

講義ノート

ゼロからの格子QCD入門

- 有限バリオン密度系の研究を目指して

素核宇宙融合 レクチャー シリーズ第9回

2013年6月26日 27日

理化学研究所

中村 純 (なかむら あつし)

広島大学情報メディア教育研究センター

nakamura@an-pan.org

格子QCDをハドロン物理研究の道具として使ってみたい方、直接は使わないがどうなっているのか知りたい方のために理研で行った集中講義のノートです。以下のような予定で準備しましたが、「シミュレーションの実際」のところは時間切れでできませんでした。興味がある方は実践問題でやってみましょうと呼びかけたところ、修士2名、博士1名、スタッフ1名、名誉教授1名の方が連絡を下さり、Zn-Collaborationと名前を付けて半年余り共同研究を続けました。スタッフの方はバリバリの格子QCDの研究者ですが、他の方は格子QCDの経験はゼロでした。おそらく今年(2014)の夏の格子の国際会議では結果の報告ができると思います。

1. 格子場の理論格子物理学

格子場の量子論 vs. 連続場の量子論

ゲージ変換

2. 格子場の数値シミュレーション (1) 経路積分のモンテカルロ計算

量子力学

ゲージ場

フェルミオン場

標準的なアルゴリズム

3. 有限密度 QCD

問題点と展望

4. 格子場の数値シミュレーション (2) シミュレーションプログラム

シミュレーションの実際

以下は集中講義の概要です。これだけで全ては分からないと思うので、文献 [2, 3, 4] などを参考にしてください。それぞれ著者の特色が出ている本です。文献 [2] については丸善のホームページ <https://pub.maruzen.co.jp/> で、文献 [3, 4] については www.amazon.com の 'Click to look inside !' で取り扱っているテーマや目次が見られますので、自分に合ったものを選ぶと良いと思います。

1 格子場の理論

1.1 格子物理学

昔、助手として初めて物理の教育にかかわった頃から、「時空を格子にすると良くわかる」というのが持論でした。微分なら差分にしてみようというわけです。

$$\frac{dX}{dt} = f(t) \quad (1)$$

という微分方程式は、 t の微分を差分にすれば左辺は $\frac{X(t+\Delta t)-X(t)}{\Delta t}$ ですから、

$$X(t+\Delta t) = X(t) + f(t)\Delta t \quad (2)$$

$X(t)$ が分かっていれば $X(t+\Delta t)$ が決まり、 $X(t+\Delta t)$ が決まれば $X(t+2\Delta t)$ が決まりと全てが決定します。

でも、どこかで1つ決めないと進みませんから (Δt は負でもいいので、過去にも進みますが)、**初期値** $X(t_0)$ を1つ与える必要があります。

ニュートン方程式のように2階の微分方程式は $v = dx/dt$ と変数を増やして一階に落とすので初期値は2個となりますが、2階の微分を差分に直すと $X(t + 2\Delta t)$ を決めるのに $X(t + \Delta t)$ と $X(t)$ が必要なことが分かるので、その観点からも初期値は2つ必要だと実感できます。

時間発展型だけではなく、次のラプラス方程式なども差分にすると見えてくるものがあります。

$$\nabla^2 f(x, y) = 0 \quad (3)$$

は2階微分を

$$\frac{\partial^2 f}{dx^2} \rightarrow \frac{1}{\Delta^2} (f(x + \Delta, y) - 2f(x, y) + f(x - \Delta, y)) \quad (4)$$

のように書けば、

$$f(x, y) = \frac{1}{4} (f(x + \Delta, y) + f(x - \Delta, y) + f(x, y + \Delta) + f(x, y - \Delta)) \quad (5)$$

つまり、ある点 (x, y) での f の値は、その前後左右での値の平均になれと言っているわけです。ラプラス方程式を満たす解を「調和関数」というのもむべなるかなと思いますね (えっ、思わない? あっ、「むべなるかな」が分からないか)。

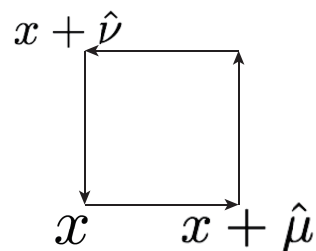
ポアソン方程式

$$\nabla^2 f(x, y) = A(x, y) \quad (6)$$

なら、(5) の右辺に $A\Delta^2$ が加わります。

ベクトル解析の gradient (勾配), divergence (発散), rotation (回転) も一度は差分で書いてみると面白いですよ。

こんなことをやっているときりがありませんが (そのうち「格子物理学」という本を書こうかと思うのですが、売れないでしょうね)、この節の最後に電磁気の電場磁場、つまり $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ を差分化してみましょう。



$$\begin{aligned}
F_{\mu\nu} &= \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \\
&\rightarrow \frac{A_\nu(x + \hat{\mu}) - A_\nu(x)}{a} - \frac{A_\mu(x + \hat{\nu}) - A_\mu(x)}{a} \\
&= \frac{A_\mu(x) + A_\nu(x + \hat{\mu}) - A_\mu(x + \hat{\nu}) - A_\nu(x)}{a} \quad (7)
\end{aligned}$$

ただし x は (x, y, z, t) というベクトルで、後でも使うので、離散化した間隔を $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \Delta t = a$ 、 $\hat{1} = (\Delta x, 0, 0, 0)$ 、 $\hat{2} = (0, \Delta y, 0, 0)$ etc. としています。図 1 を眺めながら上の式を読んでみてください。

1.2 格子場の量子論 vs. 連続場の量子論

私がイタリアのフラスカッティ研究所というところにポスドク（イタリア政府給費留学生）で行ったのは 1981 年でした。そこではパリジ先生のグループが、格子 QCD でハドロンを研究するために前人未到の領域に挑戦していらっしゃいました。今からでは想像しにくいと思いますが、逆行列を数値的に解く方法もよく分からない時代で、確率的に求めるアルゴリズムを開発していらっしゃいました。

「アメリカでゲージ場を計算する研究が進んでいる。でも、そこにどうしてクォークも入れてはいけないのか、いろいろな人に聞いてみたけどやってはいけない理由が分からない。計算機の中にクォークを置ければハドロンが計算できるじゃないか」と言われました。それまでハドロン反応の解析をモデルでやっていて、このモデルでのクォーク



図 2: 老人の昔話

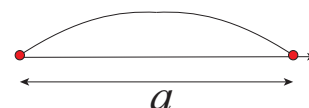
は本当に自然界のクォークなんだろうかと鬱々としていた自分に取って、これこそ自分が求めていたことだと思いました。ぜひ自分もその研究をしたいとお願いすると、計算機の使い方を丁寧に教えてくださり、「おーい、M 君、彼が格子を勉強したいそうなので、コードをあげてくれ」と彼の回りに集まって研究をしていた若い人に言ってコード全体をくれました（当時は紙に印刷されていました）。1 ヶ月アパートに籠ってこのプログラムを読んで解読しました。それから同じ計算をするのには遅れてスタートなので迷惑をかけるか

