

### 3. félévi beszámoló

Eötvös Loránd Tudományegyetem  
Fizika Doktori Iskola  
Részecskefizika és Atommagfizika Program

#### Rácstérelméleti módszerek véges kémiai potenciálon

Pesznyák Dávid (david.pesznyak@gmail.com)  
Témavezető: dr. Pásztor Attila

## Bevezető

Számos kvantumtérelmélet véges kémiai potenciál mellett vett rácstérelméleti szimulációjakor az ún. előjelprobléma ellehetetleníti az első elvekből való számításokat [1]. Ez a gyakorlatban a véges téridőráccsal regularizált pályaintegrálok numerikus kiértékelésekor a rendszer szabadsági fokaiiban exponenciálisan kicsi jel-zaj arányhoz vezet. Előjelprobléma lép fel pl. az erős kölcsönhatást leíró kvantumszindinamikában (QCD: *quantum chromodynamics*) véges barionsűrűség mellett, az erősen korrelált elektronokat modellező a Hubbard-modellben a feles betöltöttségi szinttől távol, továbbá az összes kvantummechanikai rendszerben Minkowski-féle téridő esetén. Kutatómunkám során azt vizsgálom, hogy különböző új módszerekkel milyen mértékben javítható az előjelprobléma. A doktori képzés első és második félévének beszámolóíért ld. a [2, 3] hivatkozásokat.

A harmadik félévben a kutatómunkám három részre különíthető el. Egyrészt folytattam a 2022/23-as ÚNKP ösztöndíjam során elkezdett munkát, amely a mértékelméletek kvantumszámítógépeken történő szimulálhatóságával foglalkozik. A közeljövőben a kvantumszámítógépek használatának egyik fő korlátját a kvantumbitek véges száma jelenti, így fontos, hogy az alapvetően folytonos mértékcsoport valamilyen memóriahatékony diszkrétizációját használjuk. Ebben a félévben az  $U(1)$  folytonos és a  $Z(N)$  diszkrét csoportok kapcsolatát vizsgáltam a diszkrét térszerű rács mellett vehető folytonos idő (avagy az ún. Hamilton-féle) limeszben [4, 5]. Ezen felül részt vettem a Wuppertal-Budapest Kollaboráció egy új projektjében. A QCD nyomás bariokémiai potenciál szerinti Taylor-sorában elsőként számítottuk ki hatod- és nyolcadrendben a kontinuum extrapolált kifejtési együtthatókat [6]. Továbbá elkezdtem egy analízist, amelyben egy megfelelően választott konform leképezés alapján általánosított Padé-approximáns segítségével megkísérelhető az erősen kölcsönható anyag kritikus pontjának meghatározása [7]. Az analízist funkcionális renormálási csoport módszerekkel kapott eredményeken kezdtem el alkalmazni [8].

## Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

A félév során elvégzett kutatási tevékenységeimet az alábbi alpontokban mutatom be röviden.

### Az $U(1)$ és a $Z(N)$ mértékcsoportok Hamilton-limesze

Az  $U(1)$  folytonos Lie-csoport egy lehetséges diszkrétizációját adja a  $Z(N)$  csoport. Ez a diszkrétizáció minden határon túl finomítható az  $N \rightarrow \infty$  limeszben. Ahhoz, hogy

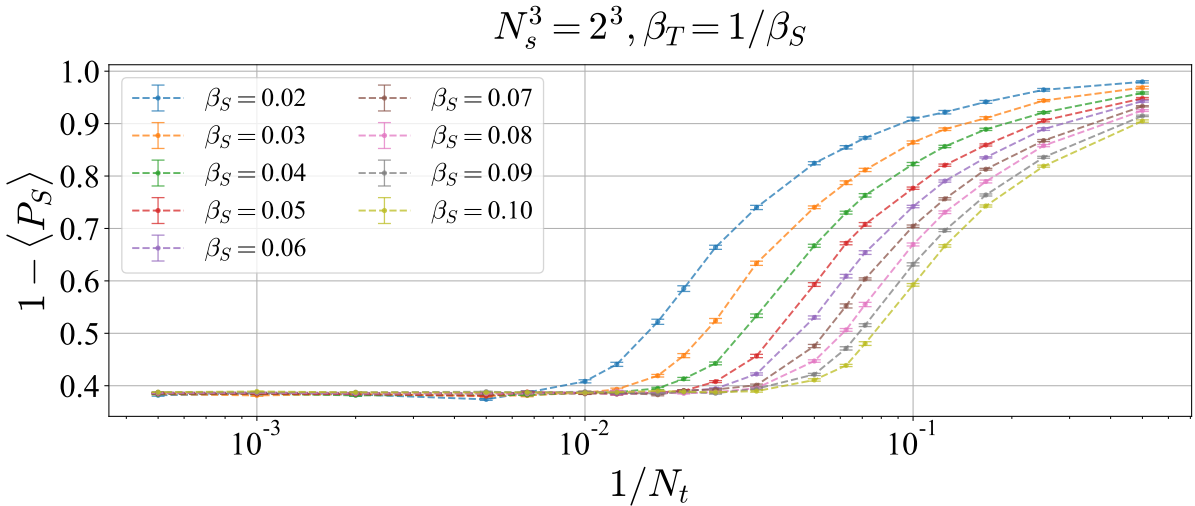
az U(1) mértékelméletet kvantumszámítógépen szimulálhassuk, konstruálnunk kell egy Hamilton-operátort, amihez folytonos időváltozóra van szükség. A térszerű rácspontokat diszkrétnek megtarva vehetjük a folytonos idő határesetét: ezt az eljárást nevezik az euklideszi elmélet Hamilton-limeszének. Ehhez anizotrópiát kell bevezetni a térszerű és időszerű irányok között, továbbá válasszunk temporális mértéket. Ekkor a Wilson-féle mértékhatás az alábbi anizotróp hatásra módosul [5]:

$$\begin{aligned}
S &= -\beta \sum_x \sum_{\mu < \nu} \text{Re} U_{\mu\nu}(x) \\
&\rightarrow S_a = -\beta_S \sum_x \sum_{k < l} \text{Re} U_{kl}(x) - \beta_T \sum_x \sum_k \text{Re} [U_k(x + \hat{0}) U_k^\dagger(x)],
\end{aligned} \tag{1}$$

ahol az  $x$ -re vett szumma az összes rácspontra vett összegzést jelenti, illetve  $\mu, \nu = 0, 1, 2, 3$  és  $k, l = 1, 2, 3$ . A képletben  $U_{\mu\nu}(x)$  jelöli az ún. plakettet, ami a rácspontok közti éleken definiált  $U_\mu(x)$  – ezek most U(1) csoportelemek, azaz tisztán komplex fázisok – mértékterek szorzatát jelenti egy téridő négyzet mentén. A temporális mérték miatt az összes időszerű él az egységelem lesz, így az időszerű második tag a hatásban leegyszerűsödik. Továbbá  $\beta$ ,  $\beta_S$  és  $\beta_T$  rendre az izotróp, a térszerű és az időszerű mértékcsatolásokat jelöli. Utóbbi kettő az  $a_t$  időszerű ráczállandóval

$$\beta_S \sim a_t \quad \text{és} \quad \beta_T \sim 1/a_t \tag{2}$$

módon skáláznak, azaz a Hamilton-limeszben  $\beta_S \rightarrow 0$ , míg  $\beta_T \rightarrow \infty$ . A fenti Hamilton-limeszt zérus hőmérsékleten definiáljuk, azaz a  $T = 1/N_t a_t$  összefüggés miatt numerikusan ki kell számolnunk az  $N_t \rightarrow \infty$  limeszt is. Erre példa az átlagos térszerű plakett esetén az 1. ábrán látható. A jövőben a különböző limeszek ( $N \rightarrow \infty, N_t \rightarrow \infty, a_t \rightarrow 0$ ) felcserélhetőségét fogom vizsgálni.



**1. ábra.** A  $\langle P_S \rangle$  átlagos térszerű plakett zérus hőmérsékleti limesze. A különböző  $\beta_S$  értékekre közel azonos és nem triviális értéket kapunk, ahogy  $N_t \rightarrow \infty$ . A  $\beta_T(\beta_S)$  függés egy konstans szorzó erejéig mindig olyan alakú, mint ahogy az ábra címében is szerepel.

## A QCD nyomás hatod- és nyolcadrendű Taylor-együtthatói

Az erősen kölcsönható anyag első elvekből való vizsgálatát a bevezetőben bemutatott előjelprobléma nehezíti. Az egyik lehetséges indirekt módszer véges barionsűrűség melletti

számításokra a zérus  $\mu_B$  bariokémiai potenciálon kapható eredményekből való extrapoláció a QCD nyomás Taylor-során keresztül:

$$\hat{p}(T, \hat{\mu}_B, \dots) - \hat{p}(T, 0) = \frac{\chi_2^B(T)}{2!} \hat{\mu}_B^2 + \frac{\chi_4^B(T)}{4!} \hat{\mu}_B^4 + \frac{\chi_6^B(T)}{6!} \hat{\mu}_B^6 + \frac{\chi_8^B(T)}{8!} \hat{\mu}_B^8 + \dots, \quad (3)$$

ahol  $\hat{p} = p/T^4$  és  $\hat{\mu}_B = \mu_B/T$ . A Taylor-együtthatók a zérus kémiai potenciálon kiértékelt általánosított szuszceptibilitások lesznek, melyeket a  $B$  barionszám mellett a  $Q$  elektromos töltés és az  $S$  ritkaság megmaradó töltésekkel együtt definiálva az alábbi alakban írhatunk fel:

$$\chi_{abc}^{BQS}(T) = \left. \frac{\partial^{a+b+c} \hat{p}(T, \hat{\mu}_B, \hat{\mu}_Q, \hat{\mu}_S)}{\partial \hat{\mu}_B^a \partial \hat{\mu}_Q^b \partial \hat{\mu}_S^c} \right|_{\mu_B=\mu_Q=\mu_S=0}. \quad (4)$$

