

# 非専門家向けの格子 QCD 入門

## —数値シミュレーションを中心として—

筑波大学 数理物質科学研究科<sup>1</sup>  
青木 慎也

### Abstract

素核宇宙融合レクチャーシリーズの第2回としては、素粒子分野の大規模シミュレーションである時空格子上の量子色力学（格子 QCD）の基礎のその応用例を紹介する。

## 1 はじめに：宇宙、原子核、素粒子

はじめに、宇宙、原子核、素粒子の各分野で使われる「理論形式」を簡単にまとめておこう。

宇宙物理学で使われるのものは、ニュートン力学（ニュートン重力）、一般相対性理論、電磁気学、流体力学など、主に古典物理学である。詳しい内容に関しては、レクチャーシリーズの他の回に譲る。一方、ミクロな現象を扱う原子核物理では、主に量子力学を用いる。例えば、陽子や中性子等の核子の多体系は、核力により相互作用するポテンシャルを持ったシュレディンガー方程式により記述される。原子核理論の場合は多体系であっても粒子の数は変わらない場合を考えることが多いので、粒子の量子力学を使うことが可能であるが、素粒子物理学の場合は、粒子の生成消滅が伴う現象が主であるため、粒子の量子力学ではなく、「場」の量子力学である場の量子論を用いて研究が進められる。現在の素粒子の標準理論は、核力などの強い相互作用を記述する量子色力学、電磁相互作用を記述する量子電磁力学、さらに、 $\beta$ 崩壊などを引き起こす弱い相互作用と電磁相互作用を統一した Weinberg-Salam 理論など、いずれも場の量子論を基礎としている。よりミクロな世界では量子効果がさらに強くなり、宇宙規模では正しかったニュートン力学や一般相対性理論などの古典重力理論も変更され、量子重力理論になると考えられているが、現在までのところ、矛盾の無い量子重力理論の定式化には成功しておらず、素粒子物理学に残された未解決問題の1つとなっている。

<sup>1</sup>現所属：京都大学基礎物理学研究所

古典力学ではニュートン方程式やアインシュタイン方程式などの微分方程式が使われる。例えば、 $N$  粒子系の古典力学のハミルトニアンは、

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2(t)}{2m_i} + \sum_{i \neq j} V(\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_j(t)) \quad (1)$$

と与えられる。ここで、 $\mathbf{x}_i(t)$ 、 $m_i$  は粒子  $i$  の座標と質量であり、その運動量は  $\mathbf{p}_i(t) = m_i \dot{\mathbf{x}}_i(t)$  である。また、 $V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$  は粒子  $i, j$  間のポテンシャルである。この系では、

$$\dot{\mathbf{x}}_i(t) = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i(t)}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i(t) = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_i(t)} \quad (2)$$

というハミルトンの正準方程式 (微分方程式) を適当な初期条件の元で解けば、系の運動、つまり、時間  $t$  の関数としての  $\mathbf{x}_i(t)$ 、が求まる。

原子核理論でよく使われる量子力学は、古典力学のハミルトニアンを量子化することで得られる。量子化は、座標  $\mathbf{x}_i$  と運動量  $\mathbf{p}_i$  を演算子と考え、その交換関係を  $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] \equiv \hat{x}_j \hat{p}_k - \hat{p}_k \hat{x}_j = i\hbar \delta_{jk}$  と与えることで行う。(ここで、 $j, k$  などの添字は粒子の種類と座標の  $x, y, z$  成分の両方をまとめて表すので、 $N$  粒子系では  $3N$  の自由度になる。) 座標演算子を通常の座標として表した場合 (座標表示) では、この交換関係を満たす運動量演算子は  $\hat{p}_j = \hbar \frac{\partial}{i \partial x_j}$  という偏微分演算子で与えられる。この場合、ハミルトニアンは

$$H = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}_i^2} + \sum_{i \neq j} V(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad (3)$$

となり、これを用いた微分方程式であるシュレディンガー方程式

$$H\psi(\{\mathbf{x}_i\}) = E\psi(\{\mathbf{x}_i\}) \quad (4)$$

を解くことで、例えば  $N$  粒子系 (原子核であれば  $N$  核子系) の固有エネルギー (原子核の場合は原子核の質量) が求められる。

素粒子物理学では、場の量子論が理論的枠組みとして用いられている。(相対論的) 場の量子論は、20世紀の物理学の二大革命であった相対性理論と量子力学を融合させたものであり、(非可算) 無限自由度の量子力学と等価である。多粒子系の量子力学との対応は

$$x_i(t) \leftrightarrow \psi(\mathbf{x}, t), \quad [\psi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{y}, t)] = i\hbar \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (5)$$

となる。ここでは、自由度  $i$  が非可算無限の自由度である座標  $\mathbf{x}$  に対応している訳で、空間の各点で定義される場  $\psi(\mathbf{x})$  の量子力学なので、場の量子論と呼ばれている。 $\pi(\mathbf{y})$  は運動量  $p_j$  に対応する「場の運動量」である。離散変数  $i$  が連続変数  $\mathbf{x}$  になったので、クロネッカーのデルタ  $\delta_{ij}$  の代わりに、3次元のディラックのデルタ関数  $\delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{y})$  が現れる。

## 1.1 経路積分による量子化

前章で紹介したのは、正準量子化と呼ばれるものであるが、座標や運動量が交換しない演算子となるので取り扱いが難しい。そこで、正準量子化と等価で、より直感的な方法である、ファイマンによる経路積分を用いた量子化を紹介しよう。

まず、1粒子の量子化を考える。粒子が、時刻  $t_1$  に  $\mathbf{X}_1$  から出発し時刻  $t_2$  で  $\mathbf{X}_2$  に到着する量子力学的な（確率）振幅（振幅の2乗が確率密度になる）は、

$$\langle \mathbf{X}_2, t_2 | \mathbf{X}_1, t_1 \rangle = \sum_{\substack{\text{すべての経路} \\ \{\mathbf{X}(t) | \mathbf{X}(t_1) = \mathbf{X}_1, \mathbf{X}(t_2) = \mathbf{X}_2\}}} e^{iS[\mathbf{X}(t)]/\hbar} \quad (6)$$

で与えられるとするのが、経路積分による量子化の方法である。この式の  $S$  は古典力学に現れる作用（汎）関数で、ラグランジアン  $L$  の時間積分として

$$S[\mathbf{X}(t)] = \int_{t_1}^{t_2} dt L[\mathbf{X}(t), \dot{\mathbf{X}}(t)] \quad (7)$$

と計算される。ポテンシャル  $V$  の中で運動する粒子の場合、

$$L[\mathbf{X}(t), \dot{\mathbf{X}}(t)] = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{X}}(t)^2 - V[\mathbf{X}(t)] \quad (8)$$

となる。ここで、 $\dot{\mathbf{X}}(t)$  は  $\mathbf{X}(t)$  の時間微分であり、第1項は粒子の運動エネルギーに相当する。さて、経路積分の”意味”を考えよう。古典力学では、粒子が時刻  $t_1$  に  $\mathbf{X}_1$  から出発し時刻  $t_2$  で  $\mathbf{X}_2$  に到達する経路はただ一つしかない。量子力学では、粒子は全ての経路を通る事が可能であると考へ、その経路の（確率）振幅に  $e^{iS/\hbar}$  という重みを与える。全ての経路を通る事が可能なので、その振幅を量子力学の原理に従ってすべて足し挙げたのが、上に与えた経路積分の式である。ここで、プランク定数をゼロにする古典極限 ( $\hbar \rightarrow 0$ ) を考えよう。この極限では、 $e^{iS/\hbar}$  が激しく振動するので、いろいろな経路の寄与を足し合わせるとほとんどゼロになってしまう。ゼロでない寄与を与える経路は、作用  $S$  の値を変化させない、つまり、 $S$  の最小値（正確には極小値  $\delta S = 0$ ）を与える経路であり、最小作用の原理から、この経路は古典的な運動  $\mathbf{X}_c(t)$  と一致する。したがって、確かにこの極限で古典力学が再現される。（図1を参照して欲しい。）このように、経路積分による量子化は、古典力学との対応が明確で、量子化に対する直感的、物理的な理解を与える。

## 1.2 場の量子論の経路積分

さて、場の量子論を経路積分を使って量子化しよう。簡単な場の理論の例として（ユークリッド空間での）スカラー場の理論を考えよう。量子力

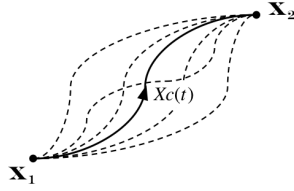


図 1:  $\mathbf{X}_1$  から  $\mathbf{X}_2$  に至るいろいろな経路。  $\mathbf{X}_c(t)$  は古典力学で許される経路である。

学の確率振幅に対応するのが、スカラー場の演算子  $\hat{\varphi}(x)$  の時間順序積を取った  $n$  点関数であるが、経路積分を使うと以下のように表される。

$$\langle 0|T\{\hat{\varphi}(x_1)\hat{\varphi}(x_2)\cdots\hat{\varphi}(x_n)\}|0\rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\varphi \varphi(x_1)\varphi(x_2)\cdots\varphi(x_n)e^{-S(\varphi)} \quad (9)$$

ここで、 $Z = \int \mathcal{D}\varphi e^{-S(\varphi)}$  であり、 $x_i = (\mathbf{x}_i, t_i)$  は 4次元時空間の座標である。左辺の  $\hat{\varphi}(x)$  は (量子力学的な) 演算子であるが、一方、右辺の  $\varphi(x)$  はただの関数である。粒子の場合は全ての経路  $\mathbf{X}(t)$  に関しての和 (経路積分) を取っていたが、場の理論の場合は、すべての可能な場の配位  $\varphi(x)$  に関しての和を取るのが経路積分になる。これから先に進むためには、右辺の経路積分の表式を計算することが必要になる。

まず、相互作用が無い自由場の場合で計算しよう。この時、作用  $S$  は、 $S = \frac{1}{2} \int d^4x d^4y \varphi(x) D(x, y) \varphi(y) = \frac{1}{2} \varphi \cdot D \cdot \varphi$  で与えられる。2番目は簡略化した記号法であり、 $x, y$  などの座標を行列やベクトルの足、その積分を和、などを考えると、積分で定義される作用  $S$  は、ベクトル  $\times$  行列  $\times$  ベクトルの 2次形式と見なすことができる。スカラー場の場合は、 $D(x, y) = (-\partial_\mu \partial^\mu + m^2)_x \delta^{(4)}(x - y)$  となる。この時、生成汎関数は

$$Z(J) = \int \mathcal{D}\varphi e^{-\frac{1}{2}\varphi \cdot D \cdot \varphi + J \cdot \varphi} = (\det D)^{-1/2} e^{J \cdot D^{-1} \cdot J} \quad (10)$$

と、ガウス積分を一般化したものとして計算される。 $N$ 変数  $x_i (i = 1, 2, \dots, N)$  のガウス積分が (定数倍を除いて)

$$\int d^N x \exp \left[ -\frac{1}{2} \sum_{i,j} x_i D_{ij} x_j + \sum_i J_i x_i \right] = (\det D)^{1/2} \exp \left[ \sum_{i,j} J_i [D^{-1}]_{ij} J_j \right]$$

と計算できる事を思い出して欲しい。

自由場の場合、任意の (偶数の)  $n$  点関数は 2点関数の組み合わせで計算される。そこで (連結な) 2点関数を考えると、

$$\langle \varphi(x)\varphi(y) \rangle_c \equiv \left. \frac{\partial^2}{\partial J(x)\partial J(y)} \log Z(J) \right|_{J=0}$$

$$= D^{-1}(x, y) = \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \frac{e^{ik(x-y)}}{k^2 + m^2} \quad (11)$$

と計算される。この2点関数はスカラー場の伝搬関数と呼ばれる。ここでは、ユークリッド空間での場の理論を考えているので、運動量空間での伝搬関数の分母は  $k_0^2 + \mathbf{k}^2 + m^2$  であるが、 $k_0 = iE$  とミンコフスキー空間に解析接続すると、運動量空間での伝搬関数の極が粒子の分散関係  $E^2 = \mathbf{k}^2 + m^2$  を与えることが分かる。

さて、次に相互作用がある場合を考えよう。ポテンシャルとして  $V(x) = \lambda\phi(x)^4$  を考えると、結合定数  $\lambda$  が小さい時は

$$\begin{aligned} Z_\lambda(J) &= \int \mathcal{D}\varphi e^{-\frac{1}{2}\varphi \cdot D\varphi + J \cdot \varphi - \int d^4x V(x)} \\ &= \int \mathcal{D}\varphi e^{-\frac{1}{2}\varphi \cdot D\varphi + J \cdot \varphi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^k}{k!} \left\{ \int d^4x \varphi(x)^4 \right\}^k \end{aligned} \quad (12)$$

と  $\lambda$  に関する展開（摂動展開）を用いて計算が出来る。例として、2点関数を摂動展開で考えてみよう。図2は、摂動展開の低次の項に対応する図（ファイマン図と呼ばれている）の一部である。左から右に  $k = 1, 2, 3$  と次数が増えていく。ここで、線で書かれているのが相互作用が無い場合の2点関数（伝搬関数）であり、式(11)で与えられる。

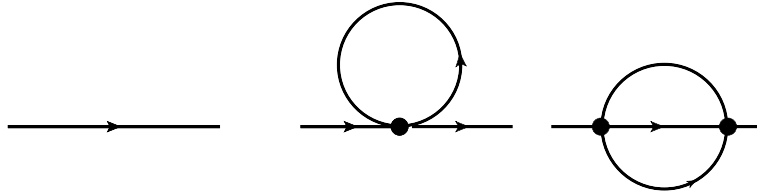


図2: スカラー場の2点関数の摂動展開のファイマン図の例。左から、0次、1次、2次と摂動の次数が増える。直線は相互作用が無い場合の2点関数で、黒丸が4点相互作用を表す。1次、2次には他のファイマン図も存在するので、各自、考えて見て欲しい。

それでは相互作用が強くて摂動展開が適用できない場合はどうすれば良いだろうか？その目的のために提案されたのが格子上の場の理論である。いよいよ、次の章では格子上の場の理論を紹介する。

## 2 格子上の場の理論

### 2.1 量子色力学 (QCD)

格子上の場の理論が最も威力を発揮するのは量子色力学 (QCD) である。ここでは、格子理論を解説する前に、QCD を簡単に紹介しよう。

QCD のラグランジアンは

$$L = \sum_f \bar{\psi}_f (\gamma^\mu D_\mu - m_f) \psi_f - \frac{1}{2} \text{Tr} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (13)$$

と与えられる。ここで、 $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ig[A_\mu, A_\nu]$  は場の強さと呼ばれる量で、電磁気学の電場や磁場に対応しており、 $A_\mu$  が 4 元ベクトル・ポテンシャルに相当する。 $D_\mu = \partial_\mu - igA_\mu$  は共変微分である。ゲージ場は群  $SU(3)$  の生成子  $T^a$  を用いて  $A_\mu = \sum_{a=1}^8 A_\mu^a T_a$  と与えられるが、一方、クォーク場は  $\psi_f^A$  であり、 $A = 1, 2, 3$  はカラー、 $f = u, d, s, c, b, t$  はクォークのフレーバー (種類) を表す。ゲージ変換は

$$\psi \rightarrow U\psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}U^\dagger \quad (14)$$

$$A_\mu \rightarrow UA_\mu U^\dagger + \frac{1}{ig} \partial_\mu U \cdot U^\dagger \quad (15)$$

で与えられる。ここで、 $U(x) \in SU(3)$  はゲージ変換関数である。この変換の元で  $D_\mu$  や  $F_{\mu\nu}$  は

$$D_\mu \rightarrow UD_\mu U^\dagger, \quad F_{\mu\nu} \rightarrow UF_{\mu\nu} U^\dagger \quad (16)$$

と変換する。この性質を使うと、ゲージ変換に対して QCD のラグランジアンが不変であることが示せる。

QCD の相互作用はゲージ不変性からその強さがクォークの種類に依らない。これをゲージ相互作用の普遍性という。また、QCD では、高エネルギー (近距離) になればなるほど、相互作用の強さが弱くなる。この性質は漸近的自由性と呼ばれている。一方、低エネルギー (遠距離) ではそれとは逆に相互作用がどんどん強くなり、この性質が「クォークの閉じ込め」という現象を説明すると考えられている。クォークの閉じ込めとは、ゲージ不変なメソンやバリオンなどは観測されるが、単独のクォークはゲージ不変でないので粒子として観測されない、という性質である。では、このような性質を持つ QCD を使って、どのように物理量を計算すれば良いのであろうか? これから、格子上の場の理論を考えていく中でそのことを説明していこう。

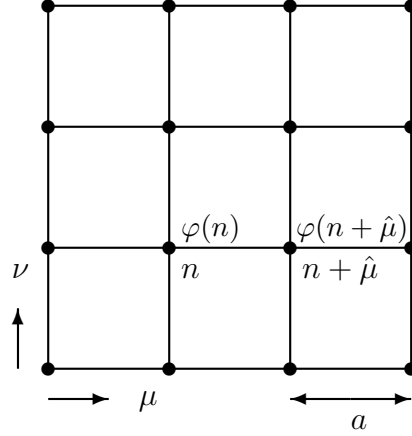


図 3: (2次元) 格子の模式図。  $a$  は格子間隔である。

## 2.2 格子上のスカラー場の理論

まず、肩ならしとして、スカラー場の理論を格子上で考えることにしよう。4点相互作用をするスカラー場の作用は連続な時空間では、

$$S = \int d^4x \left[ \frac{1}{2} \partial_\mu \varphi \partial^\mu \varphi + \frac{m^2}{2} \varphi^2 + \frac{\lambda^4}{4!} \varphi^4 \right] (x) \quad (17)$$

で与えられる。さて、連続時空を離散的にした格子時空を考えよう (図3は2次元格子時空の模式図である。)。整数のベクトル  $n = (n_1, n_2, n_3, n_4)$  を用いると格子点は  $x = na$  と表される。ここで、 $a$  は格子点の間の距離であり、格子間隔と呼ばれる。格子点  $na$  でのスカラー場は  $\varphi(na)$  で与えられるが、その点でのスカラー場の微分は、対称差分を用いて、

$$\partial_\mu \varphi(x) \rightarrow \frac{1}{2a} [\varphi((n + \hat{\mu})a) - \varphi((n - \hat{\mu})a)] \quad (18)$$

