

# 1. 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

A kvantum-színdinamika (QCD; *quantum chromodynamics*) az erős kölcsönhatás kvantumtérelmélete, melynek segítségével leírható a kvarkok és a gluonok egymással való kölcsönhatása, és ezen keresztül a hadronok összetett felépítése. Kellően nagy energia és/vagy sűrűség mellett az erős kölcsönhatás csatolása gyengül (ezt nevezzük aszimptotikus szabadságnak), így a kvarkok és gluonok, kiszabadulva a hadronokból, az erősen kölcsönható anyag ún. kvark-gluon plazma fázisába kerülhetnek (QGP; *quark-gluon plasma*). Az erősen kölcsönható anyag tanulmányozását az Ősrobbanás elmélete motiválja: úgy gondoljuk, hogy az első  $10^{-12}$ - $10^{-5}$  másodpercben a QGP töltötte ki a korai világegyetemet, majd ezt követően történt meg a hadronizáció, illetve a mai kozmosz kialakulása. Napjainkra a QGP mesterséges előállítása rutinszerűen történik a nehézion-ütköztető kísérletekben, mint pl. az LHC vagy a RHIC.

Az erősen kölcsönható anyag fázisszerkezete jól ismert véges hőmérsékleten ( $T$ ), valamint zérus és alacsony barionsűrűség, avagy bariokémiai potenciál ( $\mu_B$ ) mellett. Rácstérelméleti szimulációk alapján tudjuk, hogy alacsony kémiai potenciál esetén nincs igazi fázisátalakulás, csak ún. *crossover* (analitikus átmenet) történik. Nagyobb  $\mu_B$  esetén azonban azt feltételezzük, a QCD effektív elméletei alapján [1, 2], hogy a *crossover* felváltja egy igazi fázisátalakulás egy kritikus végpontot követően. Ennélfogva az erősen kölcsönható anyag fázisdiagramjának feltérképezése a mai nagyenergiás magfizikának az egyik központi célkitűzése [3].

### Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

A QCD rácstérelméleti megfogalmazásán keresztül lehetséges az erősen kölcsönható anyag fázisdiagramjának vizsgálata, azonban ezt nagy  $\mu_B$  mellett ellehetetleníti az ún. komplex hatás probléma [4]: a Monte-Carlo-szimulációkban a Boltzmann-súlyok tetszőleges komplex értéket felvehetnek, ezáltal nem valósítható meg a fontossági mintavételezés. Több lehetőség ismert az irodalomban a komplex hatás probléma megkerülésére, mint pl. az átsúlyozás [5] vagy az extrapoláció közvetett – tisztán zérus vagy képzetes kémiai potenciálon kapott – eredményekből [6, 7].

A doktori tanulmányaim célja, hogy részt vegyek olyan új módszerek kidolgozásában, melyek segítségével gyengíthető a komplex hatás probléma, és így új lehetőségek adódhatnak a QCD fázisdiagram megismerésére  $\mu_B > 0$  mellett is.

Átsúlyozáskor az eredeti elmélet szimulációja helyett egy olyan elméletet keresünk, ami-  
ben a komplex  $w[U]$  Boltzmann-súlyok helyett megfelelő, valós és pozitív  $r[U]$  súlyok  
szerepelnek ( $U$  a térkonfigurációt jelöli, amire az integrál vonatkozik). Ekkor az eredeti  
elméletben egy  $\mathcal{O}$  operátor termikus várható értéke felírható mint a szimulált elméletben  
vett várható értékek hányadosa:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_w = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}U \mathcal{O}[U] w[U] = \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{O}[U] w[U]}{\int \mathcal{D}U w[U]} = \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{O}[U] \frac{w[U]}{r[U]} r[U]}{\int \mathcal{D}U \frac{w[U]}{r[U]} r[U]} = \frac{\langle \mathcal{O} \frac{w}{r} \rangle_r}{\langle \frac{w}{r} \rangle_r}, \quad (1)$$

ahol  $\mathcal{Z}$  az eredeti elmélet állapotösszege, míg  $\langle \dots \rangle_w$  és  $\langle \dots \rangle_r$  rendre az eredeti és a  
szimulált elméletekben számított várható értékeket jelöli. A várható értékek hányadosá-  
ban a számlálónak és a nevezőnek is gyenge jel-zaj viszonya lehet, ennél fogva a komplex  
hatás probléma az ún. előjelproblémává redukálódott, melynek erőssége az eredeti és a  
szimulált elmélet állapotösszegeinek arányával jellemezhető:

$$\frac{\mathcal{Z}}{\mathcal{Z}_s} = \left\langle \frac{w}{r} \right\rangle_r. \quad (2)$$

