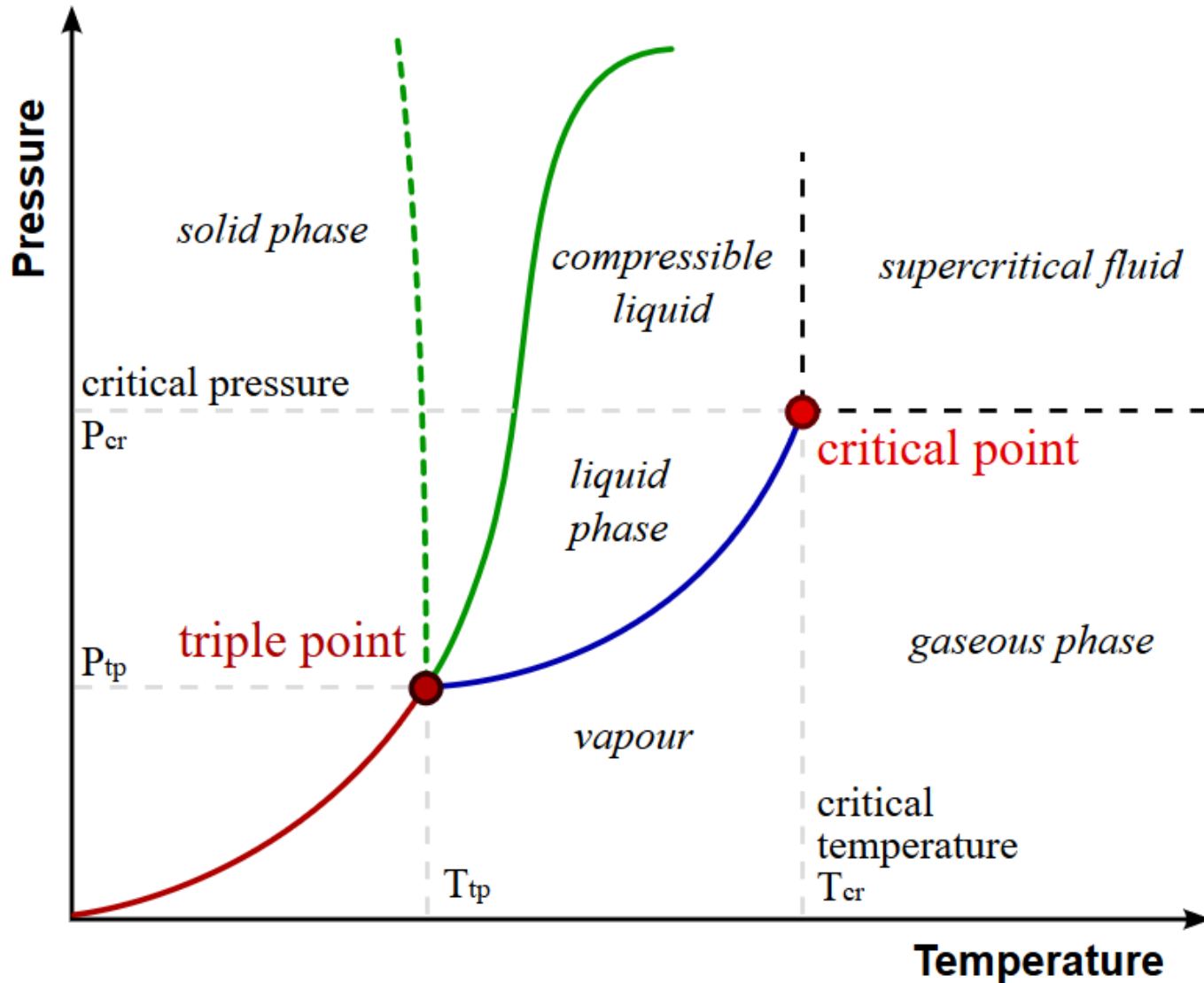


# 格子QCD入門

