



# Решеточные расчеты при конечном химическом потенциале

*В.Г. Борняков*

1 февраля 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  $T > 0, \mu_B > 0$ .

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

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

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

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

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

# 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

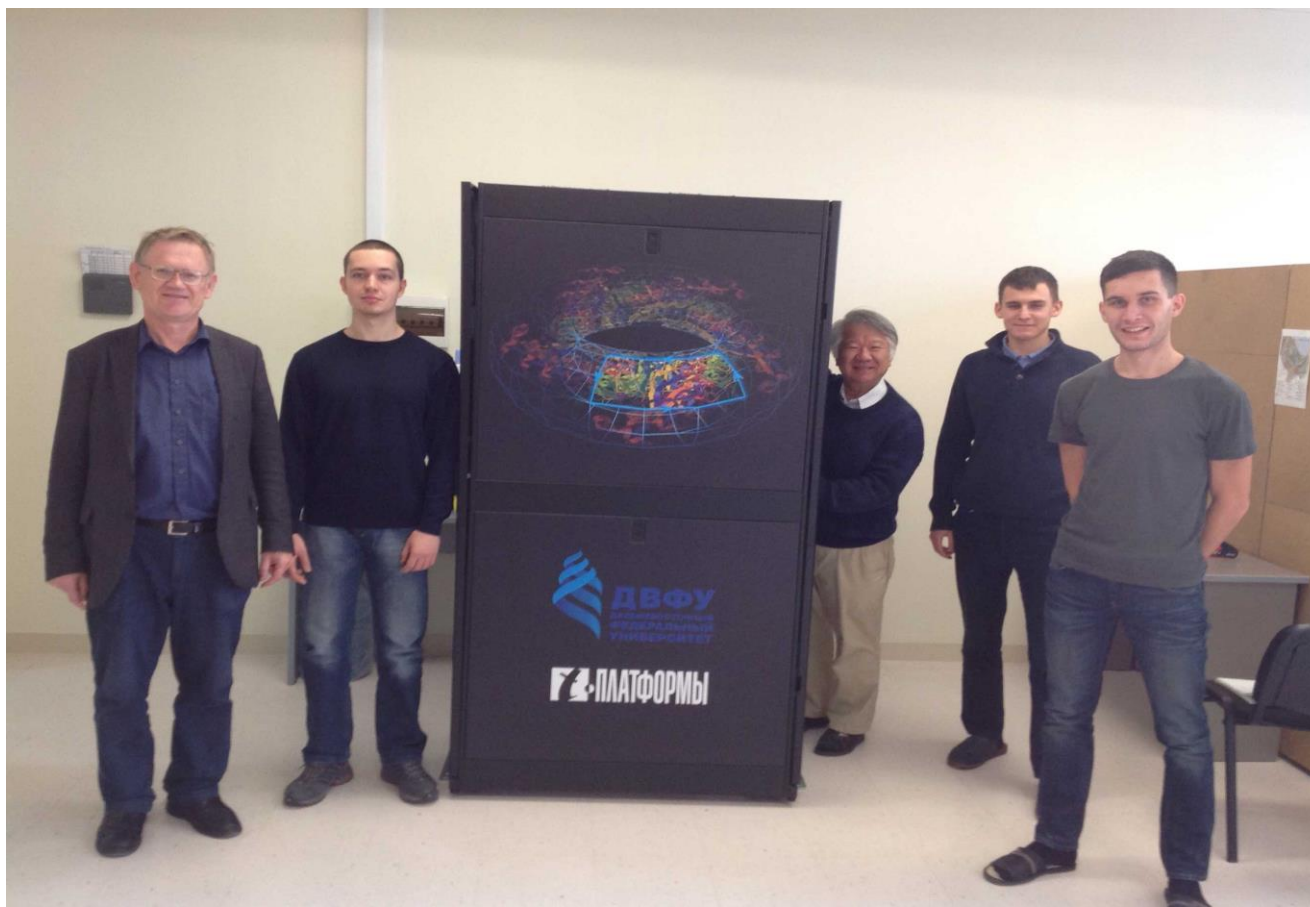
Лаборатория 191 ИТЭФ,

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  $U_\mu$  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

QCD in lattice regularization (aka **Lattice QCD**) has statistical and number of systematic uncertainties

These are **controlled** uncertainties

They can be **estimated** and **decreased**

## QCD at $T > 0$

$$S_G[A] = \int_0^{1/T} dx_4 \int d^3x \frac{1}{2} \text{Tr} F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x)$$

$$\begin{aligned} S_F[\bar{\psi}, \psi, A] \\ = \int_0^{1/T} dx_4 \int d^3x \sum_f \bar{\psi}_f(x) (\gamma_\mu D_\mu + m_f \\ - \mu_f \gamma_0) \psi_f(x) \end{aligned}$$

$T = 1/L_4$ ,  $L_4$  - length in 4<sup>th</sup> direction

$L_4 = aN_4$ ,  $a$  - lattice spacing

$$T = \frac{1}{aN_4}$$

Simple estimation of  $1/a$ :

If  $T \sim T_c$  (take  $T_c$  about 180 MeV)

$$1/a \sim N_4 T_c \sim \begin{array}{l} 720 \text{ MeV}, N_4 = 4 \\ 1.44 \text{ GeV}, N_4 = 8 \\ 2.16 \text{ GeV}, N_4 = 12 \end{array}$$