Az 1-hez közeli érték arra utal, hogy az eredeti és a szimulált elmélet közel áll egymáshoz,  
és az előjelprobléma gyenge, míg 0-hoz közeli értékek azt mutatják, hogy a két elmélet  
számottevően különbözik egymástól, és az előjelprobléma erős.

A doktori munkám során a rácsélméleti számítások során használt euklideszi pályain-  
tegrálok integrálási sokaságainak komplex kontúrdeformációjának módszerét alkalmazom,  
ami a komplex kontúrdeformációk többdimenziós általánosítása. A módszert már alkal-  
mazták egyszerűbb modellek esetében [8], és az előjelprobléma gyengülésére már találtak  
bizonyítékokat [9]. Célunk a komplex kontúrdeformációkkal olyan elméletek megtalálása,  
melyek közelebb állnak az eredeti elmülethez, azaz jobb jel-zaj viszony érhető el velük a  
várható értékek számításakor. Tegyük fel, hogy egy halmaza a lehetséges integrálási so-  
kaságoknak paraméterezhető valamilyen valós paraméterek véges  $\alpha$  halmazával úgy, hogy  
az eredeti elmélet állapotösszege invariáns marad a deformációkra:

$$\mathcal{Z} = \int_{\mathcal{M}_{\text{def}}} \mathcal{D}U_{\text{def}} w[U_{\text{def}}] = \int_{\mathcal{M}_{\text{def}}} \mathcal{D}X \det \mathcal{J}(X) w[U_{\text{def}}(X)], \quad (3)$$

ahol  $X$  jelöli az  $\mathcal{M}_{\text{def}}$  deformált sokaság valós koordinátáit és  $\det \mathcal{J} = |\partial U_{\text{def}} / \partial X|$  a  
Jacobi-determináns. Azonban mind  $\mathcal{M}_{\text{def}}$ ,  $U_{\text{def}}$  és a szimulált elmélet  $\mathcal{Z}_s^{\text{def}}$  állapotösszege  
is függ  $\alpha$ -tól, így az előjelprobléma erőssége is. Ahhoz, hogy az előjelprobléma a leg-  
gyengébb legyen, olyan  $\alpha$  paramétereket kell választani, melyek minimalizálják a  $\mathcal{Z}_s^{\text{def}}$   
állapotösszeget. Erre gépi tanulási algoritmusok segítségével adott a lehetőség. Ehhez  
ki kell számítanunk a  $\nabla_{\alpha} \log \mathcal{Z}_s^{\text{def}}$  gradienst, mely felírható a kontúrdeformált elméletben  
vett várható értékekkel.

A kutatómunkám első félévében az ún. Stephanov-modellre alkalmaztam a komplex kon-  
túrdeformációk módszerét [10], ami egy királis véletlen mátrix modell. A Stephanov-  
modell több aspektusában hasonlít a QCD-hez: mint pl. az erős előjelprobléma, ami  
egy a QCD-ben is fellépő fermiondeterminánssal analóg kifejezésből ered. A Stephanov-  
modell állapotösszege:

$$\mathcal{Z}^{\text{chRMT}} = e^{N\mu^2} \int dW dW^{\dagger} \det^{N_f} (D + m) e^{-N \text{Tr}(WW^{\dagger})}, \quad (4)$$

ahol  $W, W^\dagger \in \mathbb{C}^{N \times N}$  komplex mátrixok,  $N_f$  a kvarkízek száma,  $\mu$  a kémiai potenciál,  $m$  a kvarktömeg és a Dirac-operátor

$$D = \begin{pmatrix} 0 & iW + \mu \\ iW^\dagger + \mu & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{2N \times 2N}. \quad (5)$$

