

サマースクール 2013  
格子 QCD シミュレーション入門

サマースクール「クォークから超新星爆発まで - 基礎物理の理想への挑戦 - 」  
サマースクール格子 QCD 担当班 (松古、元木、上田)

2013 年 8 月 20 日 京都大学基礎物理学研究所

## Contents

1	サマースクールの目的と手順	2
2	格子 QCD シミュレーションとは	3
3	格子ゲージ理論の枠組み	4
3.1	連続理論の量子色力学	4
3.2	格子上の QCD 作用	5
3.2.1	フェルミオン場の格子化	6
3.2.2	ゲージ場の格子化	7
3.2.3	格子作用のまとめ	8
3.3	格子ゲージ理論の量子化	8
3.4	ハドロン相関関数	10
3.5	連続極限	11
4	格子 QCD シミュレーションの方法	12
4.1	モンテカルロ法の原理	12
4.2	ゲージ場配位生成アルゴリズム	13
4.3	クォーク伝播関数の求め方	15
4.4	メソン相関関数	16
4.5	バリオン相関関数	17
5	格子 QCD シミュレーションの実習	19
5.1	ゲージ場配位	19
5.2	ジョブの実行	19
5.3	ハドロン相関関数の解析	20
A	統計処理	22

# 1 サマースクールの目的と手順

このサマースクールでは、素粒子・原子核・宇宙物理の計算科学による融合という、新学術領域、計算基礎科学拠点の目標に基づいて、素粒子から宇宙物理までの計算物理がどのように結びついているかを体験することを目指している。このため、以下のような計算を実際に行ってゆく。

- (1a) 格子 QCD シミュレーションによるハドロン質量の計算
- (1b) 格子 QCD シミュレーションによる核力ポテンシャルの導出
- (2) 密度汎関数理論による原子核計算
- (3) 超新星爆発シミュレーション

このノートでは、このうち (1a) の格子 QCD シミュレーションによるハドロン質量の計算について、その基礎となる格子ゲージ理論の枠組みとシミュレーションの原理の説明、プログラムを走らせて結果を理解するためのガイドを記述している。非常に限られた期間に素粒子理論の初学者を対象とした説明を試みる訳なので、詳細は大きく省き、およそどういった類の計算を行っているのかを感じて貰えるよう心がけた。興味を持たれた箇所については、参考文献などによって理解を深めて頂きたい [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]。

格子 QCD とは、強い相互作用に従うクォークやグルーオンを、格子上の場として扱う枠組みである。経路積分量子化を数値的に評価することで、摂動論やモデルによらずに物理量を計算できる。第一原理に基づいて非摂動的計算を行うことができる一般的な方法として、広く用いられている。このノートでは、格子 QCD の基礎と、数値シミュレーションがどのような手順で行われているのかを鳥瞰することを目指している。例題として、ハドロン質量の計算を行う。

このノートの構成は以下のようになっている。次の章は、格子 QCD シミュレーションへの導入として、全体像を把握するための概要をまとめた。第 3 章では格子上のゲージ理論の枠組み、第 4 章で格子 QCD シミュレーションの原理についてみてゆく。第 5 章には実習の手順と結果の見方などをまとめた。

## 2 格子 QCD シミュレーションとは

陽子や中性子を形作るクォークの間に働く相互作用は、量子色力学 (Quantum Chromodynamics, QCD) と呼ばれる理論で記述される。これは、量子化された、「色」の場の理論であること表している。これらがそれぞれ何を意味するのかをみていこう。場の理論とは、電場や磁場などのように、空間の各点に自由度が分布しているような理論である。粒子についても、場として扱う。これらを、ミクロの世界の理論であるから量子論として扱う。量子力学では粒子の位置を自由度としたが、場の理論では位置は自由度ではなく、異なる点における場の量を区別するためのパラメータである。自由度は各点での場の「振幅」、電磁場の場合にはベクトルポテンシャルとスカラーポテンシャルである。このように扱うことによって、粒子の生成消滅を扱うことができるようになる。電場や磁場と、電荷を持った粒子の間に働く相互作用、すなわち電磁気力を場の理論として記述するのが、量子電磁気学 (QED) である。QED は大きな成功を収めた。

「色」というのは、クォークに特有の自由度である。各クォークは「色」の自由度を持っており、色を交換することによって相互作用を行う。「色」と呼ぶのは、この自由度が 3 つの状態をとること、メソンやバリオンなどのハドロン状態が、「白色」に対応することによるアナロジーである。数学的には、クォークを  $SU(3)$  群 (3 次元特殊ユニタリー群) の基本表現に属するものとする。色の交換を媒介するゲージ場として、グルーオン場が導入される。これは量子電磁気学における光子と同じ役割を果たすが、グルーオン同士に相互作用が働くことが、光子との大きな違いであり、このことが、QED と QCD の持つ性質に決定的な違いを与えている。QED は、自然界の実験事実を非常に高い精度で説明できる。これは摂動論という手法に立脚した結果である。しかしながら、解析的に物理量を場の理論から計算してゆくことは簡単ではない。摂動論という手法では、小さなパラメータで物理量を展開してゆく。QED では、結合定数 (電荷) を小さい量と考えることができ、これによる展開が良い近似になっていた。しかし QCD では、結合定数は低エネルギーで増大するという性質を持ち、摂動論が破綻する。高エネルギーの散乱過程などでは結合定数が小さくなるため摂動論を使えるが、ハドロンの質量などは低エネルギー領域に属する物理量であり、摂動論では信頼できる計算が困難である。なんらかの摂動論以外の手法が必要である。

格子 QCD は、一般的な非摂動的な手法である。格子 QCD では、4 次元 Euclid 格子上の場の理論を考え、ゲージ原理に基づいてフェルミオン場とゲージ場の作用を定義する。格子定数  $a \rightarrow 0$  の極限を取るとき、連続理論と一致しなければならない。量子化を経路積分法によって行うと、Euclid 空間の場合は統計力学と同様、作用を指数とする Boltzmann 因数をかけた、場の配位による汎関数積分になる。この積分をモンテカルロ法により数値的に行うことによって、摂動論やモデルによらない、QCD の計算が可能になる。この枠組みと手順について一通り理解することが、このノートの目標である。

### 3 格子ゲージ理論の枠組み

この章では、格子上の場の理論の基礎をまとめる。以下のような表記法を用いる。

自然単位系  $c = \hbar = 1$  の自然単位系を用いる。このため、次元を持つ量は格子定数  $a$  の幂によってスケールを与えることができる。QCD の特徴的なエネルギースケールは核子質量  $\sim 1\text{GeV}$  程度なので、関係式  $\hbar c = 0.197 \text{ GeV fm}$  は長さの単位をエネルギーの単位に換算する時に便利である。

**Euclid 空間** 連続時空の場の理論では通常、時空を Minkowski 空間として話を始めることが多いが、格子ゲージ理論ではユークリッド空間で考えるのが便利である。このノートでは初めからユークリッド空間上での場の理論を考える。従ってメトリックは  $\delta_{\mu\nu}$  で与えられる。

#### 3.1 連続理論の量子色力学

連続理論の QCD ラグランジアンは

$$\mathcal{L}_{\text{QCD}} = \frac{1}{2} \text{Tr} \{ F_{\mu\nu}(x) F_{\mu\nu}(x) \} + \bar{\Psi}(x) (\gamma_\mu D_\mu + m) \Psi(x) \quad (1)$$

のように与えられる。ここで  $D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu$  は共変微分。形式上、量子電磁気学 (QED) と同じ形であるが、クォーク場が各点  $x$  でスピノール成分あたり  $\Psi(x) = (\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3)^T$  の 3 成分ベクトル (SU(3) の基本表現) で表され、グルーオン場  $A_\mu(x)$  および場の強さ  $F_{\mu\nu}(x)$  は 3 行 3 列のエルミートなトレースレス行列で表される (SU(3) の随伴表現)。

$$A_\mu(x) = \sum_{a=1}^8 A_\mu^a(x) \frac{\lambda^a}{2}, \quad F_{\mu\nu}(x) = \sum_{a=1}^8 F_{\mu\nu}^a(x) \frac{\lambda^a}{2} \quad (2)$$

群論によると SU(3) 群の生成子は 8 個あり、これらをゲルマン行列  $\lambda^a$  で表す。3 成分のクォーク場を回転させることによって相互作用を伝えるのが、ゲージ場としてのグルーオン場  $A_\mu^a(x)$  である。電磁気における電場と磁場に対応する場の強さは

$$F_{\mu\nu} = \frac{1}{ig} [D_\mu, D_\nu] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig[A_\mu, A_\nu] \quad (3)$$

と表される。Eq. (1) のグルーオン場の項には、運動項に加えてグルーオン同士の相互作用項が含まれ、これが QED における光子との大きな違いである。

ラグランジアン (1) は、以下のゲージ変換に対して不変である。

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\rightarrow V(x)\Psi(x), & \bar{\Psi}(x) &\rightarrow \bar{\Psi}(x)V^\dagger(x) \\ A_\mu(x) &\rightarrow V(x)A_\mu(x)V^\dagger(x) - \frac{i}{g}V(x)(\partial_\mu V^\dagger(x)) \end{aligned} \quad (4)$$