# 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

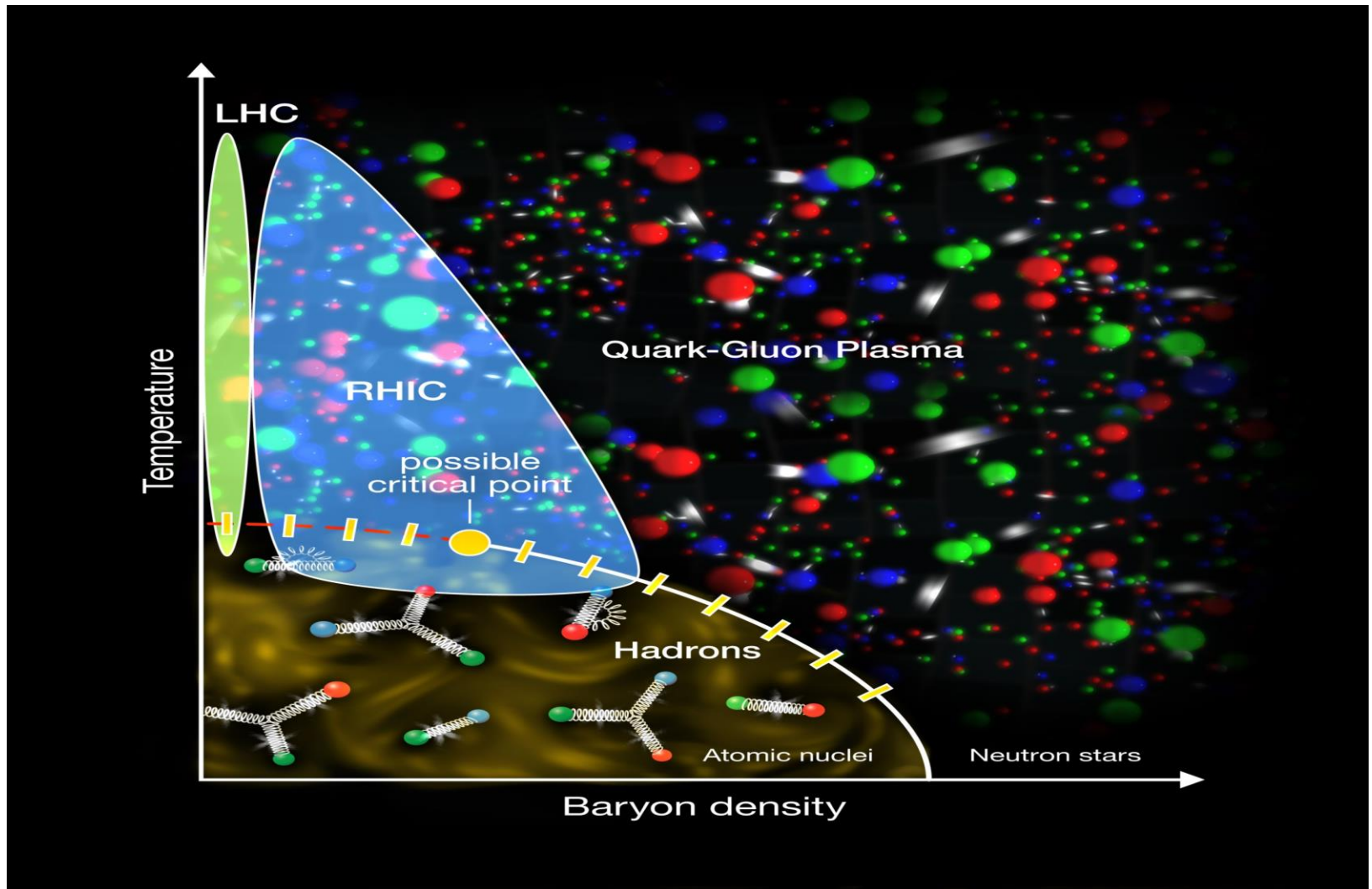
LQCD action with  $\mu$ :

$$S_F(\psi, \bar{\psi}, U) = \bar{\psi} M(U)\psi$$

where  $U_4 \rightarrow U_4 e^{a\mu}$ ,  $U_4^+ \rightarrow U_4^+ e^{-a\mu}$

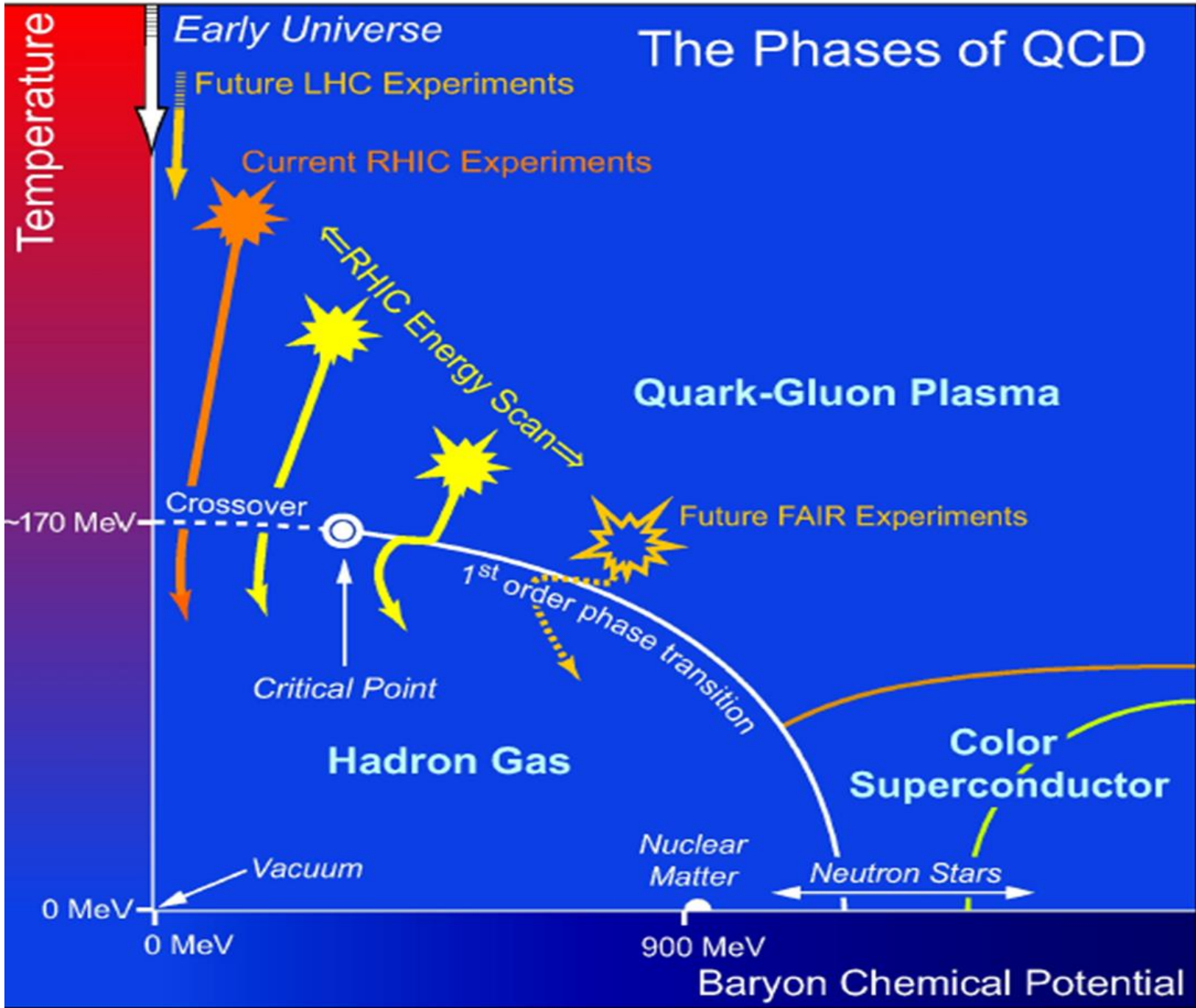


Various models and theoretical arguments suggest that there is a curve in the plane of temperature  $T$  versus baryon chemical potential  $\mu$  representing a line of first-order phase transitions. This curve terminates in a second-order phase transition at some  $T_c$  and  $\mu_c$ .



There is a curve in the plane of temperature  $T$  versus baryon chemical potential  $\mu$  representing a line of first-order phase transitions. This curve terminates in a second-order phase transition at some  $(T_c, \mu_c)$

# The Phases of QCD



The expectation is that  $T_c$  is less than 160 MeV and  $\mu_c$  is greater than a few hundred MeV.

Results of LQCD for  $\mu = 0$  ( $T_c$ , EoS) are used to fix parameters in various phenomenological models.