A pozitív és valós Boltzmann-súlyokkal bíró elméletet definiálhatjuk mint

$$\mathcal{Z}_{\text{PQ}}^{\text{chRMT}} = e^{N\mu^2} \int dW dW^\dagger |\det^{N_f}(D + m)| e^{-N\text{Tr}(WW^\dagger)}, \quad (6)$$

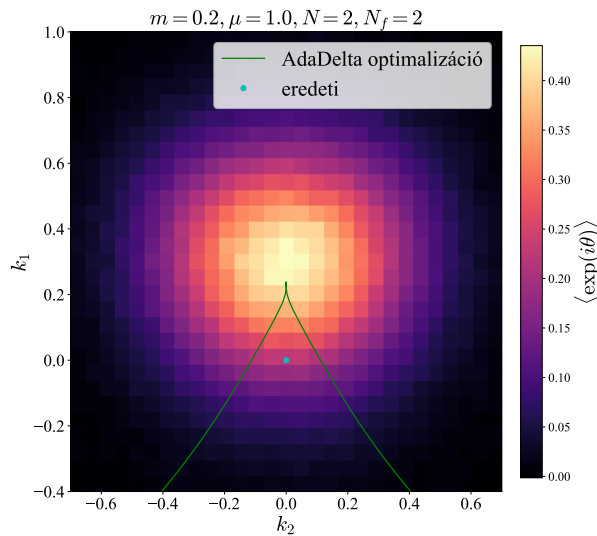
ahol vettük a fermiondetermináns abszolútértékét. A „PQ” (*phase quenched*) index arra utal, hogy a determinánsról levágtuk a komplex fázist, ennél fogva az előjelprobléma erőssége  $\mathcal{Z}^{\text{chRMT}}/\mathcal{Z}_{\text{PQ}}^{\text{chRMT}} \equiv \langle \exp(i\theta) \rangle$ . A  $W, W^\dagger$  változók komplexifikációja az alábbiak szerint történik:

$$\begin{aligned} W = A + iB &\quad \rightarrow \quad X = \alpha + i\beta \\ W^\dagger = A^T - iB^T &\quad \rightarrow \quad Y = \alpha^T - i\beta^T \end{aligned} \quad (7)$$

ahol  $A, B \in \mathbb{R}^{N \times N}$  és  $\alpha, \beta \in \mathbb{C}^{N \times N}$ , illetve  $\alpha, \beta$  mátrixokat az  $A, B$  mátrixok és további valós paraméterek segítségével paraméterezzük majd. A Dirac-operátorból eltüntethető a kémiai potenciál, ha  $A$ -t eltoljuk egy képzetes konstanssal (ez az előjelproblémát nem tünteti el, csak áthelyezi az  $\exp(-N\text{Tr}(WW^\dagger))$  tényezőre), így az *ansatzunk*  $\alpha$ -ra és  $\beta$ -ra legyen

$$\alpha = A + ik_1 \mathbb{1}, \quad \text{és} \quad \beta = B + ik_2 \mathbb{1}, \quad (8)$$

ahol  $k_1, k_2 \in \mathbb{R}$  és  $\det \mathcal{J} = 1$ . Ha pásztázunk a  $k_1$ - $k_2$  paramétersíkon, akkor az 1. ábrán látható hőterképet rajzolhatjuk ki az előjelprobléma erősségére. A fent említett gépi tanulási módszerrel kapott eredmény is szerepel az ábrán, és meg is találja a hőterképen látható optimumot. Látható, hogy egyetlen lényeges paraméter, a  $k_1$  vesz fel nemtriviális értéket.



**1. ábra.** Pásztázás a  $k_1$ - $k_2$  paramétersíkon, illetve a gépi tanulási optimalizáció eredményei (AdaDelta algoritmus).

Hasonlóan egyetlen – egy képzetes konstans eltolást leíró – paraméter marad meg akkor is, ha jóval összetettebb, sokparaméteres *ansatz*-cal dolgozunk. Ezen felül további vizsgálatok is azt mutatják, hogy – ebben a modellben – a legjobb javulást eredményező deformáció a konstans eltolás lesz.