と近似される。ここで、 $\hat{\mu}$  は  $\mu$  方向の単位ベクトルである。右辺を  $x = na$  でテイラー展開すれば、左辺  $+O(a^2)$  なので確かに近似になっている。これらの置き換えを使うと、格子空間での作用は

$$S_{\text{lat}} = a^4 \sum_n \left[ -\frac{1}{2} \varphi(na) \sum_\mu \frac{\varphi(na + \hat{\mu}a) + \varphi(na - \hat{\mu}a) - 2\varphi(na)}{a^2} + \frac{m^2}{2} \varphi(na)^2 + \frac{\lambda^4}{4!} \varphi(na)^4 \right] \quad (19)$$

で与えられる。ここで、無次元化した場  $\varphi_L(n) \equiv a\varphi(na)$  や無次元化した質量  $M \equiv ma$  を用いて作用を書き換えると、

$$S_{\text{lat}} = \sum_n \left[ -\frac{1}{2} \varphi_L(n) \sum_{\mu} \{ \varphi_L(n + \hat{\mu}) + \varphi_L(n - \hat{\mu}) - 2\varphi_L(n) \} + \frac{M^2}{2} \varphi_L(n)^2 + \frac{\lambda^4}{4!} \varphi_L(n)^4 \right] \quad (20)$$

となり、格子間隔  $a$  が作用にまったく現れず、すべて無次元の量で書ける。この作用を使って、経路積分を表すと、

$$Z = \int \prod_n d\varphi(n) \exp \left[ \sum_{n,\mu} \varphi(n) \varphi(n + \hat{\mu}) - \sum_n V(\varphi(n)) \right] \quad (21)$$

$$V(\varphi(n)) = \frac{M^2 + 2d}{2} \varphi(n)^2 + \frac{\lambda^4}{4!} \varphi(n)^4 \quad (22)$$

となる。ここで、無次元の場に付いていた添字  $L$  は省略した。指数関数の肩の第1項目は、イジング模型などの統計力学系に現れる hopping term に対応するもので、隣の格子点の場との”揃いやすさ”を決めている。再定義した場  $\varphi_H(n) = \sqrt{M^2 + 2d} \varphi(n)$  を用いると、経路積分は

$$Z^H = \int \prod_n d\varphi_H(n) \exp \left[ \sum_{n,\mu} K \varphi_H(n) \varphi_H(n + \hat{\mu}) - \sum_n V^H(\varphi_H(n)) \right] \quad (23)$$

$$V^H(\varphi(n)) = \frac{1}{2} \varphi_H(n)^2 + \frac{\lambda_H^4}{4!} \varphi_H(n)^4 \quad (24)$$

$$K = \frac{1}{M^2 + 2d}, \quad Z(J) = K^{\#V/2} Z^H(J), \quad \lambda_H = \lambda K^2, \quad (25)$$

と書き換えられる。ここで、 $\#V$  は格子点の総数である。 $K$  が小さい（つまり質量が重い）と隣との”相互作用”が小さくなり、情報が伝搬しにくくなる。これは、質量が重いと粒子が動きにくいことを表している。質量が無限に重い ( $M \rightarrow \infty$ ) とき、 $K = 0$  となるので、上記の経路積分は、

$$Z_H(J) = \left[ \int d\varphi \exp[-V^H(\varphi)] \right]^{\#V} \quad (26)$$

と簡単に実行できる。質量が有限だが大きい場合は、 $K$  の冪展開により計算することが可能であり、これは統計力学系の高温展開に対応している。例えば、2点相関関数  $\langle \varphi_H(n_1) \varphi_H(n_2) \rangle$  の高温展開による計算を考えよう。図4のように  $n_1$  と  $n_2$  を結ぶ経路を考え、その（無次元の）長さを  $L$  とすると、その寄与は（経路に交わりがなければ）

$$\langle \varphi_H(n_1) \varphi_H(n_2) \rangle = K^L (\langle \varphi^2 \rangle_{V_0^H})^L, \quad (27)$$

$$\langle \varphi^2 \rangle_{V_0^H} = \frac{\int d\varphi \varphi^2 e^{-V_0^H(\varphi)}}{\int d\varphi e^{-V_0^H(\varphi)}} \quad (28)$$



となる。最終結果は全ての可能な経路に関する重ね合わせになるが、 $K$  が小さければ最短距離の経路 ( $L = |n_1 - n_2|$ ) が最大の寄与を与える。

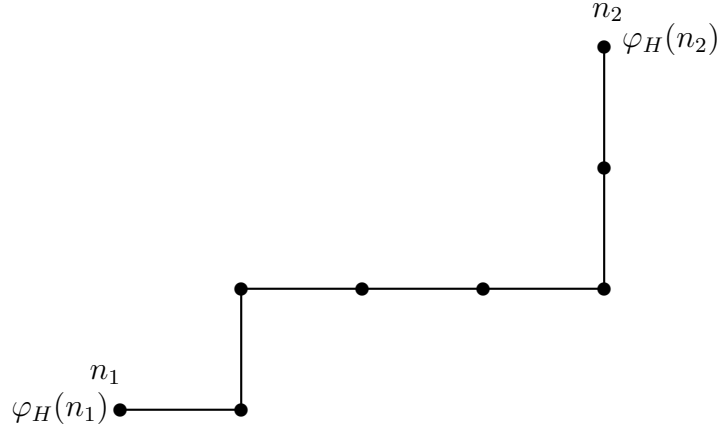


図 4: 2点関数に対する  $K$  の冪展開の最低次の寄与を与える経路の例。

さて、格子作用 (19) に戻ろう。ここで、格子間隔  $a$  が小さいとして展開すると

$$S_{\text{lat}} = a^4 \sum_n \left[ -\frac{1}{2} \sum_{\mu} \varphi(na) \partial_{\mu}^2 \varphi(na) + \frac{m}{2} \varphi(na)^2 + \frac{\lambda}{4!} \varphi(na)^4 + O(a^2) \right]$$

と  $O(a^2)$  の違いを除いて連続極限の作用と一致する。 $O(a^2)$  の誤差は対称 2 階差分と 2 階微分の違いから、

$$\begin{aligned} \nabla_{\mu}^2 \varphi(na) &\equiv \frac{\varphi(na + \hat{\mu}a) + \varphi(na - \hat{\mu}a) - 2\varphi(na)}{a^2} \\ &= \partial_{\mu}^2 \varphi + a^2 \frac{2}{4!} \partial_{\mu}^4 \varphi + O(a^4) \end{aligned}$$

となるので、対称 2 階差分の部分に 4 階差分の項を加えれば、

$$\nabla_{\mu}^2 \varphi - a^2 \frac{2}{4!} \nabla_{\mu}^4 \varphi = \partial_{\mu}^2 \varphi + O(a^4) \quad (29)$$

と、連続極限からのずれが  $O(a^4)$  となる。作用にこの差分を用いることを (古典的な) 作用の改良と呼ぶ。ただし、4 階差分は

$$a^4 \nabla_{\mu}^4 \varphi(n) = \varphi(n + 2\hat{\mu}) - 4\varphi(n + \hat{\mu}) + 6\varphi(n) - 4\varphi(n - \hat{\mu}) + \varphi(n - 2\hat{\mu})$$

なので、hopping term の構造が複雑になってしまう。

## 2.3 格子上のゲージ理論

さて、いよいよ格子上のゲージ理論を考えよう。前に述べたように、連続時空での、QCD などのゲージ不変な理論のラグランジアン密度は

$$L = \sum_{\mu} \bar{\psi} \gamma_{\mu} (\partial_{\mu} + ig A_{\mu}) \psi + \sum_{\mu \neq \nu} \frac{1}{2} \text{Tr} F_{\mu\nu}^2 \quad (30)$$

で与えられる。ここで問題になるのは、微分を差分化した時に現れる  $\bar{\psi}(x)\psi(x+\Delta x)$  のような項をどのようにゲージ不変にするかである。連続理論の場合は、

$$\underbrace{\bar{\psi}(x) P \exp \left[ ig \int_x^{x+\Delta x} A_{\mu}(y) dy^{\mu} \right]}_{\equiv U(x, x+\Delta x)} \psi(x + \Delta x) \quad (31)$$

と  $x$  と  $x + \Delta x$  を結んだゲージ不変量を定義できる。ここで、経路順序積 (path-ordered product)  $P$  は

$$P \exp \left[ ig \int_x^{x+\Delta x} A_{\mu}(y) dy^{\mu} \right] = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=0}^{N-1} [1 + ig A_{\mu}(x + n\delta x) \delta x^{\mu}],$$

$$\delta x = \frac{\Delta x}{N}$$

と定義される。ゲージ変換  $\Omega(x) \in \text{SU}(3)$  に対して、ゲージ場が

$$A_{\mu}(x) \rightarrow \frac{\Omega(x) \partial_{\mu} \Omega^{\dagger}(x)}{ig} + \Omega(x) A_{\mu}(x) \Omega^{\dagger}(x) \quad (32)$$

と変換するので、式 (31) で定義される  $U(x, x + \Delta x)$  は

$$U(x, x + \Delta x) \rightarrow \Omega(x) U(x, x + \Delta x) \Omega^{\dagger}(x + \Delta x) \quad (33)$$

と変換する。この性質とフェルミオンの変換性

$$\psi(x) \rightarrow \Omega(x) \psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}(x) \Omega^{\dagger}(x) \quad (34)$$

から、(31) がゲージ不変であることが分かる。

この連続理論の考察をヒントに、格子点  $n$  から  $+\mu$  方向へ延びる辺 (リンク) の上にリンク変数

$$U_{n,\mu} = \exp [iag A_{\mu}(n)] \in \text{SU}(3) \quad (35)$$

を導入する。逆向きのリンクにはそのエルミート共役を置く。つまり、

$$U_{n+\hat{\mu},-\mu} = U_{n,\mu}^{\dagger} \quad (36)$$

である。ゲージ変換に対してリンク変数は

$$U_{n,\mu} \rightarrow U_{n,\mu}^g = g_n U_{n,\mu} g_{n+\hat{\mu}}^\dagger \quad (37)$$

と変換する。ここで、ゲージ変換関数  $g_n \in \text{SU}(3)$  は各格子点  $n$  上で定義されている。

格子点  $n$  と  $m$  を結ぶ経路上のリンク変数の積を考えよう。ゲージ変換によって

$$\prod_n^m U \equiv U_{n,\mu_1} U_{n+\hat{\mu}_1,\mu_2} \cdots U_{m-\hat{\mu}_k,\mu_k} \rightarrow g_n \prod_n^m U g_m^\dagger \quad (38)$$

と変換するから、 $n$  から始まる閉じた経路  $C_n$  に対しては

$$\prod_{C_n} U \rightarrow g_n \prod_{C_n} U g_n^\dagger \quad (39)$$

と変換する。したがって、トレースを取った量  $\text{Tr} \prod_{C_n} U$  はゲージ不変である。

ゲージ場の作用は当然ゲージ不変であるべきなので、一般的に

$$S_G = \sum_{C \in \text{closed loop}} \sum_n \beta_C \text{Tr} \prod_{C_n} U \quad (40)$$

と書けるはずである。ここで、 $C$  に関する和は閉じた経路（ループ）の異なる形に関する和であり、 $\beta_C$  は対応した結合定数である。以下では、最も簡単な正方形のループ（プラケットと呼ぶ）に対する作用

$$S_G = \beta \sum_{n,\mu \neq \nu} \text{Tr} \overbrace{U_{n,\mu} U_{n+\hat{\mu},\nu} U_{n+\hat{\nu},\mu}^\dagger U_{n,\nu}^\dagger}^{U_{\mu\nu}(n)} \quad (41)$$

を考える。これをプラケット作用と呼ぶ。(図5)

さて、このプラケット作用が  $a \rightarrow 0$  の極限でゲージ場の作用になっていることを見てみよう。 $U_{n,\mu} = e^{iagA_\mu(n)}$  と置き、ハウズドルフの公式  $e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\cdots}$  を用いると、

$$\begin{aligned} \text{Tr} U_{\mu\nu}(n) &= \text{Tr} \exp \left[ iag \left\{ A_\mu(n) + A_\nu(n + \hat{\mu}) + i\frac{ag}{2} [A_\mu, A_\nu] + \cdots \right\} \right] \\ &\times \exp \left[ iag \left\{ A_\mu(n + \hat{\nu}) + A_\nu(n) - i\frac{ag}{2} [A_\mu, A_\nu] + \cdots \right\} \right] \\ &= \text{Tr} \exp \left[ ia^2 g F_{\mu\nu} + \cdots \right] \\ &= \text{Tr} \left[ 1 - \frac{a^4 g^2}{2} F_{\mu\nu}^2 + \cdots \right] \end{aligned} \quad (42)$$

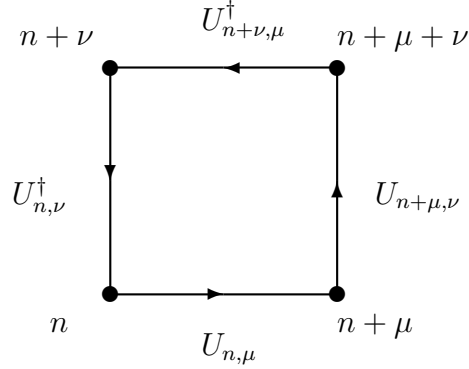


図 5: プラケット作用。

となる。ここで、 $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig[A_\mu, A_\nu]$  である。したがって、

$$\lim_{a \rightarrow 0} S_G = \beta \sum_{\mu, \nu} \text{Tr} \left[ 1 - \frac{a^4 g^2}{2} F_{\mu\nu} \right] \quad (43)$$

となるので、 $\beta = 1/g^2$  と取れば、(定数部分を除いて) 連続理論のゲージ場の作用と一致している。

この作用を用いた経路積分の表式は

$$Z = \int \prod_{n, \mu} dU_{n, \mu} \exp \left[ \frac{1}{g^2} \sum_{n, \mu \neq \nu} \text{Tr} U_{\mu\nu}(n) \right] \quad (44)$$

となるが、ここでリンク積分の測度  $dU$  は群  $SU(3)$  上の不変測度であり、

$$d(VU) = d(UV) = dU \quad (45)$$

が任意の  $SU(3)$  の元  $V$  に対して成り立つ。この不変測度は Haar measure と呼ばれている。ゲージ作用と積分測度の両方がゲージ不変であるので、分配関数  $Z$  もゲージ不変である。また、 $SU(3)$  はコンパクト群なのでその積分も有限であり、したがって有限体積の格子空間で  $Z$  は有限な量であり発散はしない。

$Z$  のゲージ不変性から、「ゲージ不変でない (局所的な) 演算子の期待値は常にゼロである」というエリツァーの定理が成り立つ。したがって、物理量は、ゲージ不変量であり、ループ上のリンク変数の積のトレースの関数になっている。

## 2.4 格子フェルミオン

QCDにはゲージ場であるグルーオンだけでなく、フェルミオンであるクォーク場も必要である。まず、スカラー場と同様に格子点上にフェルミオン場を置くことにする。連続理論でのゲージ不変なフェルミオン場の作用は

$$S_F = \int d^4x \bar{\psi}(x)(\gamma_\mu D_\mu + m)\psi(x) \quad (46)$$

となるので、微分を対称差分で置き換えて、ゲージ不変性を考慮すると、格子フェルミオンの作用は、

$$S_F = a^4 \sum_n \bar{\psi}_n \left[ \sum_\mu \gamma_\mu \frac{U_{n,\mu}\psi_{n+\hat{\mu}} - U_{n-\hat{\mu},\mu}^\dagger \psi_{n-\hat{\mu}}}{2a} + m\psi_n \right] \quad (47)$$

で与えられる。これで見えよさそうであるが、実は以下のような問題がある。双1次形式で書かれるフェルミオン作用  $S = \bar{\psi} \cdot D \cdot \psi$  を考える。 $D$ のゼロ点は伝搬関数の極になるので、“粒子”に対応する。相互作用なし、ゼロ質量の場合を、運動量空間での考えると、連続理論の場合は、 $D = i\gamma_\mu p^\mu$  となるのでゼロ点は  $\forall p^\mu = 0$  の1つだけだが、単純な対称差分を使った格子フェルミオンの場合は、 $D = i\gamma_\mu \sin(p^\mu a)/a$  なので、ゼロ点は、 $p^\mu = 0, \pi/a$  に対応して複数個ある。4次元では、 $2^4 = 16$  個のゼロ点がある。つまり、格子フェルミオン場は16個の粒子を記述しているわけで、余分な15個をダブラー、このように1つのフェルミオン場が複数の粒子を含んでしまう問題をダブリング問題と言う。

ダブリング問題を解決するためにいろいろな試みが行われたが結局、完璧な解決方法は見つからず、逆に以下の定理が示された。

ニールセン・二宮の定理 格子フェルミオン作用が、双1次形式であり、平行移動不変性、カイラル対称性、局所性、エルミート性を満たしていると、必ずダブリング問題が存在する。

この定理の証明は割愛するが、ここでは1次元の場合に、ボソンとフェルミオンの違いを使って、ダブリング問題を直感的に説明しよう。ボソンの場合、連続理論で  $D(p) = cp^2$  である。格子理論は周期的な運動量空間による正則化と考えると、2次関数なので、途中で余分なゼロを通らずに連続な周期関数 ( $D(p + 2\pi/a) = D(p)$ ) に拡張できる (図6)。一方、フェルミオンの場合は  $D(p) = cp$  なので、周期的に拡張すると、 $D(p)$  の連続性から、同一視される2つのゼロ点  $p = 0, 2\pi/a$  の間に必ず余分なゼロ点  $p_0$  が必要になり、これが格子フェルミオンにダブラーが現れる理由である (図7)。

