ヒストグラム法で探る有限密度格子QCDの相構造

中川義之 for WHOT-QCD Collaboration * 新潟大学自然科学研究科

1 序

強い相互作用の基礎理論である QCD は、ハドロン相、クォーク・グルーオン・プラズマ相をはじ めとして非常に豊富な相構造をもっていると考えられている。QCD の第一原理計算である格子 QCD シ ミュレーションは、これまでゼロ密度有限温度系の様々な性質を明らかにしてきた。しかし有限密度格 子 QCD では符号問題やオーバーラップ問題があり、比較的低密度の領域では有効な方法が確立してい るものの [1]、高密度 QCD を探るシミュレーション法は未だに確立していない。本研究では高密度領域 でも適用可能な計算手法の確立を目的とし、ヒストグラム法と再重み付け法 (reweighting method) [2,3]、 さらに複素位相に関するキュムラント展開を用いて有限密度 QCD の数値シミュレーションを行い、有 限密度 QCD の相構造を探る。

2 ヒストグラム法

ヒストグラム法では、まずある演算子 \hat{O} で配位をラベルし、その分布関数(ヒストグラム)w(O) を 求める。そこから有効ポテンシャル $V(O) = -\ln w$ を求め、シミュレーションパラメータを動かすことで、 有効ポテンシャルの形状の変化を調べる。もし転移がクロスオーバーであれば有効ポテンシャルは常に 正の曲率をもつが、1 次相転移をもてば、V(O) は double well 型になって負の曲率をもつことになる。

ここでは時空平均をとったゲージ作用 P、及びゼロ化学ポテンシャルを基準としたクォーク行列式の 絶対値 $F(\mu) = N_{\rm f} \ln |\det M(\mu) / \det M(0)|$ でゲージ配位をラベルすることを考える。すると (ゼロ化学ポテ ンシャルを基準とした) 分配関数は

$$\frac{\mathcal{Z}(\beta,\mu)}{\mathcal{Z}(\beta,0)} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta,0)} \int \mathscr{D}U e^{i\theta(\mu)} |\det M(\mu)|^{N_{\rm f}} e^{6\beta N_{\rm site}P} = \int dP dF \left\langle e^{i\theta(\mu)} \right\rangle_{(P,F)} w_0(P,F;\beta,\mu) \tag{1}$$

と表すことができる。ここで

$$w_0(P',F';\beta,\mu) = \frac{1}{Z(\beta,0)} \int \mathcal{D}U\delta(\hat{P} - P')\delta(\hat{F} - F') |\det M(\mu)|^{N_f} e^{6\beta N_{\rm site}\hat{P}}$$
(2)

はクォーク行列式の複素位相を無視したときの確率分布関数であり、

$$\left\langle e^{i\theta(\mu)} \right\rangle_{(P',F')} = \frac{\int \mathscr{D}U e^{i\theta(\mu)} \delta(\hat{P} - P') \delta(\hat{F} - F') \left| \det M(\mu) \right|^{N_f} e^{6\beta N_{\text{site}}\hat{P}}}{\int \mathscr{D}U \delta(\hat{P} - P') \delta(\hat{F} - F') \left| \det M(\mu) \right|^{N_f} e^{6\beta N_{\text{site}}\hat{P}}} = \frac{\left\langle \left\langle e^{i\theta(\mu)} \delta(\hat{P} - P') \delta(\hat{F} - F') \right\rangle \right\rangle_{(\beta,\mu)}}{\left\langle \left\langle \delta(P - P') \delta(F - F') \right\rangle \right\rangle_{(\beta,\mu)}}$$
(3)

は複素位相を除いたボルツマンの重みで計算した、クォーク行列式の複素位相の期待値である。〈(…)〉 は複素位相を除いたボルツマンの重みで計算した期待値を表す。

分配関数を格子 QCD シミュレーションで正しく評価するためには、式(1)の P と F に関する積分を 正確に評価する必要がある。つまり位相を含んだ確率分布 $w(P,F;\beta,\mu) = \langle e^{i\theta(\mu)} \rangle_{(P,F)} w_0(P,F;\beta,\mu)$ が最大 となる (P,F) で多くの配位を用意する必要がある。しかし複素位相 (3)の P、F 依存性が大きい場合は、 $w \ge w_0$ が最大になる点がズレてしまう。たくさんの配位を生成して w_0 を精密に求めたとしても、複素 位相によって $w \ge w_0$ のピークの位置がズレてしまえば、そうして得られた配位から式(1)の積分を正し く評価することはできない。

^{*}本研究は青木慎也氏 (筑波大)、江尻信司氏 (新潟大)、初田哲男氏 (理研)、金谷和至氏 (筑波大)、大野浩史氏 (Bielefeld 大)、 斎藤華氏 (筑波大)、梅田貴史氏 (広島大) との共同研究である。