もしれないということ、自分で使えるコンピュータは研究所の汎用計算機だけだったのでより軽い計算の方がいいだろうということで、 $SU(2)$ のコードを書いたのが私の格子事始めでした。

その後気がついたのですが、ヨーロッパでは私のように現象論から格子の研究に入ってきた人と、構成論的場の理論から入ってきた人がいました。

場の量子論は、与えられた作用に対して、量子化規則とカットオフの処理の手法を与えて初めて定義されますが、格子以前はカットオフも摂動論の枠組みしか知られていなかったもので、場の理論が本当に非摂動的に構成できるのかという不安が構成論的場の理論研究者にはあったようです。

というわけで、格子の導入というのは、(非摂動的な) カットオフ (紫外切断) の導入になります。



$$p_{max} = \frac{\pi}{a}$$

(8) 図 3: 運動量の最大値は格子間隔で決まる

a は格子間隔です。

2 格子場の数値シミュレーション (1)

2.1 経路積分のモンテカルロ計算

格子 QCD では、場の量子論を構成するのに必要なカットオフを時空間を離散化することによって実現します。量子化規則はファインマンの経路積分を採用します¹。

このあと、具体的に量子力学、ゲージ場と経路積分表示を見ていくと分かりますが、経路積分は非常に変数の多い多重積分になります。したがって、多重積分をどうやって数值的に処理するかがポイントです。そこで、

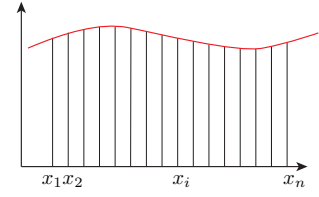
$$I = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_n f(x_1, x_2, \cdots, x_n) \quad (9)$$

という積分を考えてみます。

¹他の確率過程量子化、正準量子化がダメだというわけではありません。確率過程量子化 (ランジュバン法) は有限密度で期待される方法になっています。正準量子化は、現在の計算機ではパワーが足りないと思いますが、ハミルトニアン固有値を求めるという方法でのアプローチも可能なはずです。

まず $n = 1$ のときは簡単です：

$$I = \int dx f(x) \quad (10)$$



図のようにこれを分割して面積を求め、それを合計します。
2次元積分ではどうでしょうか。

図 4： 1次元積分

$$I = \int dx_1 dx_2 f(x_1, x_2) \quad (11)$$

計算量は分点の数に比例しますから、1次元の場合と同じ計算時間しか無いとすれば分点の数は1/2乗個になります。図4, 5では1次元の場合に16分割、2次元の場合に 4×4 分割にしています。

数値積分の誤差は

$$\text{誤差} : \frac{1}{\text{各方向の点の数}} = \frac{1}{N^{1/n}} \quad (12)$$

となります。 N は分割する点の総数です。

$N = 1000$ でも10次元 ($n = 10$) の時、 $N^{1/n} = 1.995$ となります。格子QCDでは $n = 4N_x N_y N_z N_t \times 8$ 次元での積分になりますので、通常の積分は非現実的です。(N_x, N_y, N_z, N_t は x, y, z, t 方向の格子のサイズ、4はスピナーの自由度、8はSU(3)の場合のカラーの自由度です。)

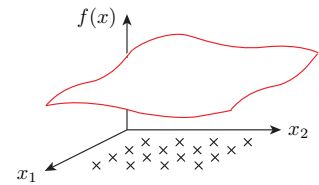


図 5： 2次元積分

ここでモンテカルロ法が登場します。これまでは、暗黙のうちに計算する点を等間隔に取っていましたが²、 $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ の n -次元空間からランダムに N 個の点を取ることになります。ランダムな選択では、その誤差は $1/\sqrt{N}$ に比例します。

$$\text{誤差} : \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (13)$$

ここには重積分の重度 n は現れません！

これがモンテカルロ法のエッセンスですが、実際にはこれに**インポートランス・サンプリング**という数値計算のテクニックを合わせます。

²ガウス求積法では等間隔ではありませんが、規則的です。

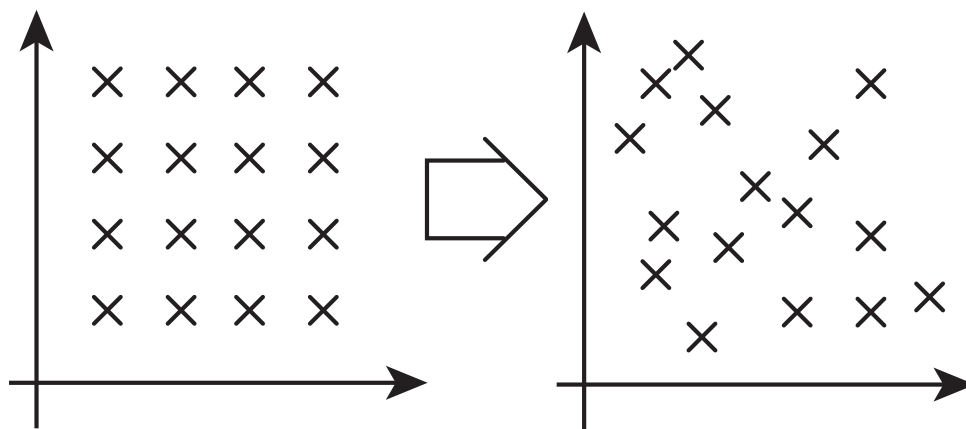


図 6: モンテカルロ

積分 $\int f(x)dx$ は非積分関数 $f(x)$ が激しく変動すると難しくなります。数値計算では有限の点でしか評価しませんから、激しく変動している時は危険だというのは理解できると思います。逆に $f(x)$ が平らであればあるほど、数値積分は容易になります。極端な話、 $f(x)$ が定数なら 1 点をとっただけで正しい答えが出てしまいます。

では、非積分関数を平らにしてみましょう。 x から t に変数を変えれば当然ヤコビアンが必要になります。

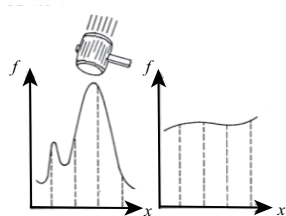


図 7: 非積分関数は平らな方が容易

$$\int f(x)dx = \int f(x(t))\frac{dx}{dt}dt \quad (14)$$

t の積分において非積分関数は $f dx/dt$ ですから、この部分が平らになればいいわけです。つまり、 dx/dt が $1/f$ となるような変数変換を見つければいいわけです。

これをインポートランス・サンプリングと言います。数値積分では非常に有効なテクニックです。

このインポートランス・サンプリングを行った時に何が起こったのか、もう少し見てみましょう。図 8 を見てください。 $f dx/dt$ が平らになるようにしたいのですから、 f が大きいところでは dx/dt は小さく、逆に f が小さいところでは dx/dt は大きくなっています。積分は t の空間で行うわけですが、ここで等間隔 Δt に分点を取ったとすると、もとの x で考えると、 dx/dt の小さいところ (f が大きいところ) では Δx は小さくなり、 dx/dt の

