

有限密度格子QCDにおけるフェルミオン行列の様相

佐々井祐二* 中村 純† 高石哲弥‡

On the Aspects of Fermion Matrix in Lattice QCD at Finite Density

Yuji SASAI, Atsushi NAKAMURA and Tetsuya TAKAISHI

Once the quark chemical potential μ is introduced in Lattice QCD at finite density, the fermion determinant $\det \Delta(\mu)$ appeared in the path integral measure becomes complex. In order to investigate the phase effect of SU(3) lattice QCD, we calculated the fluctuation of the phase of $\det \Delta(\mu)$ on a $8^3 \times 4$ lattice at $\mu a = 0.1, 0.2$ and 0.25 , as functions of $\beta = 2N_c/g^2$ from 5.20 to 5.40 , where a is the lattice spacing. Then we calculated the chiral condensate and Polyakov line in the phase quenched and reweighted cases. There is little difference between these two cases in these range of μa . To examine phase effects more, we study the range of $\mu a = 0.0 \sim 1.4$. We confirmed that the conjugate gradient calculation is possible in the higher density region though it was difficult in the intermediate density region (approximately $\mu a = 0.3 \sim 1.0$). We calculated the chiral condensate, Polyakov line, quark number density and the phase effect as functions of the μa at $\beta = 5.30$. We also investigated eigenvalue distributions of the fermion Matrix.

Key words: Lattice gauge theory, Phase effect, Fermion Matrix

1. Introduction

格子 QCD (Quantum Chromodynamics : 量子色力学) は非摂動領域の情報を得るための強力な手法である。近年は、有限温度に続き、有限密度の数値シミュレーションも活発に行われるようになってきた¹⁾。有限温度・有限密度系では、クォーク・グルーオンプラズマ相とハドロン相との相転移を調べることににより、中性子星や重核子などの高密度の核物質の様相や初期宇宙についての情報を得ることが期待されている。また、実験としてはBNLのRHICやCERNのSPSによる重イオン衝突実験がある。

有限密度においては、バリオン数化学ポテンシャルが導入される。有限密度において先駆的な仕事としては、NakamuraによるTwo-color QCDがあり、これは有限密度におけるSU(2)格子QCDである。有限密度におけるSU(3)格子QCDでは、フェルミオン行列式が複素数となってしまう、符号問題が発生し、ゲージ配位をボルツマンの重みで生成する通常のモンテカルロ法が使用できなくなる。FodorとKacは温度 $T \neq 0$ かつ化学ポテンシャル $\mu \neq 0$ におけるQCDをマルチパラメータ重み再定義法により研究した²⁾。 $\mu = 0$ と $\mu \neq 0$ における2つの測度がオーバーラップしている場合、この方法はうまく機能する。より良いオーバーラップは位相クエンチ測度を用いたシミュレーションにより得られる³⁾。ここで、位相クエンチ測度は位相を除いたものである。従って、 (T, μ)

パラメータ空間において位相の揺らぎの様相を調べることが重要であると考えられる。また、有限密度において、この位相を用いて種々の物理量を計算することが必要である。

そこで、 (T, μ) パラメータ空間、対応する格子上においては $(\beta, \mu a)$ パラメータ空間においてフェルミオン行列やその行列式の位相の特性を研究することが重要になってくる。ここで、 β は結合定数 g の関数 $\beta = 2N_c/g^2$ 、 N_c はカラー自由度、 a は格子間隔である。本稿では、様々な β と μa の値に対する位相の揺らぎと計算可能性、また、フェルミオン行列の固有値分布の様子を報告する。

2. Formulation

熱力学系は分配関数

$$Z = \text{Tr} e^{-\frac{1}{kT}(H - \mu N)} \quad (1)$$

で記述される。ここで、 k はボルツマン定数、 T は温度、 H は系のハミルトニアン、 N はバリオン数密度 $N = \int d^3x \bar{\psi} \gamma_4 \psi$ (ψ はフェルミオン、具体的にはクォーク) を表している。この式を経路積分形式で表し、フェルミオンについて積分すると

$$\begin{aligned} Z &= \int DU D\bar{\psi} D\psi \exp \left[- \int_0^{1/T} d\tau \int d^3x (L + \mu \bar{\psi} \gamma_4 \psi) \right] \\ &= \int DU (\det \Delta(\mu))^{N_f/4} e^{-S_g/kT} \end{aligned} \quad (2)$$