このオーバーラップ問題を回避するために我々は複素位相を無視したボルツマンの重みで、様々な シミュレーションパラメータで配位を生成する。そうして得られた配位から再重み付け法を用いて、求 めたい (*T*,*µ*) での分布関数及び複素位相を計算する。再重み付け法を用いると、複素位相は

$$\left\langle e^{i\theta(\mu)} \right\rangle_{(P',F')} = \frac{\left\langle \left\langle e^{i\theta(\mu)} \delta(P-P') \delta(F-F') \left| \frac{\det M(\mu)}{\det M(\mu_0)} \right|^{N_f} \right\rangle \right\rangle_{(\beta_0,\mu_0)}}{\left\langle \left\langle \delta(P-P') \delta(F-F') \left| \frac{\det M(\mu)}{\det M(\mu_0)} \right|^{N_f} \right\rangle \right\rangle_{(\beta_0,\mu_0)}}$$
(4)

で求めることができる。我々は F 及び $C = \left| \frac{\det M(\mu)}{\det M(\mu_0)} \right|$ を

$$F = N_{\rm f} \ln \left| \frac{\det M(\mu)}{\det M(0)} \right| = N_{\rm f} \int_0^{\mu/T} \Re \left[\frac{\partial (\ln \det M(\mu))}{\partial (\mu/T)} \right]_{\bar{\mu}} d\left(\frac{\bar{\mu}}{T}\right)$$
(5)

$$C = N_{\rm f} \ln \left| \frac{\det M(\mu)}{\det M(\mu_0)} \right| = N_{\rm f} \int_{\mu_0/T}^{\mu/T} \Re \left[\frac{\partial (\ln \det M(\mu))}{\partial (\mu/T)} \right]_{\bar{\mu}} d\left(\frac{\bar{\mu}}{T}\right)$$
(6)

で求めるが、これらは積分の下限値が違うだけであり、非常に相関が強い。そこで*C*が*F*の関数として表わせると近似して式(4)を評価する。

3 複素位相に関するキュムラント展開

化学ポテンシャルがゼロから大きくなるとクォーク行列式の位相が激しく揺らぎ、その期待値は統 計誤差の範囲内でゼロになってしまう。ここではこの符号問題を避けるために複素位相の期待値に対し てキュムラント展開を行う:

$$\langle e^{i\theta(\mu)}\rangle_{(P,F,\mu)} = \exp\left[i\langle\theta\rangle_c - \frac{1}{2}\langle\theta^2\rangle_c - \frac{i}{3!}\langle\theta^3\rangle_c + \frac{1}{4!}\langle\theta^4\rangle_c + \cdots\right].$$
(7)

時間反転に対応する $\mu \leftrightarrow -\mu$ の変換の下で、奇数次のキュムラントは符号を反転させる。そのため、対称性から複素位相の期待値は

$$\langle e^{i\theta(\mu)}\rangle_{(P,F,\mu)} = \exp\left[-\frac{1}{2}\left\langle\theta^2\right\rangle_c + \frac{1}{4!}\left\langle\theta^4\right\rangle_c + \cdots\right]$$
(8)

となり、正の実数となる。こうすることで、符号問題はキュムラント展開の収束性の問題に置き換わる。 ここで問題になるのはキュムラント展開の収束性である。展開の収束性が理想的なのは位相がガウ

ス分布するときである。逆にガウス分布から離れると展開の収束性はひどく悪くなると考えられる。例 えば位相 $\theta(\mu) = N_f \Imm[\ln \det M(\mu)]$ の周期性を考えて $-\pi$ から π に制限するように θ を計算してしまうと、 その分布は化学ポテンシャルが大きくなるとガウス分布から大きく離れてしまう。我々に必要なのは位 相がガウス分布に近い分布をするように θ を計算することである。そこでここでは θ の周期性を無視し て $-\infty$ から ∞ の領域で定義し、

$$\theta(\mu) = N_{\rm f} \,\Im\mathfrak{m}\left[\ln\det M(\mu)\right] = N_{\rm f} \,\int_0^{\mu/T} \Im\mathfrak{m}\left[\frac{\partial(\ln\det M(\mu))}{\partial(\mu/T)}\right]_{\bar{\mu}} d\left(\frac{\bar{\mu}}{T}\right) \tag{9}$$

のように ln det $M(\mu)$ の μ 微分を計算してそれを積分することで θ を求める。こうすることで、我々はガウス関数で良く近似される θ の分布を得ることができる [4]。

4 数値シミュレーションの結果

本研究では $8^3 \times 4$ の格子で、岩崎ゲージ作用及び $N_f = 2 \circ O(a)$ 改良されたウィルソンクォーク作用 を用い、K = 0.141139、 $c_{SW} = 1.603830$ で固定した。 $F や \theta を求めるためにランダムノイズ法を用いて ln det <math>M(\mu)$ の 1 階微分、及び 2 階微分を 10 トラジェクトリー毎に計算した。統計数は 2900 である。