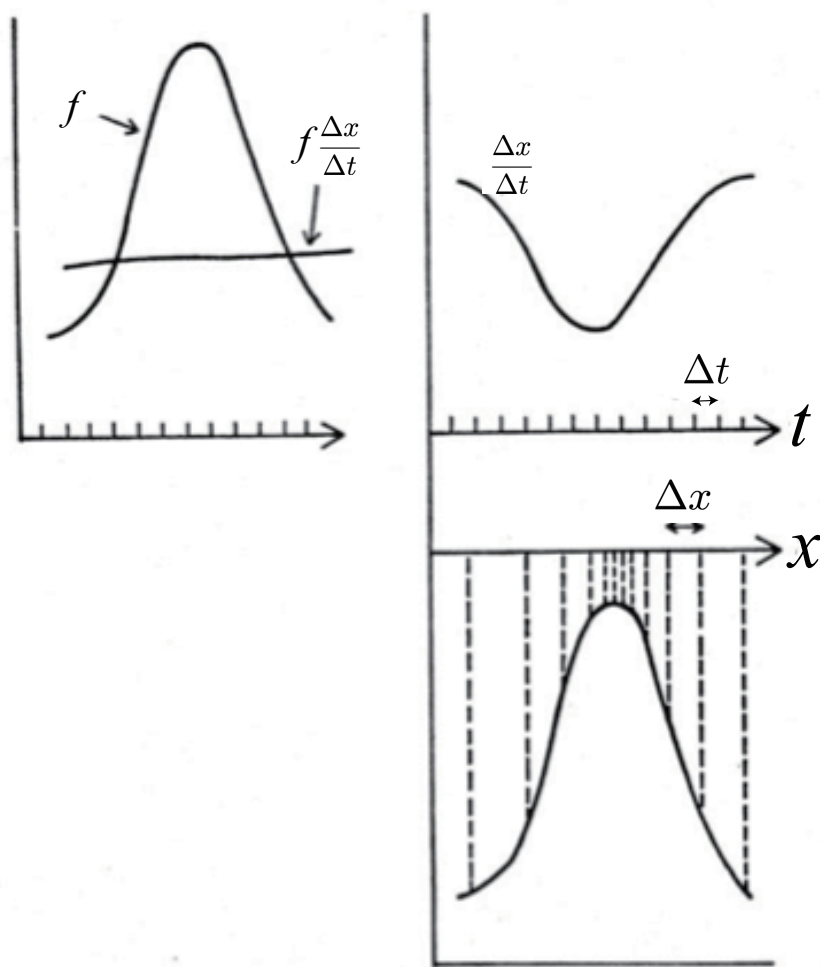


図 8: インポートランス・サンプリング

大きいところ (f が小さいところ) では Δx は大きくなります。つまり、 x の空間で見ると、 f が小さいところはパラッと点を取り、 f が大きいところでは密に点を取れということになります。言い換えれば、 $f(x)$ が大きいところは (大切なので) 沢山の点で取りなさい (サンプリングしなさい) ということになっています。

さて、このインポートランス・サンプリングとモンテカルロのランダム・サンプリングを組み合わせることができるでしょうか? そういううまい方法が存在していて、それがメトロポリスアルゴリズムです [5]。メトロポリスアルゴリズムでは積分が

$$I = \int e^{-S(x)} dx \quad (15)$$

という形をしているとします。 x は何次元でも構いません。図10がその説明です。

図9を見ながらアルゴリズムを理解してください。
 S を作用(アクション)と呼ぶことにします。

x はまず適当な初期値からスタートします。これを x_{old} とします。次に x をランダムに変えて x_{new} とします。この作り方はなんでもいいのですが、 $x_{old} \rightarrow x_{new}$ と $x_{old} \leftarrow x_{new}$ が同じ確率で起こるようにします(詳細釣り合い条件)。たとえば r を0から1の値を一様に取る乱数だったとします。このとき、 $x_{new} = x_{old} + (r - 0.5)$ はOKですが、 $x_{new} = x_{old} + r$ はダメです。後者の場合は、必ず $x_{old} > x_{new}$ となりますから、 x_{old}, x_{new} の値に対して $x_{old} \leftarrow x_{new}$ は起こりません。

さて、 x_{old}, x_{new} に対して作用を計算し、もし作用が減少すればこの変化を受け入れ(accept)、 x_{new} を x_{old} で置き換えます。

もし作用が増加した場合は、 e^{-dS} ($dS = S(x_{new}) - S(x_{old})$) を計算し(dS は正ですから e^{-dS} は1より小さくなります)、その確率で x_{new} を accept します。accept されなかったときは、 x_{old} はそのままです(x_{new} は reject)。

論文[5]はとても有名な論文ですが、読んでいない人も多いようです。物理の人にはとても分かりやすい論文ですので一度原論文を読んでおくことをお勧めします。

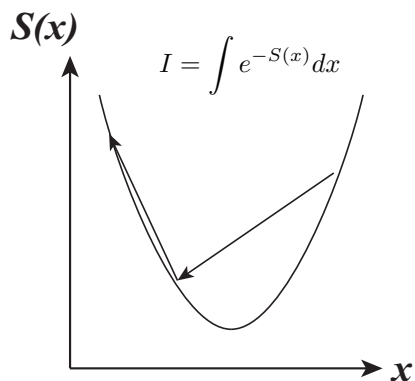


図9: $S(x)$ が減少すれば Accept, 増加の場合は $\exp(-dS)$ の確率で Accept。

2.1.1 オーバーラップ問題

モンテカルロ法では、インポートランスサンプリングによって $f(x)$ に比例するように x のサンプリングが行われ、そのサンプリング上で $O(x)$ を計算します。

$$\langle O \rangle = \frac{\int O f(x) dx}{\int f(x) dx} \quad (16)$$

しかし、このことは $O(x)f(x)$ の大きなところをサンプリングしてくれるということではありません。このミスマッチが起こると「オーバーラップ問題」が起こります。