ニールセン・二宮の定理の仮定の中で、特にカイラル対称性は重要である。ゼロクォーク質量のQCDが持つカイラル対称性は、相互作用によつ

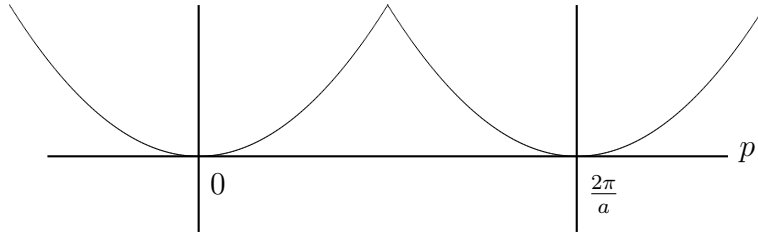


図 6: ボソンの場合の周期的な拡張。

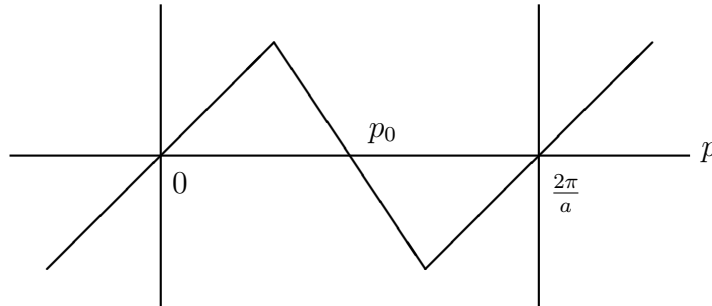


図 7: フェルミオンの場合の周期的な拡張。連続性から余分なゼロ点  $p_0$  が現れる。

て自発的に破れると期待されており、対称性が破れた時に現れるゼロ質量の南部・ゴールドストーン粒子が  $\pi$  中間子と考えられている。実際はクォークは質量  $m$  を持つので、 $\pi$  中間子の質量は  $m_\pi^2 = Am$  となる。これが  $\pi$  中間子が、強い相互作用のスケール程度の質量を持つ他のハドロンに比べて軽いことの原因と考えられている。

定理の仮定のどれかを破ればダブラーの無い格子フェルミオンが作れる。その代表的な例を紹介する。単純な格子作用にウィルソン項と呼ばれる以下の項を加える。

$$S_W = -ar \int d^4x \bar{\psi} D^2 \psi = -\frac{r}{2a} \sum_{n,\mu} \bar{\psi}_n [U_{n,\mu} \psi_{n+\hat{\mu}} + U_{n-\hat{\mu},\mu}^\dagger \psi_{n-\hat{\mu}} - 2\psi_n]$$

この項は  $O(a)$  なので、 $a \rightarrow 0$  を考えれば、古典的にはその寄与は消えて

しまう。自由場の場合を考えると

$$D(p) = i\gamma_\mu \frac{\sin(p^\mu a)}{a} + m + \underbrace{\frac{r}{a} \sum_\mu (1 - \cos(p^\mu a))}_{=M(p)} \quad (48)$$

となる。この時、物理的な粒子 ( $\forall p^\mu = 0$ ) に対しては  $M(p) = m$  であるが、ダブラーに対しては  $M(p) = m + 2\frac{r}{a} \times (\pi/a \text{ の数})$  となるので、 $a \rightarrow 0$  でその質量は発散して無限に重くなる。つまり、 $a \rightarrow 0$  の極限 (連続極限) では、ダブラーは粒子としては現れない。ウィルソン項を加えた格子フェルミオン作用はウィルソン・フェルミオン作用と呼ばれ、ダブラーの問題を解決している。しかしながら、ウィルソン項がカイラル対称性を破ってしまうので、 $m = 0$  でもカイラル対称性を持たない。(したがって、ダブラーがなくても、ニールセン・二宮の定理とは矛盾しない。) この事は、ウィルソン・フェルミオンを使った QCD でカイラル対称性の自発的破れの議論をすることを難しくしている。

ウィルソンフェルミオン作用は、実際のシミュレーションで良く使われている。無次元化して、さらに少し書き直すと

$$S_F = \sum_n \left[ \bar{\psi}_n \psi_n - K \sum_\mu \left\{ \bar{\psi}_n U_{n,\mu}(r - \gamma_\mu) \psi_{n+\hat{\mu}} + \bar{\psi}_{n+\hat{\mu}} U_{n,\mu}^\dagger(r + \gamma_\mu) \psi_n \right\} \right]$$

となる。ここで、 $K = 1/(2M + 8r)$  は hopping parameter であり、ボソンの場合と同じようにクォーク質量が重い時は  $K$  展開 (ホッピングパラメータ展開) が出来る。 $n$  から  $n + \hat{\mu}$  にはクォークが飛び、その寄与は  $KU_{n,\mu}$  になり、 $n + \hat{\mu}$  から  $n$  には反クォークが飛び、その寄与は  $KU_{n,\mu}^\dagger$  となる。

## 2.5 ”カイラル”対称性をもつフェルミオン

ここでは、最近の発展である、”カイラル”対称性を持つ格子フェルミオンを紹介しよう。格子フェルミオン作用を一般に

$$S = \bar{\psi} \cdot D \cdot \psi \quad (49)$$

と書く。ここで、スカラー場の場合と同様に、積分などは省略した記法を使っている。この作用に対して、カイラル対称性は

$$D\gamma_5 + D\gamma_5 = 0 \quad (50)$$

と表現される。つまり、フェルミオン演算子  $D$  は  $\gamma_5$  と反可換であれば良い。もちろん、ニールセン・二宮の定理から、ダブリング無しではカイラル対称性を持たせる事は出来ないはずである。そこで、格子フェルミオン

演算子  $D$  に対して、ギンスバーグ・ウィルソン (GW) 関係式と呼ばれる以下の関係式を要請する。

$$D\gamma_5 + D\gamma_5 = aD\gamma_5D \quad (51)$$

この式は、格子フェルミオン演算子のカイラル対称性の破れは  $O(a)$  であることを意味しているが、この関係式に両辺から  $D^{-1}$  を掛けると、

$$\gamma_5 D^{-1}(x, y) + D^{-1}(x, y)\gamma_5 = a\gamma_5\delta_{x, y} \quad (52)$$

となる。つまり、フェルミオンの伝搬関数  $D^{-1}$  に対してのカイラル対称性の破れは  $O(a)$  でかつ局所的 ( $\delta_{x, y}$ ) である。さて、この場合に無限小”カイラル”変換を

$$\delta\psi = \gamma_5 \left(1 - \frac{aD}{2}\right) \psi, \quad \delta\bar{\psi} = \bar{\psi} \left(1 - \frac{aD}{2}\right) \gamma_5 \quad (53)$$

と定義すれば、作用は

$$\delta S = \bar{\psi} (D\gamma_5 + \gamma_5 D - aD\gamma_5 D) \psi = 0 \quad (54)$$

と、この変換に対して不変になる。したがって、GW 関係式を満たす格子フェルミオン演算子  $D$  があれば、それを使ってダブリングが無くかつ格子上で変形されたカイラル対称性を持つ格子フェルミオンが構成できる。

GW 関係式を満たす格子フェルミオン演算子として、以下で与えられるオーバーラップ演算子がある。

$$D = \frac{1}{a} (1 - \text{sgn}(A)), \quad \text{sgn}(A) \equiv \frac{A}{\sqrt{A^\dagger A}}, \quad A \equiv D_W(-M) \quad (55)$$

ここで、 $D_W(-M)$  はウィルソン・フェルミオン演算子で、質量  $M = ma$  を負にしたものである。連続極限でも  $M = ma \neq 0$  にするので、 $D_W(-M)$  は無限に重い負の質量を持つフェルミオン演算子である。 $\text{sgn}(A)$  は演算子  $A$  に対する符号関数である。この奇妙な演算子は GW 関係式を満たし、かつ、ダブリングが無い演算子である。この演算子を使って構成されたフェルミオンはオーバーラップ・フェルミオンと呼ばれている。

オーバーラップ・フェルミオンは格子上の”カイラル”対称性のおかげで、連続理論とほぼ同じ性質を持つため、格子 QCD の計算では現在最も優れた格子フェルミオンである。しかしながら、符号関数  $\text{sgn}(A)$  の計算に時間が掛かるため、ウィルソン・フェルミオンに比べて 10–100 倍の計算コストが必要である。また、符号関数の定義に逆演算子が入っているので、格子間隔単位で見ると局所的にはなっていないが、物理的なスケールでは局所的であると考えられている。2012年の春の時点では、日本の研究グループである JLQCD (Japan Lattice QCD) Collaboration がオーバーラップ・フェルミオンを使った計算を組織的に押し進めている。



## 2.6 ゲージ理論の観測量と強結合展開

ゲージ理論の観測量はゲージ不変なもの、つまり閉じたループ（の関数）に限られる。その代表的な例として、 $L \times T$  の長方形の閉じたループ上のリンク変数の積  $W(C = L \times T) = \text{Tr} \prod_C U$  を考えよう。この量はウィルソンループと呼ばれている（図 8）。非常に重いクォーク反クォーク対を生成し、瞬時に  $L$  だけ引き離す。重いので、空間的に同じ場所に留まり、時間だけが振興していく。時間  $T$  の後で、クォーク反クォーク対を瞬時に対消滅させる。この仮定をホッピングパラメタ展開で考えると、クォークや反クォークが通った後にリンク変数が残るので、ウィルソンループが出来る。

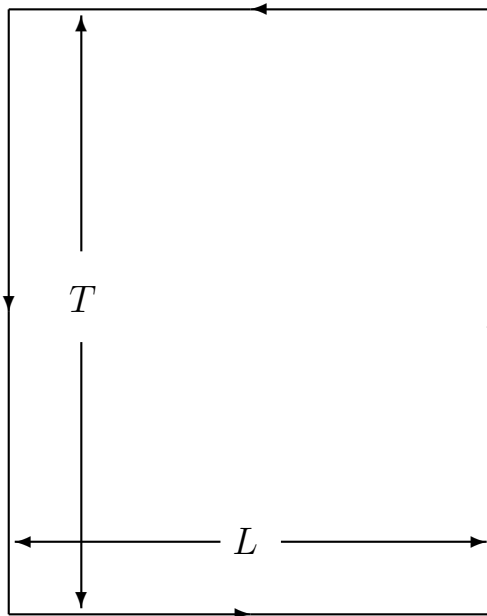


図 8: ウィルソン・ループ。

ウィルソンループの期待値 ( $U$  での経路積分) は、クォーク反クォーク間の静的ポテンシャル  $V(L)$  と  $T \rightarrow \infty$  の極限で、

$$\langle W(C) \rangle \rightarrow \exp[-TV(L)] \quad (56)$$

という関係にある。つまり、ウィルソンループの期待値を計算できれば、 $V(L)$  を求めることができるわけだ。  $\langle W(C) \rangle \rightarrow \exp[-cLT]$  と振る舞う場合を面積則と呼び、ポテンシャルは  $V(L) = cL$  となる。このクォーク反クォーク間の距離に比例したポテンシャル・エネルギーのため、クォークを引き離すことが難しく、「クォークの閉じ込め」を意味している。一方、

周辺則  $\langle W(C) \rangle \rightarrow \exp[-c'(L+T)]$  の場合は  $V(L) = c'$  なので、クォーク対を引き離すのは容易で、非閉じ込めを意味する。

さて、静的ポテンシャルを強結合展開という方法で計算しよう。群  $SU(N)$  上の積分は、

$$\int dU = 1, \quad \int dU U_{ab} = 0, \quad \int dU U_{ab} U_{kl}^\dagger = \frac{1}{N} \delta_{al} \delta_{bk} \quad (57)$$

を満たす。2番目の式はゲージ場  $U$  がランダムであることを表している。 $g^2$  が大きいときに、

$$\begin{aligned} \exp \left[ \frac{1}{g^2} \sum_{n, \mu \neq \nu} \text{Tr} U_{\mu\nu}(n) \right] &= \prod_{n, \mu \neq \nu} \exp \left[ \frac{1}{g^2} \text{Tr} U_{\mu\nu}(n) \right] \\ &= \prod_{n, \mu \neq \nu} \left[ 1 + \frac{1}{g^2} \text{Tr} U_{\mu\nu}(n) + \dots \right] \end{aligned}$$

と  $1/g^2$  で展開するのが強結合展開である。これをウィルソンループに適用する。

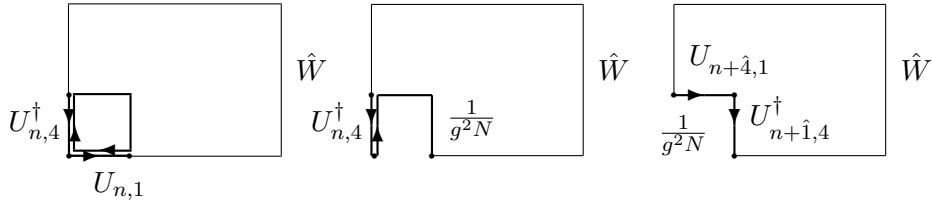


図 9: 強結合展開によるウィルソン・ループの変形。

$$W(C) = \text{Tr} U_{n,1} \overbrace{U_{n+1,1} \cdots U_{n+4,4}}^{\hat{W}} U_{n,4}^\dagger \quad (58)$$

と取る。ブラケットを 1 つ掛けて  $U_{n,1}$  の積分を実行すると、

$$\begin{aligned} &\frac{1}{g^2} \int dU_{n,1} dU_{n,4} \text{Tr} U_{n,4} U_{n+4,1} U_{n+1,4}^\dagger U_{n,1}^\dagger \text{Tr} U_{n,1} \hat{W} U_{n,4}^\dagger \\ &= \frac{1}{g^2 N} \int dU_{n,4} \text{Tr} U_{n,4} U_{n+4,1} U_{n+1,4}^\dagger \hat{W} U_{n,4}^\dagger = \frac{1}{g^2 N} \text{Tr} U_{n+4,1} U_{n+1,4}^\dagger \hat{W} \end{aligned}$$

となる。(図 9 を見よ。) これを繰り返すと、

$$\langle W(T \times L) \rangle = \left( \frac{1}{g^2 N} \right)^L \langle W((T-1) \times L) \rangle = N e^{-TL \log(g^2 N)} \quad (59)$$

計算され、面積則になることが分かる。したがって、

$$V(L) = L \log(g^2 N) \quad (60)$$

と閉じ込めを示すポテンシャルが得られる。

## 2.7 連続極限

時空間は格子構造をしているわけではないので、格子理論により最終的な答えを得るためには、格子間隔をゼロにする ( $a \rightarrow 0$ ) 連続極限を取る必要がある。

場の理論では理論にあるパラメタ (通常は裸のパラメタと呼ぶ) は (無限大の) 量子補正を受けるので、「繰り込み」を行なうことで、有限にする必要がある。ゲージ理論の場合には、

$$g_R^2 = \lim_{a \rightarrow 0} Z_g(a) g_0^2 \quad (61)$$

と、繰り込まれた結合定数  $g_R$  が一定になるように繰り込みを行う。ここで、 $g_0$  が裸の結合定数で、 $Z_g(a)$  が結合定数に関する繰り込み定数である。

それではどうやって  $a \rightarrow 0$  の極限をとるのであろうか? 無次元化した格子作用はもはや格子間隔  $a$  をあらわには含まない。格子ゲージ理論の場合は、裸の結合定数  $g_0$  を変化させることが格子間隔  $a$  を変化させることに対応する。それでは、どのように  $g_0$  を変化させれば良いのだろうか?

裸の結合定数と格子間隔の関係は、スケール  $\mu$  に依存する結合定数 (running coupling constant)  $g(\mu)$  に対する常微分方程式

$$\beta(g) \equiv \mu \frac{dg(\mu)}{d\mu} = -b_0 g^3(\mu) + \dots \quad (62)$$

から決まる。フェルミオンを含まない  $SU(N)$  ゲージ理論では、 $b_0 = \frac{11N}{48\pi^2}$  である。この方程式を

$$\int_{1/a}^{\Lambda_L} \frac{d\mu}{\mu} = -\frac{1}{2b_0} \int_{g_0^2}^{\infty} \frac{dg^2}{g^4} \quad (63)$$

と積分する。ここで、格子間隔で決まるスケールでの running coupling constant を裸の結合定数になるように境界条件を決める。つまり、 $g(1/a) = g_0$  である。また、 $\Lambda_L$  は running coupling constant が発散するスケールであり、我々は、この  $\Lambda_L$  が一定の値になるように繰り込みを行う。上の積分を実行すると、

$$g_0^2 = -\frac{1}{2b_0 \log(\lambda_L a)} \Rightarrow a = \frac{1}{\Lambda_L} \exp \left[ -\frac{1}{2b_0 g_0^2} \right] \quad (64)$$

という関係式が得られる。1番目の式から、短距離 ( $a \rightarrow 0$ ) では結合定数がゼロになることが分かる。これが有名な非可換ゲージ理論の漸近的自由性である。二番目の式から、連続極限 ( $a \rightarrow 0$ ) は  $g_0^2 \rightarrow 0$  により実現されることが分かる。

次元を持つ物理量  $K$  を考え、その質量次元を  $d_K$  とする。この物理量は、格子上では無次元となるので、 $g_0$  の関数として、以下のように振る舞う事が分かる。

$$Ka^{d_K} = C_K(\Lambda_L a)^{d_K} = C_K \exp\left[-\frac{d_K}{2b_0 g_0^2}\right] + \dots \quad (65)$$

この振る舞いを漸近的スケールリングと呼ぶ。係数  $C_K$  が分かると、 $\Lambda_L$  を単位として  $K$  の値が  $K = C_K(\Lambda_L)^{d_K}$  と求まる。したがって、いろいろな物理量  $K$  に対して  $C_K$  を計算することが、格子理論の主要な目的と言える。

### 3 格子量子色力学の数値シミュレーション

さて、いよいよ格子量子色力学の数値シミュレーションによるハドロンの質量の計算方法を紹介しよう。ハドロンはクォークの束縛状態であり、ここでは、質量の軽い  $u, d, s$  の3つのクォークを考えることにする。クォークと反クォークの束縛状態であるメソン（中間子）と3つのクォークの束縛状態であるバリオン（重粒子）と呼ぶが、その代表的な例を表1に載せる。この表の中の一部の粒子は、強い相互作用のため、自然界では他の粒子に崩壊するので安定な粒子ではなく、共鳴状態になっている。