A különböző szuszceptibilitások arányosak a megmaradó töltések kumulánsaival és korrelációival, fontos szerepet játszanak a kvark-gluon plazma állapotegyenletének tanulmányozásban, valamint az erősen kölcsönható anyag kritikus pontja utáni keresésben és kísérleti eredményekkel való összevetésben. A  $\mu_B$ -ben felírt Taylor-sor második ( $\chi_2^B$ ) és negyedik ( $\chi_4^B$ ) rendjében már évek óta elérhető megbízható és kontinuum extrapolált eredmények. A hatodik ( $\chi_6^B$ ) és nyolcadik ( $\chi_8^B$ ) rendben a [6] publikációban mutatjuk be új kontinuum eredményeket.

A projektben a szimulációs eredmények analízisét végeztem el. A QCD állapotösszege pályaintegrál reprezentációban egyetlen  $f$  kvarkízre (a szimulációk két könnyű és egy nehéz kvarkízt használtak) az alábbi alakot ölti:

$$\mathcal{Z}_f = \int \mathcal{D}U (\det M_f[U])^{1/4} e^{-S_g[U]}, \quad (5)$$

ahol  $\det M_f$  az ún. fermiondetermináns (az  $1/4$  hatványkitevő a *staggered*-diszkretizáció sajátossága). A szimulációkban a fermiondetermináns deriváltjait mérhetjük konfigurációnként mint

$$A_f^i = \frac{\partial^i}{\partial \hat{\mu}_B^i} \log(\det M_f)^{1/4}. \quad (6)$$

Az analízis során a mért  $A_f^i$  értékek várható értékeinek segítségével kiszámítottam a (4) egyenlettel analóg módon definiálható kvarkíz szuszceptibilitásokat. Majd kiszámítottam a kvarkíz kémiai potenciálok ( $\mu_u, \mu_d, \mu_s$ ) bázisáról való áttérést a különböző rendekben a megmaradó töltések ( $\mu_B, \mu_Q, \mu_S$ ) bázisára. Ezen felül a Taylor-együtthatókat kiszámítottam az  $\langle S \rangle = 0$  kényszer alapján definiált és fenomenológiailag releváns ritkaságsemleges esetben is. Ehhez már a barionszám kumulánsokon túl szükségem volt a ritkaság kvantumszám kumulánsaira, illetve a barionszám-ritkaság korrelációkra is. A Taylor-sorban magasabb rendek esetén fellépő összetettebb formulák miatt egy saját szimbolikus számításokat elvégző programkódot használtam. A hibaterjedést a jackknife-módszerrel számítottam.

## Konformális Padé-approximánsok és a kritikus pont keresése

A kémiai potenciáltól is függő  $\chi_2^B(T, \mu_B)$  kumulánstól azt várjuk, hogy divergál a kritikus pontban. A fent már használt Taylor-kifejtés mellett Padé-approximánsokkal is dolgozhatunk. Ez utóbbi hatványsor helyett racionális függvényekkel dolgozik (általában két

adott rendű polinom hányadosával). A két módszer viszonya a kritikus pontot illetően talán legegyszerűbben úgy írható le, hogy ahol a Taylor-kifejtésben szingularitást találunk, ott a Padé-approximánsnak pólusa van. Azt tudni lehet, hogy a Padé-módszer használata a szingularitástól távol általában jól működik, azonban a szingularitás vagy egy vágás közelében már nem tudja jól rekonstruálni a közelített függvényt. Ez pl. nem fizikai pólusok megjelenésében mutatkozhat meg.