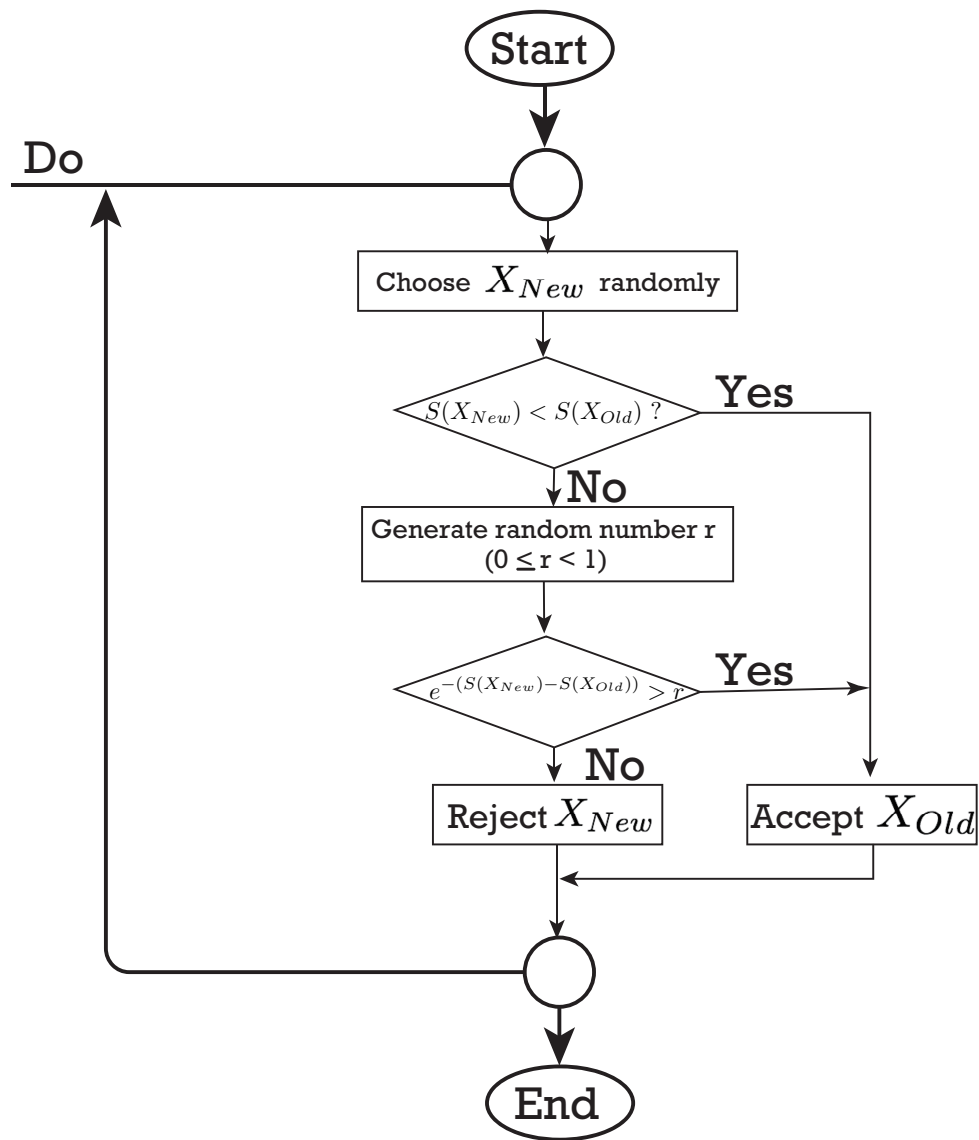


図 10: メトロポリスアルゴリズム

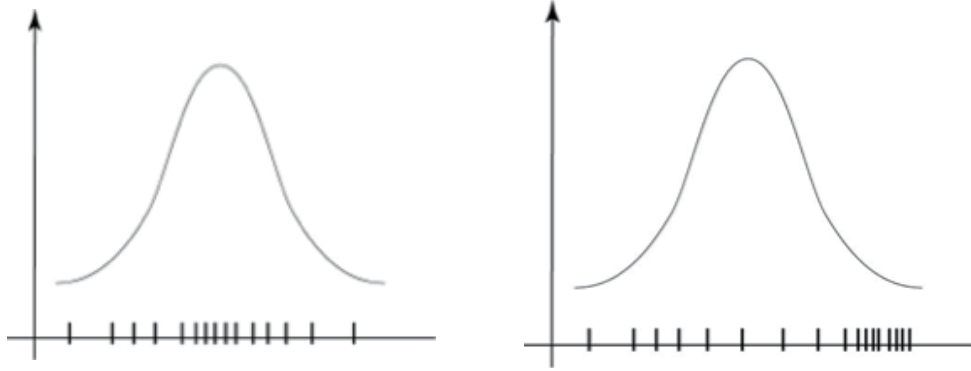


図 11: 左の図のようなサンプリングではなく、右図のようになったときにオーバーラップ問題が起こる。

2.2 量子力学

2.2.1 経路積分

ここでは文献 [6] にしたがって、1 次元の量子力学を経路積分で書き、メトロポリスアルゴリズムでモンテカルロ計算をしてみます。

$$Z = \int \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int dt L\right) \quad (17)$$

ラグランジアン L は

$$L = \frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \quad (18)$$

$\mathcal{D}x$ は

$$\mathcal{D}x = \lim_{n \rightarrow \infty} dx_1 dx_2 \cdots dx_n \quad (19)$$

ここで

$$x_0 \equiv x(t_{initial}), x_1 \equiv x(t_1), x_2 \equiv x(t_2), \cdots x_{n-1} \equiv x(t_{n-1}), x_n \equiv x(t_{final}) \quad (20)$$

2.2.2 ユークリッド化

次にユークリッド化（虚時間化）を行います。

$$t \rightarrow -i\tau$$

すると

$$L \rightarrow -\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x) \equiv -H \quad (21)$$

となるので

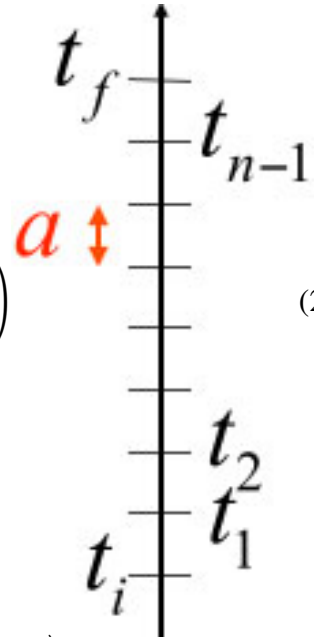
$$\begin{aligned} Z &\rightarrow \int \mathcal{D}x \exp\left(\frac{i}{h} \int (-id\tau(-H))\right) = \int \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{1}{h} \int d\tau H\right) \\ &= \int \mathcal{D}x \exp\left(-\frac{1}{h} S\right) \end{aligned} \quad (22)$$

ここで虚時間 τ を n 等分し（離散化）、 $x(\tau)$ も $x(\tau_j) = x_j$ というように離散化することになります。

$$Z = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_{n-1} e^{-S/h} \quad (23)$$

作用は

$$S = \sum_j a \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{a} \right)^2 + V(x_j) \right) \quad (24)$$



2.2.3 境界条件の処理

周期的境界条件 (Periodic boundary condition)

$$x(N+1) = x(1), \quad x(0) = x(N)$$

反周期的境界条件 (Anti-Periodic boundary condition)

$$x(N+1) = -x(1), \quad x(0) = -x(N)$$

図 12: 虚時間 τ の離散化

これをプログラムで表現するにはいろいろな方法があります。皆さんも下の例を見る前に1つ、2つ考えてみてください。周期的境界条件の場合を書いています

方法1

```

DO i = 1, N
    ia = i+1
    ib = i-1
    IF (i==N) ia=1
    IF (i==1) ib=N
    xa = x(ia)
    xb = x(ib)

```

方法2

```

REAL, DIMENSION(0:N+1) :: x
x(0) = x(N)
x(N+1) = x(1)
DO i = 1, N
    xa = x(i+1)
    xb = x(i-1)