となる。ここで、 N_f はフレーバー数、 S_g はゲージ作用である。また、グルーオン (クォーク) に対応する格子上のリンク (サイト) 変数 $U(\psi)$ に対しては周

* 津山工業高等専門学校 専門学科共通科目

† 広島大学

‡ 広島経済大学

期的(半周期的)境界条件を課している．伝搬関数の考察により連続場の理論では，化学ポテンシャルは $p_4 \rightarrow p_4 - i\mu$ の置き換えにより導入される．格子上では，我々は Kogut-Susskind (KS) フェルミオンを採用している．この場合のフェルミオン行列は

$$\begin{aligned} \Delta(x, x') &= m \delta_{x, x'} + \\ &\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \eta_i(x) \{ U_i(x) \delta_{x', x+i} - U_i^\dagger(x') \delta_{x', x-i} \} + \\ &\frac{1}{2} \eta_4(x) \{ e^{+\mu} U_4(x) \delta_{x', x+4} - e^{-\mu} U_4^\dagger(x') \delta_{x', x-4} \} \end{aligned} \quad (3)$$

ここで

$$\begin{aligned} \eta_\mu(x) &= 1 \ (\mu = 1), \ (-1)^{x_1} \ (\mu = 2) \\ &(-1)^{x_1+x_2} \ (\mu = 3), \ (-1)^{x_1+x_2+x_3} \ (\mu = 4) \end{aligned} \quad (4)$$

である．言い換えると，格子上では化学ポテンシャルはリンク変数 $U_4(x)$ に e^μ を

$$\begin{aligned} U_4(x) &\rightarrow e^\mu U_4(x), \\ U_4^\dagger(x) &\rightarrow e^{-\mu} U_4^\dagger(x) \end{aligned} \quad (5)$$

のように掛けることにより導入される．ここで， $U_\mu(x) = \exp(iaA_\mu(x))$ である．KS フェルミオンに対して，

$$\Delta(\mu)^\dagger = \Gamma_5 \Delta(-\mu) \Gamma_5 \quad (6)$$

が成り立つ．ここで， $\Gamma_5(x, x') = (-1)^{x_1+x_2+x_3+x_4} \delta_{x, x'}$ である．従って，

$$(\det \Delta(\mu))^* = \det \Delta(\mu)^\dagger = \det \Delta(-\mu) \quad (7)$$

の関係が成立するので， $\mu = 0$ であれば， $\det \Delta(\mu)$ は正実数となり数値計算は実行可能であるが， $\mu \neq 0$ であれば， $\det \Delta(\mu)$ は複素数となってしまう．

$$\det \Delta(\mu) = |\det \Delta(\mu)| e^{i\theta} \quad (8)$$

であるから，モンテカルロ計算におけるゲージ場の配位のアップデートの積分測度に位相 $e^{i\theta}$ が入るため，計算は困難となる．また， $\det \Delta(\mu)$ の計算には非常に時間が掛かるので， $\det \Delta(\mu) \rightarrow 1$ と置き換えたクエンチ近似を用いることがある．クエンチ近似は，物理的には真空からクォーク・反クォークの対生成を無視することに対応する．クエンチ近似で良い場合も多いが，化学ポテンシャルが入るような場合には $\det \Delta(\mu)$ を考慮する必要がある．そこで， $|\det \Delta(\mu)|$ のみ考慮に入れ， $e^{i\theta} \rightarrow 1$ と置き換えてゲージ場の配位をアップデートする位相クエンチがある．

モンテカルロシミュレーションにおいて，位相クエンチ測度 $DU |\det \Delta(\mu)|^{N_f/4} e^{-\beta S_g}$ ではあっても，位相 $e^{i\theta}$ を考慮に入れた計算をすることができる． $N_f = 2$

に対して，オペレータ O の期待値は以下のように与えられる

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \frac{1}{Z} \int DU (\det \Delta(\mu))^{1/2} O e^{-\beta S_g} \\ &= \frac{\int DU |\det \Delta|^{1/2} e^{i\theta/2} O e^{-\beta S_g}}{\int DU |\det \Delta|^{1/2} e^{i\theta/2} e^{-\beta S_g}} \\ &= \frac{\int DU |\det \Delta|^{1/2} e^{i\theta/2} O e^{-\beta S_g}}{\int DU |\det \Delta|^{1/2} e^{-\beta S_g}} \\ &= \frac{\int DU |\det \Delta|^{1/2} e^{i\theta/2} e^{-\beta S_g}}{\int DU |\det \Delta|^{1/2} e^{-\beta S_g}} \frac{\langle O e^{i\theta/2} \rangle_0}{\langle e^{i\theta/2} \rangle_0}. \end{aligned} \quad (9)$$