Ezen probléma kezelése végett a [7] publikációban bevezették az ún. konformális Padé-módszert, ami a Padé-approximáns illesztése előtt egy konform leképezést hajt végre a használt (pl. szimulációs) adatokon. A leképezés a komplex síkot az egységkörre képezi le, míg a vágásokat és pólusokat az egységkör szélére. A módszert iteratívan alkalmazhatjuk: először megszokott Padé-approximánssal megbecsüljük  $\mu_{LY}^2$ -t, majd ennek az értékét beírjuk a leképezés képletébe, és egy újabb Padé-approximánst konstruálunk meg  $\xi$ -ben. Ebből az új approximánsból újra meghatározzuk a pólus helyét, majd valamilyen konvergencia feltétel teljesüléséig iteráljuk ezt az utolsó két lépést. Egyelőre a munkát a [8] publikáció funkcionális renormálási csoport módszerrel a tizedik rendig ( $\chi_{10}^B$ ) megbecsült szuszceptibilitásokat használva kezdtem el. A közeljövőben ráctérelméleti számolások eredményeire is tervezem alkalmazni a módszert.

## Publikációk

- M. Giordano, A. Pásztor, D. Pesznyák és Z. Tulipánt, *Alleviating the sign problem in a chiral random matrix model with contour deformations*, Phys. Rev. D **108** (2023) o.9, 094507, [arXiv:2301.12947 [hep-lat]].
- S. Borsányi, Z. Fodor, J. N. Guenther, S. D. Katz, P. Parotto, A. Pásztor, D. Pesznyák, K. K. Szabó és C. H. Wong, *Continuum extrapolated high order baryon fluctuations*, [arXiv:2312.07528 [hep-lat]].

Az utóbbi publikációt beküldtük a Physical Review Letters folyóirathoz.

## Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben

Ebben a félévben dr. Nógrádi Dániel *Szolonok és instantonok II.* kurzusát (Neptun: FIZ/2/009E) végeztem el jeles osztállyal.

## Konferenciák és előadások az aktuális félévben

Ebben a félévben az alábbi konferenciákon és iskolákon vettem részt:

- *Methods of Effective Field Theory and Lattice Field Theory* - nyári iskola, 2023. július 9.-21., Bad Honnef, Németország („flash talk” előadás),
- *63. Cracow School of Theoretical Physics, Nuclear Matter at Extreme Densities and High Temperatures* - őszi iskola, 2023. szeptember 17.-23., Zakopane, Lengyelország (20 perces előadás),

- *AIME23 - Academia-Industry Matching Event*, 2023. november 6.-7., Budapest, Magyarország,
- *23<sup>rd</sup> Zimányi School Winter Workshop on Heavy Ion Physics*, 2023. december 4.-8., Budapest, Magyarország (15 perces előadás).

## Oktatási tevékenység az aktuális félévben

Ebben a félévben a *Kvantummechanika A* (Neptun: elmfiz3af19va) gyakorlatát tartottam. Tárgyfelelős: dr. Katz Sándor.

## Elismerések

A 2023/24-es tanévre elnyertem az Új Nemzeti Kiválóság Program ösztöndíját.

## Hivatkozások

- [1] P. de Forcrand. *Simulating QCD at finite density*. PoS LAT2009 (2009) 010
- [2] Pesznyák Dávid. 1. féléves beszámoló. [https://physics.elte.hu/media/e4/a1/5fc73bfe2540fc7e66bc26ab1dbccf0831935bc957e22dd640ab6027f84a/PHYS\\_Pesznyak\\_1.pdf](https://physics.elte.hu/media/e4/a1/5fc73bfe2540fc7e66bc26ab1dbccf0831935bc957e22dd640ab6027f84a/PHYS_Pesznyak_1.pdf)
- [3] Pesznyák Dávid. 2. féléves beszámoló. [https://physics.elte.hu/media/d9/bc/8b3d935c38aa7fba18c7a6f659f0d456284b714f4b9eb9f51b327529a3ed/PHYS\\_Pesznyak\\_2.pdf](https://physics.elte.hu/media/d9/bc/8b3d935c38aa7fba18c7a6f659f0d456284b714f4b9eb9f51b327529a3ed/PHYS_Pesznyak_2.pdf)
- [4] A. Alexandru *et al.* [NuQS]. *Gluon Field Digitization for Quantum Computers*. Phys. Rev. D 100 (2019) no.11, 114501
- [5] M. Creutz. *Quarks, Gluons and Lattices*. Oxford University Press, 1983.
- [6] S. Borsányi, Z. Fodor, J. N. Guenther, S. D. Katz, P. Parotto, A. Pásztor, D. Pesznyák, K. K. Szabó és C. H. Wong. *Continuum extrapolated high order baryon fluctuations*. [arXiv:2312.07528 [hep-lat]]
- [7] G. Basar, G. V. Dunne és Z. Yin. *Uniformizing Lee-Yang singularities*. Phys. Rev. D 105 (2022) no.10, 105002
- [8] W. j. Fu, X. Luo, J. M. Pawłowski, F. Rennecke, R. Wen és S. Yin. *Hyper-order baryon number fluctuations at finite temperature and density*. Phys. Rev. D 104 (2021) no.9, 094047