ここでゲージ変換  $V$  は SU(3) 群に属する行列である。

$$V(x) = \exp \left\{ i \sum_{a=1}^8 \theta^a(x) \frac{\lambda^a}{2} \right\} \quad (5)$$

QCD や QED などのゲージ理論と呼ばれるタイプの理論では、この局所的ゲージ変換の下での作用の不変性を課すことによって、相互作用の形を決める。ゲージ不変性は、格子上のゲージ理論でも作用の形を決める際に重要な役割を果たす。

Eq. (1) に現れる場を量子化することにより、量子色力学 (Quantum Chromodynamics, QCD) が得られる。連続理論における QCD の量子化についてはこのノートでは触れない [9]。以下では詳しく触れる余裕がない、QCD の持つ重要な性質を、いくつか箇条書にして紹介する [10]。

### 走る結合定数と漸近的自由性

物理量の期待値は、相互作用の効果により摂動論の高次で一般に発散するので、グルーオンとクォーク、グルーオン同士の結合定数に対する繰り込みが必要となる。これはある基準点で物理量が有限の量になるように規格化することに対応するが、その結果として結合定数が選んだスケールに依存することになる。繰り込みのエネルギースケール  $\mu$  を大きくしてゆくと、非可換ゲージ理論では繰り込まれた結合定数  $g$  が小さくなってゆく (ただし SU(3) ゲージ理論の場合クォーク数が 16 以下の時)。この性質を「漸近的自由」と呼ぶ。つまり、高エネルギーの現象では、摂動論が適用できる。格子 QCD では格子定数  $a$  がスケールの役割を果たすと考えると、 $g \rightarrow 0$  が  $a \rightarrow 0$ 、すなわち連続極限に対応する。

### クォークの閉じ込め

漸近的自由は高エネルギー極限での振る舞いだったが、逆に低エネルギーでは結合が大きくなり、摂動論が破綻する。現象論的には、クォークをハドロンから単独で取り出そうとすると、長距離で距離に比例してポテンシャルが増大し、やがてクォーク・反クォーク対をつくる方がエネルギー的に安定になってしまう。この単独のクォークが存在できず、ハドロンの状態でしか現れないことを、クォークの「閉じ込め」と呼び、その機構を理解することは格子 QCD の大きな課題の一つである。

### カイラル対称性

QCD ラグランジアン (1) は、クォークの質量がゼロの時、更に次のような変換の下で不変である。

$$\bar{\Psi} \rightarrow \bar{\Psi} \exp(i\alpha\gamma_5), \quad \Psi \rightarrow \exp(i\alpha\gamma_5)\Psi. \quad (6)$$

これは左巻のクォークと右巻のクォークの位相を別々に回すことに対応し、この下での不変性を「カイラル対称性」と呼ぶ。実際のクォークの質量は有限だが、 $u, d, s$  クォークはほぼゼロ質量とみなせるため、QCD の作用は近似的にカイラル対称である。しかし真空状態が対称かどうかは系のダイナミクスに依存する。通常温度では QCD 真空はカイラル対称性が自発的に破れた状態であり、それに伴う南部-Goldstone ボソンとしてパイオンの質量は軽くなる。また陽子や中性子の質量がクォーク質量の 3 倍よりもはるかに重いことも説明する。カイラル・ダイナミクスを研究することは格子 QCD の大きな課題の一つだが、格子上でカイラル対称なフェルミオン作用を定義することは難しい問題だった。最近はこのような作用が開発され、シミュレーションでも利用されるようになってきている。

## 3.2 格子上の QCD 作用

格子 QCD は、4次元ユークリッド空間の上で定義される。まず、格子上の場の理論を記述する構成する。ここではやや天下り的にゲージ場とフェルミオン場の作用を与える。格子上での作用の定義について詳しく理解したい場合は、教科書を参照のこと。

格子上の作用を決定するための指導原理として、

- ゲージ不変性

- $a \rightarrow 0$  ( $a$  は格子定数) で連続理論に帰着
- ゲージ対称性以外の連続理論が持つ対称性を可能なかぎり保つ

を考える。連続極限で消えるような項を付け加えることができるため、格子上の定義には任意性があることに注意。このことを利用して、より速く連続極限に近づく、「改良作用」を構成することができる。これは実際上は非常に重要だが、ここでは概念を理解することが目標であるので、もっともシンプルな作用を構成することを考える。

### 3.2.1 フェルミオン場の格子化

クォーク場はフェルミオンなので、反交換する Grassmann 数として表される。まず相互作用のない(自由な)フェルミオン作用の格子化を考える。連続理論では、Eq. (1) のラグランジアンを 4 次元空間で積分して作用が得られる。格子上では、フェルミオン場は  $\Psi(x) \rightarrow \Psi(n)$  のように、格子点(サイト)で定義される。フェルミオンの運動項は 1 階微分で構成されているので、エルミート性が保持されるように、中央差分(前進と後進差分の平均)

$$\partial_\mu \Psi(x) \rightarrow \frac{1}{2} (\Delta_\mu \Psi(n) + \Delta'_\mu \Psi(n)) = \frac{1}{2a} (\Psi(n + \hat{\mu}) - \Psi(n - \hat{\mu}))$$

を用いる。 $\hat{\mu}$  は  $\mu$ -方向の単位ベクトル。従って、格子上での質量  $m$  の自由なフェルミオン作用は、

$$S_F = a^4 \sum_n \left\{ \sum_\mu \bar{\Psi}(n) \gamma_\mu \frac{\Psi(n + \hat{\mu}) - \Psi(n - \hat{\mu})}{2a} + m \bar{\Psi}(n) \Psi(n) \right\} \quad (7)$$

と与えられる。この作用に対して運動量表示での伝搬関数を書いてみると、

$$G_F(k) = \left[ i \sum_\mu \gamma_\mu \frac{1}{a} \sin(ak_\mu) + m \right]^{-1} = \frac{-i \sum_\mu \gamma_\mu \frac{1}{a} \sin(ak_\mu) + m}{\frac{1}{a^2} \sum_\mu \sin^2(ak_\mu) + m^2} \quad (8)$$

となる。例えばクォーク質量ゼロの場合を考えてみると、分母のサイン関数が  $k_\mu = 0, \pi$  の場合が伝搬関数の極、即ち粒子に対応しているので、 $D = 4$  次元空間の場合には  $2^D = 16$  個の粒子が現れてしまう。粒子の個数は系のダイナミクスに大きな影響を与えるので、伝搬関数の余分な極を消去し、1つの粒子を表すようにしたい。

この「種の倍増」の問題の解決方法の一つである、ウィルソン・フェルミオンの方法を紹介する。余分な 15 個の極を消すために、格子上の作用にウィルソン項と呼ばれる

$$-r \sum_n \sum_\mu \bar{\Psi}(n) \frac{\Psi(n + \hat{\mu}) + \Psi(n - \hat{\mu}) - 2\Psi(n)}{2a} \quad (9)$$

を付加する。この項は連続極限で

$$-ar \int d^4x \bar{\Psi}(x) \partial^2 \Psi(x)$$

となり、 $a$  のべきを一つ含むため  $a \rightarrow 0$  で消え、この項を付け加えても連続理論のフェルミオン作用に一致する。

ウィルソン項を加えた後の作用は、

$$S_F = a^4 \sum_n \bar{\Psi}(n) \left\{ \sum_\mu \gamma_\mu \frac{\Psi(n + \hat{\mu}) - \Psi(n - \hat{\mu})}{2a} - r \sum_\mu \frac{\Psi(n + \hat{\mu}) + \Psi(n - \hat{\mu}) - 2\Psi(n)}{2a} + m \Psi(n) \right\} \quad (10)$$

となる。伝搬関数を計算してみると、

$$\left[ i \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \frac{1}{a} \sin(ak_{\mu}) + \frac{r}{a} \sum_{\mu} (1 - \cos(ak_{\mu})) + m \right]^{-1}.$$

となる。再び質量ゼロの場合で考えてみると、 $k_{\mu} = \pi$  では分母第2項のために極が現れず、全ての成分について  $k_{\mu} = 0$  の場合のみが極に対応し、粒子は一つになった。しかしながらこのウィルソン項は、 $m = 0$  の場合においてもカイラル対称性を陽に破るという問題がある。従って、カイラル対称性の存在が重要な役割を果たす物理量を計算する際には注意が必要である。

格子上のフェルミオン演算子の定義の仕方は、Wilson フェルミオンだけではない。種の倍増を回避する方法によってバリエーションがある。Wilson フェルミオンとともによく使われる作用として、Kogut-Susskind (staggered) フェルミオンがある。このフェルミオンは、「 $\gamma_{\mu}$  行列を対角化する表示に移る」ことによって、種の倍増を16個から4個に減らす。残った4個の自由度は一種のフレーバー自由度と解釈する。カイラル対称性が完全には破られないことや、シミュレーションのコストが小さいなどの特長を持つ。近年は格子上のカイラル対称性を持つドメインウォール・フェルミオン、オーバーラップ・フェルミオンといった作用を用いた研究も盛んである。

