

A kvantum-színdinamika kritikus
pontjának vizsgálata
rácsszimulációkkal

MSc Diplomamunka

Kapás Kornél

Fizikus MSc

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR



Témavezető

Dr. Katz Sándor
ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

Budapest, 2018

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	1
1.1. Részecskefizikai Standard Modell	1
1.2. Kvantum-szándinamika	1
1.3. Fázisdiagram és kritikus pont	1
1.4. Kutatási cél	3
2. Elméleti áttekintés	4
2.1. Kvantum-szándinamika alapjai	4
2.2. Pályaintegrálos formalizmus	5
2.3. Diszkrétizált kvantumtérelméletek	7
3. QCD Termodinamika rácson	9
3.1. Bevezetés	9
3.2. Hatás	9
3.2.1. Mértékelméletek	10
3.2.2. Fermionszektor	11
3.2.3. Állapotösszeg	12
3.3. Korrelációs függvények	13
3.4. Algoritmusok	14
3.4.1. Monte-Carlo szimuláció	14
3.4.2. Hibaszámítás	15
4. Véges kémiai potenciál	17
4.1. Kémiai potenciál rácson	17
4.2. Átsúlyozás és előjelprobléma	18
4.3. Lee-Yang zérusok módszere	19
4.3.1. Zérusok a komplex β síkon	19
4.3.2. Lee-Yang zérusok a μ^2 síkon	21
5. Eredmények	24
5.1. Zérus hőmérsékletű szimulációk	24
5.1.1. LCP meghatározás	24
5.1.2. Rácsállandó fizikai egységekben	26
5.2. Véges hőmérsékletű szimulációk	26
5.2.1. Nulla kémiai potenciál eredmények	26
5.2.2. Átsúlyozás véges kémiai potenciálra	29
5.2.3. Analízis gyorsítása GPU-val	32
5.3. Kritikus végpont helyének simítási paraméter függése	33
5.3.1. Derivált meghatározása átsúlyozásos módszerrel	33
5.3.2. Véges simításnál generált konfigurációk	34
5.4. Alsó korlát és kisebb értékek kizárása	37
5.5. Lee-Yang zérusok a μ^2 síkon	38
5.5.1. Gyökök elhelyezkedése komplex μ síkon	38
5.5.2. Fázisdiagramok eltérése	40
6. Összefoglalás és kitekintés	42

Kivonat

A részecskefizikai Standard Modell három alapvető kölcsönhatást tartalmaz, amelyek közül az egyik a kvarkok és gluonok fizikáját leíró erős kölcsönhatás. Az ezt leíró eddigi legpontosabb elmélet a kvantum-színdinamika (QCD). Az erős kölcsönhatásban, a többitől eltérő módon, kis energiákon nagy a csatolási állandó, így a már régóta bevált perturbációs módszerek nem alkalmazhatóak.

A ma ismert legszisztematikusabb, nem perturbatív módszer a rácstérelmélet. Az elméletben szereplő kvarkokat és gluonokat reprezentáló tereket a téridő rácspontjain, illetve az azokat összekötő linkeken értelmezzük, majd a rácsállandó szisztematikus csökkentésével és a kontinuum-extrapoláció segítségével kaphatunk kontinuum eredményeket.

A QCD másik lényeges tulajdonsága az aszimptotikus szabadság, melynek egyik következménye, hogy magas hőmérsékleten, illetve nagy barionsűrűségnél egy kölcsönhatásmentes kvarkokból és gluonokból álló gázt kapunk a hadronikus anyag helyett. Ezek alapján valamely T_c hőmérsékleten egy fázisátmenetet várunk e két lényegesen különböző fázis között.

Eddigi kutatások alapján alacsony barionsűrűségnél a fázisátmenet analitikus átmenet, míg magas barionsűrűség esetén elsőrendű átmenetet várunk. Így azt feltételezzük, hogy létezik egy kritikus végpont az átmeneti görbén.

Eddigi rácstérelméleti munkákban még nem sikerült kontinuum eredményt adni a kritikus pont helyére. Munkám során a QCD kritikus pontjának helyét vizsgáltam javított, simítási paramétert tartalmazó hatással, hogy jóslatot tudjak mondani a kritikus pont helyének viselkedésére a kontinuum határesetet közelítve.

Munkám két fő részből állt. Az első a korábbi eredmények reprodukciója volt az azóta kifejlesztett egzakt algoritmusok használatával. Ezek után megvizsgáltam, hogy az eredményeket hogyan befolyásolja, ha a hatásba beleteszünk egy, a linkeket simító, folytonosan változtatható paramétert. Ennek segítségével becslést lehet adni arra, hogy a kritikus pont hogyan viselkedik a kontinuum határesetet közelítve a nélkül, hogy finomabb rácson számolnánk. Munkám másik részében egy, az előzőtől eltérő módszer segítségével meghatároztam a fázisdiagramot, amit összehasonlítottam a korábbi eredményekkel.

1. Bevezetés

1.1. Részecskefizikai Standard Modell

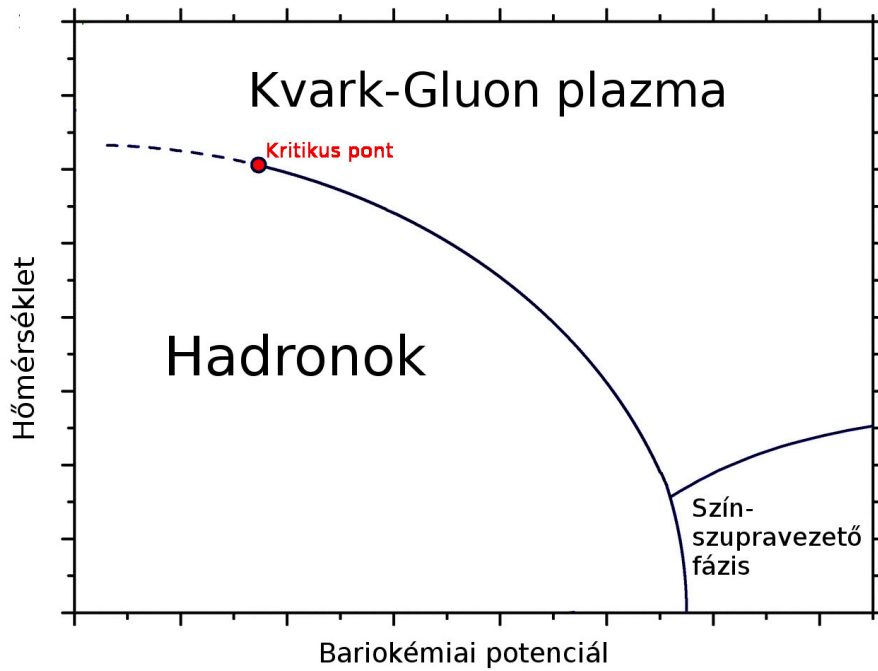
A világunkat felépítő, és eddig megfigyelt részecskék leírására szolgál a részecskefizikai Standard Modell. Ez a négy alapvető kölcsönhatásból hármát tartalmaz: az elektromágneses, a gyenge és az erős kölcsönhatást. A Standard Modellben szereplő részecskék a kvarkok, leptonok és a kölcsönhatásokat közvetítő bozonok, illetve a Higgs-bozon.

1.2. Kvantum-színdinamika

Az erős kölcsönhatás nem érzékeny a tömegre, töltésre, ízre, csak az úgynevezett színre. Maga az erős kölcsönhatást leíró elmélet, a kvantum-színdinamika (QCD - Quantum Chromodynamics) egy nem sérülő $SU(3)$ szimmetriára épülő elmélet. A három alapvető kölcsönhatásból ez némileg speciális, ugyanis a csatolási állandó alacsony energiákon, illetve nagy távolságon már túl nagy ahhoz, hogy perturbatív módon lehessen számolásokat végezni. Egészen 1974-ig csak nagy energiás perturbatív számolások léteztek az erős kölcsönhatásra. Az áttörést a QCD rácsformalizmusa hozta meg 1974-ben [1], ami által egy szisztematikus nem-perturbatív módszerre nyílt lehetőség. Ekkor a Lagrange-függvényben szereplő bozonikus és fermionikus teret a diszkrétizált téridő rácsponthoz és az azokat összekötő linkeken értelmezzük. Így már lehetségessé válik a kérdéses mennyiségek kiszámítása, majd a rácsállandó szisztematikus csökkentésével elvégezhető a kontinuum extrapoláció. Ez a módszer már régóta ismert, de csak a szuperszámítógépek színre léptével vált lehetségessé a tényleges kontinuum extrapoláció.

1.3. Fázisdiagram és kritikus pont

A QCD-nek egy fontos tulajdonsága az aszimptotikus szabadság. Ennek következménye, hogy nagy energián a csatolási állandó nullához tart, így kvázi szabad elméletet kapunk, ezért is voltak lehetségesek a perturbatív módszerek. Ennek a jelenségnek a következménye, hogy a csatolási állandó magas hőmérséklet felé tartva is csökken. Így várakozásaink szerint végtelen hőmérséklet határesetben egy köl-



1. ábra. Kvantum-színdinamika sematikus fázisdiagramja

csönhatásmentes kvarkokból és gluonokból álló gázt kapunk. Kísérleti tapasztalat, hogy valamilyen véges hőmérsékletnél van egy fázisátmenet a hadronikus fázis és egy még erősen kölcsönható kvark-gluon plazma között. Ehhez hasonlóan aszimptotikusan nagy sűrűségeknel is ezt várjuk. Ahogy azt látni fogjuk, a sűrűséget a rácstérelméletben a kémiai potenciállal szabályozzuk, így végtére a $T-\mu$ síkon egy nem-triviális fázisgörbét kapunk a két fázis között (1. ábra). Alacsony sűrűség tartományában az átmenet nem valódi fázisátmenet, hanem egy analitikus átmenet [2] [3], míg zérus hőmérsékleten nagy sűrűségeknel a modellszámolások azt mutatják, hogy a fázisátmenet elsőrendű [4]. Így feltételezhetjük, hogy létezik egy kritikus pont valahol a fázisgörbén, ami a kétfajta fázisátmenetet elválasztja, ezt hívjuk a kvantum-színdinamika kritikus végpontjának (CEP - critical end point). E pont létezésének bizonyítása és helyének meghatározása aktív kutatási terület. A RHIC 2010-ben indította BES (Beam Energy Scan) programját, amelynek fő feladata a kritikus pont keresése, így a rácson kapott elméleti eredmények szorosan kapcsolódnak a kísérleti munkákhoz.

1.4. Kutatási cél

Mindmáig nincs megbízható kontinuum eredmény a kritikus pont helyét illetően. Durvább rácsokra van jóslat, de finomabb rácsok felé haladva nem látták a kritikus pontot. Dolgozatom célja, hogy reprodukáljam az azóta kifejlesztett egzakt algoritmusokkal a korábbi eredményeket, továbbá, hogy egy, a fermion tereket simító paraméter függvényében megvizsgáljam a kritikus pont viselkedését. Ezzel a paraméterrel bizonyítottan közelíteni lehet a kontinuum határesetet, és folytonosan változtatható, így fény derülhet rá, hogy a kontinuum határesetet kicsit közelítve merre mozdul el a fázisdiagramon a kritikus pont. További céлом, hogy a korábbi munkáktól eltérő módszerrel is elvégezzem az analízist, és összehasonlítsam a két számolásból kapott eredményeket.

2. Elméleti áttekintés

Ebben a fejezetben áttekintem a munkámhoz szükséges elméleti alapjait a rácstérelméletnek. Elsősorban a kvantum-színdinamikának megismerése szükséges, majd tárgyalom a rácstérelmélethez nélkülözhetetlen pályaintegrálos formalizmusnak és a diszkretizált térelméleteknek részleteit is.

2.1. Kvantum-színdinamika alapjai

Az alábbiakban a kvantum-színdinamika alapjairól lesz szó, melyhez felhasználható az [5] irodalom. A kvantum-színdinamika a hadronokat felépítő kvarkok és gluonok kölcsönhatását leíró, nem sérülő SU(3) szimmetriára épülő elmélet. A kvarkok feles spinű fermionok, így őket ennek megfelelő Dirac-spinorokkal írjuk le, melyet ψ -vel jelölünk. A Dirac-mezőkhöz tartozó szabad Lagrange-függvény:

$$\mathcal{L}_0 = \bar{\psi}_i (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi_i \quad (1)$$

ahol i színindex. A QCD esetén a Lagrange-függvénynek invariánsnak kell lennie az SU(3) szimmetriatranszformációra nézve. Amennyiben ez egy lokális transzformáció, be kell vezetnünk a kovariáns deriválását a fermiontereknek, amely egy kompenzáló teret tartalmaz:

$$D_\mu = \partial_\mu + A_\mu = \partial_\mu - iT^a A_\mu^a \quad (2)$$

Itt A_μ -k 3x3-as mátrixok, amelyeket fel lehet írni az SU(3)-hoz tartozó 8 generátor lineáris kombinációjaként. Továbbá ezeknek a tereknek bele kell írni a Lagrange-függvénybe a kinetikus tagját, amit a QED-hez hasonlóan teszünk meg. Összességében a QCD Lagrange-függvénye:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a} + \bar{\psi}_i (i\gamma^\mu D_\mu^{ij} - m\delta^{ij}) \psi_j \quad (3)$$

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc} A_\mu^b A_\nu^c \quad (4)$$

ahol f -ek a struktúra állandók, g az elmélethez tartozó csatolási állandó. Tehát a teljes QCD-ben vannak fermionikus és bozonikus terek, amelyek közül a fermionok és a bozonok egymáshoz, míg a bozonok magukhoz is csatolódnak.

2.2. Pályaintegrációs formalizmus

Ebben a fejezetben áttekintem az alapvető fogalmakat, melyek a rácstérelméletek definiálásához szükségesek, illetve amelyeket használni fogunk a rác-QCD termodinamikai leírásánál is. Részletes áttekintéshez használhatóak a [6] és [7] referenciák. A modern kvantumtérelméletekben a kvantálást pályaintegrációs formalizmussal végezzük, amit még a kvantummechanika keretein belül vezetett be Feynman. Ebben egy részecske x -ből y -ban való propagálásának átmeneti amplitúdója az alábbi:

$$\langle y | e^{-iHt} | x \rangle = \int_{x \rightarrow y} \mathcal{D}x e^{iS} \quad (5)$$

ahol

$$\mathcal{D}x = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} dx_1 \dots dx_N \quad (6)$$

Ez reprezentálja a kvantummechanikai amplitúdót, mint egy integrál az összes lehetséges klasszikus pályára súlyozva egy exponenciális faktoral, ahol S a klasszikus hatás. Ezzel elimináltuk a kvantummechanikai operátorokat, cserébe kaptunk egy végtelen dimenziós integrált, amely viszont nagyon szemléletes. Ezzel közvetlenül nagyon nehéz számolni, viszont formálisan manipulálva az integrált, levezethető belőle könnyű és kompakt módon sok fontos eredmény.