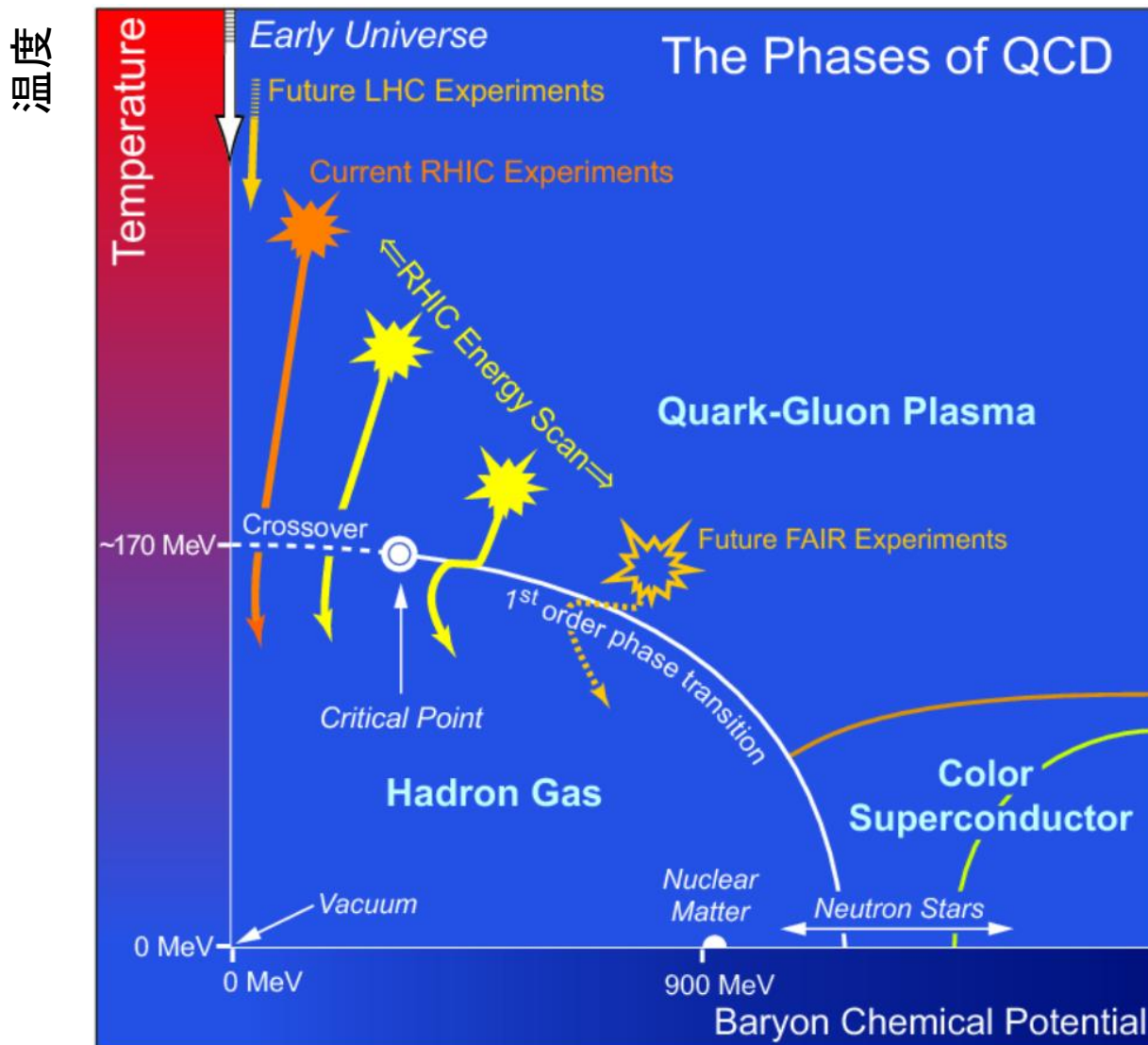
筒井翔一郎  
(理研仁科センター)