But results at  $\mu > 0$  are desirable

# Methods to solve sign problem

- **Multi-Parameter Reweighting**

Fodor, Katz, 2002

- **Taylor expansion**

Gottlieb et al. Phys.Rev.Lett. 59, 2247 (1987) (up to  $\mu^2$  )

Allton et al., Phys.Rev. D71, 054508 (2005) (up to  $\mu^6$  )

- **Imaginary Chemical Potential**

D'Elia, Lombardo, 2002

- **Canonical ensemble approach**

de Forcrand, Philipsen, 2002

# Taylor expansion

For free quark-gluon gas (Stefan-Boltzmann limit):

$$\frac{p_{SB}}{T^4} = \frac{8\pi^2}{45} + \sum_{f=u,d,..} \left[ \frac{7\pi^2}{60} + \frac{1}{2} \left( \frac{\mu_f}{T} \right)^2 + \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{\mu_f}{T} \right)^4 \right]$$

This is valid for very high T

For low T – Hadron resonance gas (HRG) model

$$\frac{p}{T^4} = G(T) + F(T) \cosh\left(\frac{3\mu_q}{T}\right)$$

# Notations

pressure

$$\frac{p}{T^4} = \frac{1}{VT^3} \log Z(V, T, \mu)$$

Quark number density

$$n_f/T^3 = \frac{\partial p/T^4}{\partial \mu_f/T}$$

Susceptibility

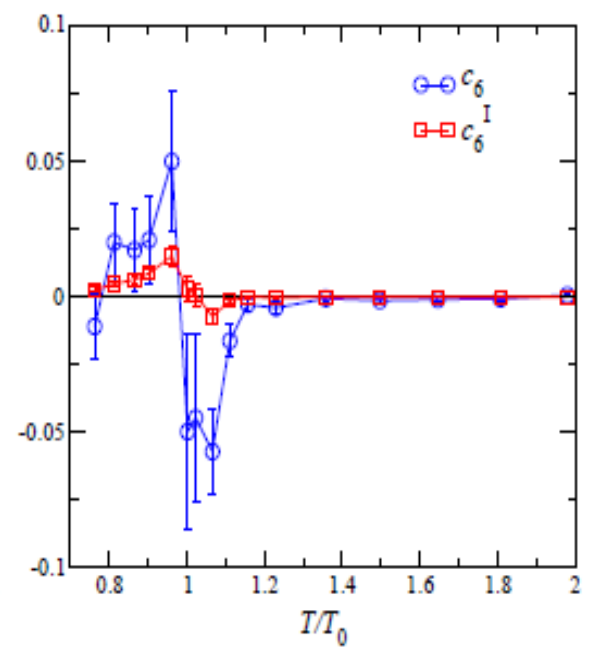
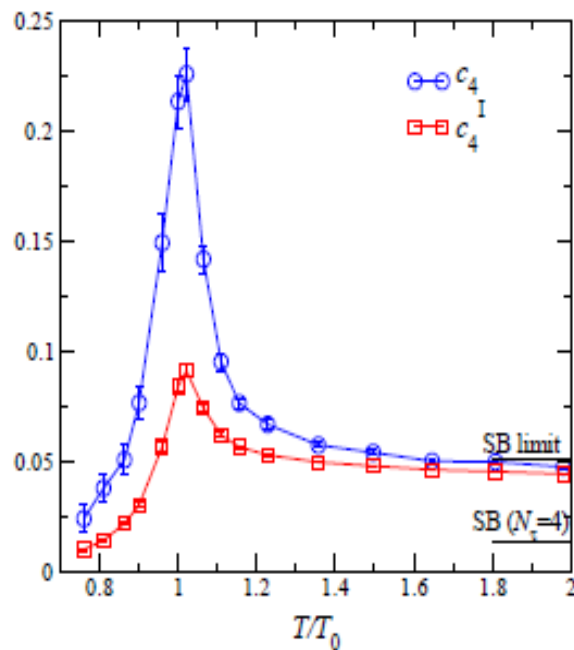
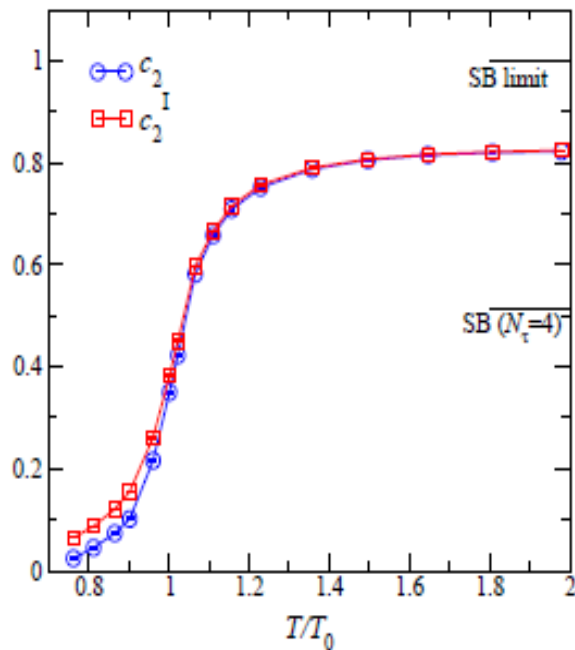
$$\chi_{ff}/T^2 = \frac{\partial n_f/T^3}{\partial \mu_f/T}$$