```

方法3

INTEGER :: *indx*(*N*, 2) という配列を作り

$$indx(i, 1) = i + 1 \text{ for } 1 \leq x \leq N - 1$$

$$indx(i, 2) = i - 1 \text{ for } 2 \leq x \leq N$$

$$indx(N, 1) = 1$$

$$indx(1, 2) = N$$

2.3 アップデートと観測

$x(1)$ から $x(N)$ までをメトロポリス法で1回更新していくステップを1スweepと呼び、この作業をアップデートと言うことにします。図13の右側がアップデートするルーティンの中身。左がそれをどのように呼ぶかです。最初に測定をしないでカラ回しをしている (thermalization) のは、初期状態の影響を少なくし、平衡状態になるまで待つためです。

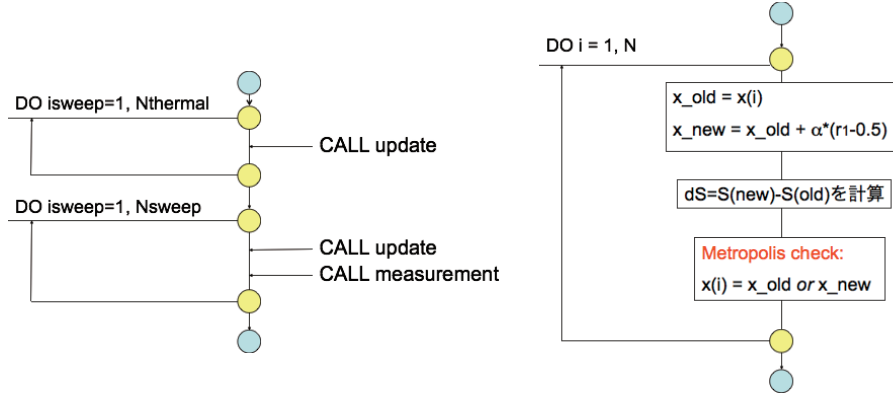


図 13: モンテカルロの手順の例。

3 格子 QCD

格子 QCD で中心になるのは $SU(3)$ のグルーオン場 U です。

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ u_{21} & u_{22} & u_{23} \\ u_{31} & u_{32} & u_{33} \end{pmatrix} \quad (25)$$

というように 3×3 の複素行列です。 $U^\dagger = {}^t U^*$ とすると、

$$UU^\dagger = I \quad (26)$$

なので、 $\det UU^\dagger = 1$ 。一方、

$$\det UU^\dagger = \det U (\det U)^* = |\det U|^2 \quad (27)$$

これは $\det U$ が絶対値が 1 の複素数であることを示していますが、 $SU(3)$ では

$$\det U = 1 \quad (28)$$

U を

$$U = e^{iA} \quad (29)$$

と書くと、 U が $SU(3)$ 行列なので、 A はエルミート ($A^\dagger = A$) でトレースレス ($\text{Tr} A = 0$) となります。実際

$$\det U = e^{\text{Tr} \log U} = e^{i \text{Tr} A} = 1 \quad (30)$$

(最初の行列式が $\exp(\text{Tr} \log)$ というのはどんな行列でもなりたつ一般式)

$$U^\dagger = e^{-iA^\dagger} = e^{-iA} \quad (31)$$

なので、

$$U^\dagger U = I \quad (32)$$

ウィルソンは 1974 年に文献 [7] で格子ゲージ理論を定式化し、強結合展開を使ってウィルソンループを計算し閉じ込めを示しました。

ウィルソンによって書かれた格子作用を見ていきましょう。

$$S = S_G + S_F \quad (33)$$

ここで S_G 、 S_F はゲージおよびフェルミオン作用です。

ゲージ作用

$$S_G = \beta \sum_{\text{plaquette}} \left\{ 1 - \frac{1}{N_c} \text{Tr} U_{ij} U_{jk} U_{kl} U_{li} \right\} \quad (34)$$

$$\beta \equiv \frac{2N_c}{g^2} \quad U_{ij} \in SU(N_c) \quad (35)$$

問題： サイズが $N_x N_y N_z N_t$ の格子にプラケットはいくつあるか？

フェルミオン作用

$$S_F = \bar{\psi} \Delta \psi \quad (36)$$

フェルミオン行列 Δ は

$$\Delta(\mu) = I - \kappa Q \quad (37)$$

$$Q = (\text{CloverTerm}) + \sum_{\mu=1}^4 Q_\mu \quad (38)$$

あるいは、もう少し丁寧に書けば

$$\Delta(x, x'; \mu) = \delta_{x, x'} - \kappa C_{SW} \delta_{x, x'} \sum_{\mu \leq \nu} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (39)$$

$$- \kappa \sum_{\mu=1}^4 \left[(r - \gamma_\mu) U_\mu(x) \delta_{x', x+\hat{\mu}} + (r + \gamma_\mu) U_\mu^\dagger(x') \delta_{x', x-\hat{\mu}} \right] \quad (40)$$

r はウィルソン項とよばれ、通常は 1 に取ります。

3.1 (古典) 連続極限

$$U_\mu(n) = e^{igaA_\mu(na)}, \quad \psi_n = \sqrt{\frac{a^3}{2\kappa}} \psi(na) \quad (41)$$

と置くと、格子間隔 a がゼロの極限で上の作用は連続極限の作用となります。

$$\lim_{a \rightarrow 0} S_G = \frac{1}{2} \int d^4x \text{Tr} F_{\mu\nu}^2 \quad (42)$$

$$\lim_{a \rightarrow 0} S_F = - \int d^4x \left\{ m \bar{\psi}(x) \psi(x) + \bar{\psi}(x) \gamma_\mu (\partial_\mu + igA_\mu(x)) \psi(x) \right\} \quad (43)$$

まずウォーミングアップに $U(1)$ の場合を調べてみましょう。

$$\begin{aligned} P_{\mu\nu}(x) &\equiv U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) \\ &= e^{igaA_\mu(x)} e^{igaA_\nu(x+\hat{\mu})} e^{-igaA_\mu(x+\hat{\nu})} e^{-igaA_\nu(x)} \\ &= e^{ia^2g \left\{ \frac{A_\nu(x+\hat{\mu}) - A_\nu(x)}{a} - \frac{A_\mu(x+\hat{\nu}) - A_\mu(x)}{a} \right\}} \\ &= e^{ia^2gF_{\mu\nu}} = 1 + ia^2gF_{\mu\nu} - \frac{1}{2}a^4g^2F_{\mu\nu}^2 + \dots \end{aligned} \quad (44)$$

これを格子上の全てのプラケットについて足すと、 $F_{\mu\nu}$ と $F_{\nu\mu}$ の和はゼロになるので

$$\sum_{\text{Plaquette}} P_{\mu\nu}(x) = \sum_x \left(1 - \frac{1}{2}a^4g^2F_{\mu\nu}^2 + \dots \right) \quad (45)$$

連続極限では $\sum a^4$ は $\int d^4x$ となり電磁場の作用が得られます。

$$\int d^4x \frac{1}{2} F_{\mu\nu}^2 \quad (46)$$

QCD の場合

SU(3) の場合は、その非可換性から $\exp(A)\exp(B) = \exp(A+B)$ となりませんが、

$$e^X e^Y = e^F$$

$$\text{ここで} \quad F = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X, [X, Y]] + [Y, [Y, Z]]) + \dots \quad (47)$$