A végső célhoz további fontos elem az euklideszi pályaintegrál. Ekkor bevezetünk egy új időkoordinátát az alábbi módon:

$$t = -i\tau$$

Ebben az új időkoordinátában fejlesztő $e^{-H\tau}$ operátor pozitív és korlátos. Hasonló

módon kapjuk ebből, hogy:

$$\langle y|e^{-H\tau}|x\rangle = \int_{x \rightarrow y} \mathcal{D}x e^{-S_E} \quad S_E = \int_0^\tau \left(\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right) d\tau' \quad (7)$$

Az euklideszi és az eredeti klasszikus hatás között az $iS_E = S$ kapcsolat áll fent. Itt $\mathcal{D}x$ természetesen már mást jelent, a komplex i hiánya miatt. Hogy szemléltessük az euklideszi formalizmus előnyét, megmutatjuk, hogy hogyan lehet többek között a sokszor releváns vákuum várható értéket megadni. Legyen E_n az n . $|n\rangle$ sajátállapothoz tartozó sajátenergiája a H -nak, amely az euklideszi időt fejleszti. Ekkor:

$$\text{Tr}(e^{-H\tau} A) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n\tau} \langle n|A|n\rangle \quad (8)$$

Továbbá az állapotösszeg:

$$Z(\tau) = \text{Tr}(e^{-H\tau}) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n\tau} \quad (9)$$

Nagy τ -ra az $n = 0$ tagok dominálják az összeget, és a vákuum várható értéke egy határesetként számítható ki:

$$\langle 0|A|0\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{Z(\tau)} \text{Tr}(e^{-H\tau} A) \quad (10)$$

Ezt fel lehet írni pályaintegrálos alakjában is:

$$\langle 0|A|0\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\int \mathcal{D}x A e^{-S_E[x]}}{Z(\tau)} \quad Z(\tau) = \int \mathcal{D}x e^{-S_E[x]} \quad (11)$$

ahol az integrál periodikus pályákra megy: $x(0) = x(\tau)$. A kvantumtérelméletekben hasonlóan fogunk eljárni. Ott is pályaintegrálos formalizmust használunk, és bevezetjük az euklideszi téridőt úgy, hogy az időkoordináta helyett bevezetünk egy új komplex koordinátát:

$$x^0 = -ix^4 \quad x^4 \in \mathbb{R} \quad (12)$$

Így a téridő metrikája az $x_1 \dots x_4$ koordinátákkal euklideszi metrika. Az euklideszi formalizmus a kezdőpont a rácstérelméletek definiálásában mindenféle mezőre nézve.

2.3. Diszkretizált kvantumtérelméletek

Kvantummechanikában a pályaintegrál bevezetésénél fontos lépés volt az idő diszkretizációja, aminek folytonos határeseteként kaptuk meg a pályaintegrálokat. Ezt a gondolatmenetet értelmezhetjük kvantumterekre is. A kvantumterek esetében a pályaintegrálokra ilyen módon úgy gondolunk, mint egy diszkretizált téridőn értelmezett, jól definiált integrálok folytonos határesetre. Ehhez bevezetünk a téridőn egy hiperkübös rácsot:

$$\Lambda = a\mathbb{Z}^4 = \{x | x_\mu/a \in \mathbb{Z}\} \quad (13)$$

ahol a a rácsállandó. Ennek a formalizmusnak óriási előnye, hogy például egy négy dimenziós euklideszi téridőn értelmezett skalármező ekvivalens azzal a problémával, amikor a rácsponthoz valóspinek vannak, tehát egy statisztikus fizikai rendszerrel. Éppen emiatt alkalmazhatóak a statisztikus fizikában használt módszerek. Bevezethető egy állapotösszeg, amelyből a fizikai mennyiségeket majd származtathatjuk. Természetesen az ebben szereplő tereket és magát a hatást is diszkretizálni kell. Ezek után az elvégezendő integrálok még mindig végtelen dimenziósak lesznek, éppen ezért a gyakorlatban véges térfogatú rácsokat használunk. A valóságban használt rácsméretek esetén ekkor még mindig akár milliárd nagyságrendű dimenziós integrálokat kell elvégezni, amely konfigurációs térnek szisztematikus feltérképezése lehetetlen. Ennek a kiküszöbölése végett Monte-Carlo szimulációkat használunk a kérdéses mennyiségek kiszámolásához (lásd. 3.4. fejezetet).

Korábban láttuk, hogy a kvantummechanikában az euklideszi téridőn a τ -ban végtelen határesetet nézve számolhatunk ki vákuum várható értékeket. Ennek térelméleti megfelelője az euklideszi idő irányú méret végtelen határesetre, ami így a zérus hőmérsékletű kvantumtereket írja le, míg a véges méret euklideszi idő irányban véges hőmérsékletű tereknek felel meg. Ekkor az állapotösszeg (ahol a β nem tévesztendő össze a későbbi fejezetekben használt csatolási paraméterrel)

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta H} \quad \beta = \frac{1}{T} \quad (14)$$

Ez összevetve (11) képlettel, a véges hőmérsékletű térelméletekben az állapotösszeg:

$$Z(\beta) = \int \mathcal{D}\Phi e^{-S_E} \quad \Phi(0, \mathbf{x}) = \Phi(\beta, \mathbf{x}) \quad (15)$$

$$S = \int_0^\beta d\tau \int d^3x \mathcal{L} \quad (16)$$

Tehát térelméletben az euklideszi idő irányú méret az inverz hőmérsékletnek felel meg. Bevezetve a téridő rácsot ez annyit jelent, hogy a térszerű rácspontok száma $N_s = \infty$ és az időszerű rácspontok száma $N_t = \frac{1}{T a}$. Gyakorlatban természetesen a térszerű rácspontok száma is véges. Ekkor a véges hőmérsékletű esetben $N_s > N_t$ -t használunk, és úgy végezzük el a kontinuum extrapolációt, hogy $a N_t$ -t fixen tartjuk, így maradunk véges hőmérsékleten. Zérus hőmérsékletű szimulációkban $N_s < N_t$ beállítást használunk.

3. QCD Termodinamika rácson

Az általánosabb bevezető után most rátérek a munkámban közvetlenül felhasznált elméleti alapokra, a kvantum-színdinamika termodinamikájának rácstérelméleti tárgyalására. Ebben a fejezetben áttekintem a QCD diszkretizálásának módját, és bemutatom a leggyakrabban használt hatásokat is. Ezt követően bemutatom a kutatás során használt algoritmusok szükségességét és elméleti alapjait, illetve a hibaszámítás módját.

3.1. Bevezetés

A kvantum-színdinamikában használt terek a bozonikus mértékterek (U) és a kvarkokat reprezentáló fermionterek (Ψ), amelyeket Grassmann-változókkal írunk le. Az utóbbiakat a rácspontokon értelmezzük, míg a mértéktereket a rácspontokat összekötő linkeken. A termodinamikai mennyiségeket a statisztikus fizikai analógia alapján a nagykanonikus állapotösszegekből származtatjuk:

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\bar{\Psi} e^{-S_E(U, \Psi, \bar{\Psi})} \quad (17)$$

Az integrálási mérték helyes értelmezéséhez a korábban látottak alapján téridő rácsot használunk. Így a mérték:

$$\mathcal{D}U \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}\bar{\Psi} = \prod_{x \in \Lambda, \mu=1 \dots 4} dU_{x;\mu} \prod_{x \in \Lambda} d\Psi_x \prod_{x \in \Lambda} d\bar{\Psi}_x \quad (18)$$

Ez szemléletesen azt jelenti, hogy az összes $U, \Psi, \bar{\Psi}$ konfigurációra integrálni kell. Ahogy azt korábban említettem, ez teljesen analóg egy négy dimenziós statisztikus fizikai rendszer állapotösszegével.

3.2. Hatás

A téridő rács bevezetésénél természetesen magát a hatást is diszkretizálni kell. A hatás általában felbontható

$$S = S_g + S_f \quad (19)$$

összegre, ahol S_g csak mértéktereket, míg S_f fermion- és mértéktereket is tartalmaz. Ezekre külön kitérek. Legegyszerűbb mód az, ha a Lagrange-függvényben szereplő deriváltakat differenciahányadossal közelítjük. A diszkretizációnak egy fontos tulajdonsága, hogy milyen a skálázása kontinuum határesethez közel. Ekkor a rácson kiszámolt mennyiségek természetesen nem a folytonos eredményt adják vissza, hanem attól eltérőt, amit az alábbi képlet ad meg:

$$\langle O \rangle_a = \langle O \rangle + \mathcal{O}(a^n) \quad (20)$$

Ahol az η paraméter mondja meg, mennyire skálázik jól. Belátható, hogy a legegyszerűbb módon diszkretizált hatáznál vannak jobb hatások is, ahol a skálázás jobb a kontinuum határesethez közelítve, és ugyanúgy visszkapjuk az eredeti hatást a kontinuum limeszben. A továbbiakban ezeket mutatom meg.

3.2.1. Mértékelméletek

A mértékterek esetén a legegyszerűbb választás az úgynevezett Wilson-hatás, melyben a mértékterekből összekombinált plakettek vannak. Egy plakett alakja az alábbi:

$$U_P(x; \mu\nu) = U_{x;\mu} U_{x+a\hat{\mu};\mu} U_{x+a\hat{\nu};\mu}^\dagger U_{x;\nu}^\dagger \quad (21)$$

ahol az U mérték terek a

$$U = e^{iA_\mu a} \quad (22)$$

kapcsolatban vannak a kontinuum A_μ bozonikus terekkel. Ezekből a plakettekől alkotott hatás:

$$S_{g,\text{Wilson}} = -\beta \left(\frac{1}{3} \sum_{x,\mu<\nu} \text{ReTr} U_P(x, \mu\nu) - 1 \right) \quad (23)$$

Belátható, hogy kontinuum limeszben ez visszaadja a szokásos Yang-Mills hatást. További mértékinvariáns tagok hozzáadásával ennek a skálázása javítható úgy, hogy továbbra is ugyanaz legyen a folytonos határeset:

$$S_{g,\text{Wilson}} = -\frac{\beta}{3} \left(c_0 \sum_{x,\mu<\nu} \text{ReTr} U_P(x, \mu\nu) + c_1 \sum_{x,\mu<\nu} \text{ReTr} U_{P(2X1)}(x, \mu\nu) \right) \quad (24)$$

ahol a $U_{P(2X1)}$, hasonló U_P plakethez, csak itt egy téglalap menti linkek rendezett szorzata.

3.2.2. Fermionszektor

A fermionszektorban a mértékszektorhoz hasonlóan naivan diszkretizált hatás az alábbi:

$$S_{\text{naiv}} = \sum_x \left(am\bar{\psi}\psi + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1\dots 4} \left(\bar{\psi}_x U_{x;\mu} \gamma_\mu \psi_{x+a\hat{\mu}} - \bar{\psi}_x U_{x-a\hat{\mu};\mu}^\dagger \gamma_\mu \psi_{x-a\hat{\mu}} \right) \right) \quad (25)$$

Ez azonban a fermionduplázódás problémájához vezet. Kiszámítva a szabad propagátort, azt találjuk, hogy a folytonos esettel ellentétben ez 16 azonos tömegű fermion írt le, és ez nem szűnik meg a kontinuum limeszt elvégezve sem! Ennek kiküszöbölésére több ismert megoldás létezik. Ezek közül egyik a Wilson-féle fermionhatás:

$$S_{\text{Wilson}} = \sum_x \left(\bar{\psi}\psi + \kappa \sum_{\mu=1\dots 4} \left(\bar{\psi}_x U_{x;\mu} (1 + \gamma_\mu) \psi_{x+a\hat{\mu}} + \bar{\psi}_x U_{x-a\hat{\mu};\mu}^\dagger (1 - \gamma_\mu) \psi_{x-a\hat{\mu}} \right) \right) \quad (26)$$

Itt a hatáshoz magasabb deriváltakat hozzáadva elérhető, hogy a nemkívánatos 15 kvark tömege $\frac{1}{a}$ -val arányosan megnő, így lecsatolódik, azonban belátható, hogy mivel nulla kvarktömeg határesetben is sérti a királis szimmetriát, a hatás a kontinuum határesetet közelítve csak lineárisan skálázik. Másik módszer a Kogut-Susskind-féle staggered hatás:

$$S_{\text{staggered}} = \sum_x \left(am\bar{\chi}\chi + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1\dots 4} \alpha_{x;\mu} \left(\bar{\chi}_x U_{x;\mu} \chi_{x+a\hat{\mu}} - \bar{\chi}_x U_{x-a\hat{\mu};\mu}^\dagger \chi_{x-a\hat{\mu}} \right) \right) \quad (27)$$

ahol

$$\alpha_{x;\mu} = (-1)^{x_1 + \dots + x_{\mu-1}} \quad (28)$$

Ennek a formalizmusnak az a lényege, hogy a hiperkocka csúcsaira szétosztjuk a fermiontér spinor komponenseit, majd egy diagonalizáció után csak egy komponenst hagyunk meg. Így a szabadsági fokok száma a negyedére csökken. Ennek a hatásnak előnye, hogy jól skálázik, továbbá a spinor komponensek hiánya könnyíti a szimulációs algoritmusok megírását is. Hátránya, hogy marad egy további 4-es degeneráció.

Ennek a 4 fermionnak azonos a tömege, azonban ez az $SU(4)$ ízszimmetria a rácson sérül, amely csak a kontinuumban áll helyre, ami miatt a 15 pszeudoskalár mezon tömeg is különbözni fog, ráadásul a második legkönnyebbnek a tömege 3-4-szer akkora, mint a legkönnyebbé. A fázisátmenet rendje erősen függ az ízek számától és a kvark tömegektől, így fontos, hogy ez az ízszimmetria-sértés a lehető legkisebb legyen. Irodalomban ismert megoldás a fermionszektorban használt mértéktereknek a simítása. Ekkor az eredeti U link helyett az alábbi használjuk:

$$V_{x;\mu} = P_{SU(3)} \left[U_{x;\mu} + \rho \sum_{\nu \neq \mu} U_{x;\nu} U_{x+a\hat{\nu};\mu} U_{x+a\hat{\mu};\nu}^\dagger \right] \quad (29)$$

ahol a P egy projekció az $SU(3)$ csoportra, ρ pedig a simítás folytonosan változtatható paramétere, melynek zérus értékénél visszkapjuk az eredeti staggered hatást. A V linkekkel használt fermionhatást használva bizonyítottan csökken az ízszimmetria-sértés. Mivel finomabb rácsonál is ez a helyzet, e hatás segítségével adott rácsméretben tudjuk közelíteni a kontinuum határesetet anélkül, hogy növelnénk a rácspontok számát. További probléma, hogy a projekció nem analitikus, amit az algoritmusok nehezen kezelnek, de létezik egy eljárás, amivel analitikussá tehető [8]. Ez nevezzük stout simításnak.