ここで紹介する格子 QCD のシミュレーションでは、3つのクォークのうち、 $u, d$  の質量は等しいとして、その平均質量で置き換えている。したがって、自由に取れる理論のパラメタは、 $m_l = (m_u + m_d)/2$ ,  $m_s$ ,  $g^2$  の3つである。最近は、 $u$  と  $d$  の質量差を計算に取り入れる試みも行われている。

#### 3.1 経路積分表示

我々がやりたいことは、物理量の期待値の経路積分

$$\langle \mathcal{O}(\bar{\psi}, \psi, U) \rangle = \frac{\int dU d\bar{\psi} d\psi \mathcal{O} e^{-S}}{\int dU d\bar{\psi} d\psi e^{-S}}, \quad S = S_G(U) + \bar{\psi} D(U) \psi \quad (66)$$

を数値的に実行することである。経路積分に於いて、フェルミオンは反可換な数であるグラスマン数で表現されているので数値計算は出来ない。幸い、その積分は解析的に実行可能で、それを使い以下のように計算できる。

$$\int dU d\bar{\psi} d\psi \mathcal{O} e^{-S} = \int dU e^{-S(U)} \mathcal{O}\left(-\frac{\delta}{\delta\eta}, \frac{\delta}{\delta\bar{\eta}}, U\right)$$

クォーク	擬スカラー中間子	ベクトル中間子
$\bar{u}u - \bar{d}d$	$\pi^0$	$\rho^0$
$\bar{d}u, \bar{u}d$	$\pi^\pm$	$\rho^\pm$
$\bar{u}u + \bar{d}d$	$\eta$	$\omega$
$\bar{s}d, \bar{d}s$	$K^0, \bar{K}^0$	$(K^*)^0, (\bar{K}^*)^0$
$\bar{s}u, \bar{u}s$	$K^\pm$	$(K^*)^\pm$
$\bar{s}s$	$\eta_s$	$\phi$
クォーク	バリオン 8 重項	バリオン 10 重項
uuu		$\Delta^{++}$
uud	$P$	$\Delta^+$
udd	$N$	$\Delta^0$
ddd		$\Delta^-$
uus	$\Sigma^+$	$(\Sigma^*)^+$
uds	$\Sigma^0, \Lambda$	$(\Sigma^*)^0$
dds	$\Sigma^-$	$(\Sigma^*)^-$
uss	$\Xi^0$	$(\Xi^*)^0$
dss	$\Xi^-$	$(\Xi^*)^-$
sss		$\Omega$

表 1: 代表的なハドロン。上がメソンで、下がバリオンである。

$$\begin{aligned}
& \times \int d\bar{\psi} d\psi e^{-\bar{\psi}D(U)\psi + \bar{\psi}\eta + \bar{\eta}\psi} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0} \\
& = \int dU e^{-S(U)} \mathcal{O}\left(-\frac{\delta}{\delta\eta}, \frac{\delta}{\delta\bar{\eta}}, U\right) \det D(U) e^{\bar{\eta}D^{-1}(U)\eta} \Big|_{\eta=\bar{\eta}=0}. \quad (67)
\end{aligned}$$

ここでは、フェルミオンに対する外場  $\eta, \bar{\eta}$  を導入している。ボソンの場合と違って、フェルミオンの”ガウス積分”からは行列式の逆ではなく行列式そのものが出てくる。

物理量の例として、荷電パイ中間子の 2 点関数を考えよう。外場に関する微分を実行すると、

$$\begin{aligned}
\langle \bar{\psi}_u(x) \gamma_5 \psi_d(x) \cdot \bar{\psi}_d(y) \gamma_5 \psi_u(y) \rangle &= -\frac{1}{Z} \int dU \det D(U) e^{-S(U)} \\
& \times \text{tr} \left[ D_d^{-1}(U)_{xy} \gamma_5 D_u^{-1}(U)_{yx} \gamma_5 \right] \quad (68)
\end{aligned}$$

となる (図 10)。ここで、tr はカラーとスピノルに関するトレースを意味する。ウィルソンフェルミオンで  $r=1$  の場合、 $D_f(U)$  は

$$D_f(U)_{xy} = \delta_{xy} - K_f \sum_{\mu} \left[ \delta_{y,x+\hat{\mu}a} U_{x,\mu} (1 - \gamma_{\mu}) + \delta_{y,x-\hat{\mu}a} U_{y,\mu}^{\dagger} (1 + \gamma_{\mu}) \right]$$

と与えられる。

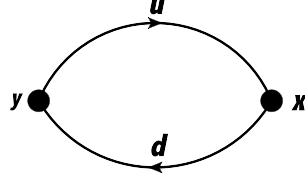


図 10: 荷電  $\pi$  中間子の 2 点関数をフェルミオンの伝搬関数で表したもの。式 (68) に対応。

後は、 $U$  積分を実行すれば良いのであるが、単純な区分求積法での数値積分は不可能である。例えば、 $10^4$  の格子を考てみよう。ゲージ場の独立成分は  $8(\text{SU}(3) \text{ の生成子の数}) \times 4$  (方向  $\mu$  の数) あるので、各成分をメッシュ 10 で区分求積すると必要な浮動小数点演算の数 (Flop) は  $10^{3.2 \times 10^5}$  になる。現在の世界最速である 10 Peta Flops クラスの計算機で計算しても、 $10^{319975}$  年の計算時間が必要になり、(宇宙年齢より遥かに長いので) 実行不可能である事が分かる。そこで、この積分を実行するためには、全てをまじめに積分するのではなく、積分に大きく寄与する部分だけを計算する方法 (importance sampling とよばれる) を用いることにする。全ての独立自由度が決まった状態をゲージ場の配位と呼ぶが、実際の、ほとんどのゲージ場の配位で、 $\det D(U)e^{-S_G(U)}$  は非常に小さな値になるので、積分にはほとんど寄与しない。

importance sampling を使った計算の手順を以下にまとめる。

1. (Importance sampling) ゲージ場  $U$  の配位を  $P(U) \propto \det D(U)e^{-S_G(U)}$  の確率で生成する。
2. 伝搬関数  $D^{-1}(U)_{y,x_0}$  を特定の  $x_0$ 、かつ、全ての  $y$  に対して計算する。これは線形方程式  $\sum_y D_{xy}\phi_y^{x_0} = \delta_{x,x_0}$  を逐次的に解くことで実現する。実際、この方程式の解は、 $\phi_y^{x_0} = D_{yx}^{-1}\delta_{x,x_0} = D_{yx_0}^{-1}$  となる。
3. 荷電中間子の計算の場合などでは、 $D_{x_0y}^{-1}$  なども必要になるが、この量を求めるのに、 $\gamma_5 D^\dagger \gamma_5 = D$  という関係式を用いる。座標  $x$ 、カラー  $A$ 、スピノル  $\alpha$  の添字をまとめて  $X = (x, A, \alpha)$  と書くと、この関係式から、 $D_{XY}^{-1} = \gamma_5 (D^\dagger)_{XY}^{-1} \gamma_5 = \gamma_5 \bar{D}_{YX}^{-1} \gamma_5$  と、複素共役  $\bar{D}$  を使い、添字を入れ替えることが出来る。
4. 演算子  $\mathcal{O}$  を構成する。荷電中間子の 2 点関数の場合は、

$$\text{tr}\{\gamma_5 D_{x_0y}^{-1} \gamma_5 D_{yx_0}^{-1}\} = \left(\bar{D}^{-1}\right)_{y\alpha_0, \beta\alpha_0}^{BA_0} \left(D^{-1}\right)_{y\alpha_0, \beta\alpha_0}^{BA_0} = \sum_{\beta, \alpha_0, B, A_0} \bar{\phi}_{y, \beta}^B \phi_{y, \beta}^B$$

と与えられる。ここで、 $\phi$  は、方程式  $D_{xy,\alpha\beta}^{AB} \phi_{y,\beta}^B = \delta_{x,x_0} \delta_{\alpha,\alpha_0} \delta^{A,A_0}$  の解である。 $A_0, \alpha_0$  の和を取るためには、この線形方程式を  $A_0$  と  $\alpha_0$  を変えながら 3(カラー)  $\times$  4 (スピノル) 回解く必要がある。

5. 1に戻り、この操作を繰り返す。

6.  $U_1 \rightarrow U_2 \rightarrow \dots \rightarrow U_N$  と多くの配位を集め、平均を

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(U_i) \rightarrow \int dU \det D(U) e^{-S_G(U)} \mathcal{O}(U) \quad (69)$$

と計算する。

この計算の中で特に時間が掛かるのは  $\det D(U)$  の部分である。そのため、過去には、 $\det D(U) = 1$  に取るという近似がよく使われてきた。つまり、生成確率を  $P(U) \propto e^{-S_G(U)}$  と取る近似で、クエンチ近似と呼ばれている。この近似は、物理的には真空からのクォーク反クォーク対の生成消滅を無視することに相当する。計算機の進歩とともにこの行列式の寄与を含んだ計算 (full QCD 計算と呼ばれる) が普通に行われるようになった。しかし、新しい手法のテストなどではいまでもクエンチ近似の計算がよく使われている。

以下では、上の手順の各プロセスを具体的に説明していこう。

### 3.2 ゲージ配位の生成法

まず、確率的な方法で計算を行うやり方を説明しよう。例えば、関数  $0 < f(x) < 1$  を  $0 < x < 1$  で積分するには、以下のように行えば良い。まず、二組の一樣乱数  $0 < x < 1, 0 < y < 1$  を生成する。ここで、 $y < f(x)$  なら「当たり」、逆なら「はずれ」とする。これを  $N$  回繰り返し、当たりの回数を  $N_{\text{hit}}$  とする (図 11)。積分は  $\int_0^1 f(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_{\text{hit}}}{N}$  と評価される。このような確率的に積分等を評価する方法は、しばしば (有名なカジノのある場所にちなんで) モンテカルロ (MC) 法と呼ばれる。

我々は、ゲージ配位を確率  $P(U)$  で生成する方法に興味があるが、原理の説明のために、1次元積分

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int_a^b dx P(x) \mathcal{O}(x), \quad \int_a^b dx P(x) = 1 \quad (70)$$

を確率的に積分することを考えよう。

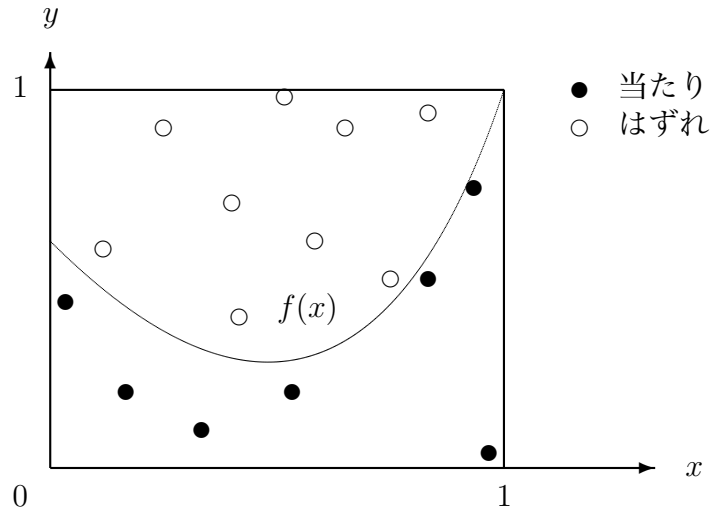


図 11: モンテカルロ法による関数の積分。

適当な乱数生成アルゴリズムを用いて、 $a < x < b$  である一様乱数  $x$  を  $N$  個生成する。その  $N$  個の乱数を使うと積分は

$$\langle \mathcal{O} \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(x_i) P(x_i) \quad (71)$$

と近似的に計算される。 $N$  を大きくすると計算の精度が良くなる。この方法は、単純なのでどんな場合にも使えるが、大抵の場合、計算効率が悪い。それは、確率分布  $P(x)$  の情報を乱数の生成に使っていないため、 $P(x)$  が特定の  $x$  に鋭いピークを持っている場合には、生成された乱数のほとんどが積分に寄与しなくなるからである。

$P(x)$  の情報を効率的に取り入れる方法として「熱浴法」と呼ばれるものがある。これは、変数変換  $y = \int_a^x dz P(y)$ ,  $dy = dx P(x)$  を用いて、積分を

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int_0^1 dx \mathcal{O}(y), \quad \mathcal{O}(y) = \mathcal{O}(x[y]) \quad (72)$$

と書き換え、この式で数値積分を以下の手順で行うものである。

1. 一様乱数  $0 < y < 1$  を生成する。
2. 解析的に  $y = \int_a^x dz P(y)$  の逆を計算して  $y$  の関数としての  $x[y]$  を求める。
3. この  $y$  を用いて平均を

$$\langle \mathcal{O} \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(y_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}(x[y_i]) \quad (73)$$



と近似的に計算する。

この方法は生成した乱数  $y$  が常に積分に寄与するので非常に効率が良いが、(2) の逆が解析的に計算出来る場合に限られているので、適用範囲が限定されている。クエンチ近似の格子 QCD の計算には、「熱浴法」を少し変更した「擬熱浴法」が適用可能であり、よく用いられているが、ここでは説明を割愛する。

その代わりに、以下では、 $\det D(U)$  の効果を含んだ full QCD に対して現在最もよく使われているアルゴリズムであるハイブリッド・モンテカルロ (HMC) 法を説明する。

アルゴリズムの説明の前に、確率過程に関する重要な定理を証明なしに挙げておく。

定理: ある確率過程 (マルコフ過程とも呼ばれる)  $P(U \rightarrow U')$  を考える。我々の場合はゲージ場を変更していく方法に対応している。この確率過程が、詳細釣り合い

$$e^{-S(U)} P(U \rightarrow U') = e^{-S(U')} P(U' \rightarrow U) \quad (74)$$

と確率保存  $\int dU' P(U \rightarrow U') = 1$  を満たすとする。この時、 $P$  を多数回繰り返して得られた平衡分布を  $\lim_{N \rightarrow \infty} P^N(U_0 \rightarrow U) = P_{\text{eq}}(U)$  とすると、

$$P_{\text{eq}}(U) = \frac{1}{Z} e^{-S(U)}, \quad Z = \int dU e^{-S(U)} \quad (75)$$

となることが言える。さらに詳細釣り合いを使うと、 $P_{\text{eq}}(U)$  は

$$\int dU' P_{\text{eq}}(U') P(U' \rightarrow U) = P_{\text{eq}}(U) \quad (76)$$

という性質 ( $P$  不変性) を持つことが示せる。

この定理により、 $P_{\text{eq}}(U) = \frac{1}{Z} e^{-S(U)}$  という確率分布を実現するには、詳細釣り合いを満たす確率過程  $P(U \rightarrow U')$  を使えば良い。確率過程  $P(U \rightarrow U')$  が詳細釣り合いを満たすということは、 $P_{\text{eq}}(U)$  を実現する必要条件ではないが、多くのアルゴリズムが詳細釣り合いを満たす確率過程を生成するように作られている。また、 $U$  の初期値  $U_0$  として何をとっても最終的な確率分布はそれに依らないことも分かっている。

詳細釣り合いを満たす確率過程を生成するアルゴリズムの 1 つが HMC 法である。以下に作用  $S(\phi)$  が与えられている場合の手順を紹介する。

1. 初期配位  $\phi$  を何らかの方法で生成する。
2.  $\phi$  に対応する「運動量」 $\pi$  をガウス分布  $P(\pi) \propto e^{-\pi^2/2}$  で生成する。

3. 分子動力学 (MD) で時間の長さ 1 の時間発展を行う。そのために、以下の方程式を差分化して数値的に解く。

$$\begin{cases} \dot{\phi}(\tau) = \frac{\partial H[\phi, \pi]}{\partial \pi} = \pi(\tau) \\ \dot{\pi}(\tau) = -\frac{\partial H[\phi, \pi]}{\partial \phi} = -\frac{\partial S(\phi)}{\partial \phi}(\tau) \end{cases} \quad (77)$$

ここで、 $H$  は「ハミルトニアン」であり、 $H[\phi, \pi] = \frac{1}{2}\pi^2 + S(\phi)$  で与えられる。

4. 新しい配位  $\phi' = \phi(1)$ ,  $\pi' = \pi(1)$  を以下の確率で採用する。(これを「採用／拒否」判定、あるいは簡単にメトロポリス判定と呼ぶ。)

$$P(\{\phi, \pi\} \rightarrow \{\phi', \pi'\}) = \min(1, e^{-\Delta H}), \quad \Delta H = H(\phi', \pi') - H(\phi, \pi)$$

つまり、 $\Delta H < 0$  なら常に採用、 $\Delta H > 0$  なら、 $e^{-\Delta H}$  の確率で採用するということである。時間変数  $\tau$  が連続であれば、MD のエネルギー保存より  $\Delta H = 0$  となるが、差分化しているため保存則が破れ、 $\Delta H \neq 0$  となる。後で示すように、その破れを補正して詳細釣り合いを満たすために、メトロポリス判定が必要となる。

5. 採用されたら  $\phi' \rightarrow \phi$  と配位を更新し、拒否された場合は古い  $\phi$  をそのまま次の配位とする。2 に戻り、同じ操作を繰り返すことで、確率過程を続けていく。

HMC 法が詳細釣り合いを満たすことを証明する前に、分子動力学の差分化の 1 つである Leap-Frog 法を紹介しよう。

離散時間ステップを  $\epsilon = 1/N$  と取り、時間は  $\epsilon$  単位で測ったステップ数で記述する。分子動力学の最初のステップとして、

$$\begin{cases} \phi(0) & = \phi \\ \pi(1/2) & = \pi - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial S(\phi)}{\partial \phi(0)} \end{cases} \quad (78)$$

とする。座標は初期値だが、運動量は座標の初期値を使って時間を半ステップ進めておく。 $n$  ステップから  $n+1$  ステップへは

$$\begin{cases} \phi(n+1) & = \phi(n) + \epsilon\pi(n+1/2) \\ \pi(n+3/2) & = \pi(n+1/2) - \epsilon \frac{\partial S(\phi)}{\partial \phi(n+1)} \end{cases} \quad (79)$$