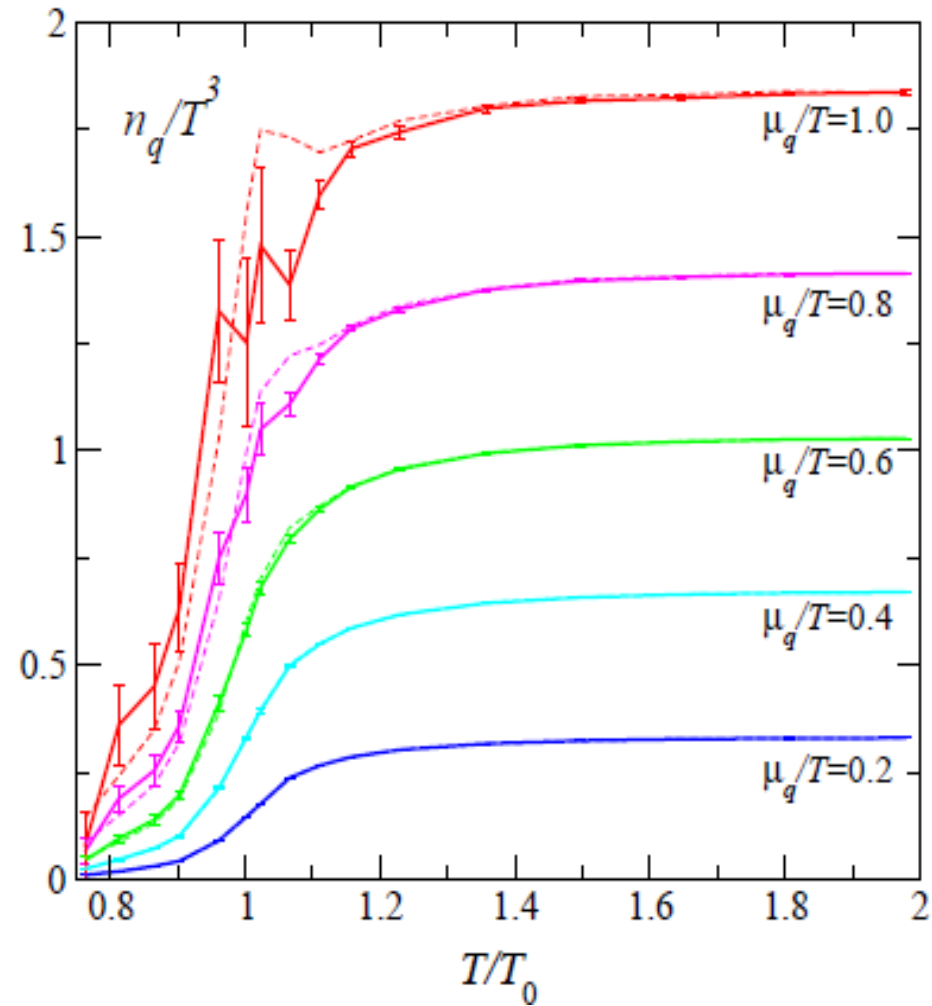
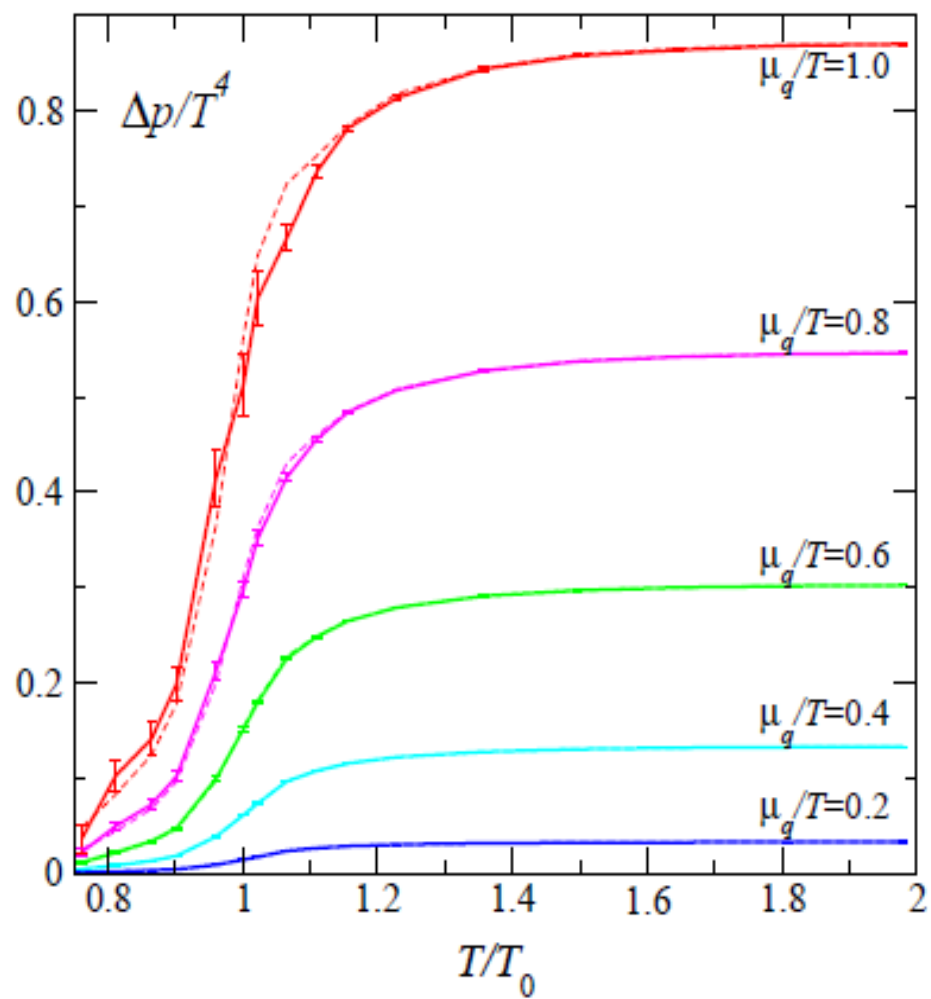
$$\frac{p}{T^4} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(T) \left(\frac{\mu_q}{T}\right)^n$$

$$\mu_u = \mu_d = \mu_q$$



# Lattice $16^3 4$ , $N_f = 2$ , Allton et al., 2005

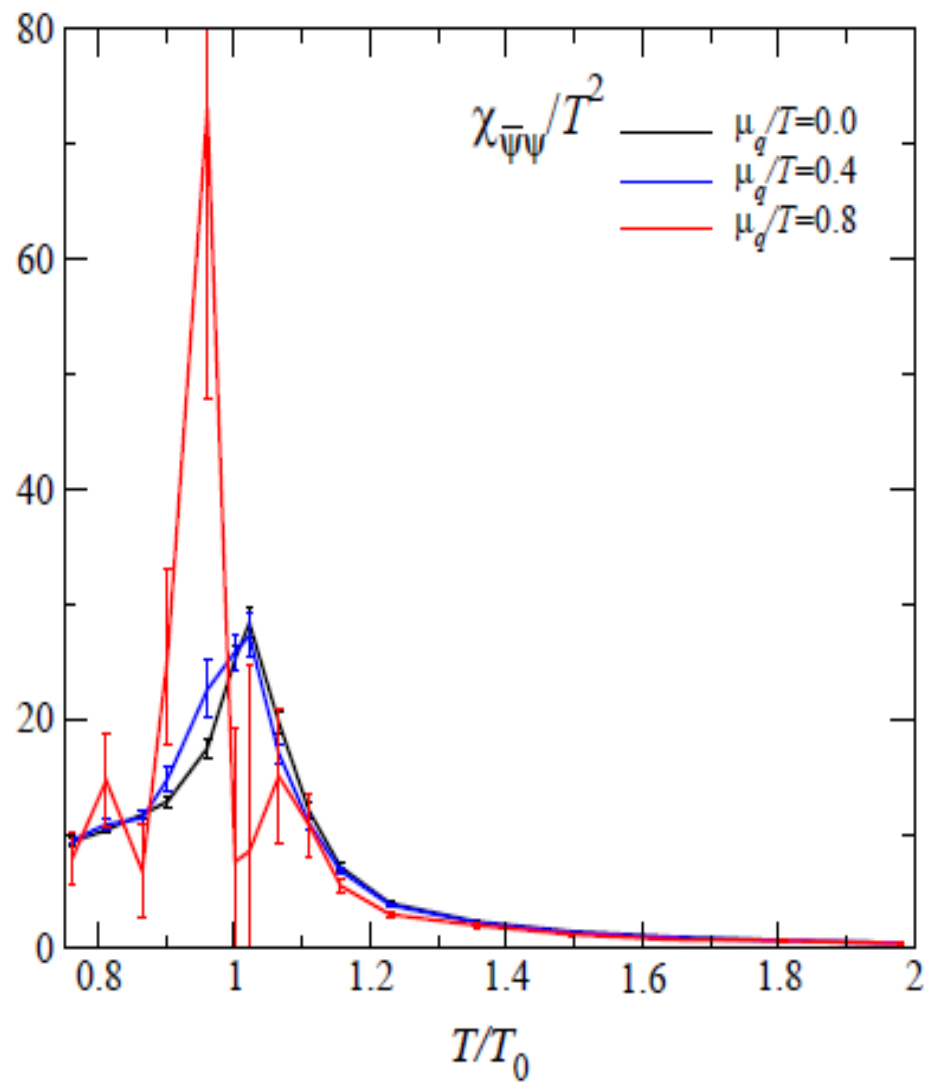
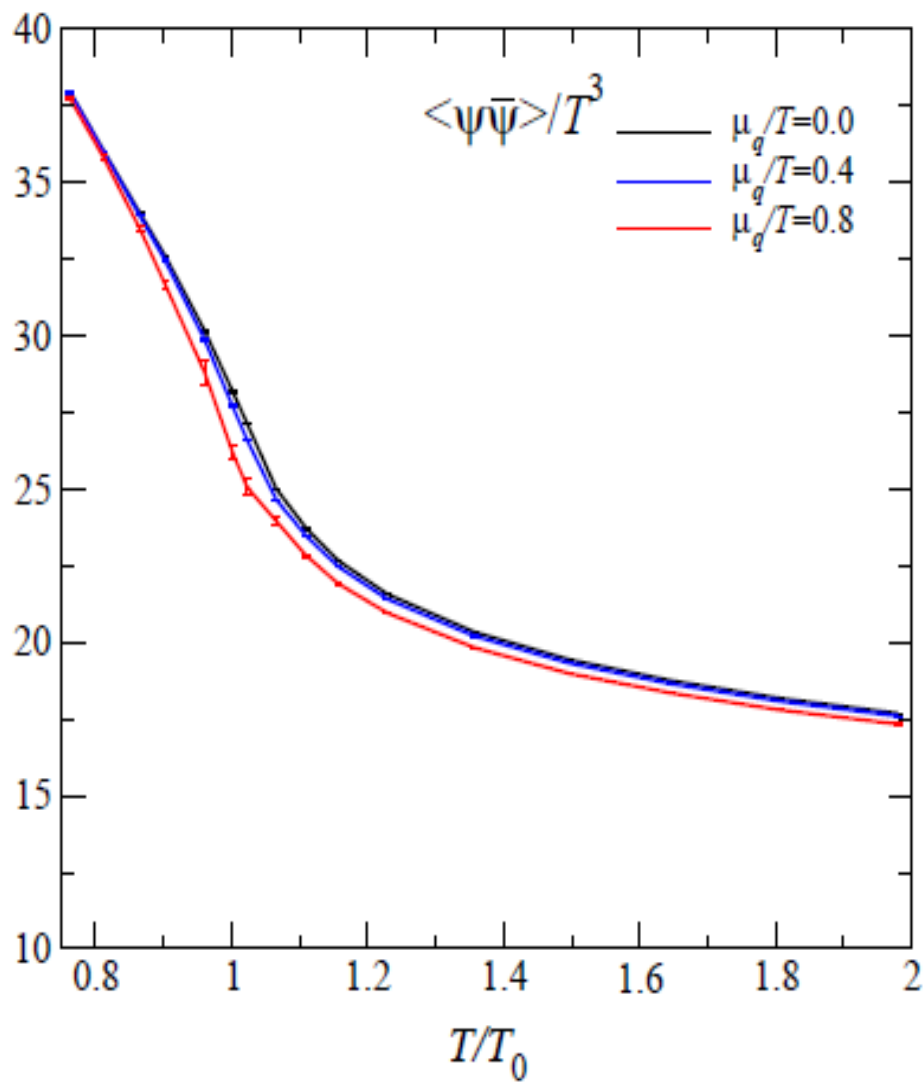