Munkám során javíthatlan mértékhatást használtam, illetve simított mértéktérek tartalmazó staggered fermionhatást.

3.2.3. Állapotösszeg

Észrevehetjük, hogy bármely hatás esetén a fermionszektorra igaz, hogy a fermionterekben egy kvadratikus kifejezés:

$$S_f = \sum_{x,y} \bar{\psi}_x M_{xy}(U) \psi_y \quad (30)$$

Éppen emiatt ezekre a Grassman-változókra egzaktul ki tudunk integrálni:

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_f} = \det M(U) \quad (31)$$

Így a teljes állapotösszeg az alábbi alakra hozható:

$$Z = \int \mathcal{D}U \det M(U) e^{-S_g} = Z = \int \mathcal{D}U e^{-(S_g(U) - \ln \det M(U))} \quad (32)$$

Több fermioníz esetén külön-külön kell integrálnunk rájuk, így több determináns jelenik meg az integrandusban. Azonos tömegek esetén így a determinánsnak valamilyen hatványa jelenne meg. Láttuk, hogy a staggered hatás alapból 4 azonos tömegű fermiont ír le, így feltehetjük, hogy a determinánsnak a negyedik gyökét vonva megkapjuk az egy ízt leíró esetet. Ennek a lokalitása kérdéses, de az eddigi vizsgálatok azt mutatják [9], hogy ez a trükk valóban alkalmazható. Így egy N_f ízt leíró elmélete:

$$Z = \int \mathcal{D}U (\det M(U))^{\frac{N_f}{4}} e^{-S_g} = Z = \int \mathcal{D}U e^{-(S_g(U) - \frac{N_f}{4} \ln \det M(U))} \quad (33)$$

3.3. Korrelációs függvények

Az állapotösszeg segítségével kiszámíthatjuk megfigyelhető mennyiségek operátorainak várható értékét az alábbi módon:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi O[U, \bar{\psi}, \psi] e^{-S_E(U)} \quad (34)$$

Zérus hőmérsékleten használt mennyiségek tipikusan a terek operátorainak valamilyen n -pont, de főleg kétpont függvényei. Például a pion operátoré $\hat{O} = \hat{\psi}_u \gamma_5 \hat{\psi}_d$. Ennek euklideszi időfejlődését a Hamilton-operátor adja:

$$\hat{O}(t) = e^{\tau \hat{H}} \hat{O}(0) e^{-\tau \hat{H}} \quad (35)$$

Így a kétpont függvény egy teljes rendszer beszúrásával:

$$\langle 0 | \hat{O}(\tau) \hat{O}(0) | 0 \rangle = \sum_n |\langle 0 | \hat{O} | n \rangle|^2 e^{-(E_n - E_0)\tau} \quad (36)$$

Ebből látható, hogy adott kvantumszám csatornán a kétpont függvény aszimptotikus exponenciális lecsengéséből megkaphatjuk a legalacsonyabb gerjesztés energiáját, tehát a tömegét.

3.4. Algoritmusok

3.4.1. Monte-Carlo szimuláció

Az állapotösszeg rácson kiszámítva egy végtelen dimenziós integrál. Gyakorlatban természetesen véges térfogatokat használunk, de akkor is a kiszámítandó integrálok akár 10^9 dimenziósak is lehetnek. Egy ekkora fázistér szisztematikus feltérképezése lehetetlen. A probléma megoldására használunk Monte-Carlo szimulációt. Kiintegrálva a fermiontereket egy tisztán mértéktérfüggő integrandust kapunk. Tegyük fel, hogy van egy végtelen elemszámú U_i konfigurációt tartalmazó halmazunk a Haar-mérték szerinti egyenletes eloszlással. Ekkor egy valamilyen megfigyelhető mennyiség várható értéke az alábbi módon számolható ki:

$$\langle O \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^N O(U_i) e^{-S_E(U_i)}}{\sum_{i=1}^N e^{-S_E(U_i)}} \quad (37)$$

Azonban még ez az eljárás is nagyon ineffektív, ugyanis a konfigurációk nagyon kis része ad lényeges járulékot az átlag kiszámításánál. Erre egy jó megoldás a fontossági mintavételezés. Eszerint a konfigurációkat egy $p \sim e^{-S_E}$ eloszlással generáljuk, így azokat a konfigurációkat fogjuk nagy valószínűséggel generálni, amelyek nagyobb járulékot adnak az integrálban. Ez esetben a várható érték:

$$\langle O \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(U_i) \quad (38)$$

Kvantum-szindinamika esetén a hatás természetesen tartalmazza a fermiontereket is, azonban Grassmann-változókra nem értelmezhető valószínűség-eloszlás, így azokra előtte kiintegrálunk. Így a valószínűség-eloszlás:

$$p(U) \sim \det M(U) e^{-S_g(U)} \quad (39)$$

Értelmes eloszlásfüggvényhez természetesen kritérium, hogy a determináns pozitív valós legyen. Belátható, hogy $\mu = 0$ esetén a Dirac-operátorban szereplő γ_5 hermiticitása miatt ez a nem triviális feltétel éppen teljesül. Minden ma ismert algoritmusban a konfigurációkat egymásból származtatjuk, így ezek egy Markov-láncot

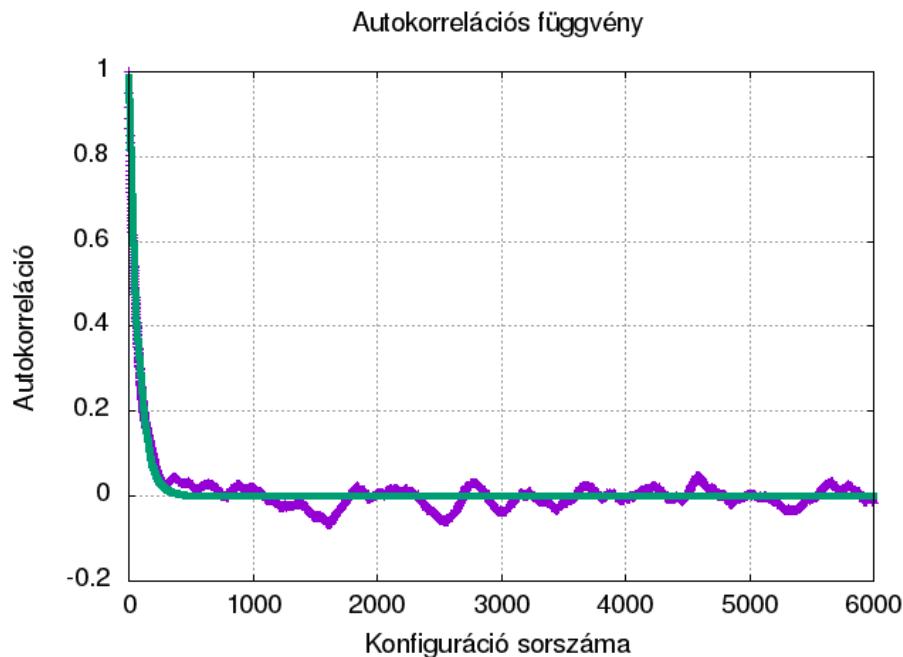
alkotnak. Az új konfigurációkat előállító legegyszerűbb algoritmus a Metropolis-algoritmus, amely két lépésből áll. Az első, hogy az aktuális U_i konfigurációt véletlenszerűen megváltoztatjuk, így kapunk egy U_{i+1} konfigurációt. Így az ehhez tartozó $p(U)$ is megváltozik. Az új konfigurációt

$$P(U_i \rightarrow U_{i+1}) = \min \left(1, \frac{\det M(U_{i+1})}{\det M(U_i)} e^{-(S_g(U_{i+1}) - S_g(U_i))} \right) \quad (40)$$

Amennyiben nem fogadjuk el az új konfigurációt, az előzőt tartjuk meg. Ez a módszer valóban működik, azonban több hátránya is van. Többek között minden lépésben ki kell egzaktul számítani a fermiondeterminánst, ami a rácspontok számának köbével arányos műveletet igényel. Továbbá, mivel a konfigurációkat egymásból származtatjuk, nem függetlenek egymástól, nagy az autokorreláció. Ezek javítására több hatékonyabb algoritmus is ismert, mint a Hibrid-Monte-Carlo [10][11], illetve a determináns törthatványát is kezelni tudó racionális Hibrid-Monte-Carlo [12]. A kritikus pont helyét illetően a korábbi munkákban az R algoritmust használták [13][14], mely nem egzakt, tartalmaz egy véges lépésközből származó szisztematikus hibát. Kutatásom egyik feladata reprodukálni az akkori eredményeket az azóta implementált RHMC algoritmussal.

3.4.2. Hibaszámítás

Az RHMC algoritmus már jóval hatékonyabb, mint a Metropolis vagy a korábban használt R algoritmus, azonban a konfigurációk még így sem függetlenek. Ennek érdekében ki lehet számolni az autokorrelációját egy konkrét mennyiségnek, amit egy konfiguráción számolunk ki. Legegyszerűbb esetben ez lehet a plakett átlag. Egy exponenciális lecsengés után az autokorrelációs függvény még zajos marad. Ez a zaj a statisztika növelésével csökkenthető le. Továbbá exponenciális illesztésből kapható karakterisztikus "idő" megmondja, hogy nagyjából milyen gyakran mentsünk konfigurációkat, hogy azok már nagyjából egymástól függetlenek legyenek. Esetünkben ez nagyjából 50 volt, mint az a 2. ábrán is látható.



2. ábra. Egymásból generált konfigurációk autokorrelációja az elejére illesztett exponenciális függvénnyel. A karakterisztikus "idő" $t = 70$ -nek adódott $N_s = 6$ esetén. Más térfogatoknál ez az érték eltérő lehet.

Természetesen, amíg nem végtelen nagyságú statisztikával dolgozunk, mindig adódik valamekkora hiba, amelyet jackknife hibaszámítással becslünk. Ennek lényege, hogy az eredeti konfigurációhalmazból kivesszük az első k darabot, majd ezen számítjuk ki a kérdéses mennyiségünket. Majd ezt követően a második k darabot vesszük ki és így tovább. Így a kérdéses mennyiség:

$$\bar{O} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \bar{O}_i \quad (41)$$

Szórása pedig:

$$\sigma_O^2 = \frac{n-1}{n} \sum_{i=1}^n (\bar{O}_i - \bar{O})^2 \quad (42)$$

ahol \bar{O}_i az i . mintán kiszámolt érték, n pedig a minták száma, ami $\frac{N}{k}$, ahol N az összes minta száma.

4. Véges kémiai potenciál

Az alábbi fejezetben rátérek a véges kémiai potenciál vizsgálatának módjára és módszereire. Először bevezetem a kémiai potenciált a fermionszektorban, majd rátérek a legtipikusabb hibaforrásokra, amelyek a véges kémiai potenciál használatánál fellépnek, továbbá a munkám során használt átsúlyozásos módszerre, és az átmeneti β_c megkeresésének módjára. Az utolsó fejezetekben bemutatom, hogy miként lehet a komplex μ^2 síkon végzett analízist elvégezni, és ehhez milyen speciális algoritmusok szükségesek.

4.1. Kémiai potenciál rácson

A vizsgálatok véges kémiai potenciál mellett lényegesen nehezebbek, mint zérus értéknél. Ennek oka többek között a következő részben tárgyalt előjelprobléma, amely miatt közvetlenül nem tudunk konfigurációkat generálni. Nagykanonikus sokaság esetén egy μN taggal vezetjük be a kémiai potenciált az állapotösszegben, továbbá euklideszi téridőn vett $\bar{\psi}\gamma_4\psi$ kifejezés arányos a részecskeszám-sűrűséggel. Ezért ésszerű választás lenne, ha egy $\mu\sum_x\bar{\psi}_x\gamma_4\psi_x$ tagot adnánk hozzá a hatáshoz, de belátható, hogy ez kvadratikusan divergenciához vezet. Viszont látható, hogy a hatáshoz hozzáadandó tag éppen egy tisztán képzetes vektorpotenciál euklideszi időirányú komponensével való kölcsönhatásnak felel meg, így mivel a mértéktereket linkekhez rendeltük, a kémiai potenciált is érdemes a linkekhez rendelni [15]. Így a véges kémiai potenciálnál vett staggered fermionhatás:

$$S_{f,\text{staggered}}(\mu) = \sum_x \left[am\bar{\chi}\chi + \frac{1}{2} \sum_{\nu=1\dots3} \alpha_{x;\nu} \left(\bar{\chi}_x U_{x;\nu} \chi_{x+a\hat{\nu}} - \bar{\chi}_x U_{x-a\hat{\nu};\nu}^\dagger \chi_{x-a\hat{\nu}} \right) + \alpha_{x;4} \left(\bar{\chi}_x U_{x;4} e^{a\mu} \chi_{x+a\hat{4}} - \bar{\chi}_x U_{x-a\hat{4};4}^\dagger e^{-a\mu} \chi_{x-a\hat{4}} \right) \right] \quad (43)$$

Különböző kvarkízek esetén más-más kémiai potenciált lehet bevezetni, de a további vizsgálatok során az u és d ízekhez azonos potenciált használtam, az s kvarkhoz pedig nullát.