### 3.2.2 ゲージ場の格子化

$\bar{\Psi}(x)\partial_{\mu}\Psi(x)$  の差分化に伴う非局所的項、 $\bar{\Psi}(n)\Psi(n+\hat{\mu})$  は局所ゲージ変換  $\Psi(n) \rightarrow V(n)\Psi(n)$  に対して不変でない。連続理論では、フェルミオンの微分項を局所的ゲージ変換で不変にするようにゲージ場を導入する。同様に、格子上のフェルミオンの差分項をゲージ不変にするように、格子点  $n$  と格子点  $n+\hat{\mu}$  をつなぐ  $\mu$  方向のボンド (リンクと呼ぶ) 上にリンク変数:  $U_{\mu}(n) = e^{iagA_{\mu}(n)}$  を導入し、

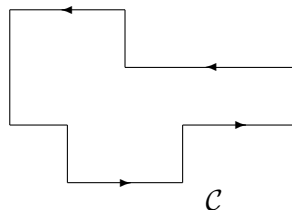
$$U_{\mu}(n) \rightarrow V(n)U_{\mu}(n)V^{\dagger}(n+\hat{\mu}) \quad (11)$$

というゲージ変換をするものとする。これによって、 $\bar{\Psi}(n)U_{\mu}(n)\Psi(n+\hat{\mu})$  はゲージ変換の下で不変となり、連続極限では、QCDにおけるクォークの共変微分項に帰着する。リンク変数は方向を持った量として定義されているので、その逆向きの変数は

$$U_{\mu}^{\dagger}(n) = U_{\mu}^{-1}(n) = U_{-\mu}(n+\hat{\mu}) \quad (12)$$

となる。このリンク変数を用いて Eq. (10) の差分を書き直せば、グルーオン場と相互作用するクォーク場の作用が得られる。

次にグルーオン場自身の作用を決める必要がある。リンク変数によるゲージ不変量は、次の図:



のように、任意の閉じたループ ( $C$ ) に沿ってリンク変数の積をとって、そのトレースをとったもの、 $\text{Tr}(P \Pi_C U)$  閉じたループとして一番簡単なものは、最小の正方形 (「プラケット」と呼ぶ) で

ある。このまわりにリンク変数をかけていったものは、連続極限での場の強さ、即ち電磁気学での電場および磁場に対応することがわかる。ゲージ不変なプラケット変数を

$$P_{\mu\nu}(n) = \frac{1}{N_c} \text{Tr} \left[ U_\mu(n) U_\nu(n + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(n + \hat{\nu}) U^\dagger(n) \right] \quad (13)$$

と定義すれば、格子上のゲージ作用を

$$S_G = -\frac{N_c}{g^2} \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} P_{\mu\nu}(n) \quad (14)$$

のように構成することができる。  $a \rightarrow 0$  としたとき、この格子上のゲージ不変な作用が連続理論 Eq. (1) におけるグルーオン場の作用に (ダイナミクスに寄与しない定数項を除いて) 一致を示すことができる。上の作用の表式に置ける和では、 $\mu, \nu$  について、 $\mu > \nu$  の場合と  $\mu < \nu$  の場合を両方取っているが、この両者が同じループに沿って逆向きにリンク変数を掛けて行ったものであり、互いにエルミート共役であることから、作用は実の量となる。シミュレーションでは結合定数のかわりに、 $\beta = 2N_c/g^2$  をパラメータとして表すことが多い。

### 3.2.3 格子作用のまとめ

こうして格子上のグルーオン場とクォーク場の作用として、

$$S_G = -\frac{N_c}{g^2} \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} P_{\mu\nu}(n), \quad (15)$$

$$\begin{aligned} S_F &= -\kappa \sum_n \sum_\mu \bar{\Psi}(n) \left[ (r - \gamma_\mu) U_\mu(n) \Psi(n + \hat{\nu}) + (r + \gamma_\mu) U_\mu^\dagger(n - \hat{\mu}) \Psi(n - \hat{\mu}) \right] \\ &\quad + \sum_n \bar{\Psi}(n) \Psi(n) \end{aligned} \quad (16)$$

を得た。ここでクォーク場については Eq. (10) を書き直して、ホッピング・パラメタ  $\kappa = 1/2(am+4r)$  を定義し、クォーク場を  $\Psi' = (\sqrt{a^3/2\kappa})\Psi$  と再定義した。定義から分かるようにクォークの質量が大きいとき、 $\kappa$  は小さくなる。 $r = 1$  のとき自由なフェルミオン系ではクォークの質量がゼロは  $\kappa = 1/8$  に相当するが、相互作用を受けると繰り込みを受けるので  $\kappa = 1/8$  からずれる。連続極限  $\beta \rightarrow \infty$  では  $\kappa \rightarrow 1/8$  となると予想される。クォーク場の作用は次のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} S_F &= \sum_{x,y} \sum_{j,k} \sum_{a,b} \bar{\Psi}(x)_j^a D(x,y)_{jk}^{ab} \Psi(y)_k^b, \\ D(x,y)_{jk}^{ab} &= \delta_{x,y} \delta_{j,k} \delta_{a,b} - \kappa \sum_\mu \left[ (r - \gamma_\mu)_{jk} U_\mu(n)^{ab} \delta_{x+\hat{\mu},y} + (r + \gamma_\mu)_{jk} U_\mu^\dagger(n - \hat{\mu})^{ab} \delta_{x-\hat{\mu},y} \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

この Eq. (17) の逆行列が、クォークの伝搬関数に対応する。

### 3.3 格子ゲージ理論の量子化

クォーク場とグルーオン場の格子作用が得られたので、この系を経路積分法によって量子化する。経路積分法では、物理量  $O$  の期待値は、

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{\Psi} \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}U O[\bar{\Psi}, \Psi, U] \exp\{-S_G[U] - S_F[\bar{\Psi}, \Psi, U]\}, \quad (18)$$

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\Psi} \mathcal{D}\Psi \mathcal{D}U \exp\{-S_G[U] - S_F[\bar{\Psi}, \Psi, U]\} \quad (19)$$



と表される。ここで  $Z$  は系の分配関数、 $D\Psi = \prod_{x,a,\alpha} \Psi(x)_\alpha^a$  などである。

まずフェルミオンの積分を考える。フェルミオン場は経路積分では反交換するグラスマン数なので、数値計算では  $\Psi$  の場を直接取り扱えるわけではない。そこでまず、作用がグラスマン数について双1次形式であることを利用して、分配関数に現れるフェルミオン場を解析的に積分する。グラスマン数の積分は、次のようなルールに従って行う。

$$\int d\psi = 0, \quad \int d\psi\psi = 1, \quad \{\psi, d\psi\} = \{d\psi, d\psi'\} = \{\psi, \psi'\} = 0. \quad (20)$$

これより、Matthews-Salam の公式と呼ばれる

$$\int d\bar{\Psi}d\Psi e^{-\bar{\Psi}A\Psi} = \det A$$

が得られる。これによって、

$$\begin{aligned} Z &= \int DU D\bar{\Psi}D\Psi e^{-S_G(U) - \sum \bar{\Psi}D[U]\Psi} \\ &= \int DU \det D[U] e^{-S_G(U)} = \int DU e^{-S_G(U) + \text{Tr} \ln D[U]} \end{aligned} \quad (21)$$

と、経路積分をリンク変数だけのものとして表すことができる。更に、

$$\begin{aligned} \int d\bar{\Psi}d\Psi (\bar{\Psi}_i \Psi_j) e^{-\bar{\Psi}A\Psi} &= (A^{-1})_{ji} \det A, \\ \int d\bar{\Psi}d\Psi (\bar{\Psi}_i \Psi_j \bar{\Psi}_k \Psi_l) e^{-\bar{\Psi}A\Psi} &= \{(A^{-1})_{ji}(A^{-1})_{lk} - (A^{-1})_{jk}(A^{-1})_{li}\} \det A \end{aligned}$$

などを使うと、物理量  $O$  のフェルミオン部分を、フェルミオンの伝搬関数  $S_{ji} = (D^{-1})_{ji}$  を使って表すことができる。ここで  $D$  はクォーク作用に現れるフェルミオン演算子 (17)、 $i, j$  は、サイト、カラー、スピノールの自由度をまとめて表したものである。

ゲージ場についての経路積分は、リンク変数について行なう。連続理論の場合との大きな違いは、積分する自由度がリンク変数 (群の元、 $U \in SU(N_c)$ ) であるために、積分が  $\int \Pi_l dU_l = 1$  のように1に規格化されている点である。このことによって、格子ゲージ理論では連続理論のときのようにゲージ固定する必要性がない。リンク変数に対する経路積分の測度を、

$$d(VU) = d(UV) = dU \quad \forall V \in SU(N_c) \quad (22)$$

をみだす不変ハール測度を取れば、経路積分の測度は明らかにゲージ不変である。実際のシミュレーションで、この汎関数積分をどのように評価するかについては、次の章で説明する。