と時間を進める。最後は

$$\begin{cases} \phi' = \phi(N) & = \phi(N-1) + \epsilon\pi(N-1/2) \\ \phi' = \pi(N) & = \pi(N-1/2) - \frac{\epsilon}{2} \frac{\partial S(\phi)}{\partial \phi(N)} \end{cases} \quad (80)$$

となり、全体として両方とも時間が1だけ進む。座標と運動量が互い違いに進む様子がカエルの歩くのに似ているので Leap-Frog 法と呼ばれている。この方法の重要な性質として時間発展の可逆性がある。これは、 $\{\phi, \pi\} \rightarrow \{\phi', \pi'\}$  と時間発展させた後に時間を反転させると  $\{\phi', -\pi'\} \rightarrow \{\phi, -\pi\}$  と元に戻る、という性質である。Leap-Frog 法がこの性質を満たすことは簡単に示せるので各自で確認して欲しい。

さて、HMC 法が詳細釣り合いを満たすことを示そう。

- 運動量の生成確率は、 $P_G(\pi) = N_0 e^{-\pi^2/2}$  である。
- MD の可逆性より、 $P_M(\{\phi, \pi\} \rightarrow \{\phi', \pi'\}) = P_M(\{\phi', -\pi'\} \rightarrow \{\phi, -\pi\})$  である。
- メトロポリス判定の確率は  $P_A(\Phi \rightarrow \Phi') = \min(1, e^{-\Delta H})$  で与えられる。ここで、 $\Phi = \{\phi, \pi\}$  である。この時、 $e^{-H} P_A(\Phi \rightarrow \Phi') = e^{-H'} P_A(\Phi' \rightarrow \Phi)$  が言える。これは、実際に場合分けして考えると以下のように簡単に示せる。 $\Delta H = H' - H < 0$  の場合は、

$$\begin{cases} e^{-H} P_A(\Phi \rightarrow \Phi') &= e^{-H} \\ e^{-H'} P_A(\Phi' \rightarrow \Phi) &= e^{-H'} e^{-(H-H')} = e^{-H} \end{cases} \quad (81)$$

となり正しい。また、 $\Delta H = H' - H > 0$  の場合も、

$$\begin{cases} e^{-H} P_A(\Phi \rightarrow \Phi') &= e^{-H} e^{-(H'-H)} = e^{-H'} \\ e^{-H'} P_A(\Phi' \rightarrow \Phi) &= e^{-H'} \end{cases} \quad (82)$$

となり、これも正しい。

さて、各々の確率を掛け合わせた全体の確率は

$$P(\phi \rightarrow \phi') = \int d\pi d\pi' P_G(\pi) P_M(\Phi \rightarrow \Phi') P_A(\Phi \rightarrow \Phi') \quad (83)$$

で与えられる。 $\pi, \pi'$  のいろいろな値を（確率的に）考えることが、積分することに相当する。これを用いると、

$$\begin{aligned} e^{-S(\phi)} P(\phi \rightarrow \phi') &= \int d\pi d\pi' e^{-H} P_M(\Phi \rightarrow \Phi') P_A(\Phi \rightarrow \Phi') \\ &= \int d\pi d\pi' e^{-H'} P_A(\Phi' \rightarrow \Phi) P_M(\Phi \rightarrow \Phi') \\ &= e^{-S(\phi')} \int d\pi d\pi' P_G(\pi') P_M(\{\phi', -\pi'\} \rightarrow \{\phi, -\pi\}) P_A(\Phi' \rightarrow \Phi) \\ &= e^{-S(\phi')} \int d\pi d\pi' P_G(\pi') P_M(\{\phi', \pi'\} \rightarrow \{\phi, \pi\}) P_A(\Phi' \rightarrow \Phi) \\ &= e^{-S(\phi')} P(\phi' \rightarrow \phi) \end{aligned} \quad (84)$$

と詳細釣り合いが証明される。

いよいよ格子 QCD に対するハイブリッド・モンテカルロ法を紹介する。格子 QCD の確率分布は規格化因子を無視すると  $P(U) = \det D(U)e^{-S_G(U)}$  となるが、前述したように、このままだと行列式の計算に膨大な時間が掛かってしまう。そこで、フレーバー数が偶数  $N_f = 2n$  で質量が全て等しい場合を考えて、行列式を

$$\det D(U) = [\det D_0(U)]^{N_f} = \left[ \det D_0^\dagger(U)D_0(U) \right]^{N_f/2} \quad (85)$$

と書き換える。ここでは、 $D_0$  は 1 つのフレーバーに対するフェルミオンの演算子であり、また、 $D_0^\dagger = \gamma_5 D_0 \gamma_5$  という性質を使った。この表式を使って確率分布を

$$P(U) = e^{-S_G(U)} \int d\phi d\phi^\dagger e^{-\sum_{i=1}^n \phi_i^\dagger (D_0^\dagger D_0)^{-1} \phi_i} \quad (86)$$

と書き換える。ここで、 $\phi_i$  は行列式を表すために導入された複素ボソンであり、フェルミオンの演算子が掛かっているのが擬フェルミオンと呼ばれている。この書き換えを行うと HMC 法のハミルトニアンは  $H = \frac{1}{2} \sum_l p_l^2 + S_G(U) + \sum_i \phi_i^\dagger (D_0^\dagger D_0)^{-1} \phi_i$  となる。ここで、 $p_l$  はゲージ場  $U_l (l = (n, \mu))$  に共役な運動量である。このハミルトニアンを使うと分配関数は (運動量のガウス積分をも含めて)

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}p e^{-H} \quad (87)$$

となる。この分配関数に対して、HMC 法を適用すると以下ようになる。

1. ゲージ配位の初期値  $U$  を選ぶ。
2. ゲージ場に共役な運動量をガウス分布  $P(p_l) \propto e^{-p_l^2/2}$  で生成する。
3. ランダムな複素場  $\xi_i$  をガウス分布  $P(\xi_i) \propto e^{-|\xi_i|^2/2}$  で生成し、 $\xi_i$  から  $\phi_i = D_0^\dagger(U)\xi_i$  を計算する。 $\xi_i$  がガウス分布しているので、 $\phi_i$  の分布は

$$e^{-\xi_i^\dagger \xi_i/2} = \exp \left[ -\frac{1}{2} \phi_i^\dagger (D_0 D_0) \phi_i \right] \quad (88)$$

と望みの形になっている。これ以降の計算では  $\phi_i$  を固定しておく。

4. 分子動力学の時間発展を使って新しい配位の候補を生成する。

$$\begin{aligned} \eta_i &= (D_0^\dagger D_0)^{-1}(U)\phi_i \\ \dot{U}_l &= ip_l U_l, \quad U_l = e^{iA_l} \\ \dot{p}_l &= -\frac{\partial S_G}{\partial A_l} - \sum_i \phi_i^\dagger \frac{\partial (D_0^\dagger D_0)^{-1} \phi_i}{\partial A_l} = -\frac{\partial S_G}{\partial A_l} + \sum_i \eta_i^\dagger \frac{\partial (D_0^\dagger D_0)}{\partial A_l} \eta_i \end{aligned}$$

分子動力学の時間発展の間、 $\phi_i$  は固定しておくので、 $U$  が変化するたびに  $D_0^\dagger D_0$  の逆を計算し、 $\eta_i$  を求める必要がある。この  $D_0^\dagger D_0$  の逆の計算にもっとも時間が掛かる。

5. メトロポリス判定を、確率  $P = \min\{1, e^{-(H'-H)}\}$  で行い、新しいゲージ配位を受け入れるかどうかを決める。2に戻り、次のゲージ配位の生成を続けていく。

ここでゲージ場の微分は独立な自由度であるリー代数の元  $A_l$  を用いて行う。リー代数の基底行列を  $t^a$  として、 $p_l$  の時間微分を具体的に書くと、

$$\dot{p}_l = \sum_a \dot{p}_l^a t^a = - \sum_a D_l^a [S(U)] t^a \quad (89)$$

となる。ここで、 $U$  の関数  $f(U)$  に対するリー微分は

$$D_l^a [f(U)] \equiv i \sum_{i,j} (t^a U_l)_{ij} \frac{\partial f(U)}{\partial (U_l)_{ij}} \quad (90)$$

で定義される。ゲージ場の分子動力学の時間発展を Leap-Frog 法により差分化すると以下になる。

$$\begin{aligned} U_l(\tau) &= e^{i\epsilon p_l(\tau-\epsilon/2)} U_l(\tau-\epsilon) \\ \eta_i(\tau) &= (D_0^\dagger D_0)^{-1} (U_l(\tau)) \phi_i \\ p_l(\tau + \frac{\epsilon}{2}) &= p_l(\tau - \frac{\epsilon}{2}) - \epsilon \left[ \frac{\partial S_G}{\partial A_l(\tau)} - \sum_i \eta_i^\dagger(\tau) \frac{\partial (D_0^\dagger D_0)}{\partial A_l(\tau)} \eta_i(\tau) \right] \end{aligned} \quad (91)$$

最後に、格子 QCD の HMC 法に関していくつかコメントをする。

1. ハミルトニアン の保存に対する Leap-Frog 法の離散化による誤差は、 $\Delta H \propto \epsilon^2 \sqrt{V}$  と見積もられるので、体積を変えた場合にその誤差を同程度に押さえるためには、 $\epsilon \sim V^{-1/4}$  と離散化を細かくする必要がある。
2.  $D_0^\dagger D_0$  の逆の計算の回数を減らすためには、なるべく小さな  $N$  (おおきな  $\epsilon$ ) を使いたいが、 $\epsilon$  が大きいと  $\Delta H$  は大きくなるのでメトロポリス判定を通りにくくなる。大きな  $\epsilon$  でも  $\Delta H$  が大きくならないようにアルゴリズムを改良する研究が現在でも盛んに行われている。たとえば、Leap-Frog 法を他の離散化に代えるとか、分子動力学の変数を工夫するなどがある。

3. 同じ質量を持つクォークの数が奇数の場合のアルゴリズムとして、PHMC(多項式 HMC 法)、RHMC(有理式 HMC 法)などが使われている。例えば、1 フレーバーの場合には、その行列式を

$$\det D_0 = (\det D_0^\dagger D_0)^{1/2} = \int d\phi d\phi^\dagger e^{-\phi^\dagger (D_0^\dagger D_0)^{-1/2} \phi} \quad (92)$$

と書き換え、 $(D_0^\dagger D_0)^{-1/2}$  を多項式や有理式で近似する方法である。

4. 確率分布を使ったモンテカルロ法では、 $P(U)$  が非負であることが必要であるが、有限密度の格子 QCD では、 $P(U)$  が複素数になるので、HMC 法などの通常のやり方が使えない。有限密度格子 QCD のシミュレーションをどのように行うか、は現在でも残ってる大問題である。

### 3.3 クォーク伝搬関数の計算

クォークの伝搬関数の計算や HMC 法の分子動力学の計算の中では、フェルミオン演算子  $D$  の逆の計算が必要である。格子 QCD では、このフェルミオンの逆演算子の計算に最も時間が掛かる。ここでは、逆演算子の計算方法を紹介する。

クォーク伝搬関数  $(D^{-1})_{xy,\alpha\beta}^{AB}$  の計算を考えよう。線形方程式

$$D(X, Y)\phi(Y) = \delta_{X, X_0}$$

を解くことが出来れば、その解は  $\phi(X) = D(X, X_0)$  を与える。ここで、 $X = (x, A, \alpha)$  は座標、カラー、スピノルの足をまとめて表した変数である。我々が扱う  $D$  は大規模疎行列なので、直接的に逆を計算する方法は時間が掛かりすぎて使えない。格子 QCD では、反復法を使って逆を計算する。線形方程式  $D \cdot x = b$  を反復法で解くアルゴリズムとしては、

$$S(x) = \frac{1}{2} |b - D \cdot x|^2 \quad (93)$$

を最小化するように反復計算を進める傾斜法がある。ここでは、傾斜法の中で格子 QCD でよく使われる共役傾斜 (CG) 法を紹介しよう。

CG 法のアルゴリズムは以下で与えられる。

1. 初期値  $x_0$  を適当に決め、初期残差  $r_0$ 、初期傾斜  $s_0$ 、初期探索方向  $p_0$  を、 $r_0 = b - D \cdot x_0$ ,  $p_0 = s_0 = D^\dagger \cdot r_0$  と計算する。
2. 反復計算 ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ):  $k$  での結果を使い、 $k + 1$  の時に、反復解  $x_{k+1}$ 、残差  $r_{k+1}$ 、傾斜  $s_{k+1}$ 、探索方向  $p_{k+1}$  を以下のように計算

する。

$$\begin{aligned}
 x_{k+1} &= x_k + \lambda_k p_k, & \lambda_k &= \frac{(s_k, p_k)}{|D \cdot p_k|^2} \\
 r_{k+1} &= b - D \cdot x_{k+1} = r_k - \lambda_k D \cdot p_k \\
 s_{k+1} &= D^\dagger \cdot r_{k+1} = s_k - \lambda_k D^\dagger \cdot D \cdot p_k \\
 p_{k+1} &= s_{k+1} + \mu_k p_k, & \mu_k &= \frac{(p_k, D^\dagger \cdot D \cdot s_k)}{|D \cdot p_k|^2} = \frac{(D^\dagger \cdot D \cdot p_k, s_k)}{|D \cdot p_k|^2}
 \end{aligned}$$

ここで、 $s_k$  を傾斜と呼ぶのは、 $\nabla_{x_k} S(x_k) = -s_k$  だからである。残差が充分小さくなったら (例えば、 $|r_{k+1}|^2 < \varepsilon$  となったら)、反復計算を打ち切り、その時の  $x_{k+1}$  を  $D \cdot x = b$  の反復解とする。

一回の反復計算に必要な演算子のかけ算は、 $p_k$  に  $D$  を掛ける  $D \cdot p_k$  の計算と、 $D \cdot p_k$  に  $D^\dagger$  を掛ける  $D^\dagger \cdot D \cdot p_k$  の計算である。証明は省略するが、CG 法では、探索方向を互いに直交するように決めているので、数値誤差さえなければ、有限回の反復で必ず収束することが保証されている。

例として、残差の減り方の様子を図 12 に載せる。

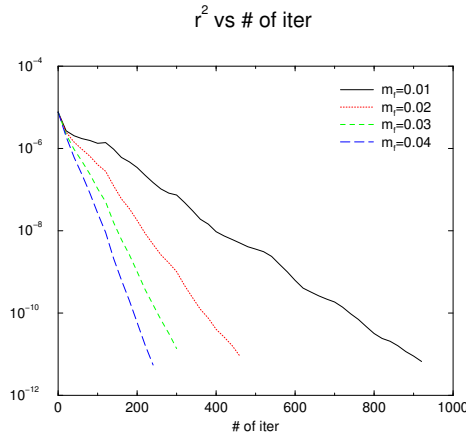


図 12: CG 法の残差の減り方の様子。縦軸が残差の 2 乗  $|r_k|^2$  の log 表示、横軸が反復回数  $\text{iter}(k)$  に相当) である。4 つの線はクォーク質量  $m_l$  の違いに対応している。

CG 法での残差の減り方は  $D$  の最大固有値と最小固有値の比である条件数によって決まる。(  $D$  がエルミートで無い場合は  $D^\dagger D$  の固有値の平方根を考えれば良い。) 格子 QCD の場合、 $D$  の最大固有値はほぼ一定。 $D$  の最小固有値は図の例の場合は、ほぼクォーク質量  $m_l$  に比例する。実際、クォークが軽い ( $m_l$  が小さい) ほど、残差の減り方が遅く収束に時間が掛かる。 $m_l = 0.04$  の時は、残差の 2 乗が  $10^{-10}$  になるのに、200 回弱

の反復計算が必要であるが、 $m_l = 0.01$  の場合は、それが800回弱とほぼ  $m_l$  の比である4倍になっている。この反復回数の増加が、格子QCDの計算でクォーク質量を軽くすることが難しい理由の1つである。(今の評価では  $m_l = 0$  では無限に時間が掛かることになるが、 $m_l$  が極端に小さくなると最小固有値は  $m_l$  に比例せず、体積で決まる一定の値になるので、実際には有限の反復回数で逆が計算出来る。)

CG法から他の反復解法(BiCG, BiCGstab, MRなどがあるが、ここでは紹介しない)に変えることで、収束が良くなる(反復回数が減り、計算時間が短くなる)場合がある。現在でも、より良い反復解法の研究が盛んに行われている。

収束を良くする方法の1つとして、 $D$ に新しい行列  $L$  を掛けて条件数を減らすという方法がある。つまり、 $D \cdot x = b$  を解く代わりに、 $L \cdot D \cdot x = L \cdot b$  を解くのである。 $L$  を掛けることを前処理と呼ぶが、この計算が簡単であることが必要であり、そうでないと、反復回数は減ったのに計算時間は減らない、というようなことが起こってしまう。

前処理の例として、ウィルソン・フェルミオンに対する偶奇前処理を紹介しよう。ウィルソン・フェルミオン演算子  $D_W$  は以下の構造を持っている。

$$D_W = 1 - KT = \begin{pmatrix} 1_{ee} & -KT_{eo} \\ -KT_{oe} & 1_{oo} \end{pmatrix} \quad (94)$$

ここで、 $K$  はホッピング・パラメタであり、 $e$  や  $o$  は格子点の偶奇性を表している。つまり、格子点  $n$  の各成分の和が偶数なら  $e$ (even)、奇数なら  $o$ (odd) とする。この時、差分から来るホッピング項  $T$  は必ず、異なった偶奇の格子を結びつけているので、上のような構造になる。 $D_W$  に  $L = 1 + KT$  を掛けるのが偶奇前処理であり、 $(1 + KT) \cdot (1 - KT) = 1 - K^2 T^2$  なので、 $D_W \cdot x = b$  という線形方程式が

$$(1 - K^2 T^2) \cdot x = (1 + KT) \cdot b \quad (95)$$

となる。ここで、 $x = x_e + x_o$ ,  $b = b_e + b_o$  と分解すると、前処理された方程式は偶成分のみで閉じており、

$$(1_{ee} - K^2 T_{eo} \cdot T_{oe}) \cdot x_e = b_e + KT_{eo} \equiv B_e \quad (96)$$