ここで， $\langle \dots \rangle_0$ は位相クエンチ測度による期待値を意味する．また，参考までにオペレータ O の位相クエンチ測度による期待値 $\langle \dots \rangle_0$ とクエンチ測度による期待値 $\langle \dots \rangle_q$ を明白に書くと

$$\langle O \rangle_0 = \frac{\int DU |\det \Delta|^{1/2} O e^{-\beta S_g}}{\int DU |\det \Delta|^{1/2} e^{-\beta S_g}} \quad (10)$$

と

$$\langle O \rangle_q = \frac{\int DU O e^{-\beta S_g}}{\int DU e^{-\beta S_g}} \quad (11)$$

となる．次に，重み再定義された式 (9) の計算式的具体形を吟味する．

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \text{Re} \frac{\langle O e^{i\theta/2} \rangle_0}{\langle e^{i\theta/2} \rangle_0} \\ &= \text{Re} \frac{\langle (\text{Re } O + i \text{Im } O)(\cos(\theta/2) + i \sin(\theta/2)) \rangle_0}{\langle \cos(\theta/2) + i \sin(\theta/2) \rangle_0} \\ &= \text{Re} \frac{\langle (\text{Re } O \cos(\theta/2) - \text{Im } O \sin(\theta/2)) \rangle_0}{\langle \cos(\theta/2) \rangle_0 + i \langle \sin(\theta/2) \rangle_0} \\ &\quad - i \frac{\langle \text{Re } O \sin(\theta/2) + \text{Im } O \cos(\theta/2) \rangle_0}{\langle \cos(\theta/2) \rangle_0 + i \langle \sin(\theta/2) \rangle_0} \\ &\approx \frac{\langle \text{Re } O \cos(\theta/2) \rangle_0 - \langle \text{Im } O \sin(\theta/2) \rangle_0}{\langle \cos(\theta/2) \rangle_0} \end{aligned} \quad (12)$$

ここで， $\sin$ は奇関数であるが，実際， $\langle \sin(\theta/2) \rangle_0$ は誤差の範囲内で 0 となる．また， $\langle \text{Im } O \sin(\theta/2) \rangle_0$ もほとんど 0 に近い値となる．

3. Numerical Investigation

我々は $8^3 \times 4$ 格子上，R-アルゴリズムを用いて，フレーバー数 $N_f = 2$ ，質量 $ma = 0.05$ において数値計算を実行した．計算は主にベクトル型計算機 NEC SX-5 上で行ったが，クエンチと固有値の計算についてはスカラー型計算機 日立 SR-11000 上で行った．位相クエンチのモンテカルロ計算では R-アルゴリズムに従い，また，クエンチの計算は LTK(Lattice Tool Kit) を用いてゲージ配位をアップデートしている．ステップサイズ $\Delta\tau = 0.01$ であり，5000 トラジェクトリ程度の計算を行うが，最初の 1000 回の結果は熱平衡化のため捨てる．また，LU 分解に対して

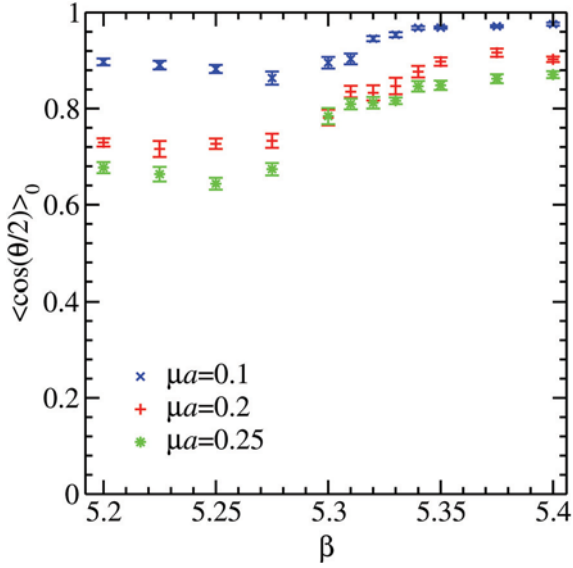


Figure 1. $\langle \cos(\theta/2) \rangle_0$ for $\mu a = 0.1, 0.2$ and 0.25 , as functions of β