このようなコンパクトな変数による経路積分であることを使って、ゲージ不変でない演算子の期待値はゼロであることも証明できる。それは「エリツァーの定理」として知られている<sup>1</sup>。従って、格子ゲージ理論において、狭義の意味において「観測量 = ゲージ不変量」とも言える。

<sup>1</sup>このことは「格子ゲージ理論においては、局所ゲージ対称性は自発的に破れない」という意味につながる。

### 3.4 ハドロン相関関数

物理量の例として、ハドロンの相関関数を考えてみる。ハドロンの相関関数を格子シミュレーションで求めることができれば、その振る舞いからハドロン質量や崩壊定数などの情報を引き出すことができる。

今、格子点  $n = (t, \vec{n})$  でのハドロンの場  $\mathcal{H}(n)$  を考える。話を簡単にするために、空間成分  $\vec{n}$  について和を取ったハドロンの場を改めて  $\mathcal{H}(t) \equiv \sum_{\vec{n}} \mathcal{H}(n)$  とおく。このハドロンの場は運動量ゼロのハドロンの状態と考えてよい。用意したハドロンの場を用いて、ハドロンの虚時間 2 点相関関数

$$G(t) = \langle T\{\mathcal{H}(t)\mathcal{H}^\dagger(0)\} \rangle \quad (23)$$

が与えられる。ここで左辺の  $\langle T\{\mathcal{H}(t)\mathcal{H}^\dagger(0)\} \rangle$  を演算子形式で Heisenberg 描像での Green 関数と等価であると考え、 $t > 0$  に対して

$$\langle \mathcal{H}(t)\mathcal{H}^\dagger(0) \rangle = \langle 0|\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{\mathcal{H}}^\dagger(0)|0 \rangle \quad (24)$$

と表される。ここで  $\hat{\mathcal{H}}(t)$ 、 $\hat{\mathcal{H}}^\dagger(t)$  はハドロンの消滅・生成演算子に対応し、 $|0\rangle$  は真空状態を表す。演算子と同じ量子数を持つハドロン状態の中間状態で展開すると

$$\langle \mathcal{H}(t)\mathcal{H}^\dagger(0) \rangle = \sum_i \langle 0|\hat{\mathcal{H}}(t)|i\rangle \langle i|\hat{\mathcal{H}}(0)|0 \rangle = \sum_i |\langle 0|\mathcal{H}|i\rangle|^2 e^{-M_i t} \quad (25)$$

となる。ここで、 $\hat{\mathcal{H}}(t) = e^{-i\hat{P}_4 t} \mathcal{H} e^{i\hat{P}_4 t}$  (ただし、 $P_4 = iE$ ) を使った。 $t < 0$  の場合も同様に考える事ができて、合わせると

$$G(t) = \sum_i |\langle 0|\mathcal{H}|i\rangle|^2 e^{-M_i |t|} \quad (26)$$

となる。状態和のうち、質量の重い 1 粒子励起状態や全体エネルギーの大きい多粒子状態の寄与は指数的に速く落ちるので、虚時間遠方では最も低い質量 (エネルギー) である 1 粒子基底状態の寄与だけが残り、

$$G(t) \rightarrow Z_0 e^{-M_0 |t|} \quad (27)$$

と時間  $t$  に関して単純な指数関数の振る舞いとなる。この虚時間遠方での漸近的振る舞いから、基底状態のハドロン質量を読み取ることができる。

メソンの場合を例に取って、もう少し詳しくみてみよう。メソン場の演算子を、クォーク場を使って

$$\mathcal{M}(n) = \bar{\Psi}(n)^a \Gamma \Psi(n)^a \quad (28)$$

のように書く。ここで  $\Gamma$  は後で見えるようにメソンの量子数を表すスピノール空間の  $4 \times 4$  行列、 $a$  はカラー成分を表す。経路積分の表式は

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{M}(n)\mathcal{M}^\dagger(m) \rangle &= \frac{1}{Z} \int DUD\Psi D\bar{\Psi} \bar{\Psi}^a(n) \Gamma \Psi^a(n) \bar{\Psi}^b(m) \tilde{\Gamma} \Psi^b(m) e^{-S_G[U] - \bar{\Psi} D[U] \Psi} \\ &= \int DU e^{-S_G[U] + \text{Tr} \ln D[U]} \left( \text{Tr}\{\Gamma S(n, n)\} \text{Tr}\{\tilde{\Gamma} S(m, m)\} - \text{Tr}\{\Gamma S(n, m) \tilde{\Gamma} S(m, n)\} \right) \end{aligned} \quad (29)$$

ここで  $\tilde{\Gamma} = \gamma_4 \Gamma^\dagger \gamma_4$  とし、 $S(m, n) = D^{-1}(m, n)$  はクォークの伝搬関数である。Eq. (29) 右辺の第 1 項は disconnected part, 第 2 項は connected part と呼ばれ、前者はフレイバーシングレットのメソンの場合にのみ寄与する。このように、ハドロンの相関関数はクォークの伝搬関数を組み合わせることで表すことができる。

### 3.5 連続極限

QCD が漸近的自由性を持つことから、系のスケールを決めている格子定数  $a$  がゼロに向かう極限は、弱結合の極限に対応する。この極限を取る際に物理量に予想される振る舞いは、QCD 理論が繰り込み可能であることから、 $\beta$  関数によるスケールリングによって表される。十分連続極限に近い格子パラメータで計算している場合には、物理量はその質量次元できまる振る舞いを示すことが予想される。

実際のシミュレーションでは、何らかの観測可能な物理量を使って格子定数  $a$  を決め、連続極限は  $a$  に関する外挿によって得られる。物理量を組み合わせて無次元量を定義すると、連続極限で有限の値に近づくので、 $a$  に対する振る舞いを予測してフィットし、外挿値を得ることが多い。その際、観測量との比較から格子定数を定義しておくと便利である。クォーク間の静的ポテンシャル (ストリングの張力) や、ハドロンの質量を使って格子定数を決めることが多い。

## 4 格子 QCD シミュレーションの方法

### 4.1 モンテカルロ法の原理

観測量  $\langle O \rangle$  は、経路積分法においては

$$\langle O \rangle = \int DU O e^{-S(U)} \quad (30)$$

のように与えられた。有限の格子サイズでは、原理的にはこの汎関数積分を多重積分として数値的に評価できると思える。これは例えば格子サイズを  $10^4$  としてみると、自由度はカラー  $8 \times$  リンク変数のベクトルの足  $4 \times$  サイト数であり、 $8 \times 4 \times 10^4 \approx 3 \times 10^5$  となる。単純な数値積分で評価することは実際上不可能であるので、モンテカルロ積分によって評価する。

モンテカルロ法では、このような超大次元積分をボルツマン因子  $\exp\{-S[U]\}$  に比例した確率で生成される有限個の「場の配位」 $\{U\}$  によって評価する（「重要サンプリング法」と呼ぶ）。

$$\langle O \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_k^N O[U^{(k)}] \quad (31)$$

このとき、配位の数  $N$  を積分の総次元数に一致させたときに求まる量を真値とすると、そこからの誤差は  $N$  を増やすとともに、 $1/\sqrt{N}$  で小さくなる。

ゲージ配位  $\{U\}$  を順次発生させるためには、次のような性質を持つ遷移確率  $P(U \rightarrow U')$  によって表される、「マルコフ過程」を利用する。

- 現世代のゲージ配位  $\{U\}$  から次世代のゲージ配位  $\{U'\}$  を発生させる： $U \rightarrow U'$
- 与えられたゲージ配位  $\{U'\}$  が得られる確率が一つ前の世代にのみ依存して、それ以前の経歴には依存しない。

$P(U \rightarrow U')$  は確率なので次の不等式を満たすことは明らか<sup>2</sup>。

$$1 > P(U \rightarrow U') > 0 \quad (32)$$

また到達できる次世代の全ての場合について遷移確率を足すと

$$\sum_{U'} P(U \rightarrow U') = 1 \quad (33)$$

の条件を満たす。マルコフ連鎖上の配位  $\{U\}$  から得られる次世代の配位の全確率分布は前世代の配位の確率分布に、そこからの遷移確率を掛けて、全ての可能な前世代について和をとることで与えられる：

$$\tilde{\rho}(U') = \sum_U \rho(U) P(U \rightarrow U'). \quad (34)$$

マルコフ過程を繰り返すことによって、「平衡（あるいは定常確率）分布」

$$\rho_{\text{eq}}(U') = \sum_U \rho_{\text{eq}}(U) P(U \rightarrow U') \quad (35)$$

<sup>2</sup> $P(U \rightarrow U') > 0$  は強いエルゴード性を課している。

に近づくことを示すことができる（証明は省略）。

実際に  $\rho_{\text{eq}}(U) \propto e^{-S(U)}$  なる定常確率分布を達成するためのアルゴリズムを構成するためには、次の「詳細平衡条件」を考えるのが便利である。

$$P(U \rightarrow U')\rho_{\text{eq}}(U) = P(U' \rightarrow U)\rho_{\text{eq}}(U') \quad (36)$$