4.2. Átsúlyozás és előjelprobléma

A 3.4 fejezetben láttuk, hogy a konfigurációk fontossági mintavételezéséhez szükséges, hogy a $\det(M)$ determináns pozitív valós legyen, hogy tudjunk valószínűségértelmezést adni. Véges kémiai potenciál esetén ez azonban nem teljesül, a determináns egy általános komplex szám lehet. Mivel az állapotösszegnek és a mennyiségek várható értékének valósnak kell lenniük, ezért vehetjük az integrandus valós részét, viszont ennek előjelének pozitívitasát semmi nem garantálja. Ha még sikerülne is valamilyen pozitív eloszlásfüggvényt értelmezni, akkor is az átlagolás során nagyon nagy kiejtések lennének, ami numerikusan nagyon instabil. Ezt hívjuk előjelproblémának. A probléma áthidalására az átsúlyozásos módszert alkalmazzuk. Ez esetben is fontossági mintavételezést alkalmazunk egy megfelelő pozitív eloszlásfüggvénnyel, a véges kémiai potenciálnál mért determinánst pedig megfigyelhető mennyiségként vesszük figyelembe. Ugyanígy lehetséges ez más szimulációs paraméterekre is, mint a simítási paraméter, β vagy m_{ud} . Ezt hívjuk többparaméteres átsúlyozásnak [16]. Így az állapotösszeg:

$$Z = \int \mathcal{D}U \det M(p, \mu, U) e^{-S_g(\beta, U)} = \int \mathcal{D}U \det M(p_0, \mu_0, U) e^{-S_g(\beta_0, U)}. \quad (44)$$

$$\left(\frac{\det M(p, \mu, U)}{\det M(p_0, \mu_0, U)} e^{-S_g(\beta, U) + S_g(\beta_0, U)} \right)$$

ahol p magába foglalhat több szimulációs paramétert is úgy, hogy a 0 indexes paraméterek mellett alkalmazható legyen a fontossági mintavételezés. A nagy zárójelbe írt mennyiségre tekinthetünk úgy tehát, mint egy megfigyelhető mennyiségre, vagy mint a 0 indexű paramétereknél generált konfigurációk súlyai az index nélküli paramétereknek megfelelő állapotösszegen. Ha ezt a súlyt w -vel eljelöljük

$$w(U) = \frac{\det M(p, \mu, U)}{\det M(p_0, \mu_0, U)} e^{-S_g(\beta, U) + S_g(\beta_0, U)} \quad (45)$$

akkor látható, hogy $Z_0 = Z(\beta_0, p_0, \mu_0)$ jelöléssel:

$$\frac{Z}{Z_0} = \frac{\int \mathcal{D}U w(U) \det M(p_0, \mu_0, U) e^{-S_g(\beta_0, U)}}{\int \mathcal{D}U \det M(p_0, \mu_0, U) e^{-S_g(\beta_0, U)}} = \langle w \rangle_{\beta_0, p_0, \mu_0} \quad (46)$$

Ezeket felhasználva egy $O(\beta, p, \mu)$ megfigyelhető mennyiségre:

$$\langle O \rangle_{\beta, p, \mu} = \frac{Z_0 \int \mathcal{D}U w(U) O(\beta, p, \mu, U) \det M(p_0, \mu_0, U) e^{-S_g(\beta_0, U)}}{Z} \quad (47)$$

$$\langle O \rangle_{\beta, p, \mu} = \frac{\langle w \cdot O(\beta, p, \mu) \rangle_{\beta_0, p_0, \mu_0}}{\langle w \rangle_{\beta_0, p_0, \mu_0}} \quad (48)$$

Tehát egy megfigyelhető mennyiség kiszámításához a zérus indexű paraméterekkel generált konfigurációkon a w súlyokkal súlyozva kell átlagolni. Ez a módszer a Ferrenberg-Swendsen-féle átsúlyozás általánosítása [17]. Minden képlet egzakt, azonban a módszer alkalmazhatósága függ attól, hogy a súlyok mennyire fluktuálnak, illetve a korábban említett előjelprobléma is gondot jelent. Kis kémiai potenciál értékeknél és térfogatnál még nincs nagy gond, de egyre nagyobbak felé haladva a probléma súlyosbodhat, ugyanis a (48) kifejezés $0/0$ alakú lesz a nagy kiejtések miatt, ami numerikusan kezelhetetlen. Várakozás szerint a 3.4.2 fejezetben tárgyalt jackknife hibaszámításból adódó hibák ezt mutatni fogják. Látni fogjuk, hogy éppen a kritikus pont közelében már nagyon nagyok a hibák $N_t = 4$ esetben is, és így nehezen megtalálható, de mivel a kritikus pontról keveset tudunk, ezért a durva rácson kapott eredmények is adnak új információt.

4.3. Lee-Yang zérusok módszere

4.3.1. Zérusok a komplex β síkon

A kritikus pont kereséséhez szükséges, hogy legyen egy megbízható módszer az átmeneti pont megkeresésére, majd a kritikus pont helyének megtalálására. Erre kifejlesztett módszer a Lee-Yang zérusok módszere, amely alkalmas az átmenet helyének és rendjének meghatározására is [18] [19]. A módszer akkor hatékony, ha gyors analitikus vagy valódi átmenet van. Amennyiben a rendszerünkben elsőrendű fázisátmenet valósul meg, és éppen az átmenet környékén vagyunk, akkor két fázist tartalmazó állapotösszeg az f szabadenergia-sűrűséggel az alábbi módon írható fel:

$$Z = e^{-\frac{V}{T} f_A} + e^{-\frac{V}{T} f_B} \quad (49)$$

Ez az alak nagy térfogat esetén alkalmazható. Az átmeneti pontban a szabadenergia-sűrűségek és a hőmérsékletek megegyeznek. Legyen az átmeneti hőmérséklet T_c , amihez tartozik egy β_c csatolás. A csatolási paraméter segítségével elhanyagolhatjuk a rendszert az átmeneti pontból, így kis változásra:

$$T = T_c + c_1 \Delta\beta + \mathcal{O}(\Delta\beta^2) \quad (50)$$

$$f_B = f_A + c_2 \Delta\beta + \mathcal{O}(\Delta\beta^2) \quad (51)$$

Ezeket visszaírva az állapotösszegbe:

$$Z = e^{-\frac{V}{T_c} f_A} (e^{aV\Delta\beta} + e^{bV\Delta\beta}) \quad (52)$$

$$a = \frac{f_A c_1}{T_c^2} \quad b = a - \frac{c_2}{T_c} \quad (53)$$

Még tovább alakítva az állapotösszeget:

$$Z = 2e^{-\frac{V}{T_c} f_A + \frac{a+b}{2} V \Delta\beta} \cosh\left(\frac{a-b}{2} V \Delta\beta\right) \quad (54)$$

Nagy térfogatok esetén ez a $Z(\beta)$ függvény zérushelyekkel rendelkezik a komplex síkon:

$$\text{Im}\Delta\beta = \frac{2}{(a-b)V} \left(k + \frac{1}{2}\right) \pi \quad k \in \mathbb{Z} \quad \text{Re}\Delta\beta = 0 \quad (55)$$

Ezek a Lee-Yang zérusok. Elsőrendű átmenet esetén a képzetes része a zérushelynek $1/V$ - vel skálázik, azonban analitikus átmenetnél a végtelen térfogat határesetben is véges marad. Így megkeresve Z zérushelyeit, azok valós része az átmeneti β_c definíciójaként használható, míg a képzetes rész végtelen térfogati extrapolációja információt ad az átmenet rendjéről. Ezen zérusok meghatározását átsúlyozással végezzük, tehát β_0 -nál szimulált érték közelében meg kell határozni a Z/Z_0 -t, amihez csak a korábban tárgyalt súlyokat kell összeadnunk. Zérus kémiai potenciál esetén:

$$w(U) = e^{-S_g(\beta) + S_g(\beta_0)} = e^{(\beta - \beta_0)P} \quad (56)$$

Különböző U_i konfigurációkon megmérve a P_i plakettátlagokat a megoldandó egyenlet:

$$\sum_i e^{(\beta-\beta_0)P_i} = 0 \quad (57)$$

Véges kémiai potenciál esetén, N_f kvarkízt használva:

$$\sum_i \left(\frac{\det M(\mu)}{\det M(\mu=0)} \right)_i^{\frac{N_f}{4}} e^{(\beta-\beta_0)P_i} = 0 \quad (58)$$

Az egyenlet megoldásához meg kell mérni a determinánst zérus és véges kémiai potenciálnál is, majd $\Delta\beta$ szerint sorba fejtjük, és ennek a közelítő polinomnak keressük a zérushelyeit. Ezzel a módszerrel a valós rész a mindenkori fázisátmenet helyét mondja meg, míg a képzetes rész végtelen térfogati extrapolációjából megmondhatjuk az átmenet rendjét, ugyanis a képzetes rész elsőrendű átmenet esetén zérus a végtelen térfogati határesetben. A kritikus pontot oda várjuk, ahol a képzetes rész zérussá válik:

$$\text{Im}\Delta\beta(\mu, V) = \text{Im}\Delta\beta_\infty(\mu) + c\frac{1}{V} \quad \text{Im}\Delta\beta_\infty(\mu_{CEP}) = 0 \quad (59)$$

4.3.2. Lee-Yang zérusok a μ^2 síkon

Az állapotösszeg zérushelyeinek keresésénél eljárhatunk másként is. Az előző fejezetben leírt módszer működik akkor is, ha rögzített β -nál a komplex μ^2 síkon keressük meg a zérushelyeket. Ez azért lehet hasznos, mert ilyen esetben az előjel-probléma kevésbé súlyos. Továbbra is az (58) egyenletet kell megoldani, de ezúttal rögzített β paraméter mellett keressük a gyököket. Ehhez felhasználjuk, hogy a fermiondetermináns analitikus alakja ismert [13]:

$$\det M(a\mu) = e^{-3N_s^3 N_t a\mu} \prod_{i=1}^{6N_s^3} (e^{N_t a\mu} - \lambda_i) \quad (60)$$

Ahol λ_i -k egy redukált fermionmátrix sajátértékei. Ennek a determinánsnak még venni kell a gyökét, ha két fermionízt szeretnénk leírni. Létezik egy módszer, amellyel a gyökvonást elvégezhetjük úgy, hogy végül $e^{N_t a\mu}$ -ben továbbra is polinomot kapunk. A módszer azon alapszik, hogy a fermionduplázódás során a kontinuum limesz kö-

zelében a sajátértékek négyesével csoportosulnak. A gyökvonást tehát úgy kell elvégezni, hogy ezen csoportokból kettőt elhagyunk. Praktikusan ez úgy történik, hogy az összes lehetséges párosítás közül keressük azt, ahol a párok távolságának összege minimális. Egyre nagyobb térfogatok esetén ez egyre egyértelműbb. Ez a probléma ismert [21], létezik rá már egy megírt kód. Ezután a megoldandó egyenlet az alábbi lesz:

$$\sum_i \left(e^{-\frac{3}{2}N_s^3 N_t a \mu} \prod_{j=1}^{3N_s^3} \frac{e^{N_t a \mu} - \lambda_j}{1 - \lambda_j} \right)_i e^{(\beta - \beta_0) P_i} = 0 \quad (61)$$

$$\sum_i \left(\prod_{j=1}^{3N_s^3} \frac{e^{N_t a \mu} - \lambda_j}{1 - \lambda_j} \right)_i e^{(\beta - \beta_0) P_i} = 0 \quad (62)$$

Így az állapotösszeg az $e^{N_t a \mu}$ változóban egy polinom lesz minden konfigurációra. Feladat, hogy ismerve minden egyes polinom zérushelyeit, meghatározzuk azok együttthatóit. Így az összegzést úgy kell elvégezni, hogy minden rendre összeadjuk az együttthatókat, amik meghatározása a gyököket ismerve szintén egy ismert probléma. Ez a módszer annyiban is praktikus, hogy a felösszegzett polinomnak tudjuk, hogy rendelkeznie kell adott tulajdonságokkal. Az elmélet $Z(3)$ szimmetriája miatt az állapotösszeg invariáns a $\frac{\mu}{T} \rightarrow \frac{\mu}{T} + i\frac{2\pi}{3}$ transzformációra, így igaznak kell lennie az alábbiak:

$$\sum_j c_j (e^{N_t a \mu})^j = \sum_j c_j \left(e^{N_t a \mu + i\frac{2\pi}{3}} \right)^j \quad (63)$$

ahol c_j -k a már felösszegzett együttthatók. Ekkor:

$$\sum_j c_j (e^{N_t a \mu})^j \left(1 - e^{i\frac{2\pi j}{3}} \right) = 0 \quad (64)$$

Ennek minden μ -re teljesülnie kell, ami csak úgy lehetséges, ha minden harmadik együttthatón kívül a többi zérus. Továbbá a felösszegzés után az együttthatóknak valós számnak kell lenniük, mivel az állapotösszeg valós. Ezeket felhasználva az $(e^{3N_t a \mu})$ változóban egy N_s^3 rendű valós együttthatós polinomnak kell megkeresni a gyökeit. Ezekből köbgyököt vonva megkaphatjuk az összes zérushelyet, amiből fizikailag releváns az origóhoz legközelebbi lesz. Erre a problémára egy nagyon effektív módszer az Aberth-módszer, amely a Newton-módszernek egy módosított változata. Ennek segítségével egyszerre lehet megkeresni az összes gyököt. A módszer lény-

ge, hogy meg kell adni kezdeti z_k gyököket ($k = 1, \dots, N_s^3$), amelyeket az alábbi mennyiséggel kell léptetni minden iterációban:

$$w_k = -\frac{\frac{p(z_k)}{p'(z_k)}}{1 - \frac{p(z_k)}{p'(z_k)} \sum_{j \neq k} \frac{1}{z_k - z_j}} \quad z_k = z_k + w_k \quad (65)$$

ahol p maga a polinom. Ez annyiban különbözik a Newton-módszertől, hogy van benne ahhoz képest egy új tag, melyben az összegzés az összes gyökre megy. Ez annak felel meg, mintha az aktuális közelítései a gyököknek taszítanák egymást. Ezzel egyszerre kaphatjuk meg a polinom összes gyökét. A módszer a munkámban is alkalmazható, viszont a korrekciós tagban megjelenő különbség miatt a gyököket nagyon nagy precizitással kell tárolni. Erre használtam az elérhető *mpc*, *mpfr* és *gmp* multiprecíziós könyvtárakat, melyekkel tetszőleges biten lehet tárolni a változókat. A *double* változó 64 bites precíziójához képest a kódban a változókat (főleg nagyobb térfogatok esetén) 1024 biten tároltam. A kódot egy konfiguráción teszteltem, hiszen ott ismertek a gyökök. Eredményül teljes pontossággal és megbízhatósággal visszakaptam a gyököket. A módszer hatékonyságát erősen befolyásolja továbbá a kezdető gyökök megfelelő elhelyezése. Megfelelő közelítés, ha vesszük az egymás utáni együtthatók hányadosát, és az origótól ilyen távolságra rakjuk le az adott gyököket fázisban egyenletes eloszlással.

5. Eredmények

Munkám fontos részei a zérus hőmérsékletű szimulációk, amelyek a paraméterek és a skála beállításához szükségesek. Eredményeim tárgyalását ezzel kezdem, majd áttérek a véges hőmérsékleten végzett szimulációk kiértékelésére és a kritikus pont keresésének eredményére.