は、LAPACK の関数 ZGEEV, 固有値計算にたいしては関数 ZGETRF を用いる。

最初に、フェルミオン行列式の位相 θ を調べたい。そのため、フェルミオン行列式 $\det \Delta(\mu)$ を計算する必要がある。そのため、我々は 2 つの方法: (I) 固有値を求めてから掛け合わせる, (II) LU 分解法により三角行列を求め対角成分を掛ける, を試した。我々が取り扱っているフェルミオン行列 $\Delta(\mu)$ は複素倍精度 6144×6144 次元行列である。NEC SX-5 上においてその行列式の計算時間は、(I) 固有値法では約 8 時間 10 分, (II) LU 分解法では約 15 分となった。そこで、我々は位相計算に対して (II) 固有値法を使うことにした。

10 トラジェクトリ毎に合計 400 個の $\det \Delta(\mu)$ を計算し $\cos(\theta/2)$ の統計平均をとった。図 1 は化学ポテンシャル $\mu a = 0.1, 0.2, 0.25$ のそれぞれの場合についての、 β の値に対する $\langle \cos(\theta/2) \rangle_0$ の揺らぎを示している。フレーバー数 $N_f = 2$ であるので、 $\langle \cos \theta \rangle_0$ でなく、 $\langle \cos(\theta/2) \rangle_0$ を計算している。一見して、小さな β では、 $\cos(\theta/2)$ の揺らぎは大きい。また、化学ポテンシャル μa の増大と共に、揺らぎが大きくなる傾向がある。より、大きな μa に対して、この傾向が続くか興味がある。

カイラル対称性が破れているか否かを吟味するために、カイラル凝縮 $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ を計算する。位相クエンチ (phase quench) の場合は $\langle \bar{\psi} \psi \rangle_0$ を計算するために、各トラジェクトリ毎、合計 4000 個の $\text{Re} \bar{\psi} \psi$ を計算し統計平均をとった。次に、 $\det \Delta(\mu)$ の位相 θ を用いて、重み再定義 (reweighted) の結果を得ることがで

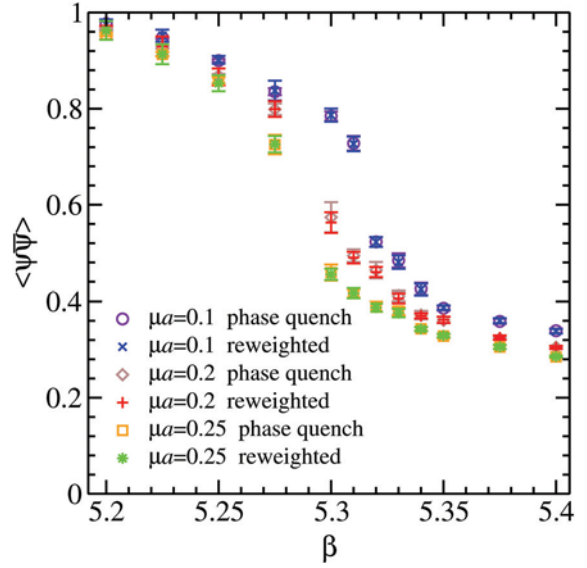


Figure 2. Phase quench and reweighted chiral condensates $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ for $\mu a = 0.1, 0.2$ and 0.25 , as functions of β

きる。この場合は位相の統計数の関係から、式 (13) に従い、10 トラジェクトリ毎に合計 400 回の統計平均をとっている。

$$\langle \bar{\psi} \psi \rangle = \frac{\langle \text{Re} \bar{\psi} \psi \cos(\theta/2) \rangle_0 - \langle \text{Im} \bar{\psi} \psi \sin(\theta/2) \rangle_0}{\langle \cos(\theta/2) \rangle_0} \quad (13)$$

$$\approx \frac{\langle \text{Re} \bar{\psi} \psi \cos(\theta/2) \rangle_0}{\langle \cos(\theta/2) \rangle_0} \quad (14)$$

図 2 から、 $\beta \approx 5.3$ 近傍が 1 次の相転移点 β_c であり、 $\beta > \beta_c$ では、カイラル対称性が回復していると考えられる。また図 2 から、重み再定義の印は位相クエンチの印とエラーバーの範囲で重なって、位相の効果が見られない。ここで、位相クエンチの結果は Kogut と Sinclair により報告された μ 特性と一致している⁴⁾。 $\langle \sin(\theta/2) \rangle_0 \approx 0$ であるから、位相の平均値は式 (14) の中で、因数分解され約分されているように見える⁵⁾。