この条件は前述の平衡分布 (35) を満足するための十分条件となる<sup>3</sup>。従って、 $\rho_{\text{eq}}(U) \propto e^{-S(U)}$  を得るために、

$$P(U \rightarrow U')e^{-S(U)} = P(U' \rightarrow U)e^{-S(U')} \quad (37)$$

なる微細平衡条件を満足するようなアルゴリズムで、ゲージ配位  $\{U\}$  を前世代から次世代に逐次更新する。

このようなアルゴリズムの例として、「メトロポリス法」を紹介する。メトロポリス法では微細平衡条件を満足する遷移確率

$$P(U \rightarrow U') \propto \min(1, e^{-\Delta S(U)})$$

で逐次ゲージ配位を更新する方法で、その手順は以下のように表される。

1. 配位  $\{U\}$  を元にランダムな手続きで新しい配位  $\{U'\}$  を試行的に選び出す（この試行手続きはミクロ可逆性を満たすものとする）
2.  $\Delta S = S(U') - S(U)$  を計算
3.  $[0, 1]$  に一様に分布した乱数  $R$  を発生
  - もし  $R < \exp(-\Delta S)$  ならば  $\Rightarrow$  新しい配位を採用
  - もし  $R > \exp(-\Delta S)$  ならば  $\Rightarrow$  新しい配位を棄却
4. 繰り返す (1 に戻る)

このアルゴリズムが詳細平衡条件を満たすことは簡単に示すことができる。

## 4.2 ゲージ場配位生成アルゴリズム

メトロポリス法は、作用さえ計算できれば適用可能な汎用性のあるアルゴリズムであるが、試行手続きのランダムネスを大きくすると採用確率は低くなり、配位がなかなか更新されない。そのため、ゲージ場のみを動的に扱うシミュレーション（クォークの真空への効果を見捨てる「クエンチ近似」）では、ゲージ場の作用が局所的であることを利用した、より効率のよい「熱浴法」を用いることが多い。一方、クォークの真空偏極を含む動的シミュレーション（「フル QCD」シミュレーションとも呼ばれる）では、反可換するクォーク場を積分した結果の有効作用が非局所的であるので、局所的にリンク変数をアップデートしてゆく効果的なアルゴリズムを組むのが難しい。フル QCD に適したアルゴリズムとしては、ハイブリッドモンテカルロ法と呼ばれる手法が広く用いられている。

<sup>3</sup>証明：両辺に  $U$  に関する和をとると、 $\sum_U P(U' \rightarrow U) = 1$  より平衡分布 (35) が示せる。

既に述べたように、分配関数は次のように表される。

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\Psi} \mathcal{D}\Psi e^{-S_G[U] - \sum \bar{\Psi} D[U] \Psi} = \int \mathcal{D}U \det D[U] e^{-S_G[U]} = \int \mathcal{D}U e^{-S_G[U] + \text{Tr} \ln D[U]} \quad (38)$$

$\text{Tr} \ln D(U)$  の項は非局所的な作用で数値的にこの項をキープしたままモンテカルロ計算する計算コストは高い。黎明期には  $\det D[U] = \text{定数}$  として近似を行なった。これがクエンチ近似であり、クォークの質量が大きい場合は真空偏極の効果が小さくなるので正当化される。現在ではこの項も含んだフル QCD シミュレーションが主流ではあるが、新しい物理量の計算などでは未だに頻繁にこの近似が使われている。

フル QCD の配位生成アルゴリズムとして現在主流のハイブリッドモンテカルロ法では、まずフェルミオン行列式をボソン場 (「擬フェルミオン場」) による積分に置き換える。簡単のため 2 フレイバーの場合を考えると、 $D$  の代わりに  $D^\dagger D$  の行列式を評価すればよい。

$$Z = \int \mathcal{D}U \det(D^\dagger[U]D[U]) e^{-S_G[U]} = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi e^{-S_G[U] - \phi^\dagger (D^\dagger[U]D[U])^{-1} \phi} \quad (39)$$

こうして  $U$  と  $\phi$  に関する積分を実行すればよいことになったが、擬フェルミオン場の作用に  $(D^\dagger D)^{-1}$  が現れることになった。次にゲージ場に共役運動量場  $P$  を導入し、 $U$  と  $P$  についてのハミルトン方程式に従って場を発展させてゆく。この際、発展方程式を支配する「時間」は手で持ち込んだものであり、4次元時空中の時間とは関係無い。この操作は、カノニカル集団の表式をマイクロカノニカル集団によって評価することに対応する。発展方程式を解く際に、シミュレーションでは有限ステップサイズの誤差が発生してしまうが、これはハミルトン系の保存量、ハミルトニアン のずれに関するメトロポリス法を最後に実行することによって確率的に補正できる。ハイブリッドモンテカルロ法のアルゴリズムは、次のようにまとめられる。

1. あるゲージ場の配位  $U$  の下で、 $\phi$  を  $\propto \exp(-\phi^\dagger (D[U]^\dagger D[U])^{-1} \phi)$  の確率で生成する。これはまず  $\exp(-\xi^\dagger \xi)$  とガウス分布の確率で生成した  $\xi$  から、 $\phi = D^\dagger[U] \xi$  とすればよい。
2. 共役運動量  $P$  の分布を、Gauss 分布によって与える。
3.  $U$  と  $P$  に関する発展方程式を解き、ある時間ステップを進める。この際各ステップで、 $P$  を進めるための「フォース」に対する擬フェルミオン場からの寄与を計算するために、 $(D^\dagger D[U])x = \phi$  という大規模線型方程式を解く必要が生じる。
4. ある時間ステップ進めて場が  $\{U', P'\}$  となったら、ハミルトニアン のずれ  $H[U', P', \phi] - H[U, P, \phi]$  を計算し、メトロポリス法の条件に従って、場  $\{U', P'\}$  を採用するか棄却するかを決める。棄却された場合は、元の配位  $U$  を新しい場として採用する。
5. 繰り返す (1 に戻る)

ハイブリッド・モンテカルロ法には、高速化のための種々の改良が提案されており、奇数個のフレイバー数を扱うためのバリエーションもいくつかある。

このように、クォークをダイナミカルに扱うシミュレーションは非常にコストのかかるものであるが、生成した配位を使うと多くの物理量を計算できるので、生成された配位を公開し、研究者の間で共有しようとする活動が進められてきた。この種の活動で先駆的なのは Gauge Connection である。その後 ILDG (International Lattice Data Grid)[11] が発足し、統一的な配位データの

フォーマットや、生成した配位の作用やパラメーターなど「メタデータ」の記述法を定め、地域グリッドを統合した公開活動を展開している。日本では筑波大、KEK、阪大 RCNP、広島大、金沢大が参加する JLDG (Japan Lattice Data Grid) [12] が、ILDG の地域グリッドを提供するとともに、国内の研究グループのデータ公開、グループ内のデータ転送や蓄積を支援するための活動や、データグリッド環境の整備を進めている。

### 4.3 クォーク伝播関数の求め方

メソンやバリオンなどハドロンの相関関数を計算するには、まずそれらを構成するクォークの格子上的伝搬関数を求め、それらを組み合わせて相関関数を構成する。この節では、格子上でのクォーク伝搬関数を求める手順について概説する。

Dirac 演算子  $D(n, m)$  は、 $(4 \text{ spins}) \times (3 \text{ colors}) \times (\text{space-time volume}) = 12V$  とすると、 $12V \times 12V$  の大規模な行列である。クォーク伝搬関数は、Dirac 演算子  $D(n, m)$  の逆行列であるが、あらゆる点からあらゆる点への成分をすべて求めることは現実的でない<sup>4</sup>。そのため、まずある固定した点からその他の点への伝搬関数を求めることが多い。例えば、 $n = (0, 0, 0, 0)$  (クォーク場の source) から任意の格子点  $m$  (クォーク場の sink) への伝搬関数  $S(m, 0)$  は、 $12V$  次元ベクトルで表される大規模線形方程式

$$\sum_m D(n, m; U) S(m, 0) = \delta_{n0} \quad (40)$$

の解とみなせる。これを求めるには、線形方程式を解くために応用数学で開発されている解法を用いる。行列  $D$  が大規模な疎行列であったことから、掃き出し法 (Gauss-Jordan 法) などの直接解法は効率が悪い。一方、共役勾配法 (Conjugate Gradient=CG 法) などの反復法は、疎行列であることを有効に使うことができるため、格子シミュレーションでは広く利用されている。ここでは例として、共役勾配法のアルゴリズムを、原理の説明抜きで紹介しておく。原理について興味のある方は数値アルゴリズムの教科書を参照されたい [13, 14]。解きたい方程式を、 $Ax = b$  とする。 $A$  が行列、 $x$  が求めたい解ベクトル、 $b$  がソースベクトルである。

共役勾配法アルゴリズム：

1. 任意の初期ベクトル  $x_0$  に対して  $p_0 = r_0 = b - Ax_0$  を計算
2. 以下の計算を行なう
  - $\alpha_k = \frac{(p_k, r_k)}{(p_k, Ap_k)}$
  - $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
  - $r_{k+1} = r_k + \alpha_k Ap_k$
  - $\beta_k = -\frac{(r_{k+1}, Ap_k)}{(p_k, Ap_k)}$
  - $p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$
3. 必要な精度  $\epsilon$  以下に残差  $r$  が達していなければ 2 に戻る