Chiral condensate

$$\frac{\langle \bar{\psi}\psi \rangle}{T^3} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n^{\bar{\psi}\psi}(T) \left(\frac{\mu_q}{T}\right)^n$$

$$c_n^{\bar{\psi}\psi} = \frac{\partial c_n}{\partial m_q/T}$$



# The QCD Equation of State to $\mathcal{O}(\mu_B^6)$ from Lattice QCD

A. Bazavov,<sup>1</sup> H.-T. Ding,<sup>2</sup> P. Hegde,<sup>3</sup> O. Kaczmarek,<sup>2,4</sup> F. Karsch,<sup>4,5</sup> E. Laermann,<sup>4</sup>  
 Y. Maezawa,<sup>6</sup> Swagato Mukherjee,<sup>5</sup> H. Ohno,<sup>5,7</sup> P. Petreczky,<sup>5</sup> H. Sandmeyer,<sup>4</sup>  
 P. Steinbrecher,<sup>4,5</sup> C. Schmidt,<sup>4</sup> S. Sharma,<sup>5</sup> W. Soeldner,<sup>8</sup> and M. Wagner<sup>9</sup>

<sup>1</sup>*Department of Computational Mathematics, Science and Engineering and Department of Physics and Astronomy,  
 Michigan State University, East Lansing, MI 48824, USA*

<sup>2</sup>*Key Laboratory of Quark & Lepton Physics (MOE) and Institute of Particle Physics,  
 Central China Normal University, Wuhan 430079, China*

<sup>3</sup>*Center for High Energy Physics, Indian Institute of Science, Bangalore 560012, India*

<sup>4</sup>*Fakultät für Physik, Universität Bielefeld, D-33615 Bielefeld, Germany*

<sup>5</sup>*Physics Department, Brookhaven National Laboratory, Upton, NY 11973, USA*

<sup>6</sup>*Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8317, Japan*

<sup>7</sup>*Center for Computational Sciences, University of Tsukuba, Tsukuba, Ibaraki 305-8577, Japan*

<sup>8</sup>*Institut für Theoretische Physik, Universität Regensburg, D-93040 Regensburg, Germany*

<sup>9</sup>*NVIDIA GmbH, D-52146 Würselen, Germany*

We calculated the QCD equation of state using Taylor expansions that include contributions from up to sixth order in the baryon, strangeness and electric charge chemical potentials. Calculations have been performed with the Highly Improved Staggered Quark action in the temperature range  $T \in [135 \text{ MeV}, 330 \text{ MeV}]$  using up to four different sets of lattice cut-offs corresponding to lattices of size  $N_\sigma^3 \times N_\tau$  with aspect ratio  $N_\sigma/N_\tau = 4$  and  $N_\tau = 6 - 16$ . The strange quark mass is tuned to its physical value and we use two strange to light quark mass ratios  $m_s/m_l = 20$  and 27, which in the continuum limit correspond to a pion mass of about 160 MeV and 140 MeV respectively. Sixth-order results for Taylor expansion coefficients are used to estimate truncation errors of the fourth-order expansion. We show that truncation errors are small for baryon chemical potentials less than twice the temperature ( $\mu_B \leq 2T$ ). The fourth-order equation of state thus is suitable for the modeling of dense matter created in heavy ion collisions with center-of-mass energies down to  $\sqrt{s_{NN}} \sim 12 \text{ GeV}$ . We provide a parametrization of basic thermodynamic quantities that can be readily used in hydrodynamic simulation codes. The results on up to sixth order expansion coefficients of bulk thermodynamics are used for the calculation of lines of constant pressure, energy and entropy densities in the  $T$ - $\mu_B$  plane and are compared with the crossover line for the QCD chiral transition as well as with experimental results on freeze-out parameters in heavy ion collisions. These coefficients also provide estimates for the location of a possible critical point. We argue that results on sixth order expansion coefficients disfavor the existence of a critical point in the QCD phase diagram for  $\mu_B/T \leq 2$  and  $T/T_c(\mu_B = 0) > 0.9$ .