図 3 は位相クエンチの場合と重み再定義の場合のポリヤコフ線の結果である。この 2 つの場合のマークは殆ど重なっている。もっと大きな μa に対して、位相効果が現れるか否か興味がある。我々の方法では、クォークの伝搬関数を求めるための共役勾配法の計算は $\beta = 5.20$ に対しては $\mu a > 0.27$ において収束しなくなる。つまり、我々は μa 方向の相転移点 μ_{ca} 以下でシミュレーションを実行している。もし、 $\mu a \geq \mu_{ca}$ でシミュレーションが実行できるならば、位相効果の解明につながると期待される。

我々は $(\beta, \mu a)$ 模式図 4 の化学ポテンシャル $\mu a = 0.0 \sim 0.3$ の付近で、縦方向の矢印の向き $\beta = 5.2 \sim$

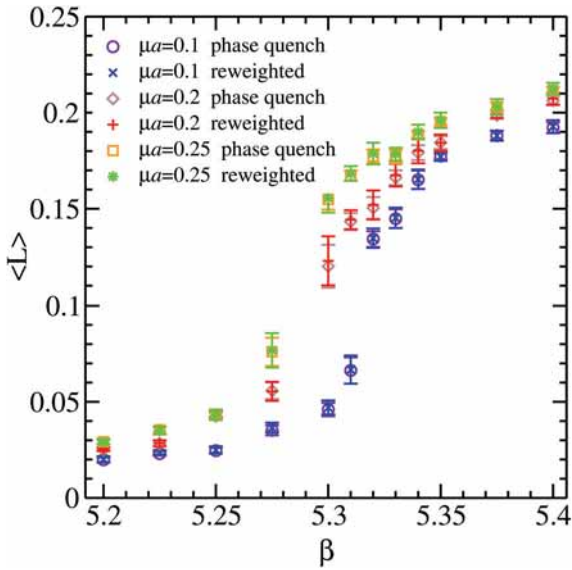


Figure 3. Phase quench and reweighted Polyakov lines $\langle \text{Re } L \rangle$ for $\mu a = 0.1, 0.2$ and 0.25 , as functions of β

5.4 の範囲で系の位相効果を調べてきた。しかし、 $\mu_c a$ に近づくにつれ、共役勾配法の計算が収束しなくなった。打開策を探るため、現実的ではない密度領域の μa まで図 4 の横方向の矢印の向き $\beta = 5.3$, $\mu a = 0.0 \sim 1.4$ の範囲で、準備的な計算を行った。図 4 において、○印は計算可能であった $(\beta, \mu a)$ 点、×印は共役勾配法の計算が途中で止まってしまった $(\beta, \mu a)$ 点を意味する。中密度領域 $0.3 < \mu a < 0.8$ では計算できなかったが、高密度領域の $\mu a \geq 0.8$ では計算可能になったことが分かった。我々の計算ではパイオンの質量は $m = 457 \text{ MeV}$ ($ma = 0.57$) であるので、計算はパイオンの質量付近の密度領域で困難になるようである。つまり、パイオン凝縮が共役勾配法の計算可能性に関係していることが考えられる。高密度領域ではカイラル対称性は回復しており、短時間に共役勾配法の計算は収束する。また、 $\mu a = 1.4$ において、徐々に β の値を下げて計算したが、カラー超伝導相 (CSC 相) 突入の兆候は見られなかった。

準備計算として行っているため、図 5 は統計数が少ないが、位相の揺らぎの傾向はつかめる。 μa の増加と共に、揺らぎが増加を続けるわけではなく、 $\cos(\theta/2)$ の値は 0.6 より下らない。図 6 は一端計算できなくなる中密度領域を抜けて、高密度領域ではカイラル対称性が回復することを示している。また、図 7 は、 μa の増加と共に、ポリヤコフ線が閉じ込め相を示す 0 から非閉じ込め相を示す非 0 の値へ推移していく、しかし、計算できない中密度領域を抜けて高密度領域に入ると、再度、ポリヤコフ線の値は下がってくる。