5.1. Zérus hőmérsékletű szimulációk

5.1.1. LCP meghatározás

A megfelelő szimulációs paraméterek beállításához meg kell határoznunk a konstans fizika vonalát a paramétertérben. Esetemben az m_{ud} , β és ρ közötti helyes összefüggésre volt szükség. Ehhez zérus hőmérsékleten generáltam rácsokat $N_s = 10$ és $N_t = 16$ rácsmérettel. Ezeken meghatároztam különböző paraméterek esetén a pion és rho mezon tömegét rácsegységekben, amelyekből meghatároztam a konstans fizika vonalát. A tömegek meghatározásához a generált konfigurációkon meg kell mérni a megfelelő korrelációs függvényeket. A 3.3 fejezetben tárgyaltak alapján ennek aszimptotikus exponenciális lecsengéséből ki lehet számolni a tömeget. Mivel rácson vagyunk, ezért valójában a periodikus határfeltételhez illeszkedő koszinusz-hiperbolikus függvényt fogunk kapni:

$$\langle 0 | \hat{O}(\tau) \hat{O}(0) | 0 \rangle \sim \cosh(-m\tau) \quad (66)$$

Ezt a függvényt kell illeszteni a mért adatpontokra, minden konfigurációra. Hibát a szokásos jackknife hibaszámítással számoltam. A kiszámolt eredményeket foglalja magában az alábbi két táblázat.

		$\rho=0.00$		$\rho=0.05$	
β	m_{ud}	am_π	am_ρ	am_π	am_ρ
5.09	0.02	0.355(5)	1.3(5)	0.368(0)	1.2(4)
5.09	0.06	0.604(7)	1.3(9)	0.620(9)	1.2(9)
5.19	0.02	0.368(1)	1.2(7)	0.383(0)	1.0(9)
5.19	0.06	0.617(8)	1.3(2)	0.635(9)	1.2(3)

Hogy a fizikai piontömeghez tartozó paramétereket kapjunk, fel kell használni a királis perturbáció számítás eredményét a pion és rho mezon tömegének kvarkoktól való függésére vonatkozóan:

$$m_\pi \sim \sqrt{m_{ud}} \quad (67)$$

$$m_\rho = a + b \cdot m_{ud} \quad (68)$$

Így az arányra:

$$\frac{am_\pi}{am_\rho} = \frac{m_\pi}{m_\rho} = c_1 \frac{\sqrt{m_{ud}}}{1 + c_2 m_{ud}} \quad (69)$$

A rácsegységekben mért tömegek arányait és a használt kvarktömeget beírva a (69) képletbe meghatározhatjuk a konstansokat rögzített β -ra. A véges hőmérsékletű szimulációknál végig rögzített $m_{ud} = 0.0092$ kvarktömeget használtam, így ezek után meghatároztam, hogy hogyan függ a pion tömege a szimulációk során változó β és ρ paraméterektől, és mennyiben tér el a fizikai piontömegetől. A pion tömegfüggésére az alábbi összefüggés adódott:

$$m_\pi(\beta, \rho) = 140 - 150(\beta - 5.09) - 380\rho \quad (70)$$

$$\frac{m_\pi}{140 \text{ MeV}} = 1 - 0.9(\beta - 5.09) - 2\rho \quad (71)$$

Az eredményeknél látni fogjuk, hogy a legnagyobb simítás, ahol még megtaláltam a kritikus pontot, és a legkisebb β esetén a maximális eltérés a fizikai pion tömegetől 8-10 % körüli. Az alábbi táblázat magába foglalja a különböző simításoknál és β értékeknél a fizikai pion tömegetől való eltérést.

Simítás	$\mu = 0$		$\mu = \mu_{\text{CEP}}$	
	β	$m_\pi/m_{\pi_{\text{Fizikai}}}$	β	$m_\pi/m_{\pi_{\text{Fizikai}}}$
0.00	5.188	91 %	5.167	93 %
0.03	5.135	89 %	5.113	91 %
0.06	5.094	87 %	-	-
0.09	5.066	84 %	-	-

Továbbá a kritikus pont környékén a két simítás közti eltérés a piontömegben 1-2 %.

5.1.2. Rácsállandó fizikai egységekben

A skála meghatározásához ugyanazokat a szimulációkat használtam fel, mint a piontömeg meghatározásánál, és a módszer hasonló. Itt a rácsegyységekben meghatározott piontömeget számoltam ki a szimulációs paraméterek függvényében, így különböző β -kra és ρ -kra ismerve a pion tömegének fizikai értékét meghatároztam a rácsállandót:

$$am_\pi = am_\rho c_1 \frac{\sqrt{m_{ud}}}{1 + c_2 m_{ud}} \quad a(\beta, \rho) = \frac{am_\pi}{140 \text{ MeV}} \quad (72)$$

Itt a konstansok meghatározásánál az m_{ud} helyére rendre a 0.02 és 0.06 értékeket írtam, majd a konstansokat ismerve megnéztem, hogy a rácsegyységekben mért piontömeg hogyan függ a szimulációs paraméterektől, amennyiben az $m_{ud} = 0.0092$ értéket írom vissza. Ezeket felhasználva a rácsállandó paraméter függésére az alábbiakat kaptam:

$$a(\beta, \rho) = (6.97 - 1.03\beta - 2.92\rho) \frac{1}{\text{GeV}} \quad (73)$$

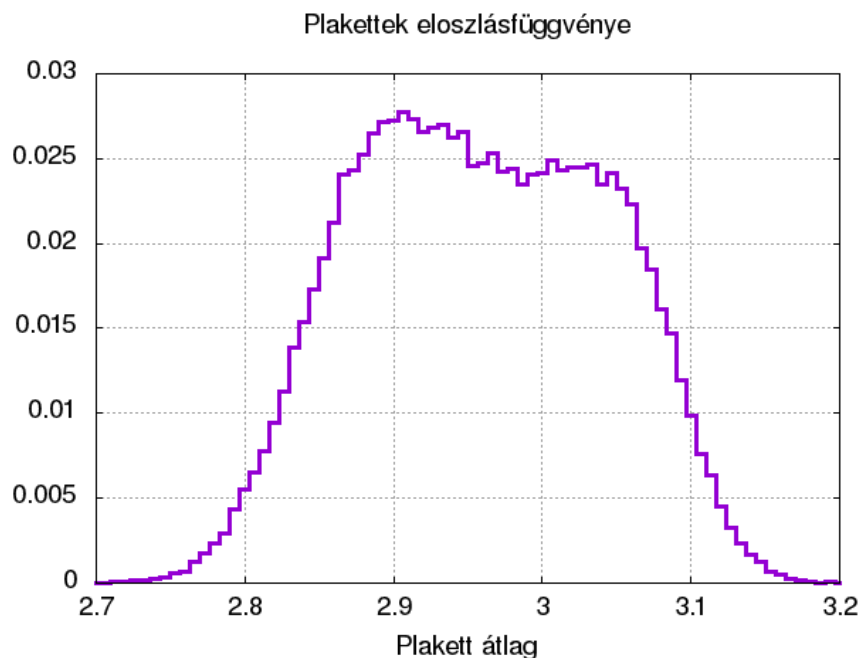
5.2. Végese hőmérsékletű szimulációk

Az alábbi fejezetben bemutatom a végese hőmérsékleten végzett szimulációk eredményét. Először megmutatom az analízis menetét nulla kémiai potenciál mellett, beleértve a Lee-Yang zérók keresését és a végtelen térfogati extrapolációt. Ezután rátérek az átsúlyozásos módszerre, annak alkalmazhatósági feltételeire. Munkám során a végese kémiai potenciál analízisének szükséges determináns számoló algoritmust optimalizáltam grafikus processzorra, aminek köszönhetően a kiértékelés nagyságrendekkel gyorsabb lett. A konkrét hatékonyságbeli növekedést is részletesen tárgyalom a fejezetben.

5.2.1. Nulla kémiai potenciál eredmények

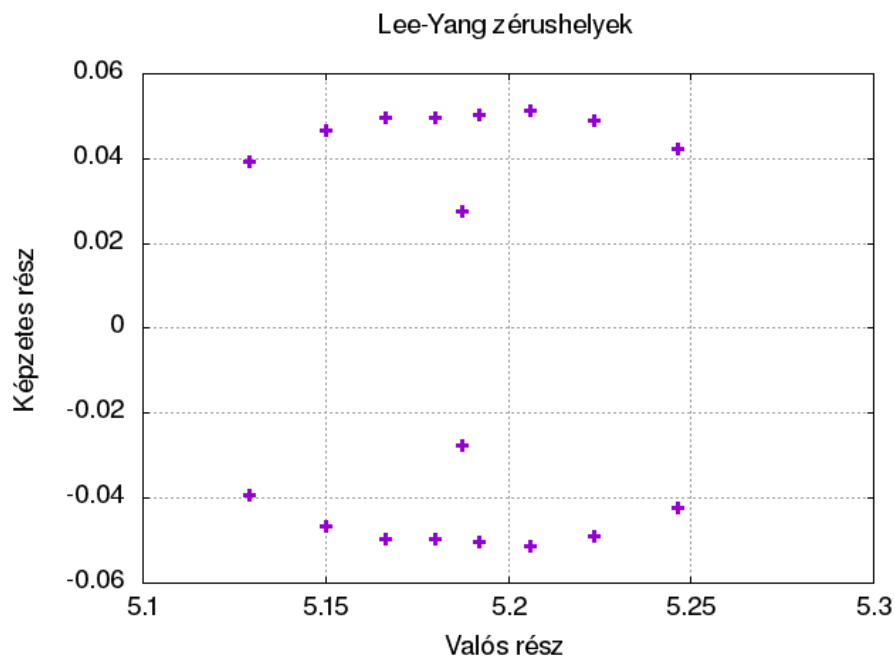
A munkám során négy térfogatot ($N_s = 6, 8, 10, 12$ $N_t = 4$) használtam. Első lépésben meg kellett keresni az átmeneti ponthoz tartozó β_c értékeket, amellyel a nagy statisztikás szimulációkat indítottam. A témával foglalkozó korábbi munkákban használt β értékekkel indítottam az első futtatásokat. A β paraméter helyes beállítására két módszert használtam. Egyik lehetséges módszer, a konfigurációkon

egy mennyiség, ez esetben a plakett átlag, tehát maga a Wilson-hatás mérésére. Az átmeneti pontban mindkét fázisból vannak konfigurációk, így a plaketek eloszlásának egy kétcsúcsú hisztogramot kell adnia. Ilyen esetben valóban az átmenet környékén vagyunk, amint a 3. ábrán látható.



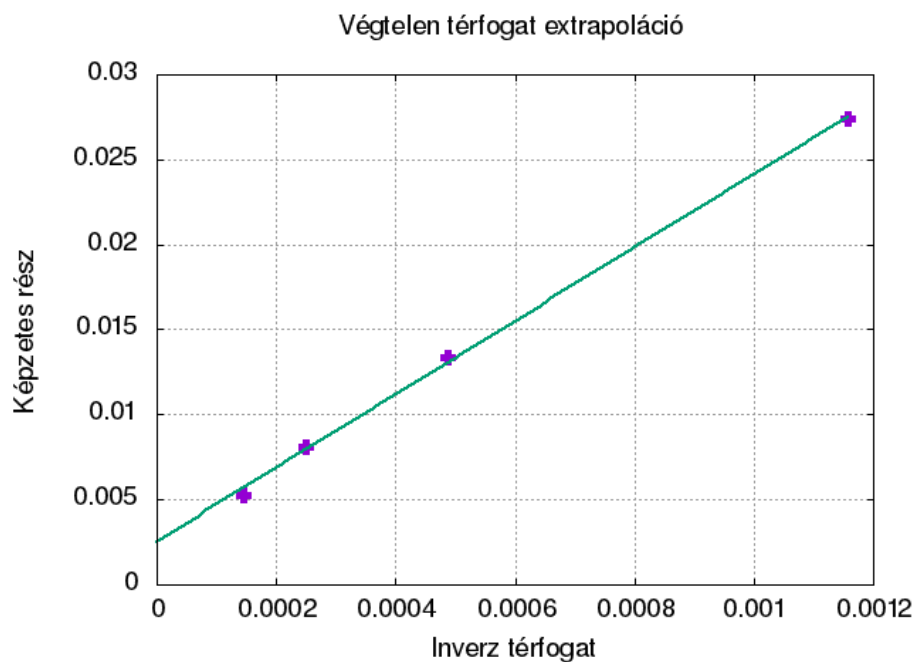
3. ábra. Plaketek eloszlása $N_s=6$ -os rács esetén, ahol $\beta = 5.188$. Jól látható a kettős csúcs, amely a két fázis jelenlétét jelzi

Ez azonban még nem feltétlen a pontos átmeneti pont. A finomításhoz használt módszer a Lee-Yang zérók módszere, amint azt láttuk a korábbi fejezetben. Ez esetben az (57) egyenletet kell megoldani. Ehhez a függvény tipikusan 30-ad rendig Taylor-sorba fejttem, és a közelítő polinomnak kerestem meg a gyökeit. Adott térfogat esetén a zérusok a 4. ábrán látható módon helyezkednek el. A további vizsgálatok során mindig a valós tengelyhez legközelebbi pozitív gyököt választottam.



4. ábra. Lee-Yang zérusok elhelyezkedése 6-os rács esetén

Ezt az analízist meg kell csinálni mindegyik térfogatra. A kapott adatokból már el lehet végezni a végtelen térfogat extrapolációt az (59) egyenlet alapján. Ezt úgy érdemes csinálni, hogy inverz térfogat függvényében ábrázolva a képzetes helyekhez egyenest illesztünk. Így a tengelymetszet adja a végtelen térfogati extrapolációt, ahogy azt az 5. ábrán láthatjuk.



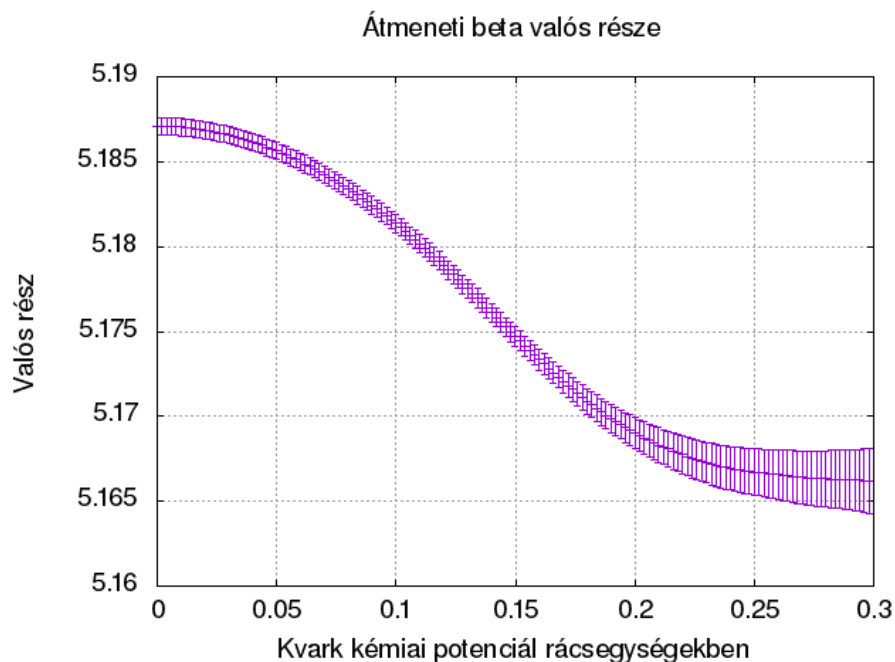
5. ábra. Végtelen térfogati extrapoláció zérus kémiai potenciál esetén. Végese helyen metszi a tengelyt az egyenes, ami analitikus átmenetre utal.

