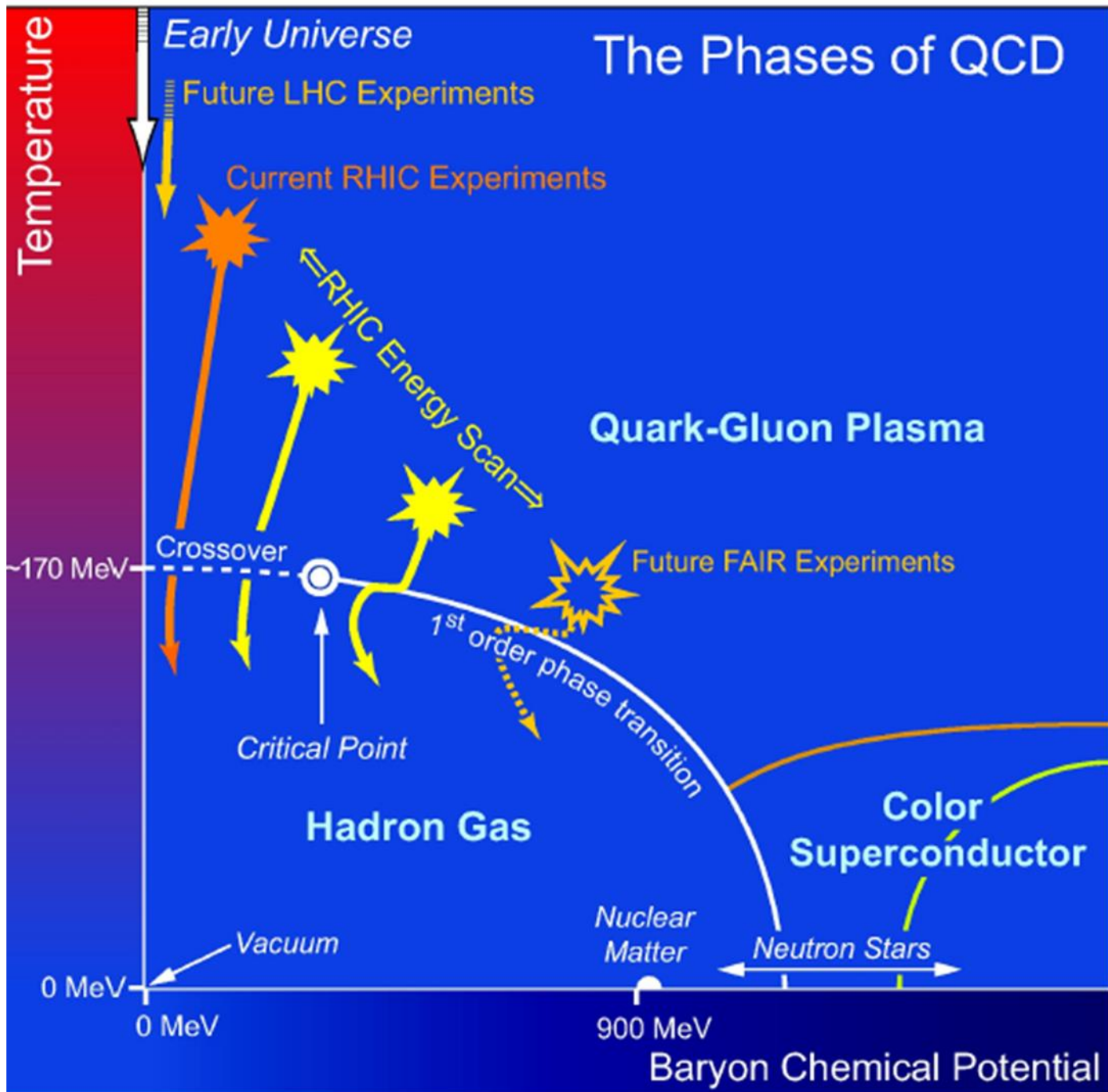
$$\int d\psi d\bar{\psi} \exp\{-\bar{\psi}_u D\psi_u - \bar{\psi}_d D\psi_d\} =$$

$$N \int d\phi_R d\phi_I \exp\{-\phi^+ (DD^+)^{-1} \phi\}$$

Одна из основных численных задач – обращение матрицы

$$DD^+$$

Обычно используется метод сопряженных градиентов



# Sign problem

$\det(\not{D} + m + \mu \gamma_0)$  -- In the integral

We use  $\gamma_5 \not{D} \gamma_5 = \not{D}^\dagger$

$$\begin{aligned} \gamma_5 (\not{D} + m + \mu \gamma_0) \gamma_5 &= \not{D}^\dagger + m - \mu \gamma_0 \\ &= (\not{D} + m - \mu^* \gamma_0)^\dagger \end{aligned}$$

$$\det(\not{D} + m + \mu \gamma_0) = \det^* (\not{D} + m - \mu^* \gamma_0)$$

$$\det(D + m + \mu \gamma_0) = \det^*(D + m - \mu^* \gamma_0)$$

Determinant is real only for  $\mu = 0$  and  $\mu = i\mu_I$

This makes impossible to apply usual MCMC algorithm In case of real  $\mu$

Note, that for imaginary  $\mu$  this problem is absent