Data for basic thermodynamic observables calculated for baryon chemical potentials  $\mu_B/T \leq 2.2$  in the temperature range  $135 \text{ MeV} \leq T \leq 280 \text{ MeV}$  for the cases (I) of vanishing strangeness and electric charge chemical potentials and (II) vanishing strangeness density,  $n_S = 0$  and fixed electric charge to net baryon-number ratio,  $n_Q/n_B = 0.4$  are provided as two ancillary files.

January 18, 2017

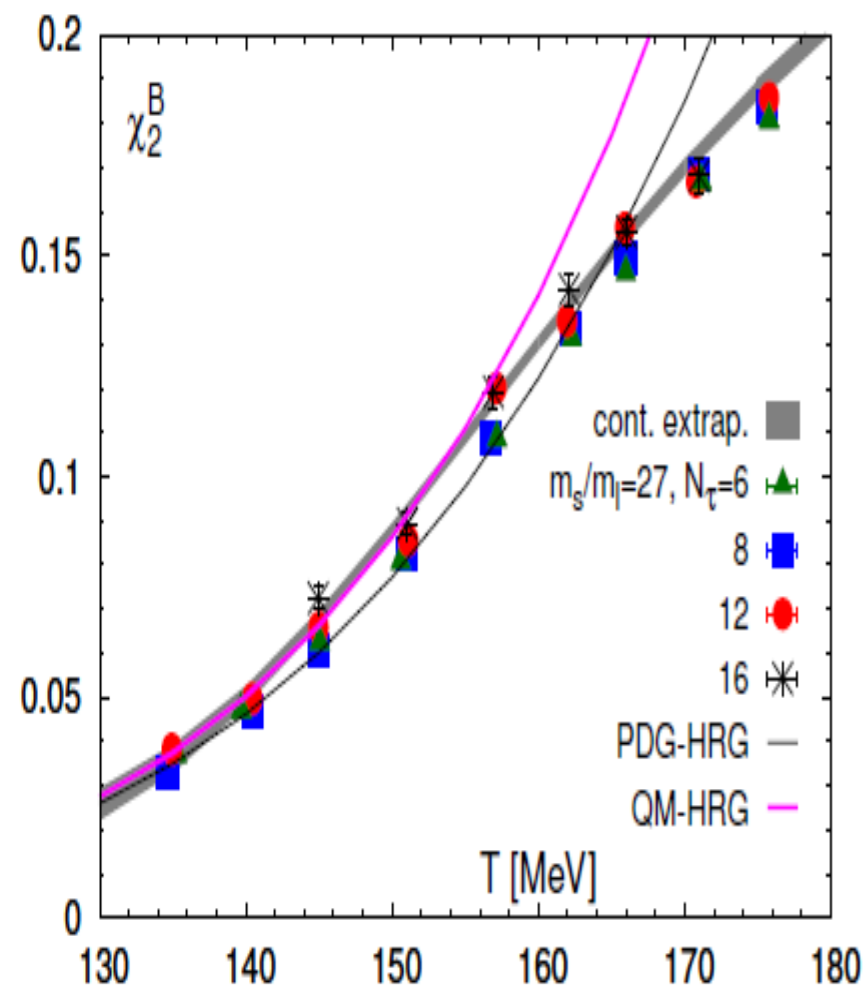
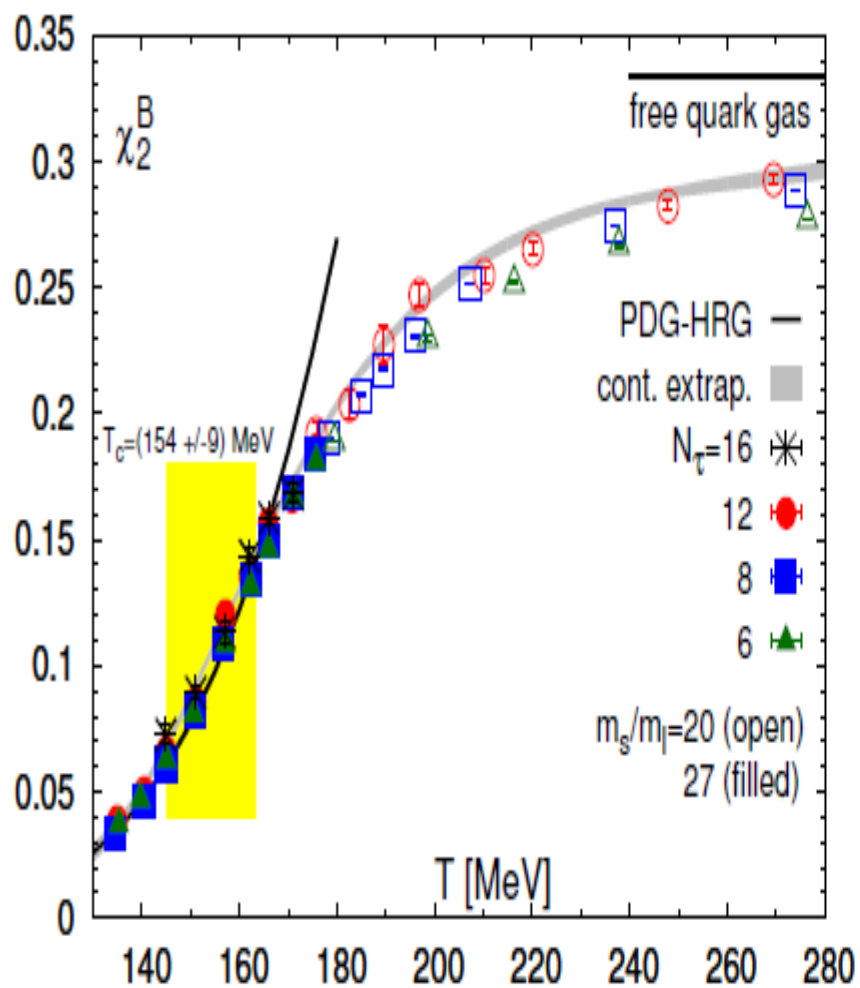
PACS numbers: 11.10.Wx, 12.38.Gc, 12.38.Mh