A zérus kémiai potenciálon kapott eredményeket foglalja magába az alábbi táblázat:

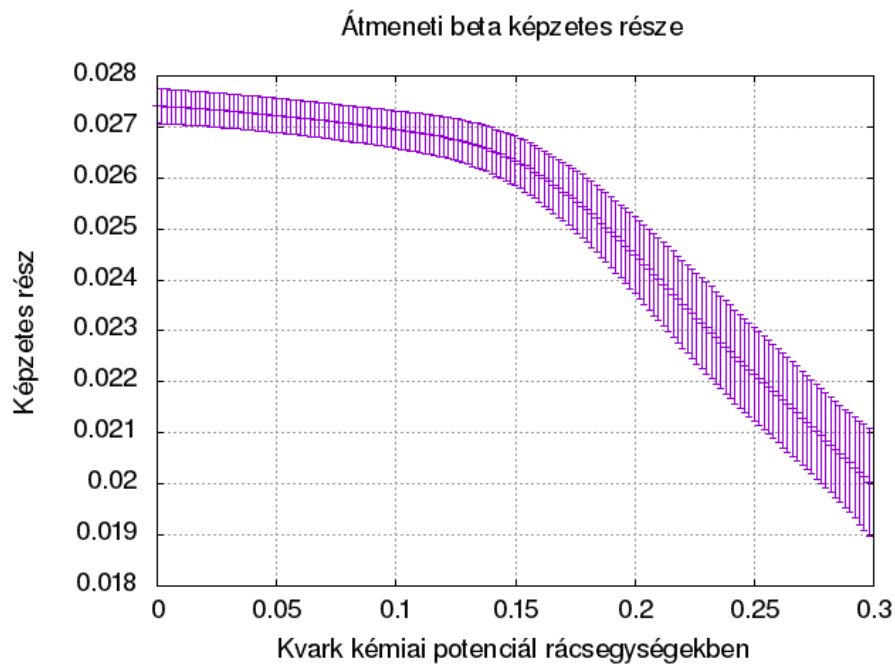
Térfogat	$\text{Re}\beta_c$	$\text{Im}\beta_c$
6	5.1886 ± 0.0005	0.027 ± 0.0004
8	5.1880 ± 0.0002	0.134 ± 0.0002
10	5.1889 ± 0.0003	0.008 ± 0.0001
12	5.1904 ± 0.0002	0.005 ± 0.0001
∞	5.188 ± 0.0005	0.00206 ± 0.000018

5.2.2. Átsúlyozás véges kémiai potenciálra

Véges kémiai potenciál esetén hasonlóan kell eljárni, csak az (58) egyenletet kell megoldanunk. Ezzel tetszőleges lépésközzel megkereshetjük véges kémiai potenciál esetén az átmeneti pontot. Minden esetben, de nagyobb térfogatok esetén hatványozottan fontos, hogy a zérus kémiai potenciálnál jól eltaláljuk az átmeneti β_c -t. A korábban említett előjelprobléma miatt nagyobb kémiai potenciálok felé haladva nagyobb hibával lehet csak megtalálni az átmeneti pontot. További probléma lehet, hogy nem megfelelően nagy statisztika esetén előfordulhat, hogy egy-egy konfiguráció a többihez képest sokkal nagyobb súlyt kap, ami szintén megnöveli a hibát. Látni fogjuk, hogy a kritikus pont környékén ezek a hibafaktorok nagyon is jelentősek. Továbbá a súlyok térfogattól is függenek, így nagyobb a térfogatok, és majd a nagyobb simítások esetén is jelentősen megnőnek a hibák. A legkisebb térfogat esetén a β_c képzetes és valós részét mutatják $a\mu$ függvényében a 6. és 7. ábrák.



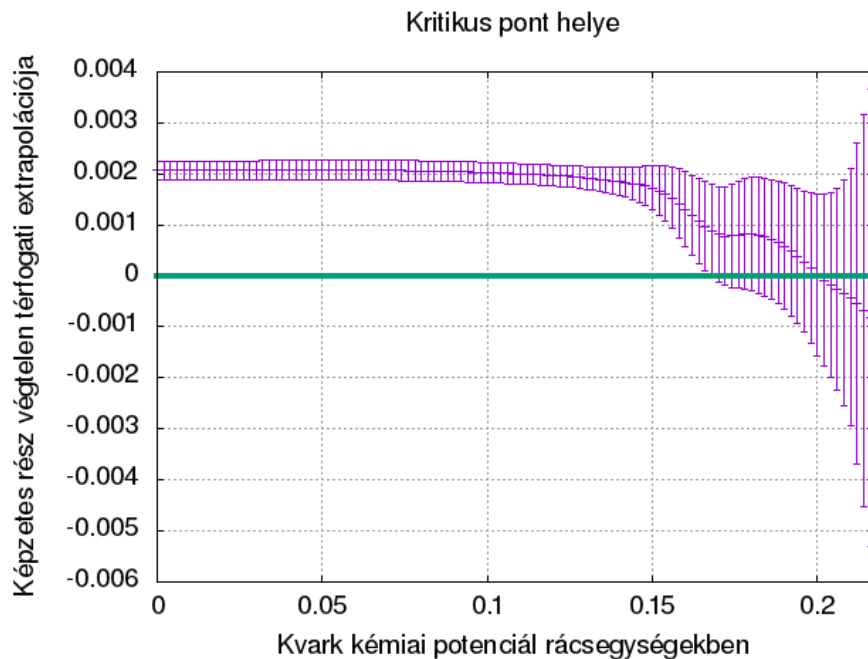
6. ábra. Zérus simítás mellett a valós része β_c -nek $N_s=6$ -os rács esetén a kémiai potenciál függvényében.



7. ábra. Zérus simítás mellett a képzetes része β_c -nek $N_s=6$ -os rács esetén a kémiai potenciál függvényében.

Ugyanígy járhatunk el mindegyik térfogat esetén, és elvégezhetjük a végtelen térfogat extrapolációt mindegyik kémiai potenciál értékre. Ekkor a β_c képzetes részei végesek lesznek az analitikus átmenet tartományban, és levág nullára a kritikus pont helyénél. Így az extrapolált függvénynek kell megkeresni a metszéspontját a kémiai

potenciál tengellyel. A korábban említett hibafaktorok miatt ezt csak viszonylag nagy hibával lehetett megadni. Az extrapolált görbét mutatja a 8. ábra.



8. ábra. Képzetes részek végtelen térfogati extrapolációja. Egy bizonyos μ érték utána nullával konzisztens, ami a kritikus pont helyét mondja meg.

A kritikus pont helyének hibáját jackknife hibaszámítással végeztem, aminek eredménye

$$a\mu_{\text{CEP}} = 0.202 \pm 0.02 \quad (74)$$

$$\beta_{\text{CEP}} = 5.169 \pm 0.04 \quad (75)$$

Ezeket át kell váltani fizikai egységekre a zérus hőmérsékleti eredmények segítségével. A rácslánc ekkora csatolásnál $a = 1.65 \text{ GeV}^{-1}$. Továbbá tudjuk, hogy

$$T = \frac{1}{N_t a} \quad (76)$$

Így a kritikus pont helye fizikai egységeiben:

$$\mu_{B_{\text{CEP}}} = (367 \pm 36) \text{ MeV} \quad T_{\text{CEP}} = 150 \text{ MeV} \quad (77)$$

Ez konzisztens a [14] munkában kapott eredményekkel.

5.2.3. Analízis gyorsítása GPU-val

Az analízis egyik legidőigényesebb része korábban a fermiondetermináns kiszámítása volt. Munkám során ezt a rutint megírtam grafikus processzorra, ahol a MAGMA-ban implementált rutinokat használtam fel [22]. Az alábbi táblázatban feltüntettem a régi CPU-s és az új GPU-s rutinnal vett futási időt térfogatfüggvényében:

Térfogat	CPU (s)	GPU (s)	Arány
6	20	3	7
8	150	20	7
10	1950	115	17
12	12600	380	34

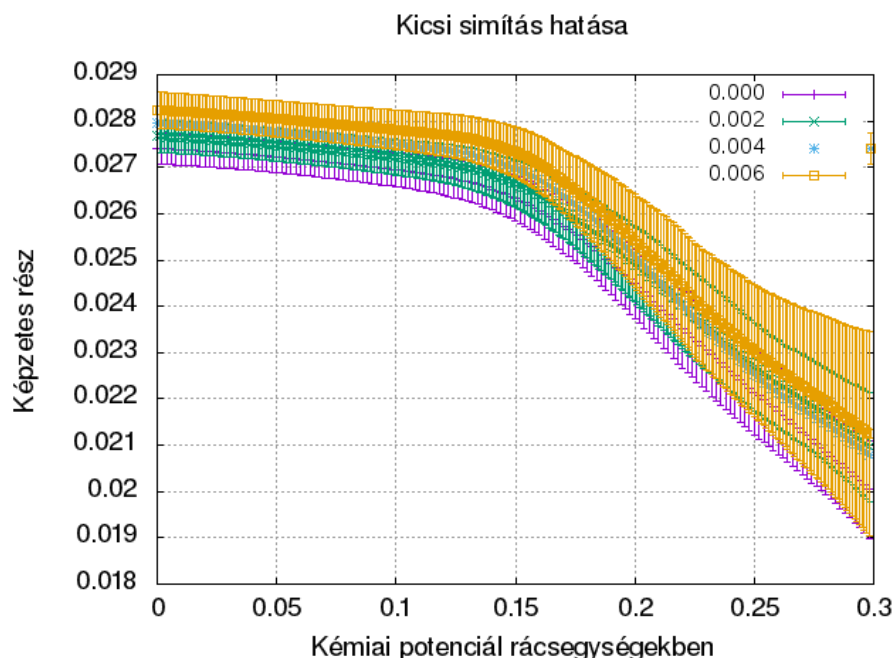
Látható, hogy egyre nagyobb térfogatoknál a GPU-s gyorsítás egyre hatékonyabb, ami biztató lehet majd a későbbi még nagyobb térfogatok esetén. Egy teljes analízis így az eddigi egy hónap helyett egy napra lecsökkenthető.

5.3. Kritikus végpont helyének simítási paraméter függése

A simítás hatását kétféleképpen is vizsgáltam. Első esetben nagyon kis simításokat vizsgáltam, és a zérus simítású konfigurációkról súlyoztam át véges simításra a determinánst számolásnál. Második esetben véges simításnál generált konfigurációkon mértem közvetlenül a determinánst.

5.3.1. Derivált meghatározása átsúlyozásos módszerrel

Első esetben kicsi $\rho = 0.002, 0.004, 0.006$ simításokat vizsgáltam. Minden analízis azonos az előző fejezetek során tárgyaltakkal. A legkisebb térfogat esetén a simítás hatását mutatja a 9. ábra.

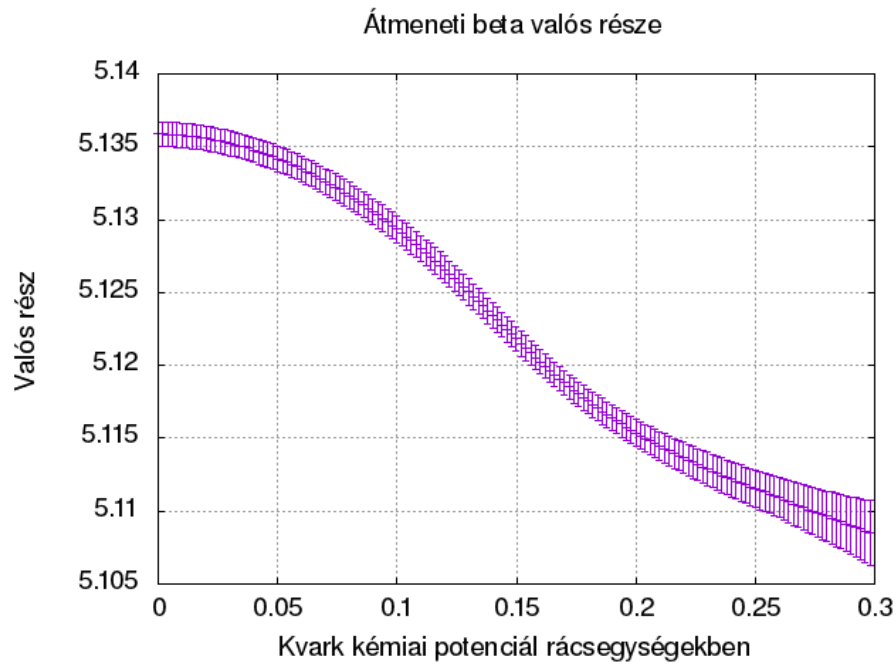


9. ábra. Kis simítás hatása a képzetes részekre, amelyek is simítás értékek esetén alig mozdulnak el.