を使えば連続の作用が得られます。

フェルミオン作用 S_F についても

$$f(x + \hat{\mu}) = f(x) + a\partial_\mu f(x) + O(a^2) \quad (48)$$

を使い

$$\kappa = \frac{1}{8 + 2ma} \quad (49)$$

とすれば、連続の作用を得ることができます。

3.2 いろいろな作用

格子化された QCD の作用はユニークではありません。そのことを利用していろいろな改良された作用 (improved actions) が考案され使われています。

よく使われるものとしては、 S_G に対して 1×1 のループ (プラケット型) にさらに 1×2 のループや他の形態のループを加えたもの (Iwasaki 作用、Symanzik 作用、DBW2 作用) があり、 S_F に対しては、クローバー項と言われる項を付け加えたものがあります。

これらは、有限の格子間隔 a の高次項の影響 (lattice artefact) を減少させるための工夫ですが、ウィルソンフェルミオン作用がカイラル対称性を破ってしまうという問題を解決するためのカイラルフェルミオン、ドメインウォールフェルミオンがあります。

カイラル対称性は

$$\{\Delta, \gamma_5\} = 0 \quad (50)$$

と表現できます。ウィルソンフェルミオンは質量がゼロのときでも、ウィルソン項 r のためにこの式を満たすことができません。

カイラル対称性を持つフェルミオンの作用が探されましたが、みな失敗に終わり、それはかなり一般的な条件の下で不可能であることが証明されました。ニールセン・二宮の No-Go 定理 (1981) として知られています。

1982 年に Gisbarg と Wilson は上の条件 (50) はきつすぎて格子で満たすべき条件は

$$\{\Delta, \gamma_5\} = 2a\Delta R\gamma_5\Delta \quad (51)$$

であることを示しました。そして具体的に

$$\Delta = 1 - \frac{W}{\sqrt{W^\dagger W}} \quad (52)$$

という形が 1981 年に Neuberger によって見いだされました。ここで、 W はウィルソンフェルミオンです。計算量は非常に多いのですが、計算機の高速化にともない研究が進んでいます。

3.3 ウィルソンループとポリアコフライン

$$W = \frac{1}{N_c} \text{Tr} (U_{ij} U_{jk} \cdots U_{li}) \quad (53)$$

$$L = \frac{1}{N_c} \text{Tr} (U_{12} U_{23} \cdots U_{n-1,n}) \quad (54)$$

ウィルソンループとポリアコフラインの期待値 $\langle W \rangle$ 、 $\langle L \rangle$ の物理的意味は以下のようになります。いま次のような外場を加えたとします

$$j_\mu = g\delta^3(x_\mu - x_\mu(t)) \quad (55)$$

このことによって系のエネルギーは

$$i \int d^4x j_\mu A_\mu = ig \int dx_\mu A_\mu \quad (56)$$

だけ増加します。したがって

$$\begin{aligned} e^{-S_G} &\rightarrow e^{-ig \int dx_\mu A_\mu - S_G} \\ &= e^{igaA_n} e^{igaA_{n-1}} \cdots e^{igaA_1} e^{-S_G} \\ &= W e^{-S_G} \end{aligned} \quad (57)$$

このソースを加えることによって増加した自由エネルギーを ΔF とすれば

$$\frac{e^{-(F+\Delta F)}}{e^{-F}} = \frac{\int \mathcal{D}U e^{-S_G W}}{Z} = \langle W \rangle \quad (58)$$

ウィルソンループが $L \times T$ の長方形であったとき、もし $\langle W \rangle \propto \exp(-CL \times T)$ (面積則) とするとすると、 $\Delta F = CL \times T$ となります。自由エネルギーが $TV(L)$ で与えられるとすれば

$$V(L) = CL \quad (59)$$

つまり 2 点間の距離 L にポテンシャルが比例することになり、「閉込め」を意味します。

ポリアコフループの場合も同じように

$$e^{-\Delta F} = \langle L \rangle \quad (60)$$

となります。 $\langle L \rangle = 0$ は、1つのクォークの存在で ΔF が無限大になる、すなわちそのようなものは存在できず閉込めになります。逆にもし無限大でなく有限ならば、1つのクォークが存在でき、非閉込めを意味するわけです。

3.4 アップデートのアルゴリズム

S_G しかなければ簡単ですが、 S_F があると少し複雑になります。現在標準的に使われているのはハイブリッド・モンテカルロ (HMC) 法と呼ばれるものです。

$$(\det \Delta)^2 = \det \Delta \det \Delta^\dagger = \det \Delta \Delta^\dagger = \int \mathcal{D}\phi_{\text{dagger}} \mathcal{D}\phi e^{-\phi^\dagger (\Delta \Delta^\dagger)^{-1} \phi} \quad (61)$$

と行列式を逆行列の積分に書き直すところからスタートします。

仮想的な分子動力学的な系を作り、その方程式に従って系を発展させ、その中で $U_\mu(x)$ も変化させて行きます。

4 有限密度 QCD

4.1 基本

有限温度・有限密度では大分配関数

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta(H - \mu \hat{N})} \quad (62)$$

を計算することになります。これを経路積分で書くと、通常の QCD とほとんど同じで、違いは

$$S = \int_0^{1/T} d\tau d^3x \mathcal{L} \quad (63)$$

と虚時間の積分が 0 から $1/T$ までと有限になり、フェルミオン行列に化学ポテンシャル μ の項が加わります。

$$\Delta(\mu) = m + \sum_{\mu} \gamma_{\mu} (\partial_{\mu} - g A_{\mu}) + \mu \gamma_0 \quad (64)$$

ここでは連続の場合を書いています。

格子の場合は、 $U_{\mu} = \exp(igaA_{\mu})$ であり、化学ポテンシャルは A_4 と同じレベルで入ってくるはずなので

$$\begin{aligned} U_4 &\rightarrow e^{ia(gA_4 - i\mu)} = e^{\mu a} U_4 \\ U_4^{\dagger} &\rightarrow e^{-ia(gA_4 - i\mu)} = e^{-\mu a} U_4^{\dagger} \end{aligned} \quad (65)$$

と置き換えればいいことになります。

$(\det \Delta)^* = \det(\Delta^{\dagger})$ が $\det \Delta$ に等しいか、つまり実であるかを調べるために $\Delta^{\dagger}$ を計算すると (エルミート γ を使っている。他の表示でも結論は変わらない)

$$\Delta(\mu)^{\dagger} = m - \sum_{\mu} \gamma_{\mu} (\partial_{\mu} - g A_{\mu}) + \mu^* \gamma_0 \quad (66)$$

これから

$$(\det \Delta(\mu))^* = \det \Delta(-\mu^*) \quad (67)$$

となることが示せます。 $\mu = 0$ のときは、この式から確かに $\det \Delta$ は実数になりますが、有限の化学ポテンシャルのときはそうはいかないわけです。