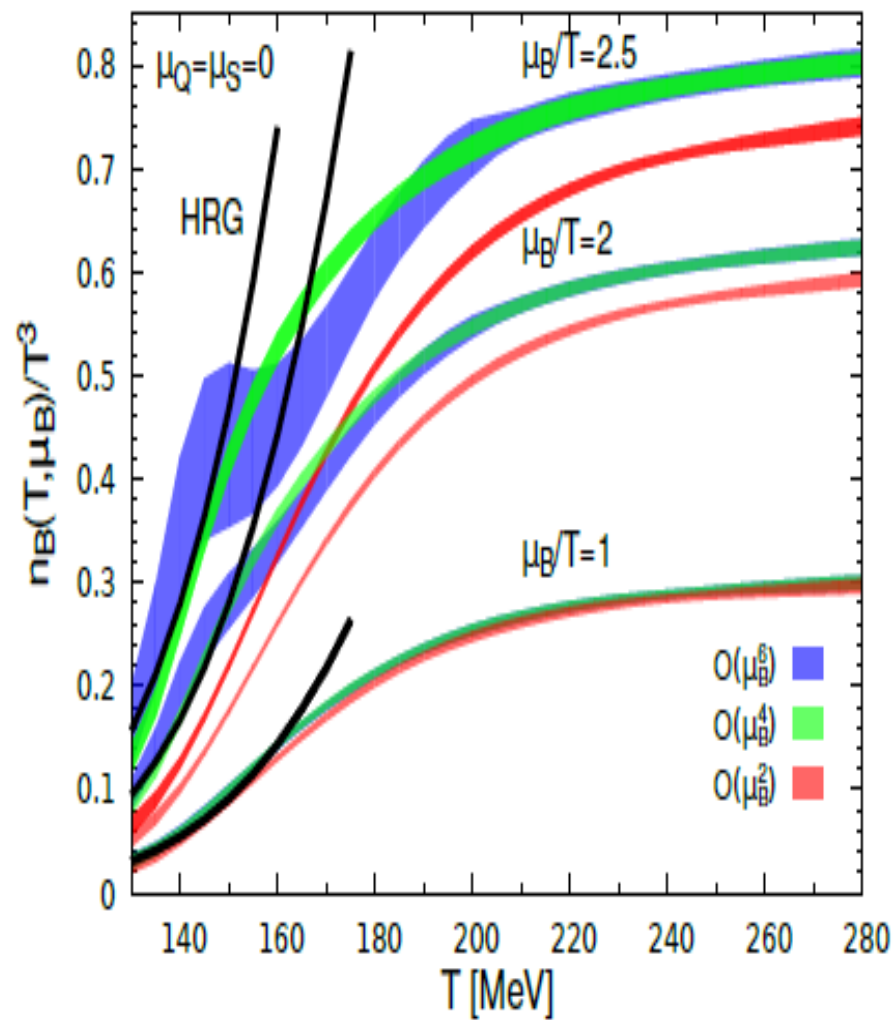
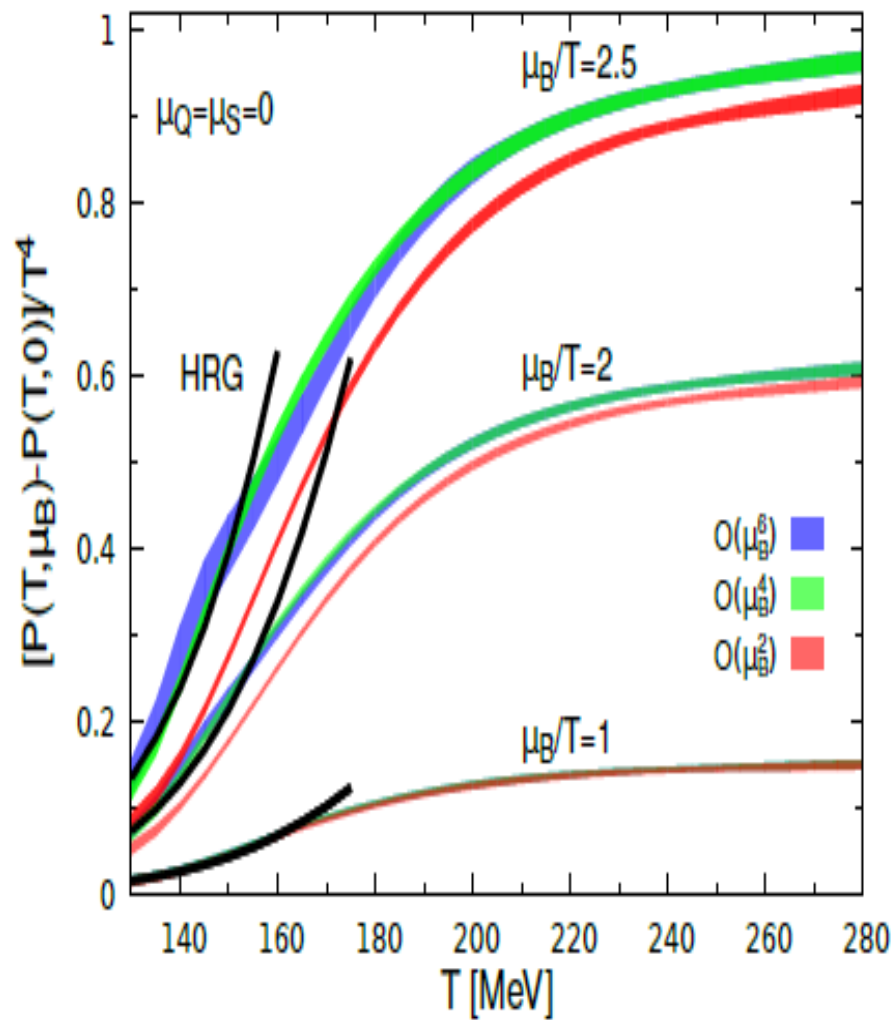
$$N_f = 2 + 1$$

$$\frac{m_s}{m_l} = 27 \quad (m_\pi = 140 \text{ MeV})$$

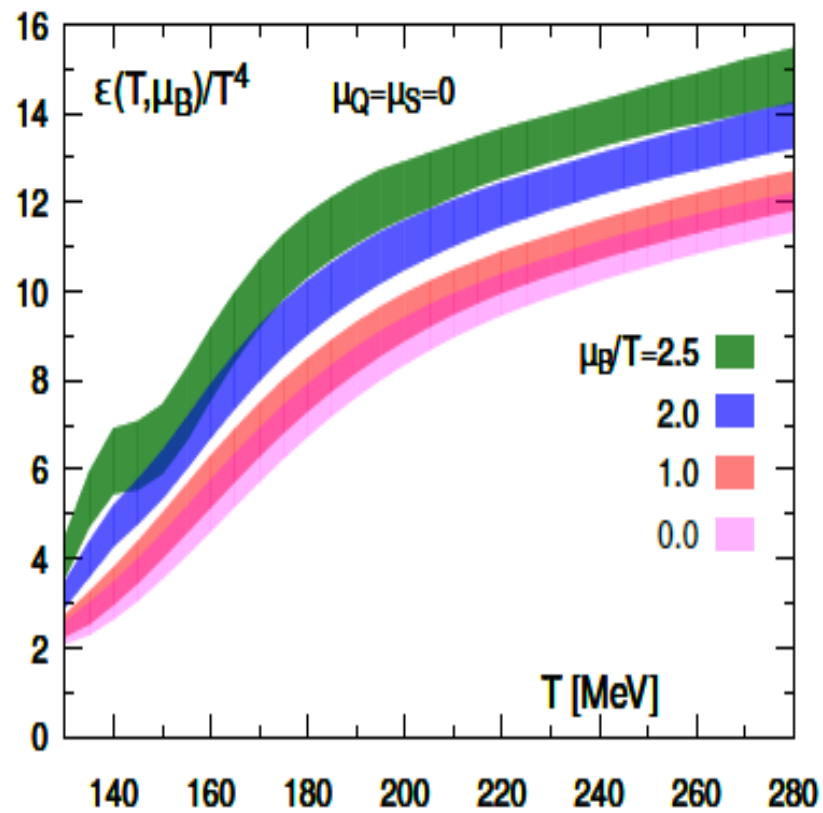
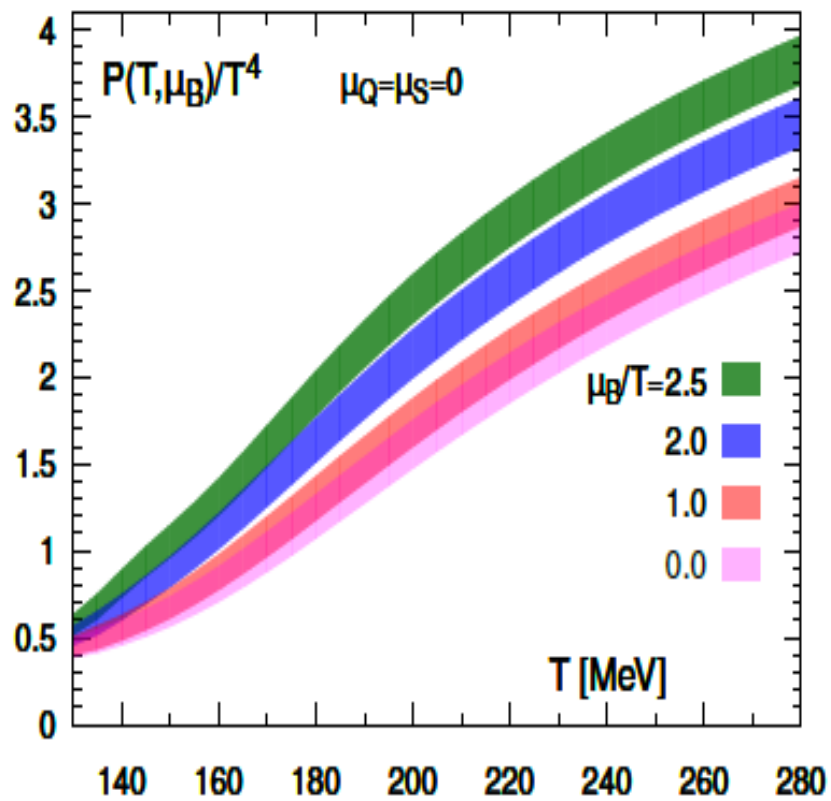
$$N_t = 8, 10, 12, 16$$