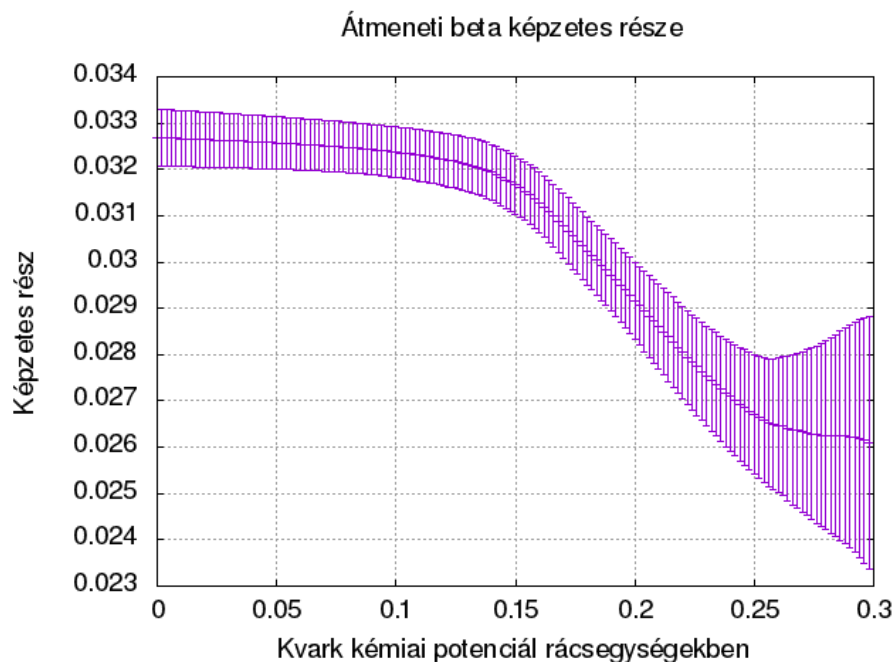
Már ebből látható, hogy nagyon kicsi az effektus. Azonban analízis során már a 0.002-nél nagyobb simítások esetén túl nagyok voltak a súlyok, hatalmasak voltak a hibák, és a kritikus pontot se lehet megtalálni. Ennek az az oka, hogy átsúlyozásos módszert használtam. A 0.002-es simításnál meg lehet találni a kritikus pontot, így lehet deriváltat számolni a kritikus pont helyére a simítás hatására, de az derül ki, hogy ilyen kis simításnál a derivált konzisztens nullával, ezért vált szükségessé a véges simításnál generált konfigurációk analízise.

5.3.2. Végés simításnál generált konfigurációk

A simítási paramétert az átsúlyozásos módszernél látott adatok alapján állítottam be úgy, hogy a képzetes részek legalább 10 szigmára elváljanak egymástól. Így esett a választás $\rho = 0.03, 0.06, 0.09$ -re. A simítást növelve mind a valós, mind a képzetes része elmozdul a zérus simítási értékekhez képest, ahogy azt a 10. és 11. ábrákon is láthatjuk.



10. ábra. 0.03-as simítás mellett a valós része β_c -nek $N_s=6$ -os rács esetén a kémiai potenciál függvényében.

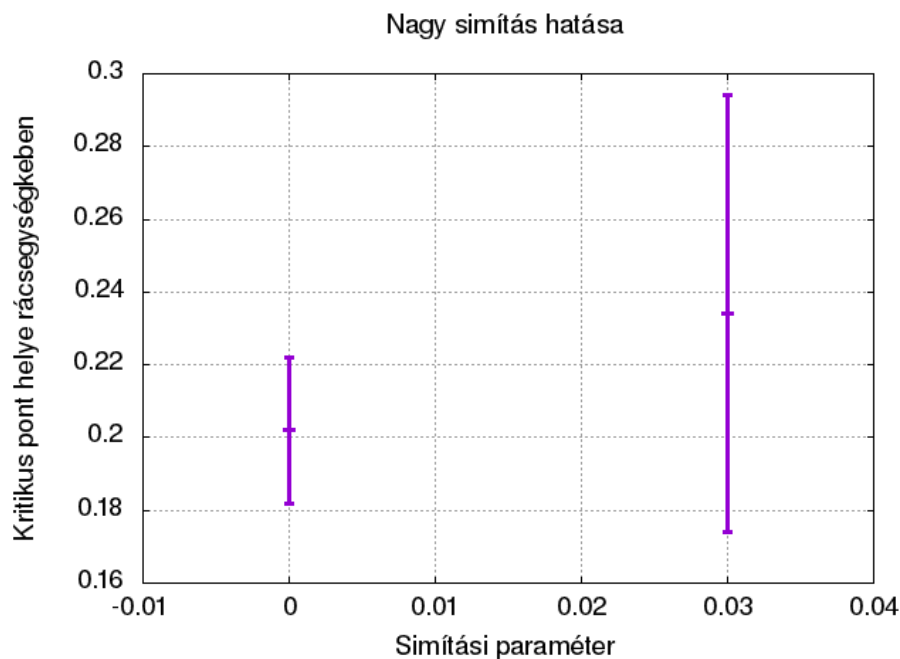


11. ábra. 0.03-as simítás mellett a képzetes része β_c -nek $N_s=6$ -os rács esetén a kémiai potenciál függvényében.

Ezeket ugyanúgy elvégeztem a teljes analízist. A kritikus pontot azonban csak a zérus és 0.03-as simításnál lehetett megtalálni. A magasabb simításnál a végtelen térfogati extrapolációnak már viszonylag kis kémiai potenciálnál óriásiak a hibái. A zérus és 0.03-as esetben az eredmények:

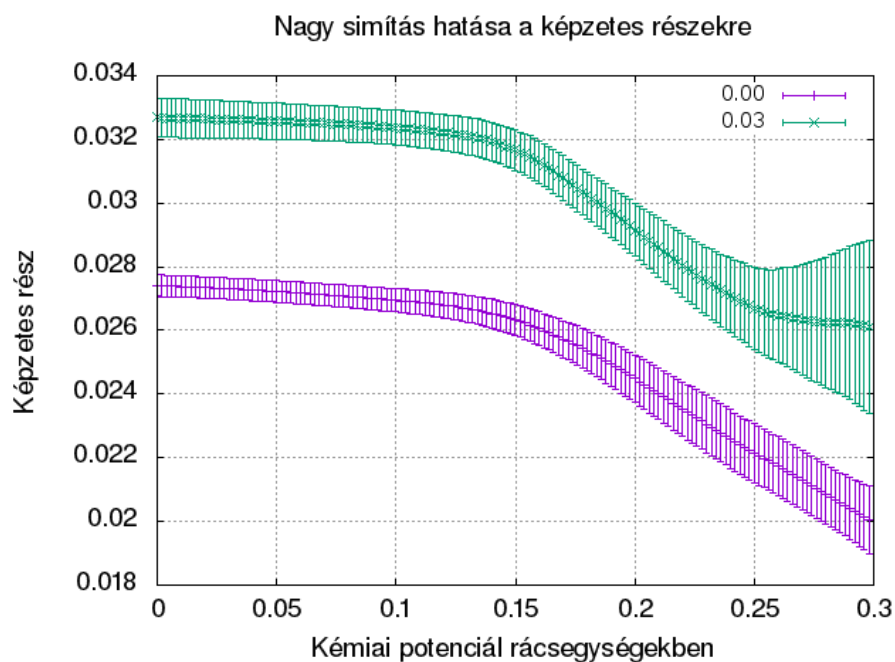
Simítás	Kritikus pont helye (rácsegyiségben)	Hiba
0.00	0.202	0.02
0.03	0.234	0.06

Látható, hogy a hibák viszonylag nagyok. Nagyon nagy jackknife mintájú analízis során, ahol gyakorlatilag mindig egy konfigurációt hagytam ki, kiderült, hogy egy vagy két konfiguráció dominálja a hibát, tehát ezeknek az átsúlyozás során nagyon nagy a súlyuk, amelyek egyre nagyobb μ esetén dominálnak. Ennek kiküszöbölésére nagyobb statisztikát kell venni, azonban exponenciálisan nagyobb, így nehezen vehető fel a verseny.



12. ábra. Nagy simítás hatása. Zérus simítás esetén a pion tömege a fizikainak 93 %-a, míg 0.03 esetén 91 %-a így a piontömeg változása 1% körüli, tehát az effektus valóban a simítás változtatásának eredménye.

Látható, hogy 0.03-os simítás esetén a kritikus pont pozitív irányba mozdul, de nem szignifikáns a változás, míg adott térfogaton a képzetes részre jelentős a hatása, ahogy azt a 13. ábra is mutatja.



13. ábra. Nagy simítás hatása a képzetes részre.

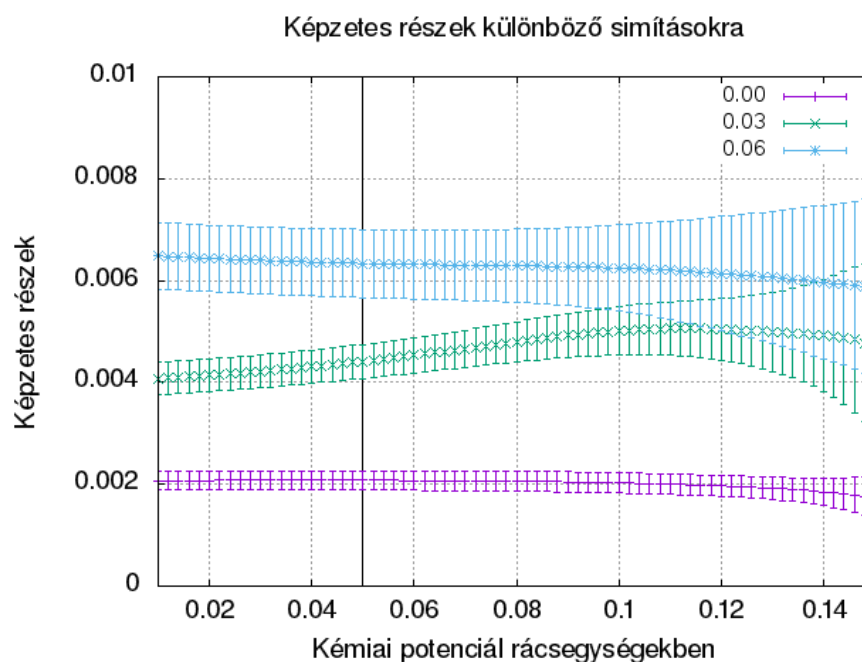
Ismert, hogy simítási paraméterrel közelíthetjük a kontinuum eredményt. Mun-

kám során rámutattam, hogy míg a véges térfogatokon végzett analízis során kapott eredmények és a végtelen térfogati extrapolációk erősen függenek a simítási paramétertől, a kritikus pont helye nem annyira érzékeny rá, nem szignifikánsan, de pozitív irányba mozdul el. Ezzel adhatunk egy alsó korlátot a kritikus pont helyére, ami a már korábbi munkákban is megkapott érték:

$$\mu_{B_{\text{CEP}}} = (367 \pm 36) \text{ MeV} \quad T_{\text{CEP}} = 150 \text{ MeV} \quad (78)$$

5.4. Alsó korlát és kisebb értékek kizárása

A méréseim alapján az alsó korlát a kritikus pontra 360 MeV körüli. Ez feltételezi, hogy a kontinuumviselkedés ettől a durva rácstól egészen a kontinuumig monoton. Utóbbi években jelent meg egy fenomenológiával kísérleti adatokból számolt eredmény a kritikus pont helyére, ahol 95 MeV-et mondanak a bariokémiai potenciálra [23]. A 95 MeV rácsegységekben 0.05-nek felel meg. A 14. ábráról leolvasható, hogy mindegyik simítás esetén legalább 10 szigmára különbözik a nullától, illetve simítást növelve távolodik tőle a végtelen térfogati extrapoláció, vagyis nem lehet elsőrendű átmenet, mindenképpen analitikus átmenet.



14. ábra. Végtelen térfogati extrapolált képzetes részek különböző simításokra, a függőleges vonal $\mu_B = 95$ MeV-nek felel meg

5.5. Lee-Yang zérusok a μ^2 síkon

5.5.1. Gyökök elhelyezkedése komplex μ síkon

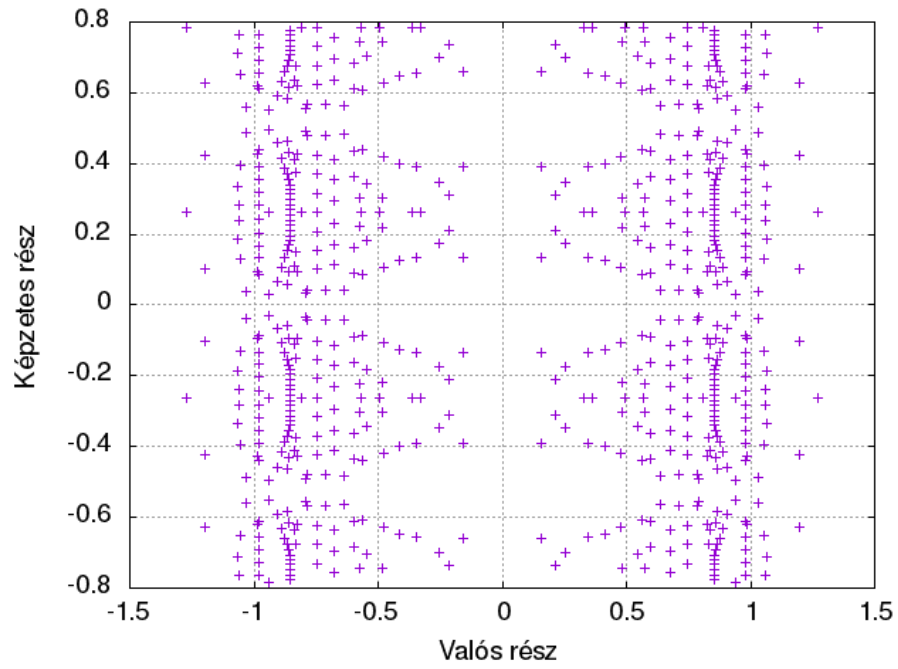
Magának az állapotösszegnek sok szimmetriája van, amelyek szépen látszódnak a gyökök elhelyezkedésében. Az együtthatók valós volta miatt minden gyöknek komplex μ síkon megjelenik komplex konjugált párja. Továbbá, minden konfigurációra igaz, hogy a λ sajátértékeknek megjelenik $\frac{1}{\lambda^*}$ párja is. Ez μ -ben annyit jelent, hogy adott μ_{LY} gyökhöz megjelenik $-\mu_{LY}^*$, tehát minden gyöknek lesz egy tükörképe a képzetes tengelyre is. Végül a korábban említett $Z(3)$ szimmetria miatt megjelennek a köbgyökvonás után további gyökök. A polinom gyökeit $X = e^{3N_t a \mu}$ változóban kerestük. Ekkor köbgyökvonás után:

$$Y = \sqrt[3]{X} = e^{\frac{N_t a \mu_{LY}}{3} + i \frac{2\pi l}{3}} \quad l \in [-1, 0, 1] \quad (79)$$