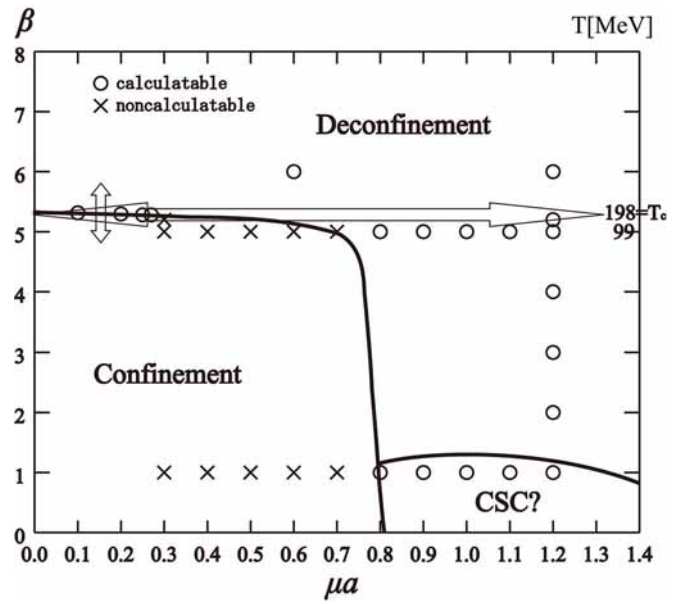


Figure 4. Schematic phase diagram of QCD in the $(\beta, \mu a)$ plane

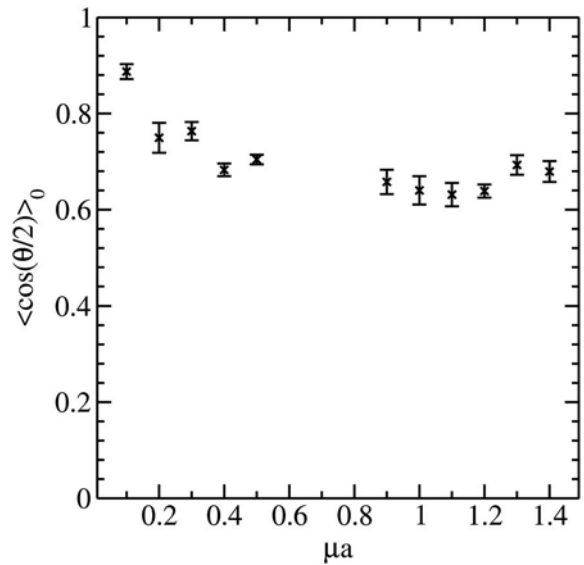


Figure 5. $\langle \cos(\theta/2) \rangle_0$ for $\beta = 5.30$, as functions of μa

一見して、高密度領域は閉じ込め相であるように見えるが、これは物理的直感に反する。格子サイズが有限であるがために、この領域ではクォークの自由エネルギーが無限大となり、ポリヤコフ線が 0 の値に近づいてくると考えられる。つまり、空間を 8^3 個、時間を 4 個に区切るにより構成されている格子の有限サイズ効果が原因である。ここで、図 6、図 7 と

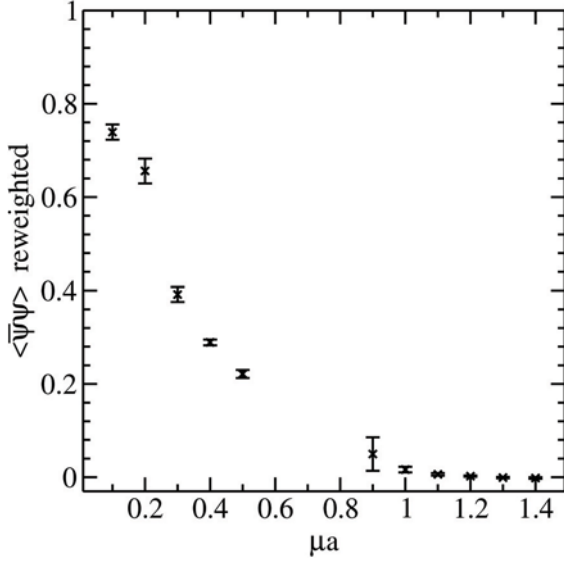


Figure 6. Reweighted chiral condensates $\langle \bar{\psi}\psi \rangle$ for $\beta = 5.30$, as functions of μa