反復法には、行列の性質 (エルミートかそうでないか等) によって多くのバリエーションがあるので、行列の性質に最適なものを探ることが重要である。また前処理法を工夫することによっても高速化できる。ハイブリッドモンテカルロ法の項で述べたように、この線型解法がシミュレーションコストの大きな部分を占めているので、高速化は非常に重要である。

<sup>4</sup>最近はいわゆる all-to-all 伝搬関数法として、このような伝搬関数を用いる手法が開発されている。

Table 1:  $P = (-1)^{L+1}$  and  $C = (-1)^{L+S}$ 

$\Gamma$	$^{2S+1}L_J$	$J^{PC}$	Meson	Charmonium
$\gamma_5$	$^1S_0$	$0^{-+}$	$\pi$	$\eta_c$
$\gamma_i$	$^3S_1$	$1^{--}$	$\rho, \omega$	$J/\psi$
1	$^3P_0$	$0^{++}$	$\sigma, a_0, f_0$	$\chi_0(1P)$
$\gamma_5\gamma_i$	$^3P_1$	$1^{++}$	$a_1$	$\chi_1(1P)$
$\gamma_i\gamma_j$	$^1P_1$	$1^{+-}$	$b_1$	$h_c(1P)$

#### 4.4 メソン相関関数

既に紹介したように、ハドロンの相関関数が計算できれば、そのハドロンの質量や崩壊定数などが計算できる。

実際に  $\langle \mathcal{M}(n)\mathcal{M}^\dagger(m) \rangle$  を評価するには、まずゲージ配位  $\{U\}$  を確率  $\det D[U] \exp\{-S_G(U)\}$  に従って逐次発生させる。それぞれのゲージ配位  $\{U\}$  の上でクォーク伝搬関数  $D[U]^{-1}(m, l)$  を求め、得られたクォーク伝搬関数によってメソン相関関数

$$\langle \mathcal{M}(n)\mathcal{M}^\dagger(m) \rangle = -\frac{1}{N} \sum_{\{U_i\}} \text{Tr}\{\Gamma D[U]^{-1}(n, m) \tilde{\Gamma} \gamma_5 (D[U]^{-1}(n, m))^* \gamma_5\} \quad (41)$$

を構成する。

ハドロ演算子は、対象となるハドロと同じ量子数を持つように構成すればよいため、構成法には任意性がある。メソン場の場合、クォークと反クォークの場を格子同一点上に置いて構成する、局所的な演算子として

$$\mathcal{M}_\Gamma(n) = \bar{\Psi}^a(n) \Gamma \Psi^a(n) \quad (42)$$

が頻繁に使われる。ここで  $\Gamma$  は 16 種類のディラック行列で、例えば、 $\Gamma = \gamma_5$  にとれば、中間子のような擬スカラー中間子、 $\Gamma = \gamma_\mu$  にとれば、 $\rho$  中間子のようなベクトル中間子に対応する。残りの  $\Gamma$  と中間子との対応は表を参照。式 (42) ではクォーク場と反クォーク場のテンソル積を同一格子点で取ったが、非局所的な演算子を使うこともできる。(この場合、ゲージ不変にするためにリンク変数を挿入するか、ゲージ固定を行う。) 量子数が等しければ得られる質量はハドロンの定義に依らないが、基底状態との結合の強さなどの性質が異なるため、ハドロ演算子を注意深く選ぶことによって統計誤差を減らせるなど、メリットがある場合がある。

既に述べたように、ハドロンの相関関数は、十分大きな虚時間で、

$$G(t) \rightarrow e^{-M_0|t|} \quad (43)$$

と時間  $t$  に関する指数関数的振る舞いをする。この虚時間遠方での漸近的振る舞いから、基底状態のハドロンの質量を読み取ることができる。例えば、次のような有効質量 (Effective Mass) と呼ばれる量を

$$M_{\text{eff}}(t) = \ln \left\{ \frac{G(t)}{G(t+1)} \right\} \quad (44)$$

定義すれば、これを時間の関数として図示すると、ある虚時間より大きなところで虚時間によらない一定値に収束する。その一定値が基底状態のハドロンの質量  $M_0$  と考えてよい。



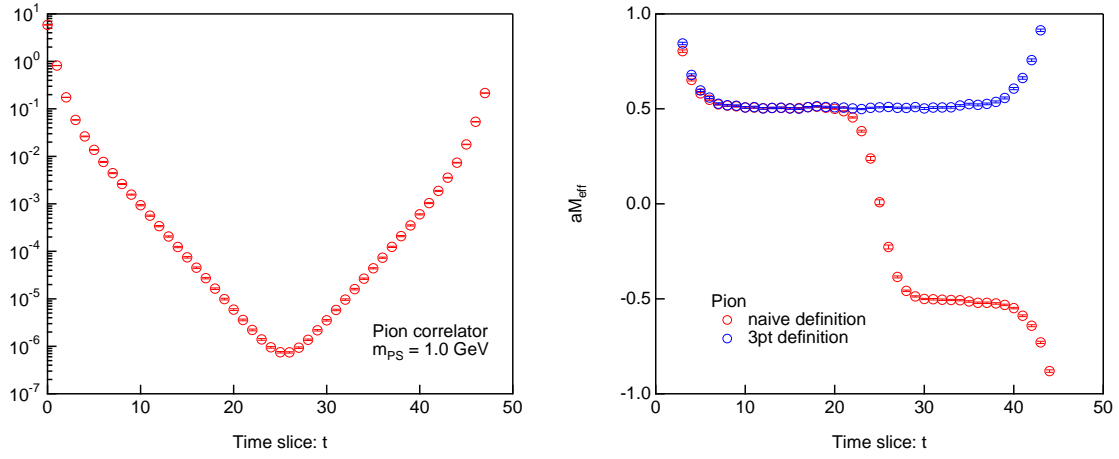


Figure 1: 擬スカラーチャンネルの2点相関関数 (左図) とその有効質量 (右図) のプロット。

実際のシミュレーションでは、有限格子を扱うので、 $t$  方向の境界条件を考慮する必要がある。クォークについて周期的境界条件を採用すると、メソンの相関関数は、

$$G \propto \cosh \left[ M \left( t - \frac{T}{2} \right) \right] \quad (45)$$

という振る舞いをするようになる。図は虚時間方向に周期境界条件を課したときに得られた擬スカラーチャンネルの2点相関関数をプロットしたものである。有効質量についても、境界条件を考慮して定義を変更するとよい。例えば、以下のように定義すると、図のような振る舞いが得られる。

$$M'_{\text{eff}}(t) = \cosh^{-1} \left[ \frac{G_{\text{PBC}}(t+1) + G_{\text{PBC}}(t-1)}{2G_{\text{PBC}}(t)} \right] \quad (46)$$

#### 4.5 バリオン相関関数

バリオンはクォークと同じくフェルミオンであるので、スピンの構造を持つ。バリオンの場合もメソンの場合と同様、その構成法には任意性があるが、ここでは3つのクォークを格子同一点上に置いて構成する方法を紹介する。以下では核子（陽子、中性子）の場合を扱う。まず同一点上でダイクォーク（スピノル空間でトレースをとる）を組み、残りのクォークに核子のスピノル成分を担わせると、次のような2種類の核子と同じ量子数を表す演算子を構成できる。

$$\mathcal{N}_1(n) = \varepsilon_{abc} \left[ u_a^T(n) C \gamma_5 d_b(n) \right] u_c(n) \quad (47)$$

$$\mathcal{N}_2(n) = \varepsilon_{abc} \left[ u_a^T(n) C d_b(n) \right] \gamma_5 u_c(n) \quad (48)$$

これらには、非相対論極限を持つ前者に対して、後者は非相対論極限を持たないという違いがある。このため格子QCDシミュレーションでも、クォーク質量が重いところでは演算子  $\mathcal{N}_2$  の核子基底状態との結合が非常に弱い事が知られている。しかしクォークの質量を小さくしてゆくと、 $\mathcal{N}_2$  と核子の基底状態との結合が大きくなっていくことが示されている。このスクールでは、核子の演算子として  $\mathcal{N}_1$  を用いて相関関数を計算する。