と次元が半分の方程式になる。 $K$  が小さい(つまり、クォークが重い)時は、 $(1 - K^2 T^2)$  は  $1 - KT$  より、より1に近いので、条件数が良くなることが期待される。一方、 $x_e$  を解く時は、一回の反復で  $T_{eo} \cdot T_{oe}$  が1回とその共役を1回掛ける計算が必要なので、 $D_W$  と  $D_W^\dagger$  を1回づつ掛ける場合と、ほぼ同じ計算量が必要である。いったん、

$$x_e = (1_{ee} - K^2 T_{eo} \cdot T_{oe})^{-1} \cdot B_e \quad (97)$$



が求めれば、前処理をしていない方程式の奇部分の関係  $x_o - KT_{oe}x_e = b_o$  を用いれば、

$$x_o = b_o + KT_{oe}x_e \quad (98)$$

と奇部分の解  $x_e$  がほとんど計算コストを掛けずに求めることが出来る。このように、偶奇前処理は計算コストがほぼ同じで条件数を改善できる簡単な方法であるため、格子 QCD ではいろいろな場合に使われている。

HMC 法では、 $D$  ではなく、 $\eta = (D^\dagger D)^{-1}\phi$  と  $A \equiv D^\dagger D$  の逆の計算が必要であるが、 $A^\dagger = A$  はエルミート演算子なので、CG 法のアルゴリズムが少し変わる。ここでは、 $A \cdot x = b$  (ただし、 $A^\dagger = A$ )、を解く CG 法を紹介する。

1. 初期解  $x_0$  選び、 $r_0 = b - A \cdot x_0$ ,  $p_0 = r_0$  を計算する。
2. 反復計算 ( $k = 0, 1, 2, \dots$ ):  $k$  での結果を使い、 $x_{k+1}$ ,  $r_{k+1}$ ,  $p_{k+1}$  を以下のように計算する。

$$\begin{aligned} x_{k+1} &= x_k + \alpha_k p_k, & \alpha_k &= \frac{(p_k, r_k)}{(p_k, A \cdot p_k)} \\ r_{k+1} &= r_k - \alpha_k A \cdot p_k \\ p_{k+1} &= r_{k+1} + \mu_k p_k, & \mu_k &= \frac{(r_{k+1}, A \cdot p_k)}{(p_k, A \cdot p_k)} \end{aligned}$$

前と同様に、 $|r_{k+1}|^2 < \varepsilon$  となったら、反復を打ち切り、 $x_{k+1}$  を解とする。

この計算では、1 回の反復で  $A = D^\dagger D$  の計算が必要なので、 $D$  の逆の計算の場合の演算量と同じである。ただし、逆を計算すべき演算子が  $D$  から  $A$  になったので、条件数は 2 乗される。

最後におまけを 1 つ。

$$(D + m_i \mathbf{1}) \cdot x_i = b, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (99)$$

という  $N$  個の線形方程式を、

$$(D + m_{\min} \mathbf{1}) \cdot x = b \quad (100)$$

という 1 つの線形方程式を解くのとほぼ同じコストで解くことが出来るアルゴリズムが存在する。ただし、 $m_{\min}$  は  $m_i$  なかで一番小さな質量である。(より正確には  $D + m_i \mathbf{1}$  の中で最も条件数の悪い  $m_i$  である。) このアルゴリズムは、multi-mass solver と呼ばれている。multi-mass solver が使えるためには、右辺が共通で、左辺の違いが  $D$  と可換であることが必要である。

### 3.4 データ解析の基礎

ここでは、データ解析の基礎的な事項について解説する。

まず、ハドロンの伝搬関数を使って、ハドロン質量を決める方法を紹介する。ハドロンの伝搬関数は、中間状態の完全系を使うことで、以下のよう表せる。ここでは、例として、空間の運動量をゼロに射影したパイ中間子を考える。

$$\begin{aligned} G(t) &\equiv \sum_{\vec{x}} \langle 0 | \pi(\vec{x}, t) \pi(\vec{0}, 0) | 0 \rangle = \sum_{\vec{x}} \langle 0 | e^{iP \cdot x} \pi(0) e^{-iP \cdot x} \pi(0) | 0 \rangle \\ &= \sum_{\vec{x}} \sum_{n, \vec{p}_n} \langle 0 | \pi(0) | n \rangle \langle n | \pi(0) | 0 \rangle e^{i p_n \cdot x} = \sum_n |Z_n|^2 e^{-m_n t}. \end{aligned}$$

ここで、 $P$  は 4 元運動量演算子、 $|n\rangle$  は、その固有値が  $p_n = (\vec{p}_n, iE_n)$ 、 $E_n = \sqrt{\vec{p}_n^2 + m_n^2}$  である固有状態、 $Z_n = \langle 0 | \pi(0) | n \rangle$  である。静止エネルギー  $m_n$  のなかで一番小さな値を  $m_0$  とする。 $t$  を充分大きく取れば、

$$G(t) = |Z_0|^2 e^{-m_0 t} + \sum_{n \neq 0} O(e^{-\Delta m_n t}), \quad \Delta m_n = m_n - m_0 \quad (101)$$

と、 $G(t)$  の振る舞いから、 $\pi$  で作られる状態の中で一番軽い粒子の質量  $m_0$  が求まる。このように、ハドロンの伝搬関数の大きな  $t$  での振る舞いからその演算子で作られる一番軽い粒子の質量を求めることが出来る。

周期的境界条件 ( $G_T(t+T) = G_T(t)$ ) の場合は、上の式は少し変更を受ける。(空間運動量がゼロの) 中間子の場合は、

$$\begin{aligned} G_T(t) &\equiv \sum_n \langle n | e^{iP_4 T} \pi(t) \pi(0) | n \rangle = G(t) + \sum_{n \neq 0} |\langle n | \pi | 0 \rangle|^2 e^{-m_n(T-t)} \\ &= \sum_n |Z_n|^2 \left( e^{-m_n t} + e^{-m_n(T-t)} \right) \\ &= |Z_0|^2 e^{-m_0 T/2} 2 \cosh[m_0(t - T/2)] + \dots \end{aligned} \quad (102)$$

となる。ここで、 $\dots$  の部分は  $O(e^{-\Delta m_n t}, e^{-\Delta m_n(T-t)})$  ( $n \neq 0$ ) の寄与を表している。図 13 (左) に周期的境界条件での  $\pi$  中間子と  $\rho$  中間子の伝搬関数を対数表示の縦軸を用いて載せる。 $t$  が大きなところでは、 $\pi$  の方が傾きが小さいので、 $\pi$  の方が  $\rho$  より軽いことが分かる。核子 (バリオン) の場合は、少し複雑になり、以下のように振る舞う。

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{x}} \langle 0 | N_\alpha(\vec{x}, t) N_\beta(\vec{0}, 0) | 0 \rangle &= \frac{(1 + \gamma_0)_{\alpha\beta}}{2} \left( Z_+ e^{-m_{N^+} t} - Z_- e^{-m_{N^-}(T-t)} \right) \\ &+ \frac{(1 - \gamma_0)_{\alpha\beta}}{2} \left( Z_- e^{-m_{N^-} t} - Z_+ e^{-m_{N^+}(T-t)} \right) \end{aligned} \quad (103)$$

ここで、 $m_{N^+}$  は正パリティの通常の核子の質量で、 $m_{N^-}$  は正パリティである核子に対する負パリティのパートナー粒子の質量である。また、 $\alpha, \beta$

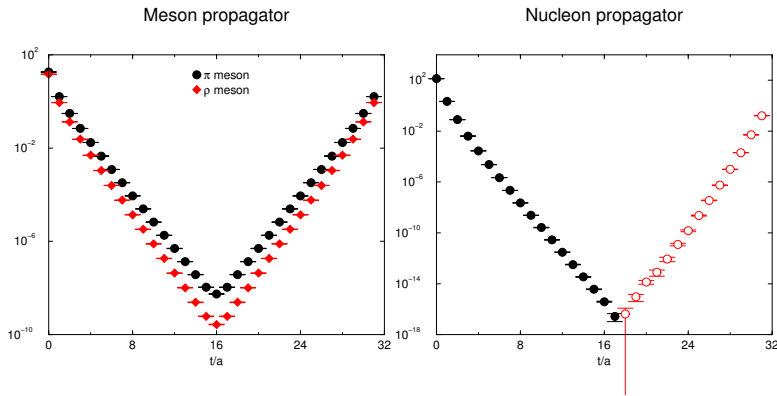


図 13: (左) 周期的境界条件での  $\pi$  中間子と  $\rho$  中間子の伝搬関数。縦軸は対数表示、横軸は  $t/a$ 。(右) 周期的境界条件での核子の伝搬関数。

はスピノルの添字であり、粒子のスピンに対応する。図 13 (右) に核子の伝搬関数のスピニアップの成分 (ディラック表示で  $\alpha = \beta = 1$  の成分) を載せる。式から分かるように  $t = 0$  から減衰している成分が通常の核子の伝搬であり、 $T = 32a$  から減衰しているのが負パリティの成分の伝搬に対応している。両者の傾きを比べると  $m_{N^+} < m_{N^-}$  であることが分かる。

ハドロンの伝搬関数から基底状態の質量を引き出すには、伝搬関数を式 (101) (周期的境界条件の場合は、式 (102) や式 (103) ) の  $\dots$  で示される励起状態の寄与が無視出来る大きな  $t$  の領域で、第 1 項の形を仮定してフィットする必要がある。この場合に重要なのは、どの  $t$  から励起状態が無視出来るかを知ることであるが、そのために有効質量  $m(t)$

$$m(t) = -\log \frac{G(t/a + 1)}{G(t/a)} \quad (104)$$

を導入する。有効質量は  $t$  が充分大きくなれば、 $\lim_{t \rightarrow \infty} m(t) = m_0$  と基底状態の質量に一致する。したがって、もし  $n = 0$  以外の励起状態の寄与が無視出来るようになれば、 $m(t)$  はある  $t$  以上では、定数になる。その  $t$  を  $t_{\min}$  とすれば、 $t_{\min} \leq t \leq t_{\max}$  がフィットする範囲になる。(周期的境界条件などの場合や、大きな  $t$  で精度が悪くなる場合などは、 $t$  の上限値  $t_{\max}$  も導入する必要がある。) 図 14 に、 $\rho$  中間子の有効質量を載せる。○を見ると  $t/a \geq 8$  で有効質量  $m(t)$  がほぼ一定になっているので、 $t \geq 8a$  でフィットすれば良い。伝搬関数をフィットして得られた結果が実線である。○はクォークを 1 点に置いた演算子を用いて  $\rho$  中間子の伝搬関数を計算したものであるが、それを空間的に広げた演算子に変えることで、励起状態の寄与を減らせることが経験的に知られている。これを smearing による演算子の改良と呼ぶ。具体的には、クォークの伝搬関数

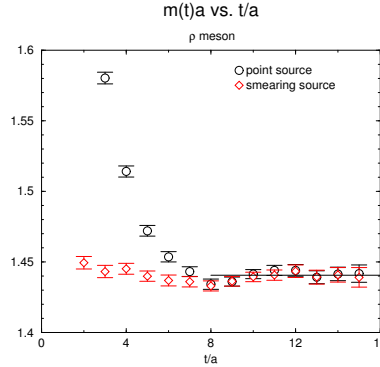


図 14:  $\rho$  中間子の有効質量。○は通常の演算子の場合、◇は改良された演算子の場合、に対応する。実線は伝搬関数をフィットして得られた結果。

を計算する式を

$$D_{xy}\phi_y = \delta_{t,t_0}\delta_{\vec{x},\vec{x}_0} \quad (105)$$

と右辺を空間の 1 点  $\vec{x}_0$  に置くのではなく、例えば

$$D_{xy}\phi_y = \delta_{t,t_0}Ae^{-B|\vec{x}-\vec{x}_0|} \quad (106)$$

と指数関数で空間的に拡げたりするのである。図にある◇は、 $A, B$  を適当に調整して計算した伝搬関数の有効質量の振る舞いである。非常に小さな  $t$  で有効質量が一定になっているので、小さな  $t$  からフィットすることができ、その結果、誤差を小さくすることが可能になる。(一般に、伝搬関数の統計誤差は、 $t$  が大きいほど大きくなる。)

さて、次に統計誤差の評価方法や、伝搬関数などから質量を引き出すためのフィットについて簡単に紹介する。物理量  $\mathcal{O}$  の統計平均と統計誤差は以下の式で与えられる。

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}_i, \quad \delta \langle \mathcal{O} \rangle = \sqrt{\frac{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2}{N-1}} \quad (107)$$

ここで、 $N$  はゲージ配位の総数、 $\mathcal{O}_i$  は  $i$  番目のゲージ配位で計算した物理量の値である。上に与えた統計誤差の評価は、 $N$  が充分大きく、かつ各データ  $\mathcal{O}_i$  が互いに独立なら正しい。しかしながら、データの独立性を確かめるのは難しい。また、質量などのより複雑な物理量に対する誤差の評価には、誤差の伝搬公式を使うが、その場合には、誤差を過大評価してしまう場合がある。そのような時に、誤差をより正確に求めるために考案された方法の 1 つがジャックナイフ法である。一番簡単なビンサイズが 1 のジャックナイフ法では、まず、 $N$  個のデータから 1 つのデータを取り除い

た  $N - 1$  のデータでの平均を定義する。

$$\bar{\mathcal{O}}_i = \frac{1}{N-1} \sum_{k \neq i} \mathcal{O}_k \quad (108)$$

このような1つを除いた平均は  $N$  通りある。これを使って、物理量  $\mathcal{O}$  の任意の関数  $f(\mathcal{O})$  に対して、その平均と誤差を

$$\langle f(\mathcal{O}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\bar{\mathcal{O}}_i), \quad (109)$$

$$\delta \langle f(\mathcal{O}) \rangle = \sqrt{N-1} \sqrt{\langle f(\mathcal{O})^2 \rangle - \langle f(\mathcal{O}) \rangle^2} \quad (110)$$

で定義するのがジャックナイフ法である。統計誤差が通常に比べて  $N - 1$  倍されているのは、同じデータを  $N - 1$  回使っているからで、 $f(\mathcal{O}) = \mathcal{O}$  の場合に通常の統計誤差と一致することからも正しいことが分かる。ジャックナイフ法の利点は、(1) どんな物理量でも統計誤差が計算出来る (2) 後述するデータ間の相関も取り入れられる。 (3) ビンサイズを1から増やすことで、(やはり後述する) 自己相関も評価できる、ということである。(3) について補足する。まず、 $N$  個のデータを  $n$  個の連続したデータ (これをビンと呼ぶ) に分ける。ビンの数は  $N_b = N/n$  である。 $i$  番目のビンは  $n$  個の添字  $b_i = ((i-1)n + 1, (i-1)n + 2, \dots, in)$  で特徴づけられる。そこで  $i$  番目のビンを除いた平均

$$\bar{\mathcal{O}}_i = \frac{1}{N-n} \sum_{k \notin b_i} \mathcal{O}_k \quad (111)$$

を用いて、平均と誤差を

$$\langle f(\mathcal{O}) \rangle = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} f(\bar{\mathcal{O}}_i), \quad (112)$$

$$\delta \langle f(\mathcal{O}) \rangle = \sqrt{N_b - 1} \sqrt{\langle f(\mathcal{O})^2 \rangle - \langle f(\mathcal{O}) \rangle^2} \quad (113)$$

と一般化したのが、ビンサイズ  $n$  のジャックナイフ法である。 $n = 1$  なら前の定義に戻る。

伝搬関数からハドロン質量を引き出すためには、フィットという操作が必要になる。 $K$  個のデータとその統計誤差が  $(g(x_i), \delta g(x_i))$  ( $i = 1, 2, \dots, K$ ) と与えられたとする。ここで、 $x_i$  はデータの違いを表す変数で、伝搬関数の場合には、離散的な時間  $t$  に対応する。このデータをフィット関数  $f(x, c)$  でフィットすることを考える。ここで、 $c = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}$  はフィットパラメタでその数は  $n$  である。 $x$  は  $x_i$  に対応する変数である。伝搬関数の例では、

$$f(x, c) = c_1 \cosh(c_2(x - T/2)) \quad (114)$$

であり、 $c_2 = m$  が質量、 $c_1 = |Z_0|^2$  が振幅、 $x = t$  が時間である。最適なフィットパラメータを決めるには、 $\chi^2$  フィットというものを用いる。これは

$$\chi^2(c) = \sum_{i=1}^K \frac{\{f(x_i, x) - g(x_i)\}^2}{\delta g(x_i)^2} \quad (115)$$

が最小になるようにフィットパラメータ  $c$  を決める方法である。直感的には、点  $x_i$  でのフィット関数と実際のデータとのズレがその誤差程度になるように決めていこうというものである。したがって、良いフィットの場合、 $\chi^2 \simeq K - n =$  自由度の数、になる。フィットパラメータ  $c_i$  の誤差は、 $c_i$  以外の値を  $\chi^2$  の最小値  $\chi_{\min}^2$  を与える最適値にとり、 $c_i$  を最適値から変化させて、 $\chi^2$  が 1 だけ増える  $c_i$  の変化分としている。つまり、 $c_i$  の誤差  $\delta c_i$  は  $\chi^2(c_i \pm \delta c_i, c_{j \neq i}) = \chi_{\min}^2 + 1$  を満たす。

しかしながら、この誤差の計算方法は、データ間の相関がある（つまり、 $g(x_i)$  と  $g(x_j)$  が独立でない）と正しい誤差評価を与えない。そのような場合は、前述のジャックナイフ法か、相関を考慮した  $\chi^2$  フィットを使う。相関を考慮した  $\chi^2$  は

$$\chi^2(c) = \sum_{i,j=1}^K \{f(x_i, x) - g(x_i)\} C_{ij}^{-1} \{f(x_j, x) - g(x_j)\} \quad (116)$$

で与えられる。ここで、 $C_{ij}$  は相関行列と呼ばれるもので、

$$C_{ij} = \frac{\langle G(x_i)G(x_j) \rangle - \langle G(x_i) \rangle \langle G(x_j) \rangle}{N - 1}, \quad g(x_i) \equiv \langle G(x_i) \rangle \quad (117)$$