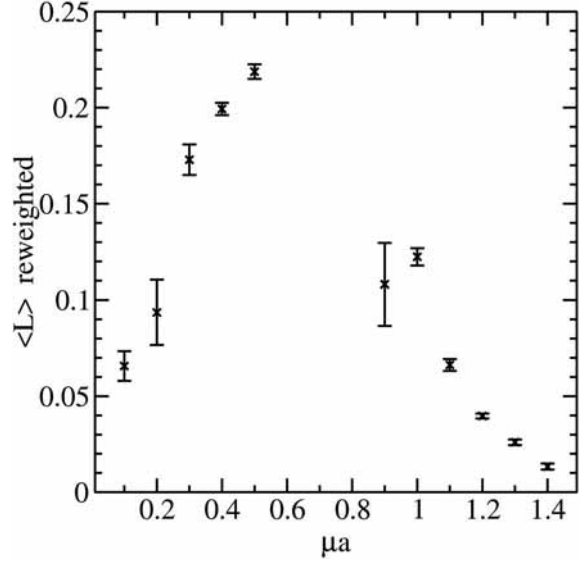


Figure 7. Reweighted Polyakov lines $\langle L \rangle$ for $\beta = 5.30$, as functions of μa

も、重み再定義の結果を示している。高密度領域であっても、重み再定義の結果と位相クエンチの結果には差が見られなかった。

図 8 にクォーク数密度 n の計算結果を示している。 μa の増大と共に、クォーク数密度 n の値は 3 に近づいていく。これはカラーの自由度 3 による規格化を施していないためである。Harsenfratz と Toussaint による 4^4 格子における計算結果と定性的に一致している⁶⁾。また、実線は自由クォークの場合の計算結果である。低密度領域では相互作用がある場合のクォーク数密度と良く一致しているが、値が 3 に近づくのはより高密度状態になってからである。また、中間密度領域 $\mu a = 0.5 \sim 0.9$ の範囲における計算例は、計算の困難性のために統計数はかなり少ない。図より、パイオンの質量 $m = 457\text{MeV}$ ($ma = 0.57$) 付近の密度領域から、計算が困難となるのが分かる。

図 9 に化学ポテンシャル $\mu a = 0.0 \sim 1.4$ の範囲で計算した KS フェルミオン行列の固有値分布のうち、 $\mu a = 0.0, 0.2, 0.5, 1.0$ の 4 つの結果を示す⁷⁾。ただし、これらは 1 つのゲージ配位に対しての固有値分布であり、統計平均を施したものではない。なお、図の横軸は複素固有値空間の実数成分、縦軸は虚数成分である。 $\mu a = 0.0$ の場合はクエンチの場合と同じであり、クォーク質量 $ma = 0.05$ に対応して実数成分が 0.05 の位置に固有値は分布する。 $\mu a = 0.2$ の場合は有限密度に対応し、固有値分布は実数成分 0.05 を中心として、実軸方向に分布が広がっていき、虚数成分 0.0 の部分の位置の密度分布が薄くなっていく。さらに、共役勾配法による計算が困難になってい

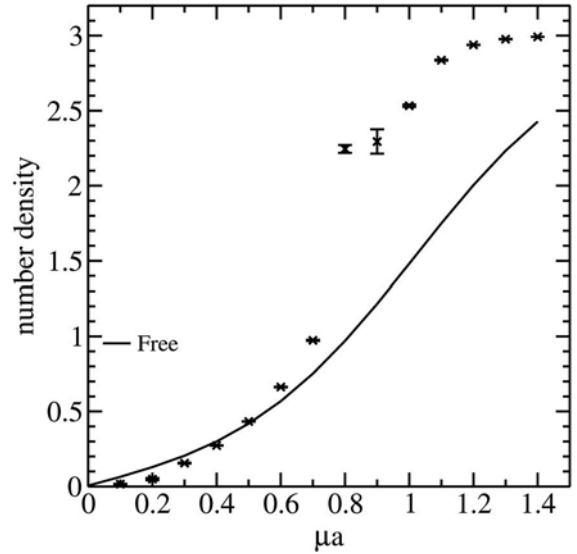


Figure 8. Quark Number Density n for $\beta = 5.30$, as functions of μa

く $\mu a = 0.5$ からは、原点上の固有値、つまり 0 固有値が発生してくる。この場合 $\det \Delta(\mu)$ は 0 となるので、クォーク伝搬関数を求めるための共役勾配法の計算が止まってしまう。計算できない中密度領域を抜けて、高密度領域 $\mu a = 1.0$ の場合は、実軸方向に固有値分布は大きく広がった穴を持ち、0 固有値は発生せず、計算の収束も高速になる。