バリオン2点相関関数に関しては、メソン2点関数と比べて、いくつか注意する点が存在する。

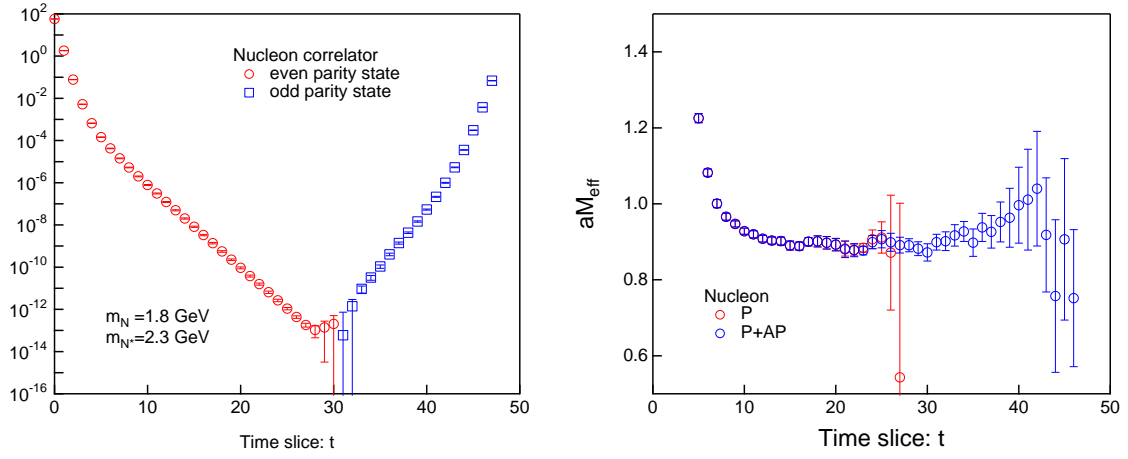


Figure 2: 核子の相関関数 (左図) と有効質量 (右図) のプロット。

まず、バリオン 2 点相関関数はバリオン演算子  $B_\alpha$  がスピノルの足  $\alpha$  を持つことから、

$$G_N(t)_{\alpha\beta} = \sum_{\vec{x}} \langle T \{ \mathcal{N}_\alpha(\vec{n}, t) \bar{\mathcal{N}}_\beta(0) \} \rangle \quad (49)$$

のようにスピノル空間の足  $(\alpha, \beta)$  でラベルされる、 $4 \times 4$  のスピノル構造を持つ。今、ここで空間  $\vec{n}$  について和をとって、運動量ゼロの状態に射影した。 $t > 0$  に対しては粒子が、 $t < 0$  に対しては反粒子が寄与するので、それぞれについて可能な粒子状態  $|n\rangle$  を演算子間に挟むと、

$$G_N(t)_{\alpha\beta} = \left( \frac{1 + \text{sign}(t)\gamma_4}{2} \right)_{\alpha\beta} \sum_{n+} C_{n+} e^{-M_{n+}|t|} + \left( \frac{1 - \text{sign}(t)\gamma_4}{2} \right)_{\alpha\beta} \sum_{n-} C_{n-} e^{-M_{n-}|t|} \quad (50)$$

を得る。ここで  $-M_{\pm n}$  はパリティが正負のそれぞれ  $n$  番目の励起状態を表す。 $P_{\pm} = (1 \pm \gamma_4)/2$  は粒子・反粒子の射影演算子である。周期的境界条件をフェルミオンに課した場合、粒子の射影演算子  $P_+ = (1 + \gamma_4)/2$  をバリオン 2 点関数に射影してスピノル空間のトレースをとれば、 $t$  及び  $(T - t)$  の大きいところで

$$\frac{1}{4} \text{Tr} \{ P_+ G_N(t) \} = C_+ e^{-M_+ t} - C_- e^{-M_- (T-t)} \quad (51)$$

という振る舞いを示すことになる。ここで  $M_{\pm}$  はパリティ正負の核子の基底状態の質量である。このバリオン相関関数と 2 点で定義した有効質量の振る舞いを、図に示す。

## 5 格子 QCD シミュレーションの実習

### 5.1 ゲージ場配位

実習では、ゲージ場については既に生成されているものを使い、その上でクォークの伝搬関数を解きハドロンの相関関数を組むプログラムを使って、ハドロン質量決定の過程を追ってみる。

ゲージ場は CP-PACS コラボレーションによって生成された 2 フレイバーの動的クォークの効果を含む配位データ [15] を用いる。このゲージ場配位は、格子 QCD データグリッドである ILDG(International Lattice Data Grid) 上に公開されているもので、全世界の格子 QCD 研究者が利用できるものである。ここで使うゲージ配位のデータは、以下のような条件で生成されたものである。

- 格子サイズは  $12^3 \times 24$ 。
- ゲージ場の作用は Wilosn 作用を改良した、岩崎作用と呼ばれるものを用いた。
- フェルミオン場には Wilosn 作用を改良した、クローバー作用と呼ばれるものを用いた。
- 格子定数は  $a = 0.215(2)\text{fm}$  に対応する。
- 動的クォークのホッピングパラメータは  $\kappa = 0.1409$ 。実際の  $u, d$  クォーク質量よりかなり重い質量に対応する。

### 5.2 ジョブの実行

まず、一つ一つの配位データを読み込んで相関関数を計算するプログラムを実行する。このプログラムは、Bridge++ [16] という C++ によるコードセットを基にして作成されたもので、 $P_s$  と  $V$  メソンおよび核子の相関関数を計算する。ハドロンの演算子は、ソース、シンク共にそれぞれ同一点上で構成されたものを用いる。クォークの境界条件は全ての方向について周期的で、ホッピングパラメータは  $\kappa = 0.1409$  (動的クォークと同じ) としている。

実行の手順は以下の通り。

#### (1) ファイルの用意

ソースファイルを置いてあるディレクトリから `school_latt1_job.tar.gz` を自分の作業ディレクトリにコピーする。 `gzip -d [file 名]` で解凍し、 `tar xvf [file 名]` で展開。 `latt1_job/` というディレクトリが出来、この下に必要なものが揃っている。配位データはサイズが大きいので、あるディレクトリにまとめて用意されており、`CONF` というシンボリックリンクが張られている。バイナリデータなので直接直読もうとしないこと。

#### (2) コンパイル

コンパイルには数分の時間がかかるが、多くのユーザが同時に行うとシステムに大きな負荷がかかるため、ここでは既にコンパイル済みの実行ファイルを使う。

コンパイルしてみたい場合には、以下の手順に従う。 `exec/` に移動し、 `gmake` でコンパイルする。実行ファイル `NOARCH.x` がディレクトリ `build/` の中にできる。ディレクトリ `src/` 以下にあるのがソースコードである。

#### (3) サブミットするスクリプトの準備

`script/` で `bash mk_jobscript.sh 5000 > SLAT.5000` を実行すると、ジョブサブミットのためのスクリプトができる。これは配位番号 5000 についてハドロン相関関数を計算す

るためのもので、スクリプトに渡す番号を変えれば、他の番号の配位用のものも同様に作れる。(例えば、`bash mk_jobscript.sh 5010 > SLAT.5010。`)

#### (4) ジョブのサブミット

SR のバッチキューシステムにジョブをサブミットする。`llsubmit SLAT.5000` と実行する。ジョブがすぐ流れれば 3、4 分で終了する。コマンド `llq` によって、現在実行中および実行待ちのジョブ一覧を調べることが出来る。キャンセルする場合は、`llcancel [ジョブ番号]` を実行。

#### (5) 結果の確認

計算結果は `data/` に格納される。あらかじめ実行した結果が `sample/` にあるので、一致していれば OK。

計算結果のファイル `wspect_rhq.dat.5000` をみてみよう。まず反復法の一つである、BiCGStab アルゴリズムによって、 $t = 0, \vec{x} = 0$  に置いたソースからクォークの伝搬関数を求める。収束条件は  $r^2/b^2 < 10^{-8}$ 。次にこのクォークの伝搬関数を組み合わせて、PS メソン、V メソン ( $\mu = 1, 2, 3$  成分)、核子の各相関関数を計算する。各 time slice での相関関数の実数部、虚数部が出力される。核子については負パリティの状態の結果も出力されているが、ここでは使用しない。こうして、一つの配位データについての相関関数が得られたが、物理量の期待値を求めるためには、これを統計アンサンブルについて繰り返し、統計処理を行う必要がある。

### 5.3 ハドロンの相関関数の解析

続いて、解析処理の手順をみてゆく。ここからの作業は計算コストが小さいので、フロントエンド上で直接コマンドラインから行う。以下で使用する解析用プログラムはスクリプト言語 Perl によって書かれている。

#### (1) ファイルの用意

ソースファイルを置いてあるディレクトリから `school_latt1_anals.tar.gz` を自分の作業ディレクトリにコピーする。`gzip -d [file 名]` で解凍し、`tar xvf [file 名]` で展開。`latt1_anals/` というディレクトリが出来、この下に必要なものが揃っている。

#### (2) 相関関数のデータ

前節の手順を繰り返せばアンサンブルに対する相関関数のデータが得られるが、ここでは時間の節約のため、あらかじめ計算しておいたデータを使う。`data/` の中に 75 配位分の結果が用意されている。まず、`perl rip_correlns.pl` を実行する。これは準備処理として、ハドロンの量子数ごとにファイルに出力する。結果は `correlns` というディレクトリに格納される。

#### (3) 相関関数と有効質量のプロット

`perl effective_mass.pl` を実行する。相関関数と有効質量が計算される。結果はディレクトリ `effval/` に格納される。ここでは、メソンの有効質量について Eq. (46) ではなく、

$$\frac{C(t+1)}{C(t)} = \frac{\cosh(-m[t+1-T/2])}{\cosh(-m[t-T/2])} \quad (52)$$

によって定義し、各  $t$  毎に bisection 法によって数値的に解く。核子については Eq. (44) の表式を用いる。結果のデータをプロットすると、図 3 のようになる。相関関数以後のデータ