我々が知りたいのは、 μ を変えたときの有効ポテンシャル $V(P,F;\beta,\mu) = -\ln w_0(P,F;\beta,\mu) - \langle e^{i\theta(\mu)} \rangle_{(P,F)}$ の曲率である。複素位相のキュムラント展開を2次まで考えると、P、F方向の曲率は

$$\frac{\partial^2 V}{\partial P^2} = \frac{\partial^2 (-\ln w)}{\partial P^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \langle \theta \rangle_c}{\partial P^2}, \quad \frac{\partial^2 V}{\partial F^2} = \frac{\partial^2 (-\ln w)}{\partial F^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \langle \theta \rangle_c}{\partial F^2}, \tag{10}$$

となる。ここで P、F が各シミュレーションポイントでの平均値のまわりにガウス分布すると仮定する と、分布関数の曲率 $\partial^2(-\ln w)/\partial P^2$ 、 $\partial^2(-\ln w)/\partial F^2$ はそれぞれ P、Fの感受率の逆数に等しくなる。

図 1 は μ/T = 3.2, 3.6, 4.0 での *F* 方向の分布関数の曲率を示している。曲率は μ/T が大きくなるとと もに急激に小さくなるのがわかる。一方、*P* 方向の曲率は μ/T が変化してもほとんど変わらなかった。



図 1: µ/T = 3.2, 3.6, 4.0 での F 方向の分布関数の曲率。



図 2: $\mu/T = 3.2, 3.6, 4.0$ での複素位相の 2 次のキュムラント $\frac{1}{2} \langle \theta^2 \rangle_{o}$

図 3 は μ/T = 3.2, 3.6, 4.0 での複素位相の 2 次のキュムラント $\frac{1}{2} \langle \theta^2 \rangle_c$ の等高線を図示している。 $\langle \theta^2 \rangle_c$ は (*P*,*F*) が大きな領域で小さな値をとり、(*P*,*F*) が小さな領域で大きな値をとることがわかる。(*P*,*F*) が 小さな領域をカバーするのは低温相でのシミュレーションで得られた配位であり、逆に (*P*,*F*) が大きな 領域をカバーするのは高温相の配位である。つまり低温相側でクォーク行列式の位相の揺らぎは大きく なる。また、 μ/T が大きくなるにつれ、等高線の間隔が狭くなっているのがわかる。つまり μ/T が大き くなると低温相側での位相の揺らぎが急激に大きくなるのである。

位相を無視したシミュレーション ($N_f = 2$ の場合は有限アイソスピンシミュレーション) で1次相転移をもたなければ、分布関数 – $\ln w_0$ の曲率は常に正である。有限クォーク化学ポテンシャルで1次相転移をもつためには、位相の2次のキュムラントから負の寄与があり、その大きさが – $\ln w_0$ の正の曲率よ



図 3: µ/T = 0.4, 2.4 でのクォーク行列式の位相分布。

りも大きくなる必要がある。図 3 は F 方向の有効ポテンシャルの曲率 $\partial^2 V/\partial F^2$ をプロットしたものである。 μ/T が大きくなるにつれて有効ポテンシャルは小さくなり、 $\mu/T = 4.0$ では曲率が 0 となる領域が現れているのがわかる。これは $\mu/T = 4.0$ で 1 次相転移が起こることを示唆している。

5 まとめ

ここではヒストグラム法を用いた有限密度格子 QCD の 相構造の研究に関する進展を報告した。複素位相について キュムラント展開を用いると、その最低次の次数で有効ポテ ンシャルは分布関数 – $\ln w_0$ と 2次のキュムラント $\langle \theta^2 \rangle_c$ の和 となる。ここでは、 μ/T が大きくなると分布関数の正の曲率 が急激に小さくなることを示した。さらに $\mu/T = 4.0$ で位相 の 2次のキュムラントからくる負の曲率が打ち勝って、有効 ポテンシャルの曲率が負となる領域が現れることを示した。 これは $\mu/T = 4.0$ で 1 次相転移が起こることを示唆している。



References

- [1] S. Ejiri et al. [WHOT-QCD Collaboration], Phys. Rev. D82, 014508 (2010). [arXiv:0909.2121 [hep-lat]].
- [2] S. Ejiri, Phys. Rev. D77, 014508 (2008). [arXiv:0706.3549 [hep-lat]].
- [3] H. Saito et al. [WHOT-QCD Collaboration], Phys. Rev. D84, 054502 (2011). [arXiv:1106.0974 [hep-lat]].
- [4] Y. Nakagawa et al. [WHOT-QCD Collaboration], PoS LATTICE2011 (2011) 208