$$\frac{N_s}{N_t} = 4$$









Assuming that the current results obtained with expansion coefficients up to 6th order are indicative for the behavior of higher order expansion coefficients and taking into account the current errors on 6th order expansion coefficients we concluded that at temperatures  $T > 135$  MeV the presence of a **critical point** in the QCD phase diagram for  $\mu_B < 2T$  **is unlikely**.

## Imaginary $\mu_q$

At imaginary chemical potential  $\mu_q = i\mu_{qI}$  the sign problem is absent and standard Monte Carlo algorithms can be applied to simulate Lattice QCD. Can we use this?

Study of QCD at nonzero  $\mu_{qI}$  can provide us with information about physical range of  $\mu_q$

- extrapolation to  $\mu_q = 0$  or analytical continuation to nonzero real  $\mu_q$

The QCD partition function  $Z$  is a periodic function of  $\theta = \mu_{qI}/T$ :

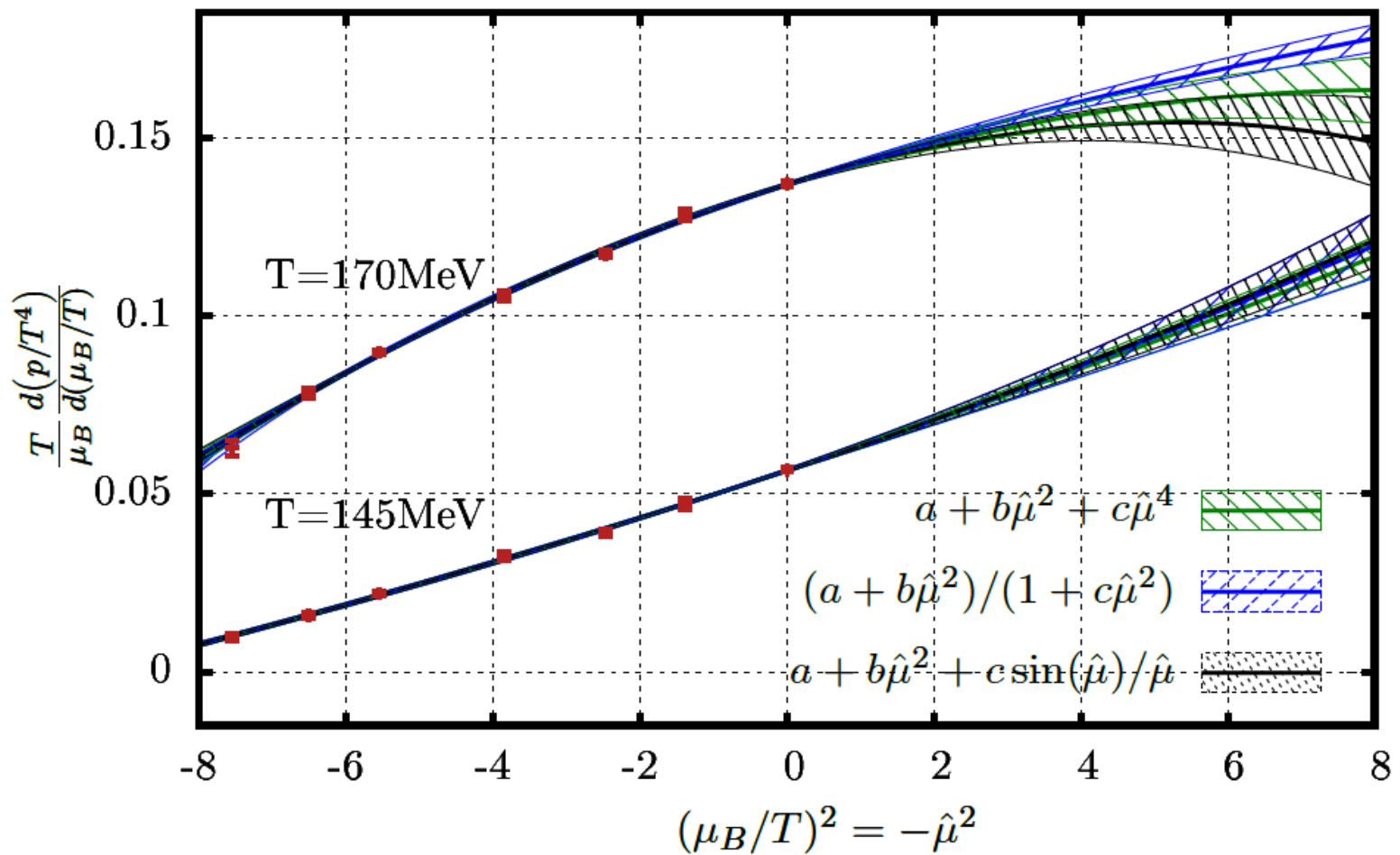
$$Z(\theta) = Z(\theta + 2\pi k/3)$$

There are 1st order phase transitions at  $\theta = (2k + 1)\frac{\pi}{3}$

This symmetry is called Roberge-Weiss symmetry

$N_f=2+1$ ,  $N_t=10,12,16$ ,  $N_s=40,48,64$   
 Fodor et al., 2016

Analytical continuation on  $N_t = 12$  raw data



$$T_c(\mu)$$