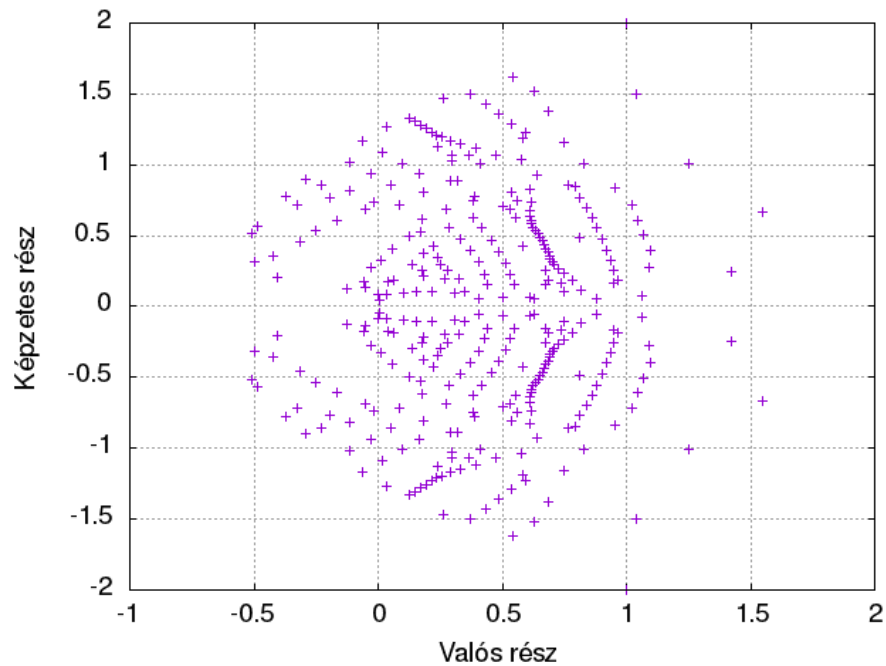
Ekkor a logaritmus vétele után:

$$a \mu_{LY} = \frac{\ln Y}{3N_t} - i \frac{2\pi l}{3N_t} = \frac{\ln Y}{12} - i \frac{\pi l}{6} \quad l \in [-1, 0, 1] \quad (80)$$

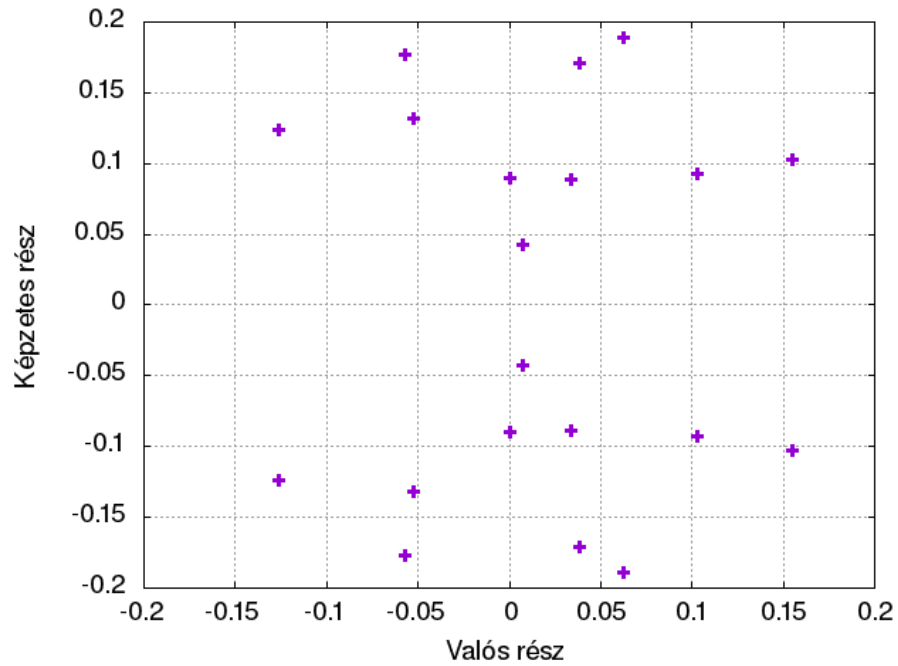
Tehát egy megkapott $a \mu_{LY}$ mellett megjelennek $a \mu_{LY} \pm i \frac{\pi}{6}$ zérusok is. Ennek megfelelően látjuk elhelyezkedni a gyököket a 15., 16. és 17. ábrán 6-os rács esetén.



15. ábra. Gyökök elhelyezkedése komplex $a\mu$ síkon, melyen jól kivehetőek a polinom szimmetriái



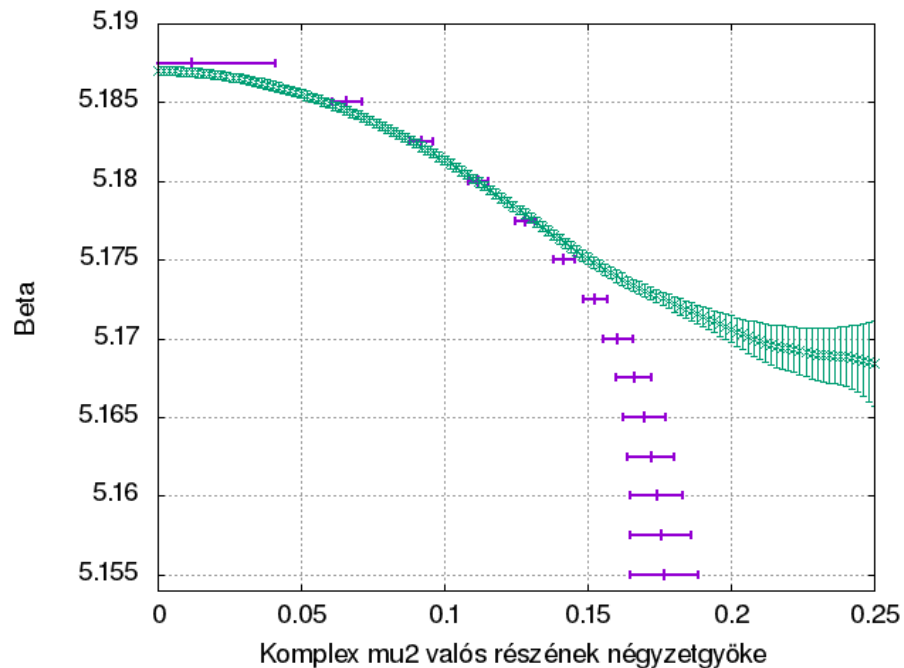
16. ábra. Gyökök elhelyezkedése a komplex $(a\mu)^2$ síkon. Analízis során ezen a síkon az origóhoz legközelebbi gyök a fizikailag releváns Lee-Yang zérus.



17. ábra. Néhány, origóhoz legközelebbi zérushely elhelyezkedése

5.5.2. Fázisdiagramok eltérése

A munkámnak egyik fontos eredménye a két különböző analízisben meghatározott fázisdiagram alakja. A komplex μ^2 síkon keresett origóhoz legközelebbi zérushely valós részének négyzetgyökéből határozhatjuk meg a fázisdiagramot. A két eredményt mutatja a 18. ábra.



18. ábra. Két különböző analízisből kapott fázisdiagram a 8-as rács esetén. Jól látszik, hogy egy ideig együtt mennek, majd elválnak egymástól

Mindegyik térfogatra igaz, hogy egy ideig együtt mennek a fázisdiagramok, majd valamely β , illetve μ érték után eltérnek egymástól, tehát valójában az igazi fázisdiagram valahol a kettő között haladhat tovább. A kritikus pont helyét a fázisdiagramon tehát a kettő módszer kombinált használatával érdemes meghatározni.

6. Összefoglalás és kitekintés

Korábbi kutatások megmutatták, hogy zérus hőmérsékleten a hadronikus fázis és a kvark-gluon plazma közötti fázisátalakulás analitikus átmenet, továbbá modelszámolások alapján magas kémiai potenciálon az átalakulás elsőrendű. A kettőt egymástól elválasztó pont a kvantum-szindinamika kritikus pontja, ahol másodrendű fázisátalakulást várunk. Ennek helyére azonban még nincs megbízható kontinuum eredmény a rácstérelméletben.

Munkám során a kritikus pont helyét vizsgáltam $N_t = 4$ rácson, és reprodukáltam korábbi kutatások eredményeit az azóta kifejlesztett RHMC algoritmussal, továbbá megvizsgáltam egy, a mértéktereket simító, folytonos paraméter függvényében a kritikus pont viselkedését, amivel lehet közelíteni a kontinuum határesetet. Kutatásom során rámutattam, hogy erre a paraméterre a kritikus pont helye nem nagyon érzékeny, nem szignifikánsan, de nagyobb kémiai potenciálok felé mozdult el, amivel adható egy alsó korlát a végpont helyére:

$$\mu_{CEP} = (367 \pm 36) \text{ MeV} \quad (81)$$

Továbbá egy nemrég megjelent kísérleti adatokra alapozott számolás eredményét ($\mu_{CEP} = 95 \text{ MeV}$) zártam ki nagy biztonsággal.

A fázisdiagramot meghatároztam úgy is, hogy rögzített β mellett a komplex μ^2 síkon kerestem meg a Lee-Yang zérusokat. Ehhez multiprecíziósan megírtam az Aberth-féle gyökkereső algoritmust, mellyel az állapotösszeg mint az $e^{Nt\mu}$ változóban polinom összes gyökét meghatároztam. A valós részekből meghatároztam a fázisdiagramot, mely egyezik az első eredménnyel, de egy pont felett egymástól szignifikánsan eltérnek, így jó eséllyel e felett külön-külön egyik görbe sem hihető el. A kritikus pont így valószínűleg a kettő közötti tartományra várható. További kutatásaim feladata a kritikus pont helyét a második módszerrel is kis hibával meghatározni és összehasonlítani a korábban kapott eredményemmel.

A jövőben további módszerekkel vizsgálom a kritikus pont viselkedését. Többek között nagyobb statisztikával és a paraméterek pontosabb beállításával (pontosabb LCP, átsúlyozás kvarktömegben) csökkentem a hibákat, és pontosítom az eddigi

eredményeket. Célom továbbá megvizsgálni a végpont viselkedését a fizikainál kisebb kvarktömegekre, hiszen akkor erősebb átmenetet várunk, a kritikus pont kisebb kémiai potenciál felé tolódik, így könnyebb megtalálni, majd visszaextrapolálni fizikai kvarktömegekre.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném megköszönni témavezetését Katz Sándornak, akitől a munkámhoz sok szakmai tanácsot és segítséget kaptam, továbbá szeretném megköszönni Pásztor Attilának, hogy ő is átnézte szakmai szemmel a dolgozatomat, és sok építő jellegű tanáccsal látott el. Szeretném megköszönni menyasszonyomnak, Király Henriettának, hogy dolgozatomnak nyelvhelyességét átnézte, és javította, és végül szeretném megköszönni fizikus barátaimnak, akikkel sok órát dolgoztunk együtt, és mind emberileg, mind szakmailag mellettem állnak.

Hivatkozások

- [1] K. Wilson
Confinement of quarks
Phys. Rev. **D10**, (1974) 2445
- [2] Y. Aoki, G. Endrodi, Z. Fodor, S.D. Katz, and K.K. Szabo
The order of the quantum chromodynamics transition predicted by the standard model of particle physics
Nature **443** (2006) 675-678, [hep-lat/0611014]
- [3] Z. Fodor, S.D. Katz
The phase diagram of quantum chromodynamics
(2009) arXiv:[hep-ph/0908.3341]
- [4] S. P. Klevansky
The Nambu-Jona-Lasinio model of quantum chromodynamics
Rev. Mod. Phys. **64** (1992), 649-708
- [5] T. Muta
Foundations of quantum chromodynamics
World Scientific Notes In Physics - Vol. 78
- [6] I. Montvay, G. Munster
Quantum field on lattice
Cambridge, UK: Univ, Pr (1994) 491 p.
Cambridge monograph on mathematical physics
- [7] H. J. Roethe
Lattice Gauge Theories, An Introduction
World Scientific Lecture Notes in Physics - Vol 74
- [8] C. Morningstar and M. J. Peardon
Analytic smearing of $SU(3)$ link variables in lattice QCD
Phys. Rev. **D69** (2004) 054501, [hep-lat/0311018]

- [9] C. Bernard, M. Golterman, and Y. Shamir
Observation on staggered fermions at non-zero lattice spacing
Phys. Rev. **D73** (2006) 114511, [hep-lat/0604017]
- [10] J. Polonyi and H. W. Wyld
Microcanonical simulation of fermionic systems
Phys. Rev. Lett. **51** (1983) 2275.
- [11] S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton, and D. Roweth
Hybrid monte calro
Phys, Lett. **B195** (1987) 216-222.
- [12] M. A. Clark and A. D. Kennedy
Accelerating staggered fermion dynamics with the rational hybrid monte calro (rhmc) algoritm
Phys. Rev. **D75** (2007) 011502, [hep-lat/0610047]
- [13] Z. Fodor and S. D. Katz
Lattice determination of the critical point of QCD at finite T and mu
JHEP, **03** (2002) 014, [hep-lat/0106002]
- [14] Z. Fodor and S. D. Katz
Critical point of QCD at finite T and mu, lattice results for physical quark masses
JHEP **04** (2004) 050, [hep-lat/0402006]
- [15] P. Hasenfratz and F. Karsch
Chemical potential on the lattice
Phys. Lett. B125 (1983) 308.
- [16] Z. Fodor and S. D. Katz
A new method to study lattice QCD at finite temperature and chemical potential
Phys. Rev. Lett **B534** (2002) 87-92, [hep-lat/0104001]
- [17] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen
New monte carlo technique for studying phase transitions
Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2635-2638.

- [18] C. N. Yang and T. D Lee
Statistical theory of equations of state and phase transition. i: Theory of condensation
Phys. Rev. **87** (1952) 404-409
- [19] C. N. Yang and T. D Lee
Statistical theory of equations of state and phase transition. ii: Lattice gas and Ising model
Phys. Rev. **87** (1952) 410-419
- [20] Z. Fodor, S. D. Katz
Lattice determination of the critical point of QCD at finite T and μ
JHEP **03** (2002) 014, [hep-lat/0106002]
- [21] Vladimir Kolmogorov
Blossom V: a new implementation of a minimum cost perfect matching algorithm
Math. Prog. Comp. (2009) 1:43–67 DOI 10.1007/s12532-009-0002-8
- [22] Stanimire Tomov and Jack Dongarra and Marc Baboulin
Towards dense linear algebra for hybrid GPU accelerated manycore systems
Parallel Matrix Algorithms and Applications, Parallel Computing (2010)
0167-8191 , 10.1016/j.parco.2009.12.005
- [23] Roy A. Lacey
Indications for a critical point in the phase diagram for hot and dense nuclear matter
arXiv:1512.09152v2 [nucl-ex]

NYILATKOZAT

Név:

ELTE Természettudományi Kar, szak:

NEPTUN azonosító:

Diplomamunka címe:

A **diplomamunka** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 20

a hallgató aláírása