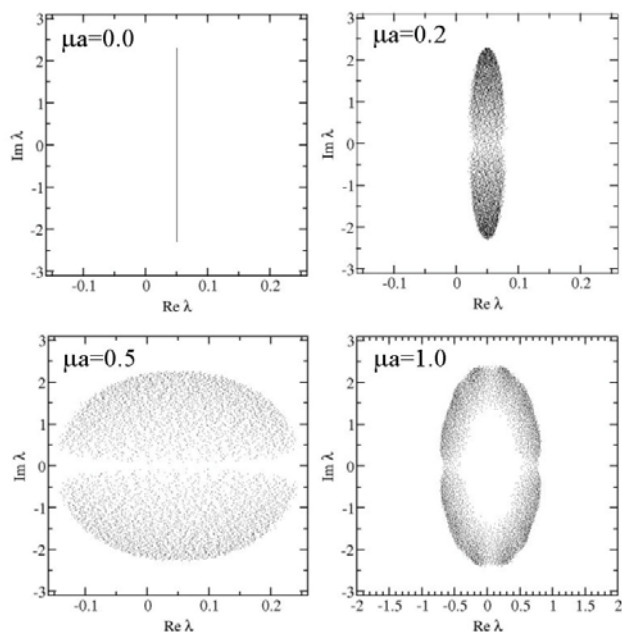


Figure 9. Eigenvalue distributions of KS fermion Matrix for $\mu a = 0.0, 0.2, 0.5$ and 1.0 at $\beta = 5.30$

4. Summary

我々は $8^3 \times 4$ 格子上で、化学ポテンシャル $\mu a = 0.1, 0.2, 0.25$ の場合についてフェルミオン行列式 $\det \Delta(\mu)$ の位相の揺らぎを調べた。 μ の増大につれて、位相の揺らぎも大きくなることが分かった。カイラル凝縮 $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ とポリヤコフ線 $\langle L \rangle$ を位相クエンチの場合と重み再定義の場合について計算したが、2つの場合の差は見られなかった。つまり、位相効果を発見することができなかった。

より大きな μa の場合の位相効果の有無に興味があるが、共役勾配法による計算の収束の関係で計算ができない。そこで、準備計算として、 $\beta = 5.3$, $\mu a = 0.0 \sim 1.4$ の範囲で計算可能性を調べた。

中密度領域ではパイオン質量付近で計算が困難になり、固有値分布の解析から、0 固有値が発生している場合に対応することが分かった。高密度領域では再度、計算が可能になるが、ここでも位相効果を発見することはできなかった。

現在は、スカラー型計算機日立 SR-11000 上で並列計算により、1つの固有値の計算時間が22分程度と大幅に短縮されている。SR-11000 上で1つの μa あたり、500個の固有値を計算しており、統計平均をとったヒストグラム表示も可能となっている。また、ゲージ場中のクォークの満足する Dirac 方程式の固有値分布を解析する理論としてランダム行列理論がある⁸⁾。今後は固有値空間の様相の解析に加えてランダム行列理論との比較を試みたい。

Acknowledgments

本数値計算は大阪大学核物理研究センター (RCNP) のベクトル型計算機 NEC SX-5 と広島大学情報メディア教育研究センターのスカラー型計算機 日立 SR-11000 によりなされました。ここに深謝いたします。

REFERENCES

- 1) S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka and T. Takaishi, hep-lat/030631 (2003).
- 2) Z. Fodor and S.D. Katz, JHEP 0203 (2002) 014; hep-lat/0106002.
- 3) Ph. de Forcrand, S. Kim, T. Takaishi, Nucl. Phys. B(Proc. Suppl.) 119 (2003) 538; hep-lat/0209126.
- 4) J.B. Kogut and D.K. Sinclair, Phys. Rev. D66, 034505 (2002); hep-lat/029054.
- 5) Y. Sasai, A. Nakamura and T. Takaishi, Nucl. Phys. (Proc. Suppl.) 129-130C (2004) 539; hep-lat/0310046.
- 6) A. Harsenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys. B371 (1992), 539.
- 7) A. Nakamura, Y. Sasai, T. Takaishi, AMERICAN INSTITUTE of PHYSICS CONFERENCE PROCEEDINGS 756, 416 (2005).
- 8) G. Akemann and T. Wettig, Phys. Rev. Lett. 92, 102002 (2004); hep-lat/0308003.