## Publikációk

M. Giordano, A. Pasztor, D. Pesznyak, Z. Tulipant, *Fighting the sign problem in a chiral random matrix model with contour deformations* [arXiv:2301.12947 [hep-lat]].

A cikket beküldtök a *Physical Review D* folyóirathoz.

## Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben

Ebben a félévben az alábbi kurzusokat végeztem el:

- FIZ/2/024E, *Az erősen kölcsönható anyag fázisszerkezete* (jeles), dr. Lévai Péter;
- FIZ/2/083E, *Kvantumszindinamika* (jeles), dr. Trócsányi Zoltán;
- FIZ/2/132, *Asztro-részecskefizika* (jeles), dr. Trócsányi Zoltán és Seller Károly;
- FIZ/3/066E, *Nyitott kvantumrendszerek elméletei* (jeles), dr. Diósi Lajos;
- VTN-099:145, *Brazil jiu-jitsu* (jeles), Váradi Erzsébet Julianna.

## Konferenciák az aktuális félévben

Ebben a félévben az alábbi konferenciákon vettem részt:

- *SIGN22 – Flagship Workshop: 8<sup>th</sup> International Workshop on the Sign Problem in QCD and Beyond*  
2022. szeptember 5.-9., Tel-Aviv, Izrael (45 perces előadás)
- *22<sup>nd</sup> Zimányi School Winter Workshop on Heavy Ion Physics*  
2022. december 5.-9., Budapest, Magyarország (15 perces előadás)

## Oktatási tevékenység az aktuális félévben

Ebben a félévben a *Kvantummechanika A* (elmfiz3af19va) gyakorlatát tartottam (heti  $2 \times 45$  perc). Tárgyfelelős: dr. Katz Sándor.

## Elismerések

A 2022/23-as tanévre elnyertem az Új Nemzeti Kiválóság Program ösztöndíját.

## Hivatkozások

- [1] K. Fukushima, C. Sasaki. *The phase diagram of nuclear and quark matter at high baryon density*. Prog. Part. Nucl. Phys. 72 (2013), 99-154
- [2] P. Kovács, Zs. Szép, Gy. Wolf. *Existence of the critical endpoint in the vector meson extended linear sigma model*. Phys. Rev. D 93 (2016) 11, 114014
- [3] M. A. Stephanov. *QCD Phase diagram and critical point*. Prog. Theor. Phys. Suppl. 153 (2004), 139-156, Int. J. Mod. Phys. A 20 (2005), 4387-4392
- [4] P. de Forcrand. *Simulating QCD at finite density*. PoS LAT2009 (2009) 010
- [5] M. Giordano, K. Kapás, S. D. Katz, D. Nográdi, A. Pásztor. *New approach to lattice QCD at finite density; results for the critical end point on coarse lattices*. JHEP 05 (2020) 088
- [6] C. R. Allton, S. Ejiri, S. J. Hands, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, C. Schmidt, L. Scorzato. *The QCD thermal phase transition in the presence of a small chemical potential*. Phys. Rev. D 66 (2002) 074507
- [7] R. Bellwied, Sz. Borsányi, Z. Fodor, J. N. Guenther, J. Noronha-Hostler, P. Parotto, A. Pásztor, C. Ratti, J. M. Stafford. *Off-diagonal correlators of conserved charges from lattice QCD, and how to relate them to experiment*. Phys. Rev. D 101 (2020) 3, 034506
- [8] A. Alexandru, G. Basar, P. F. Bedaque, N. C. Warrington *Complex paths around the sign problem*. Rev. Mod. Phys. 94 (2022) no.1, 015006
- [9] M. Giordano, K. Kapás, S. D. Katz, A. Pásztor, Z. Tulipánt. *Exponential reduction of the sign problem at finite density in the 2+1D XY model via contour deformations*. [arXiv:2202.07561 [hep-lat]]
- [10] M. A. Stephanov. *Random matrix model of QCD at finite density and the nature of the quenched limit*. Phys. Rev. Lett. 76 (1996), 4472-4475
- [11] G. Aarts, F. Attanasio, B. Jäger and D. Sexty. *The QCD phase diagram in the limit of heavy quarks using complex Langevin dynamics*. JHEP 09 (2016), 087