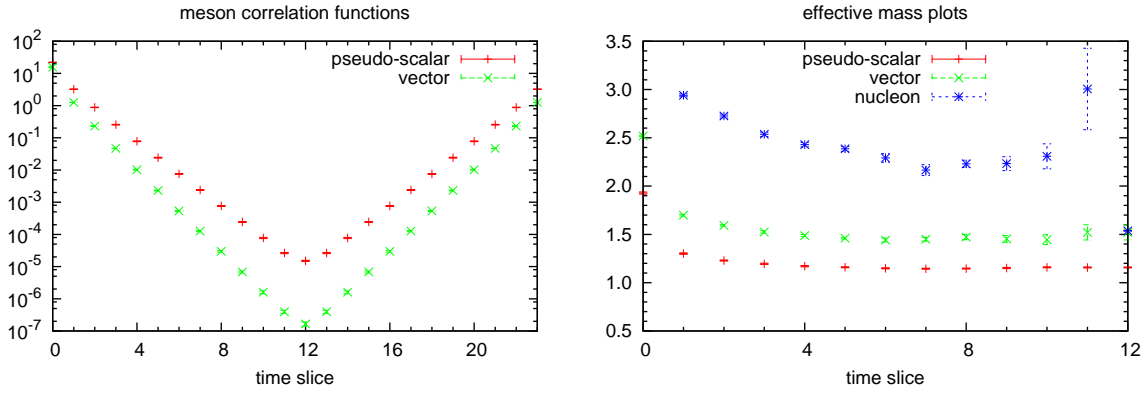


Figure 3: CP-PACS コラボレーションの配位データによる相関関数の測定。左図：相関関数のプロット (PS and V mesons)。右図：有効質量プロット。

については、それぞれの数値に誤差がつけられている。ここでは、ジャックナイフ法という方法によって誤差を評価している。

#### (4) 最小二乗法によるフィット

`perl hadron_mass_fit.pl` を実行する。このスクリプトは、最小二乗法によるフィットによって、Eq. (27) における  $M_0$  と  $Z_0$  を求めている。結果はディレクトリ `mass_fit/` に格納される。解析用コード `hadron_mass_fit.pl` の中で、「initial values for the fit」という行以下に、フィットのためのパラメータがある。最初の二つの数値がフィットを行う  $t$  の範囲、次の二つの量は  $M_0$  と  $Z_0$  の初期値である。フィット範囲を変えてみると結果の数値が変化することがわかる。どの範囲でフィットを行うべきかは、有効質量のプロットを見て判断する。有効質量が平らになっていない領域は、励起状態の寄与が無視できことを示している。一方で、 $t$  と共に統計的ゆらぎは増大する。

上記のゲージ場配位について、論文に記載されている  $\pi$ ,  $\rho$ ,  $N$  の質量は、格子定数を単位として、

$$aM_\pi = 1.1560(6), \quad aM_\rho = 1.4330(13), \quad aM_N = 2.2596(49) \quad (53)$$

である。矛盾しない値が得られたらどうか。

格子定数  $a = 0.215(2)\text{fm}$  はエネルギーの単位で表せば  $a^{-1} = 0.918(9)\text{GeV}$  に対応するので、この値を計算した数値にかければ次元を持った量にできる。実験値に比べてかなり大きいのは、クォーク質量として自然界よりもかなり重い値を用いているためである。自然界の  $u$ ,  $d$  クォークの質量は QCD のダイナミクスのスケールに比べて非常に軽いため、直接その値でのシミュレーションは簡単ではない。このため、現実の  $u$ ,  $d$  クォーク質量よりも重いいくつかの値で物理量を計算しておき、それを外挿することが多い。また今回使用した配位は 2 フレイバーの動的クォークを含むが、実際にはやや重い  $s$  クォークを含めて、2+1 フレイバーの動的クォークが系のダイナミクスに寄与する。更に  $a \rightarrow 0$  の連続極限を取る必要もある。このようにして入ってくる系統的誤差をいかにコントロールするかが、実際のシミュレーションでは重要となる。

## A 統計処理

シミュレーションでは物理量の期待値を有限個の配位のアンサンブルで評価することになるので、統計処理が必要となる。<sup>5</sup> 独立な測定データ  $A_k$  ( $k = 1, \dots, M$ ) に対する平均値とその誤差は、次の式で与えられる。

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_k^M A_k \quad (54)$$

$$\delta \langle A \rangle = \sqrt{\frac{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}{M-1}} = \sqrt{\frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{M-1}} \quad (55)$$

いくつかの物理量  $A^{(a)}$  の関数として表される量  $f(\{A^{(a)}\})$  の誤差を見積もるためには、誤差の伝播則を用いる。しかし複雑な関数の場合やフィットなどの操作をした後の誤差をこの方法で評価するのは簡単ではない。そのような場合には、次のジャックナイフ法を用いるのが便利である。

**ジャックナイフ法** 初めに、最も簡単なビン・サイズ 1 のジャックナイフ法を説明する。まず、 $k$  番目のデータを除いた統計平均を定義する。

$$\langle A \rangle_k \equiv \frac{1}{M-1} \sum_{l \neq k} A_l \quad (56)$$

$A$  の関数である物理量を  $f(A)$  とすると、 $f$  の平均値とその誤差は、次のように計算される。

$$\langle f(A) \rangle = \frac{1}{M} \sum_k^M f(\langle A \rangle_k) \quad (57)$$

$$\delta \langle f(A) \rangle = \sqrt{(M-1) \{ \langle f(A)^2 \rangle - \langle f(A) \rangle^2 \}} \quad (58)$$

これらの定義を、 $A$  に適用すれば、Eqs. (54), (55) になることが容易に確認できる。

同様に、ビン・サイズ  $m$  のジャックナイフ法は次のような手順となる。まず全データを、 $M_m = M/m$  個のビンに分割する。それぞれのビンには、 $m$  個のデータがあることになる。各ビンにラベル  $b$  ( $b = 1, \dots, M_m$ ) を割り当て、このビンの要素の集合を  $B_b$  で表す。ビン  $b$  のデータを取り除いた平均値を、

$$\langle A \rangle_b \equiv \frac{1}{M-m} \sum_{l \notin B_b} A_l \quad (59)$$

これを用いて、 $f(A)$  の平均値と誤差は、次のようになる。

$$\langle f(A) \rangle = \frac{1}{M_m} \sum_{b=1}^{M_m} f(\langle A \rangle_b) \quad (60)$$

$$\delta \langle f(A) \rangle = \sqrt{(M_m-1) \{ \langle f(A)^2 \rangle - \langle f(A) \rangle^2 \}} \quad (61)$$

<sup>5</sup>この節の記述は、文献 [2] に従っている。

## Acknowledgment

この資料は 2011 年 8 月に開催したサマースクール「クォークから超新星爆発まで - 基礎物理の理想への挑戦 - 」にて、格子 QCD 入門用に作成したものを改訂している。2011 年版資料は佐々木勝一氏による講義ノートをベースにして松古栄夫が作成し、実習環境の準備を佐々木、松古、野秋淳一が行った。2012 年の準備は、松古、野秋、元木伸治、上田悟が行った。

## References

- [1] 岩崎洋一, 物理学最前線 11 「格子ゲージ理論」(共立出版, 1985).
- [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 3), (シュプリンガーフェアラーク東京, 2005).
- [3] M. Creutz, Quarks, gluons and lattices (Cambridge monographs on mathematical physics), (Cambridge, 1983).
- [4] I. Montvay and G. Münster, Quantum Fields on a Lattice (Cambridge, 1994).
- [5] H. J. Rothe, Lattice Gauge Theories 3rd ed. (World Scientific, 2005).
- [6] J. Smit, Introduction to Quantum Fields on a Lattice (Cambridge lecture notes in physics), (Cambridge, 2002).
- [7] T. DeGrand and C. DeTar, Lattice Methods for Quantum Chromodynamics (World Scientific, 2006).
- [8] C. Gattringer and C. B. Lang, Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation (Lecture Notes in Physics), (Springer, 2009).
- [9] T. Muta, Foundations of Quantum Chromodynamics: An Introduction to Perturbative Methods in Gauge Theories, 3rd ed. (World Scientific, 2009).
- [10] M. Shifman ed., At the Frontier of Particle Physics: Handbook of QCD, vol. 1-4 (World Scientific, 2001,2002).
- [11] International Lattice Data Grid, <http://cssm.sasr.edu.au/ildg/>.
- [12] Japan Lattice Data Grid, <http://www.jldg.org/>.
- [13] Y. Saad, Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd ed. (SIAM, 2003), 著者のサイト (<http://www-users.cs.umn.edu/saad/>) に PDF 有り.
- [14] 杉原正顯, 室田一雄, 線形計算の数理 (岩波数学叢書), (岩波書店, 2009).
- [15] A. Ali Khan *et al.* [CP-PACS Collaboration], “Light hadron spectroscopy with two flavors of dynamical quarks on the lattice,” Phys. Rev. D **65**, 054505 (2002) [Erratum-ibid. D **67**, 059901 (2003)] [arXiv:hep-lat/0105015].
- [16] Bridge++ project, <http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>