物理的な意味を見てみましょう。行列式に関する公式

$$\det \Delta = \exp(\text{Tr} \log \Delta) \quad (68)$$

において、 $\Delta = 1 - \kappa Q$ として $\log$ を展開すると (ホッピングパラメータ展開, あるいは $1/\text{質量}$ 展開)、

$$\begin{aligned} \det \Delta = & \exp \left(e^{+\mu/T} (\text{正の虚時間方向へ 1 周}) \right. \\ & + e^{-\mu/T} (\text{負の虚時間方向へ 1 周}) \\ & + \dots \left. \right) \end{aligned} \quad (69)$$

この正負の方向へのワインディング項は互いに複素共役なので $\mu = 0$ のときは実数になりますが、そうでないときはここから位相が出てしまいます。

ただし、上の証明と説明は $\det \Delta(\mu)$ が実になることは保証されないということを示しているだけで、実になることもあります。その例がカラー $SU(2)$ です。 $SU(2)$ の場合は

$$U_\mu^* = \sigma_2 U_\mu \sigma_2, \quad (70)$$

という関係があるので

$$\Delta(U, \gamma_\mu)^* = \Delta(U^*, \gamma_\mu^*) = \sigma_2 \Delta(U, \gamma_\mu^*) \sigma_2, \quad (71)$$

となり、 $\{\det \Delta(x, x'; \gamma_\mu)\}^* = \det \Delta(x, x'; \gamma_\mu^*)$ 。 γ_μ^* は $\{\gamma_\mu^*, \gamma_\nu^*\} = \delta_{\mu\nu}$ を満たすので、ガンマ行列の別の表示です。 $\det \Delta$ は表示にはよらないはずなので³、

$$\Delta(U, \gamma_\mu)^* = \Delta(U, \gamma_\mu) \quad (72)$$

マルチパラメータ・リウエイティング

温度 T 、化学ポテンシャル μ のところが知りたければ、それに対応する点でグルーオン場を生成しようと思います。しかし、それを別のゲージ結合定数で、密度はゼロのところでやることにします。 $\mu = 0$ のところで生成すれば符号問題はありません。

³ γ_μ と γ_μ^* の関係はすぐ見つかります。 $C\gamma_\mu C = -\gamma_\mu^*$, $\gamma_\mu^* = V\gamma_\mu V^{-1}$ ただし $V = C\gamma_5$ で $C = i\gamma_0\gamma_2$ は荷電共役行列。またエルミート γ 行列を使っている。

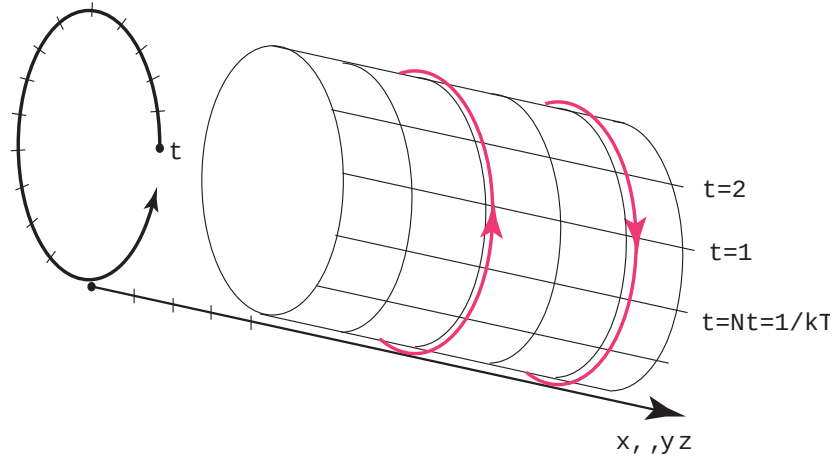


図 14: 有限温度では格子は周期的（反周期的）境界条件を持ち、クォーク、反クォークループのうち、格子に巻き付くループが有限密度の寄与となる。

違う結合定数と密度の場所では作用が違うので、そんなことをしたらもちろん辻褄が合わなくなります。そこで、観測量を計算するときに、その作用のズレの補正します（リウェイトイング）。結合定数と化学ポテンシャルと2つのパラメータのズレの補正を入れるから、マルチパラメータです。

$$\begin{aligned} & \int \det \Delta(\mu) e^{-S_G(g)} \\ &= \int \det \Delta(0) e^{-S_G(g')} \frac{\det \Delta(\mu)}{\det \Delta(0)} \frac{e^{-S_G(g)}}{e^{-S_G(g')}} \end{aligned} \quad (73)$$

この方法では行列式を（少なくともその比を）計算する必要があります。

μ が小さい場合は、 $\sum_n C_n(\mu/T)^n$ という形でテーラー展開してしまうという方法があります。テーラー展開法は、QCD-TARO というグループが有限密度でのハドロンの遮蔽質量の格子 QCD 計算に使いました。もし臨界点があったらテーラー展開は収束しないはずで、その兆候を探すためにテーラー展開の係数の値をシミュレーションで求めて、解析が行われています。高次の項は誤差も大きくなって大変ですが。

純虚数化学ポテンシャル

式 (67) をよく見ると、 μ が純虚数の場合にもフェルミオン行列式は実になります。ホッピングパラメータ展開の式 (69) では、正の方に回る項と負の方向に回る項は互いに複素共役の関係なので、足すと実数になります。

純虚数の場合には符号問題が無くなるということは昔から知られており、その場合の周期性なども調べられていました [8]。しかしそれを計算してもどうにもならないと思われていました。その予想に反して 2002 年にヨーロッパの 2 つのグループの計算が発表され [9, 10]、相転移温度を虚数化学ポテンシャルで $T(\mu) = C_0 + C_1\mu^2 + C_2\mu^4$ とフィットして、それを実化学ポテンシャルにしてみればいいだろうとして相転移線を予言したところ、リウエイティング法で予想されていたものとよく一致しました。

虚数化学ポテンシャル μ_I で計算したグランド・カノニカル分配関数 Z_{GC} を虚数化学ポテンシャル μ_I についてフーリエ変換すると、個数 N を固定したカノニカル分配関数 Z_C が得られることが示せます。

$$Z_C(N, T) \propto \int d\frac{\mu_I}{T} e^{i(\mu_I/T)N} Z_{GC}(\mu_I, T) \quad (74)$$

4.2 最近の発展

有限密度格子 QCD は宇宙初期、RHIC、LHC での超高エネルギー重イオン衝突、中性子星などの胸躍る分野の研究の基礎データを提供することが期待されていますが、大きな密度、特に μ/T が 1 を越えるような領域での計算は困難を極めていました。