で定義される。 $G(x)$  の統計平均が  $g(x)$  なので、この式の分子がデータ間の相関を表していることが分かるであろう。もし、相関が無ければ誤差の定義から  $C_{ij} = \delta_{ij} \delta(x_i)^2$  となり、相関の無い場合の  $\chi^2$  の定義に一致する。実際の計算では、相関行列を正確に求めることは難しい。 $C_{ij}$  が正確に求まらないと近似的にゼロ固有値を持ってしまふことがあり、逆行列  $C_{ij}^{-1}$  がうまく計算できなくなる。そのような場合にはジャックナイフ法などを用いて誤差を評価する。（各ビンで通常の  $\chi^2$  フィットを行い、その結果で得られた  $c$  に対して、ビン間での平均や誤差を計算し、最適パラメータの  $c$  の値とその誤差とする。）

統計誤差の正しい評価には、異なるゲージ配位間の相関も取り入れる必要がある。ゲージ配位間（一般にはモンテカルロのサンプル間）の相関は、自己相関関数により見積もることが出来る。 $N$  個のゲージ配位により計算された物理量を  $\mathcal{O}_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) とする。この時、自己相関関数は

$$A(t) = \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} \mathcal{O}_i \mathcal{O}_{i+t} - \langle \mathcal{O} \rangle^2 \quad (118)$$

で定義される。これは、モンテカルロ時間が  $t$  だけ離れた配位間の相関を表すもので、一般に  $e^{-t/\tau}$  のように指数関数的に減少していく。 $\tau$  のことを自己相関時間と呼び、平衡に達するまでのモンテカルロ時間の目安を与える。統計誤差の評価に重要なものは、積分された自己相関時間であり、

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{t=1}^N \frac{A(t)}{A(0)} \quad (119)$$

で与えられる。 $\tau_{\text{int}}$  は統計的に独立なゲージ配位を生成するのに必要なモンテカルロ時間の目安を与える。独立なゲージ配位は  $N$  でなく  $N/\tau_{\text{int}}$  になるので、 $\tau_{\text{int}}$  を知る事ができれば、正しい統計誤差は

$$\delta\langle\mathcal{O}\rangle = \sqrt{\frac{\langle\mathcal{O}^2\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle^2}{N/\tau_{\text{int}} - 1}} \quad (120)$$

と計算出来る。自己相関関数や自己相関時間は物理量  $\mathcal{O}$  やシミュレーションのアルゴリズムなどによって異なる。図 15 に位相電荷 (topological

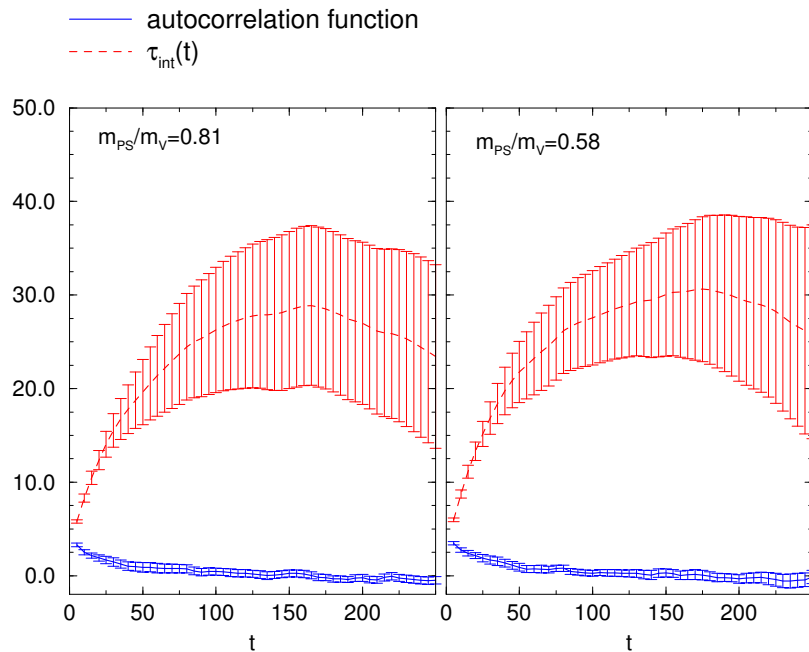


図 15: 位相電荷の自己相関関数 (下、青) と  $t$  まで積分された自己相関時間  $\tau_{\text{int}}(t)$  (上、赤) .

charge)  $Q$  に対する相関関数と  $t$  まで積分された自己相関時間  $\tau_{\text{int}}(t)$  を載せる。 $\tau_{\text{int}} = \lim_{t \rightarrow \infty} \tau_{\text{int}}(t)$  である。位相電荷  $Q$  は自己相関が長いことで

知られる物理量であり、この例では  $\tau_{\text{int}} \simeq 30$  程度になっている。また、擬スカラー中間子とベクトル中間子の質量の比は、左は 0.81 で右は 0.58 となっており、右の方がクォーク質量が軽く（この比はクォーク質量を軽くするほど小さくなり、クォーク質量がゼロになると、この比もゼロになる。）、軽い方が、若干だが自己相関も長くなっている。

ビンサイズを変えたジャックナイフ法を用いることで、自己相関の効果を取り入れることができる。自己相関が有る場合は、統計誤差はビンサイズ  $n$  とともに増加していく。ビンサイズ  $n$  が積分された自己相関時間  $\tau_{\text{int}}$  より大きくなるとそれ以上誤差は増加せず一定になる。誤差が一定になる最小の  $n$  を  $n_{\text{min}}$  とすると、その時のジャックナイフ法の誤差が正しい統計誤差を与える。また、この時、 $n_{\text{min}} \sim \tau_{\text{int}}$  である。図 16 に擬スカラー

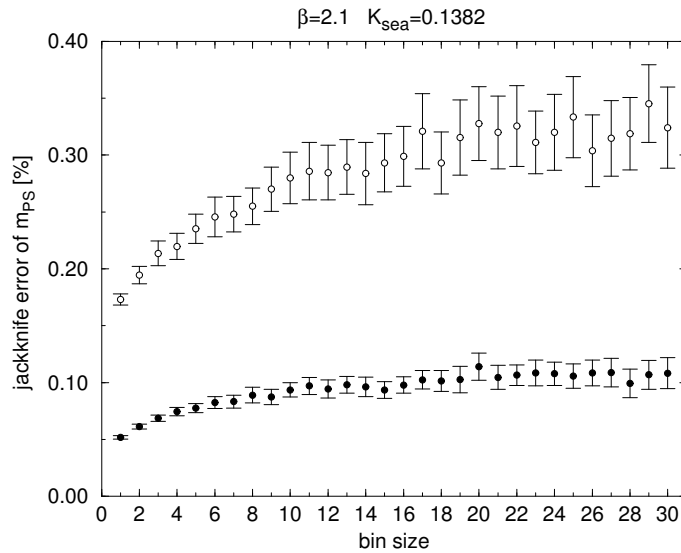


図 16: 擬スカラー粒子の質量のジャックナイフ法による誤差 (%) のビンサイズ依存性。

粒子の質量  $m_{\text{PS}}$  のジャックナイフ法による誤差 (%) のビンサイズ依存性を載せる。下の黒四角が重い場合で、上のしろ四角が軽い場合である。ビンサイズを大きくしていくと誤差は増大していくが、重い場合は  $n \simeq 15$ 、軽い場合は  $n \simeq 20$  で誤差がほぼ一定になっているのが分かる。一定になった時の誤差はそれぞれ約 0.1%、0.3% である。



### 3.5 ハドロン質量のカイラル外挿と連続極限

ハドロンの伝搬関数を計算し、そこからフィットによりハドロン質量とその統計誤差を引き出せたとしよう。前にも述べたように  $m_\pi \simeq 140$  MeV という物理的な  $\pi$  中間子の質量を与えるような軽いクォーク質量（物理点のクォーク質量と呼ぶ）を用いて直接シミュレーションをするのは難しい。そこで、通常は、現実より重い質量の何点かでハドロン質量を計算し、その結果を物理点のクォーク質量まで外挿することで求めたいハドロン質量を得る。この外挿のことをカイラル外挿と呼ぶ。ここでは、ウィルソン・クォーク作用を用いたクエンチ近似でのハドロン質量の計算結果を使って、カイラル外挿のやり方を具体的に紹介したい。

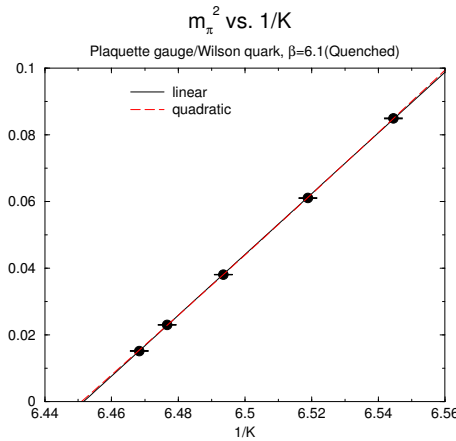


図 17:  $\pi$  中間子質量の 2 乗の  $1/K$  依存性。ここで、 $K$  はホッピング・パラメタである。実線は  $1/K$  に関して 1 次のフィット、破線は 2 次のフィットを示す。

図 17 に、格子単位での  $\pi$  中間子の質量の 2 乗 ( $m_\pi^2 a^2$ ) を縦軸、 $1/K$  を横軸にプロットしたものを載せる。ここで  $K = \frac{1}{2ma + 8}$  はホッピング・パラメタでその逆数はクォーク質量に関する。図から分かるように、 $m_\pi^2 a^2$  は  $1/K$  のほぼ 1 次で減少しているの、以下のような  $1/K$  の多項式でフィットを行う。

$$m_\pi^2 a^2 = A_\pi \left( \frac{1}{K} - \frac{1}{K_c} \right) + B_\pi \left( \frac{1}{K} - \frac{1}{K_c} \right)^2 + \dots \quad (121)$$

ここで、 $K_c, A_\pi, B_\pi, \dots$  がフィット・パラメタである。特に、 $K_c$  は臨界ホッピング・パラメタと呼ばれ、 $\pi$  中間子の質量がゼロになる点である。このようなフィットをカイラル・フィットと呼ぶ。連続理論の PCAC 関係

式  $m_\pi^2 = Am_q$  にヒントを得て、ウィルソン・フェルミオンのクォーク質量  $m_q$  を

$$2m_q a = \frac{1}{K} - \frac{1}{K_c} \quad (122)$$

で定義する。この式から分かるように  $1/K_c$  はウィルソン・フェルミオンのクォーク質量の加法的繰り込み定数に対応している。連続理論では、カイラル対称性のおかげでクォーク質量の加法的繰り込みは無いが、ウィルソン・フェルミオンはカイラル対称性をあらわに破っているため、加法的繰り込みが必要になる。図 17 の中の実線は、 $m_q a$  の 1 次でのフィット ( $K_c$  と  $A_\pi$  の 2 つがパラメタ) の結果であり、破線は 2 次のフィット ( $B_\pi$  が加わる) の結果である。どちらもデータをよく再現している。

他のハドロンのカイラル・フィットも考えよう。図 18 にベクトル中間子である  $\rho$  中間子とスピン 1/2 であるバリオンである核子 (陽子と中性子の総称) の  $1/K$  依存性を載せる。カイラル・フィットとして、やはり

$$m_\rho a = A_\rho + B_\rho 2m_q a + \dots \quad (123)$$

$$m_N a = A_N + B_N 2m_q a + C_N (2m_q a)^2 + \dots \quad (124)$$

という多項式のフィットを考える。図中の実線は  $\rho$  中間子に関しては 1 次、明らかに曲がりの見える核子に関しては 2 次のフィットの結果である。

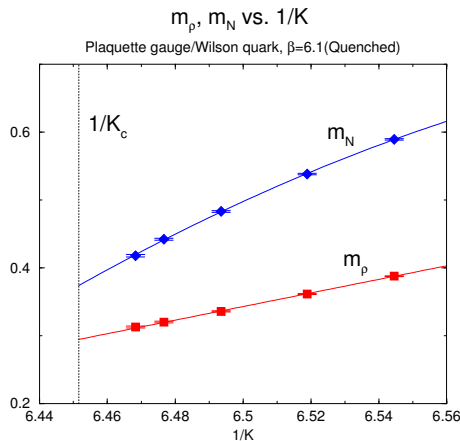


図 18:  $\rho$  中間子と核子の質量の  $1/K$  依存性。実線は  $1/K$  に関するフィットであり、 $\rho$  中間子は 1 次、核子は 2 次でフィットしている。

表 2 にカイラル・フィットの結果得られたパラメタの値を載せる。括弧の中の数字はジャックナイフ法で評価したパラメタの統計誤差である。最後の列は、自由度あたりの  $\chi^2$  の値である。 $\rho$  や核子の場合、この値が 1 に近いので良いフィットであるが、 $\pi$  中間子の場合には 1 よりかなり大きい。

$\pi$  中間子はデータの誤差が小さいので、そのために  $\chi^2$  が大きくなってしまったのかもしれないが、フィット関数の問題の可能性もある。フィット関数の他の可能性は次章で紹介する。

粒子	次数	$A$	$B$	$C$	$K_c$	$\chi^2/\text{自由度}$
$\pi$	1	0.911(2)	—	—	0.155001(2)	5.3
$\pi$	2	0.884(10)	02.5(8)	—	0.155015(6)	3.8
$\rho$	1	0.2947(10)	1.00(1)	—	—	1.0
$N$	2	0.374(3)	2.82(12)	-5.39(97)	—	0.9

表 2: カイラル・フィットのパラメタの値。最後の列は、フィットの  $\chi^2$  を自由度で割った量である。

フィットの結果を使って、物理点のクォーク質量へのカイラル外挿を行う。まず、物理点に対応するクォーク質量の値  $m_l a$  を決定する。そのために、 $m_\pi^2$  と  $m_\rho^2$  の比が正しい値になるという条件

$$\frac{m_\pi^2}{m_\rho^2} = \frac{135^2}{770^2} = \frac{A_\pi 2m_l a}{(A_\rho + B_\rho 2m_l a)^2} \quad (125)$$

を用いて、 $m_l a$  を求める。ここでは、 $\pi$  中間子に関しては 1 次の式を使ったが 2 次も同様である。表のパラメタの値を代入してこの式を解くと、 $m_l a = 0.0015$  を得る。ここでは簡単のために中心値だけを載せたが、統計誤差を計算することも可能である。次に  $\rho$  中間子の実験値を使って格子間隔  $a$  を以下のように決める。

$$m_\rho a = A_\rho + B_\rho 2m_l a = 0.77(\text{GeV}) \cdot a \Rightarrow a = \frac{A_\rho + B_\rho 2m_l a}{0.77} \text{GeV}^{-1}. \quad (126)$$

表のパラメタの値と  $m_l a = 0.0015$  を用いると  $a = 0.387 \text{ GeV}^{-1}$  を得る。 $\rho$  中間子ではなく  $\pi$  中間子を使っても同様に  $a$  を求めることが出来るが、両者の質量の比を正しく取ったので、得られる値は同じである。ここでやったことは、格子間隔、つまり、格子 QCD の結合定数  $g^2$ 、と  $u, d$  クォークの質量の平均値  $m_l$  という理論の 2 つのパラメタを  $m_\pi, m_\rho$  という 2 つの物理量から決定したことに相当する。これ以外の物理量は全て格子 QCD の予言値となる。まず、 $m_l a$  と  $a$  の値から、 $m_l = 3.88 \text{ MeV}$  が求まる。また、核子の質量は

$$m_\rho a = \frac{A_N + B_N 2m_l a + C_N (2m_l a)^2}{a} \quad (127)$$

から  $m_N = 989 \text{ MeV}$  と求まる。実験値が  $m_N \simeq 930 \text{ MeV}$  なので、当たらずとも遠からずというところである。

ここで得られた核子の質量は、有限の格子間隔  $a$  でのものなので、最終的な予言値を得るには、 $a \rightarrow 0$  という連続極限を取る必要がある。そのため、幾つかの異なった  $g$  で上記の計算と解析を繰り返す必要がある。物理的な格子体積は一定に保ったまま計算を行う必要があるので、 $a$  を小さくするとそれだけ格子点が必要になり、計算コストが増大する。図 19 は、核子の質量  $m_N$  の格子間隔依存性である。図には、 $m_N(a) = m_N + C_1 a$  (1次, 実線)、 $m_N(a) = m_N + C_1 a + C_2 a^2$  (2次, 点線) でフィットした結果も同時に載せている。切片  $m_N$  が (この例ではクエンチ近似の) 格子 QCD の予言値である。1次のフィットの結果は実験値より若干小さく、2次のフィットの場合は実験値とほぼ等しいがその誤差は大きい。

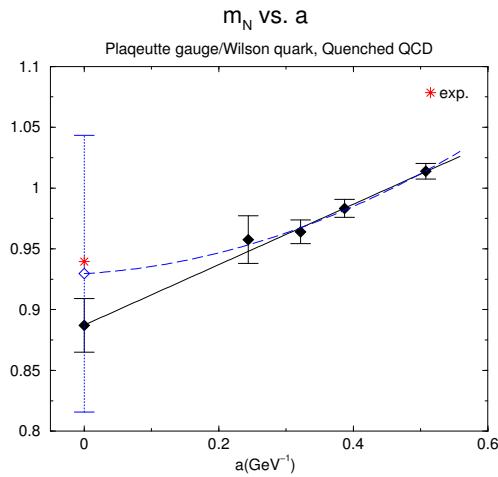


図 19: 核子の質量の  $a$  依存性。実線は 1 次式、破線は 2 次式によるフィットの結果である。 $a = 0$  にあるダイヤモンドは連続極限での値であり、星印 \* は実験値である。

格子 QCD の 1 つの大きな目標は、いろいろなハドロン質量をクエンチ近似無しで計算し、その連続極限が実験値と誤差の範囲で一致することを確立することである。

### 3.6 ハドロン質量の最新結果の紹介

ここで、ハドロン質量に関する最新の結果を紹介する。(ただし、講義を行った 2010 年 12 月までの結果なので、今では最新ではないが。)