# 水の「相図」



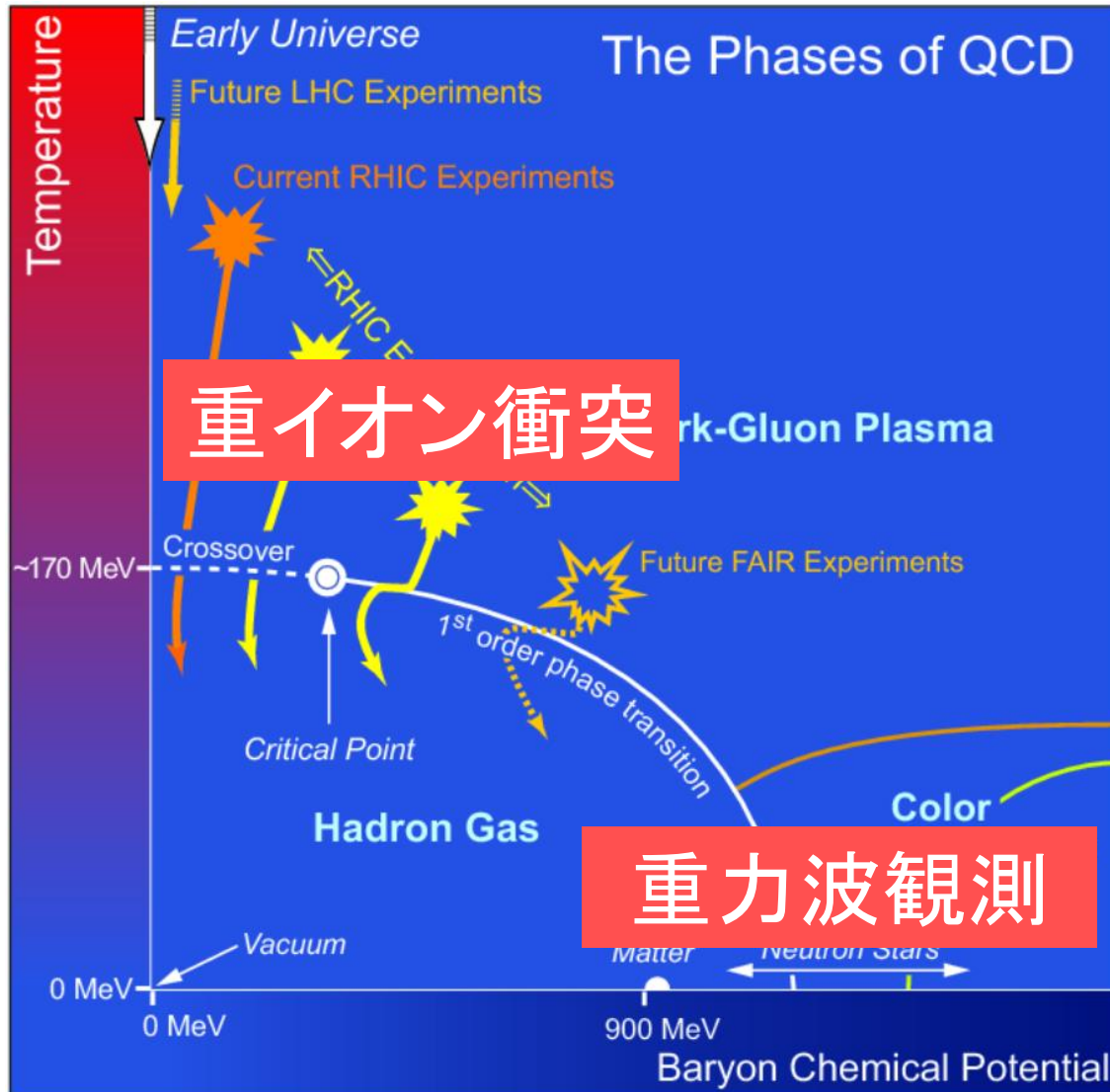
# クォークの「相図」

Kumar [1311.3426]