しかし、これまでの研究で何が問題なのかが少しずつ分かってきています。ここでは、今後の進展の参考になるかもしれないいくつかの点についてコメントしていきます。

パイ凝縮の壁

単純に考えれば、フェルミオン行列式の符号が問題ならば、その絶対値を取って位相をリウエイティングすればいいのではと思われるかもしれませんが。

$$\begin{aligned}
\langle O \rangle &= \frac{\int \mathcal{D}U O (\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-S_G}}{\int \mathcal{D}U (\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-S_G}} \\
&= \frac{\int \mathcal{D}U O |\det \Delta(\mu)|^{N_f} e^{-S_G}}{\int \mathcal{D}U |\det \Delta(\mu)|^{N_f} e^{-S_G}} / \frac{\int \mathcal{D}U e^{iN_f \phi} |\det \Delta(\mu)|^{N_f} e^{-S_G}}{\int \mathcal{D}U |\det \Delta(\mu)|^{N_f} e^{-S_G}} \\
&= \frac{\langle e^{iN_f \phi} O \rangle_0}{\langle e^{iN_f \phi} \rangle_0}
\end{aligned} \tag{75}$$

ここで、 N_f はフレーバー数、 ϕ はフェルミオン行列式の位相：

$$\det \Delta(\mu) = |\det \Delta(\mu)| e^{i\phi} \tag{76}$$

$laX\rangle_0$ が位相を落として (phase quench)、絶対値だけで計算した期待値です。

$N_f = 2$ の場合を考えます。 $(\mu$ が実のときは) $(\det \Delta(\mu))^* = \det \Delta(-\mu)$ なので、

$$|\det \Delta(\mu)|^2 = \det \Delta(\mu) \det \Delta(-\mu) \tag{77}$$

つまり、これは2つのクォークのうちの1つに化学ポテンシャル μ を与え、もう1つに $-\mu$ の化学ポテンシャルエネルギーを与えていることになります。2フレーバを u 、 d とすると

$$\mu_u = -\mu_d \tag{78}$$

となります。

π^+ 中間子は u クォークと反 d クォークから構成されますが、化学ポテンシャルというのは、系の熱浴とその化学ポテンシャル分の粒子のやりとりが起こるシステムですから、化学ポテンシャルを上げていって

$$\mu_u = -\mu_d > m_\pi/2 \tag{79}$$

になると、いくらでもパイを作れてしまい、そこでパイ凝縮が起こります。このときゼロモードが現れ、 Δ^{-1} が計算できなくなってしまいます。

ピン留め法

マルチパラメータ・リウエイティングやその系列の方法では、フェルミオン行列式が複素数になるのを避けるため、 $\mu = 0$ で計算します。しかし、 $\mu = 0$ で生成された配位は、

当然のことながら高密度状態がごくわずかしかな含まれていません。つまりオーバーラップ問題を引き起こしてしまいます。この問題に対する対策としてピン留め法があります。

ある測定量 O に対して

$$\rho(x) = \int \mathcal{D}U \det \Delta e^{-S_G} \delta(x - O(U)) \quad (80)$$

を状態密度といいます。分配関数にデルタ関数を入れて O が値 x になるところの密度を計算しろと言っているわけです。もしデルタ関数を少し広げてある幅に $O(U)$ が入った割合と言えば、ヒストグラムになります。ヒストグラムが求まれば、 O の期待値が求まります。

しかし、ヒストグラムを求めることが難しい場合があります。 $\mu = 0$ で作った配位からカノニカル分配関数 Z_n を求めようとする、 n が大きなところはほとんど現れません。

図 15 のように x が大きくなると急速に頻度が下がる分布を考えてみます。本当は X_1 から X_2 あたりの振舞いが重要な役割をするとしても、このままではその領域あたりはほとんど出現しません。そこで、配位を

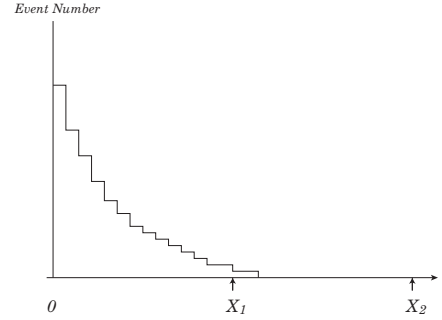


図 15: ピン留め法の必要性

$$X_1 \leq x \leq X_2 \quad (81)$$

に「ピン留め」することにします。

O の値が上の領域に入った時に、 $[X_1, X_2]$ 領域のピン留めを開始します。もしアップデートした結果がこの領域に入ったときは Accept、入らなかった時は Reject します。ただし、入らなかった時は、飛び出す前のビンのところに記録をします。この最後の修正が必要な理由は、ピン留めを実施しなかったときに $[X_1, X_2]$ の外から入ってくるはずだったイベントをカウントするためです [11, 12]。

複素ランジュバン法

モンテカルロ積分は $e^{-作用}$ に比例して状態を生成していきますが、有限密度 QCD ではこれが複素数になってしまって困ってしまいます。複素ランジュバン法は仮想時間 τ を導

入して,

$$\frac{dA_\mu(x)}{d\tau} = -\frac{\partial S}{\partial \tau} + (\text{ノイズ}) \quad (82)$$

というランジュバン型の方程式を解くので、計算ができてしまいます。「ある確率でグルーオン場を生成」というわけではないので、符号問題もないわけです。

しかし、 $\exp(-S)$ が複素数の時に経路積分と同等だと証明できるかという問題があります。ランジュバン方程式には対応する確率に対するフォッカー・プランク方程式があり、その振舞いが調べられれば正しい答えが得られるかどうか分かるはずですが、有限密度 QCD に対しては厳密な証明は無いようです。とくに複素ランジュバン方程式は解が正しくない解に収束してしまう場合があることが知られており、答えを知らない有限密度 QCD に対して、得られた結果の評価が難しくなります。

また、 A_μ を複素数にしてしまうと、 U_μ が $SU(3)$ ではなくなってしまうという問題があります。

しかし、最近スタマテスクたちのグループは、 A_μ の虚数部をできるだけ小さくするような変換をすることで、かなり大きな μ/T まで結果がマルチパラメータ・リウエイティングと一致するという計算を報告しているので、これから注目する必要があるようです。

参考文献

- [1] 青木慎也素核宇融合レクチャーシリーズ第2回 「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」
- [2] 青木慎也「格子上の場の理論」シュプリンガー現代理論物理学シリーズ、シュプリンガー・フェアラーク東京 (2005) 再販 丸善出版 (2012)
- [3] C. Gattringer and C. B. Lang, ``Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation'' (Lecture Notes in Physics), Springer, 2009

- [4] T. Degrand and C. DeTar ``Lattice Methods for Quantum Chromodynamics'', World Scientific Publishing Company (2006)
- [5] N.Metropolis et al. J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953)
- [6] M. Creutz and B. Freedman, Ann. Phys. 132 427, (1981)
- [7] K.G.Wilson, Phys. Rev. D10, 2445 (1974) Erice Lecture Note 1977
- [8] A. Roberge and N. Weiss Nucl. Phys. B275 (1986), 734.
- [9] M. D'Elia, M. P. Lombardo, Proceedings of the GISELDA Meeting held in Frascati, Italy, 14-18 January 2002.
- [10] Ph. de Forcrand, O. Philipsen, Nucl. Phys. **B642** 290 (2002).
- [11] A. Gocksch, Phys. LettB. 206 (1988) 290.
- [12] A. Gocksch, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 2054.