はじめに紹介するのは、ヨーロッパの研究グループである BMW (Budapest-Marseille-Wuppertal) Collaboration の結果 (Science 322 (2008) 1224) である。図 20 に 2+1 フレーバーの格子 QCD で計算されたハドロン質量の

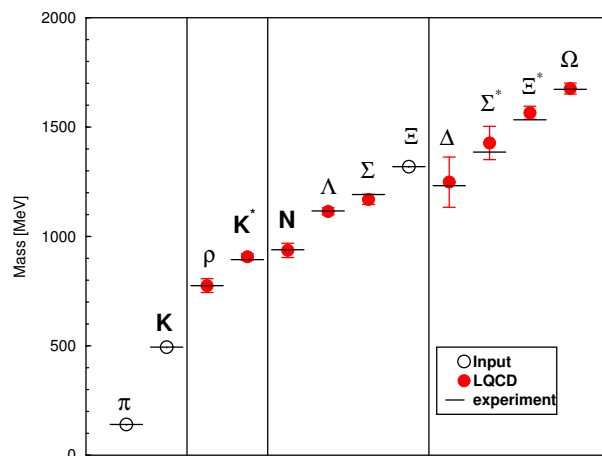


図 20: ハドロン質量の最新結果の一例。論文 (Science 322 (2008) 1224) の結果をグラフにしたもの。詳細は本文を参照。

結果を載せる。実際に計算をおこなったクォーク質量でのパイ中間子の最低質量は  $m_{\pi}^{\min.} \simeq 190$  MeV とかなり実験値 ( $m_{\pi} \simeq 140$  MeV) に近く、カイラル外挿からの不定性は小さく抑えられている。また、計算を行った全てのクォーク質量で  $m_{\pi}L \geq 4$  を満たしているので、経験的に有限体積効果による不定性も小さいと思われる。(Lは空間の1辺の長さである。)すでに  $a \rightarrow 0$  の連続極限も取られているので、有限の格子間隔による不定性も小さい。白抜きのデータは、2つのクォーク質量 (u,dの平均とs) とゲージ結合定数 (格子間隔  $a$ ) を決めるのに使ったインプット ( $m_{\pi}, m_K, m_{\Xi}$ ) であり、他の点が格子QCDの”予言値”である。横線が実験で測られた質量であり、 $\rho$  や  $\Delta$  などの不安定粒子 (共鳴状態) の場合は、横線が共鳴エネルギーの中心値を表している。図から分かるように、理論 (QCD) の予言は実験値と良い精度で一致している。このグループは、最近では、さらにクォーク質量を減らして  $m_{\pi}^{\min.} \simeq 120$  MeV での計算も行っている。この場合は、カイラル外挿ではなく、カイラル内挿なので、その不定性はほとんど無い。興味のある方は論文 (Phys. Lett. B701 (2011) 265 及び JHEP 1108(2011) 148) を見て欲しい。

次に、筆者も所属していた日本の研究グループである PACS-CS Collaboration (PACS-CS という計算機を用いた研究グループであったが、計算機の運用が終ったため、その活動は休止中) の結果を紹介する。図21に2+1フレーバーの格子QCDでのハドロン質量の結果 (Phys. Rev. D79(2009)034503) を載せる。この計算は  $a = 0.09\text{fm}$  の1点で行っており、連続極限への外挿を取っていない。空間のサイズは  $L = 2.9$  fm、 $m_{\pi}^{\min.} \simeq 156$  MeV なので、 $m_{\pi}^{\min.}L \simeq 2.3$  と有限サイズ効果が若干、心配であるが、その点を別に

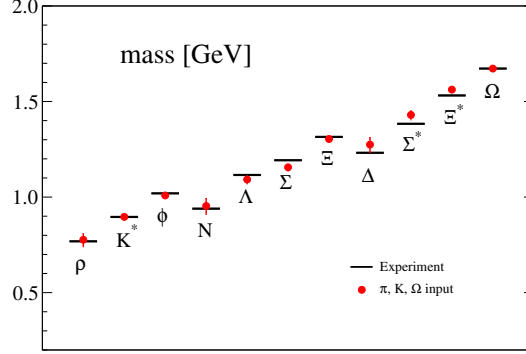


図 21: ハドロン質量の結果。論文 (Phys. Rev. D79(2009)034503) から転載。詳細は本文を参照。

すれば、ほぼ物理的なクォーク質量 (つまり  $m_\pi \simeq 140$  MeV) での計算になっており、カイラル外挿が不要になっている。この計算では、クォーク質量などのパラメタを決めるのに、 $m_\pi, m_K, m_\Omega$  を用いているので、図では  $\Omega$  以外は、格子 QCD 計算による予言値である。連続極限はまだ取っていないが、実験値である横棒との一致は良い。最近では、空間サイズをより大きく  $L = 5.8$  fm とし、また、 $m_\pi \simeq 140$  MeV と物理的な値にした計算が行われている。この場合は、 $m_\pi L \geq 4$  なので有限体積効果は小さい。

PACS-CS Collaboration では、論文 (Phys. Rev. D81 (2010) 074503) において、Reweighting という手法を使って  $m_\pi \simeq 140$  MeV でのハドロン質量を計算している。その方法と結果を簡単に紹介しよう。Reweighting とは、クォーク質量  $m^*$  で生成したゲージ配位を使って、クォーク質量が  $m$  でのハドロン質量を計算する方法であり、その計算は以下のように実行される。演算子  $\mathcal{O}[U]$  の期待値をこの方法で計算するために、

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{O}[U] \rangle_m &= \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{O}[U] \det D_m(U) e^{-S_G(U)}}{\int \mathcal{D}U \det D_m(U) e^{-S_G(U)}} \\
&= \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{O}[U] \frac{\det D_m(U)}{\det D_{m^*}(U)} \det D_{m^*}(U) e^{-S_G(U)}}{\int \mathcal{D}U \frac{\det D_m(U)}{\det D_{m^*}(U)} \det D_{m^*}(U) e^{-S_G(U)}} \\
&= \frac{\langle R_{m/m^*}(U) \mathcal{O}[U] \rangle_{m^*}}{\langle R_{m/m^*}(U) \rangle_{m^*}} \quad (128)
\end{aligned}$$

と等式変形する。ここで、

$$R_{m/m^*}(U) = \frac{\det D_m(U)}{\det D_{m^*}(U)} \quad (129)$$

である。つまり、 $m^*$  で作られたゲージ配位は重み  $\det D_{m^*}(U)$  を持っているので、そのズレを  $R_{m/m^*}(U)$  を使って正しい  $m$  での重み  $\det D_m(U)$  に reweight したのである。論文では、 $m_\pi \simeq 156$  MeV ( $m^*$  に相当) で生成された配位を使って、 $m_\pi \simeq 140$  MeV ( $m$  に相当) でのハドロン質量を計算した。この方法は、 $m$  と  $m^*$  があまり違っていると  $R_{m/m^*}(U)$  が 1 から大きくずれてしまうので有限の配位数では数値的にうまくいかないが、この場合はクォーク質量のズレがわずかなので、問題無く Reweighting 法で計算出来た。図 22 に Reweighting 法によるハドロン質量の計算結果を

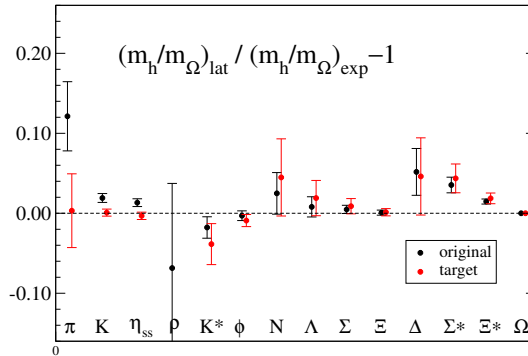


図 22: Reweighting 法によるハドロン質量の実験値からのずれ。論文 (Phys. Rev. D81(2010)074503) から転載。詳細は本文を参照。

載せる。original と書かれた黒丸が  $m^*$  での計算であり、target と書かれた赤丸が Reweighting 法で計算した  $m$  での結果である。図の縦軸は、 $\Omega$  バリオンの質量を単位にして測った各ハドロン質量の格子での値と実験値との比の 1 からのズレ、つまり  $(m_h/m_\Omega)_{\text{lat}} / (m_h/m_\Omega)_{\text{exp}} - 1$ 、をプロットしている。定義から、 $\Omega$  に対しては誤差なしで 1 を与える。図から分かるように  $m_\pi$  や  $m_K$  は格子 QCD の計算が実験値と誤差の範囲で一致しているの、クォーク質量 ( $u, d$  の平均と  $s$  の 2 つ) の Reweighting 法がうまくいっていることが分かる。共鳴状態である  $\rho$  や 10 重項 (デカプレット) バリオン ( $\Delta, \Sigma^*, \Xi^*$ ) を除けば、他のハドロンの質量も (若干大きな) 誤差の範囲で実験値を再現している。

最近では、 $u, d$  クォークの平均ではなく、 $m_u, m_d$  それぞれを別にした Reweighting 法も試みられている。その場合はクォーク質量だけでなく、

電磁相互作用による  $u, d$  の違い ( $u$  の電荷は  $2e/3$ 、 $d$  の電荷は  $-e/3$ ) を取り入れた計算が行われている。

### 3.7 カイラル外挿に関するコメント

この講義では、クォーク質量依存性を評価し、カイラル外挿を行うのに、多項式のフィットを使ったが、実際の研究では、物理量によってはカイラル摂動論によるフィットがしばしば使われている。カイラル摂動論は QCD の低エネルギーの有効理論であり、そこで使われる有効自由度は、カイラル対称性の自発的破れによって現れる南部・ゴールドストーン粒子である  $\pi$  中間子 (3 フレーバーでは、K 中間子を含めた擬スカラー中間子) である。クォークの質量がゼロ ( $\pi$  中間子の質量もゼロ) からのズレを展開パラメタとして有効理論を構築していくのがカイラル摂動論である。その詳細の紹介は省略するが、2 フレーバーの場合の、パイ中間子の質量  $m_\pi^2$  と崩壊定数  $f_\pi$  のクォーク質量  $m_q$  依存性は以下で与えられる。

$$m_\pi^2 = 2Bm_q \left[ 1 + \frac{2Bm_q}{16\pi^2 f^2} \ln m_q + cm_q \right] \quad (130)$$

$$f_\pi = f \left[ 1 - \frac{2Bm_q}{8\pi^2 f^2} \ln m_q + dm_q \right] \quad (131)$$

ここで、それぞれの量のはじめの項が最低次 (Leading Order) の寄与であり、2 項目、3 項目が次の次数 (Next-to-Leading Order) の寄与を表している。3 項目は多項式展開の NLO と同じであるが、2 項目はカイラル摂動論に特有の項で、chiral log と呼ばれている。 $m_\pi^2$  の LO は  $m_\pi^2 = 2Bm_q$  となり、PCAC 関係式を与えている。

カイラル摂動論のフィットの例を論文 (Phys. Rev. Lett. 101(2008) 202004) から紹介しよう。この研究は、筆者が所属する JLQCD Collaboration という日本の研究グループと台湾の TWQCD Collaboration の共同研究で、カイラル対称性の性質の良いオーバーラップ・フェルミオンを用いた 2 フレーバー格子 QCD の計算である。図 23 の上に  $m_\pi^2/m_q$  (GeV)、下に  $f_\pi$  (GeV) を、 $m_\pi^2$  (GeV<sup>2</sup>) の関数としてプロットしている。図の中の線は以下の形のカイラル摂動論の NLO によるフィットである。

$$\frac{m_\pi^2}{m_q} = 2B \left[ 1 + \frac{1}{2} X \ln X + c_3 X \right] \quad (132)$$

$$f_\pi = f [1 - X \ln X + c_4 X] \quad (133)$$

図にはそれぞれ 3 本の線があるが、 $X = x \equiv 4Bm_q/(4\pi f)^2$  (青点破線)、 $X = \hat{x} \equiv 2m_\pi^2/(4\pi f)^2$  (緑破線)、 $X = \xi \equiv 2m_\pi^2/(4\pi f_\pi)^2$  (赤実線)、と展開パラメタの違いに対応している。 $\hat{x}$  及び  $\xi$  に  $m_\pi^2$  や  $f_\pi$  などを入れると、も



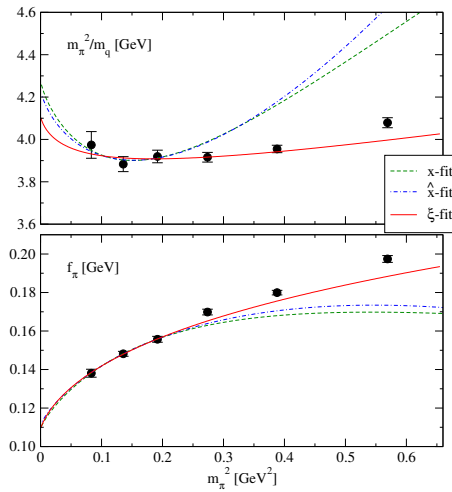


図 23:  $m_\pi^2/m_q$  と  $f_\pi$  のカイラル摂動論の NLO を使ったフィット。論文 (Phys. Rev. Lett. 101(2008)202004) から転載。詳細は本文を参照。

ともとのカイラル摂動論の式との違いは NNLO (Next-to-Next-to Leading Order) なので、NLO で考えている限りその違いは無視できる。 $\pi$  中間子の質量が軽い 3 点を使ってフィットを行ったが、どのフィットもデータの振る舞いを良く説明している。これは、この軽い 3 点の振る舞いは、カイラル摂動論の NLO で良く説明出来ることを意味している。しかし、フィット範囲を超えてパイ中間子が重くなると、 $x$ -fit,  $\hat{x}$ -fit はデータから大きくずれてしまうので、NLO がうまくいかないことを示唆している。一方、 $\xi$ -fit はフィット範囲を超えてもデータの振る舞いを良く記述している。これは、 $\xi$  の中の  $f_\pi$  のクォーク質量 ( $\pi$  中間子質量) 依存性のおかげである。しかしながら、この結果をもって  $\xi$ -fit の NLO が重いところでもうまくいくと結論することは出来ない。なぜなら、 $x, \hat{x}$  と  $\xi$  の違いは NNLO なので、その違いが見えてしまうことは NLO が不十分であることを意味しているからだ。そこで、カイラル摂動論の NNLO の式を用いて、性質の良かった  $\xi$ -fit によりすべての点をフィットすることを試みた。図 24 に  $m_\pi^2/(2Bm_q) - 1$  (上)、 $f_\pi/f - 1$  (下) という LO からのズレを表す量に対する  $\xi$ -fit の結果を載せる。赤い実線がカイラル摂動論の NNLO により 6 点すべてをフィットした結果である。確かに全領域で良くフィットできている。青い破線は、全体の中での NLO の寄与 (LO の寄与は既に差し引かれている) を表している。 $m_\pi^2/m_q$  に関しては、(NNLO-NLO)/(NLO-LO) の大きさは右から 3 番目の点 ( $m_\pi|_{\text{sim}} \approx 500$  MeV に対応) で 30% 程度とそれほど大きくはないが、 $f_\pi$  の場合は、同じ点で 70% とかなり大きい。このように、カイラル摂動論の収束性は物理量ごとに異なる。

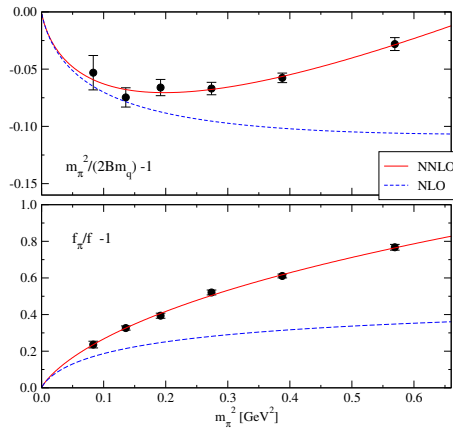


図 24:  $m_\pi^2/(2Bm_q) - 1$  と  $f_\pi/f - 1$  のカイラル摂動論の NNLO を使ったフィット。論文 (Phys. Rev. Lett. 101(2008)202004) から転載。詳細は本文を参照。

既に述べたように、最近では、基本的な物理量に対してカイラル摂動論を使うのがほぼ”標準”になっている。しかしながら、カイラル摂動論の適用範囲かどうかをチェックせずに闇雲に使って、「理論的にはこれを使うのが正しいのだからこれで良いはずだ」という態度は問題であると思う。特に、格子 QCD の計算結果をカイラル摂動論を使って実験値と合うように誘導するような外挿をするようなことは、絶対に避けるべきである。このように、カイラル外挿はなかなか微妙で難しいが、物理点での計算も可能になってくるので、カイラル外挿の結果とその点での直接計算の結果とを比較することでその検証ができる。物理量に対する予言をするには、カイラル外挿よりも物理点での直接計算の方が信頼性は高い。しかし、カイラル摂動論の未定係数 ( $c_3, c_4$  など) の決定には、(実験では分からない) クォーク質量依存性を格子 QCD で計算することが重要になる。カイラル摂動論の未定係数が求まれば、(格子 QCD で計算の難しい) 他の物理量の予言も出来るので、この方向の研究も意義がある。

## 4 最後に

格子 QCD による軽いハドロン質量の計算はほぼ完成に近づいており、その結果は QCD の正しさを検証するとともに、格子 QCD の信頼性を確立することになる。これから重要になっていく格子 QCD 計算は、ハドロン間の相互作用の計算である。その方向の研究として、不安定粒子の崩壊幅の計算、核力ポテンシャルの計算、ヘリウム束縛エネルギーの直接計

算、などがすでに行われているが、今後のさらなる発展が期待される。

この講義で紹介したのは、格子 QCD の基礎と数値シミュレーションのほんのさわりである。もう少し詳しい内容を知りたい方は、拙著で恐縮だが、

青木 慎也「格子上の場の理論」(丸善出版)

を参考にして欲しい。また、格子フェルミオンに関しては

青木 慎也 「格子上のカイラルフェルミオン」、現代物理学最前線 7, (2002 年 12 月) 1-61 (共立出版)

という解説がある。