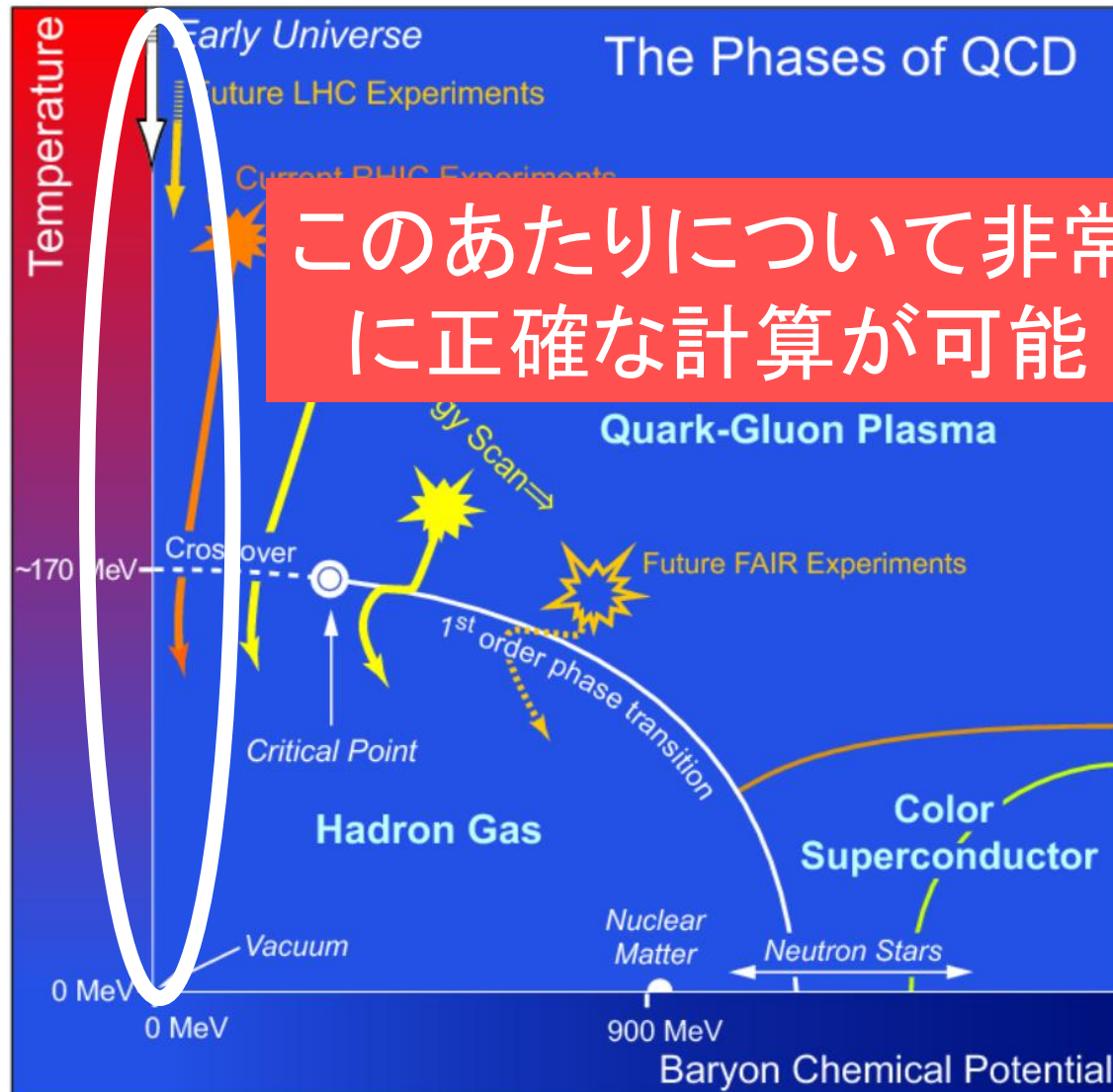


化学ポテンシャル

# クォーク相図の今



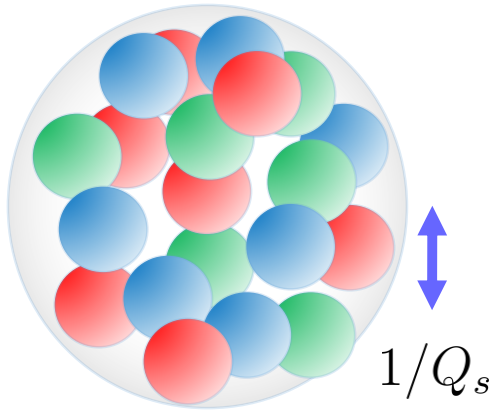
# 格子QCDの守備範囲



# 典型的なスケール

高エネルギー重イオン衝突では:

パートン分布関数(pdf)

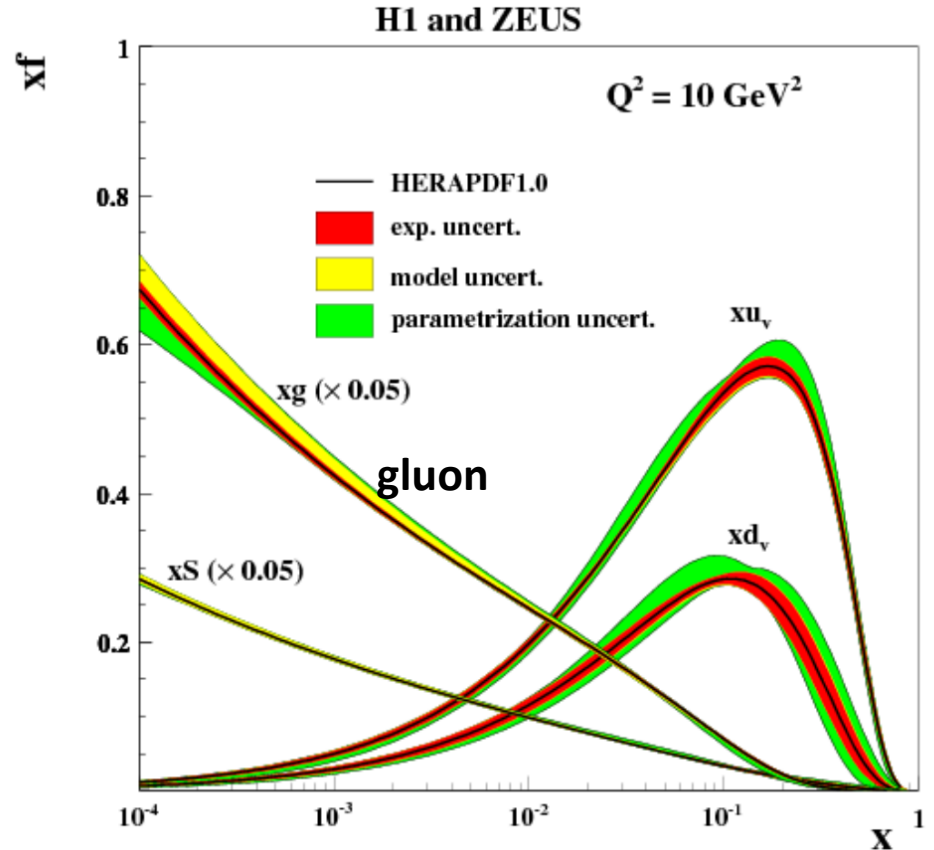


パートンの典型的なサイズ

$$Q_s = 1 \sim 2 \text{ GeV}$$

$$\alpha_s = \frac{g^2}{4\pi} = 0.3$$

$$g \sim 2$$



XXXI Physics in Collision (2011)  
H1 Collaboration, ZEUS Collaboration

# 第一原理計算

# 非摂動論的とは？

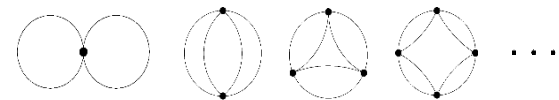
摂動論: 理論に含まれる小さいパラメータのべきで展開する。

$$\langle O \rangle = f_0 + f_1 \alpha_s + f_2 \alpha_s^2 + \dots$$

\* 摂動級数は漸近級数なので、摂動展開の無限次=厳密ではない

非摂動 = beyond 摂動論の総称

- Resummation (ある特定のクラスのダイアグラムを無限個足し上げること)
- WKB法、リサージェンス理論
- Bethe仮設法
- (第一原理)数値シミュレーション
  - 厳密対角化
  - DMRG(密度関数くりこみ群)
  - モンテカルロ法
  - 量子コンピュータ用のアルゴリズムもある





# 第一原理計算

(ここでは)

第一原理計算 = 以下の形の積分を数値的に実行すること

$$\langle O \rangle \equiv \frac{1}{Z} \int dx O(x) e^{-S(x)}$$

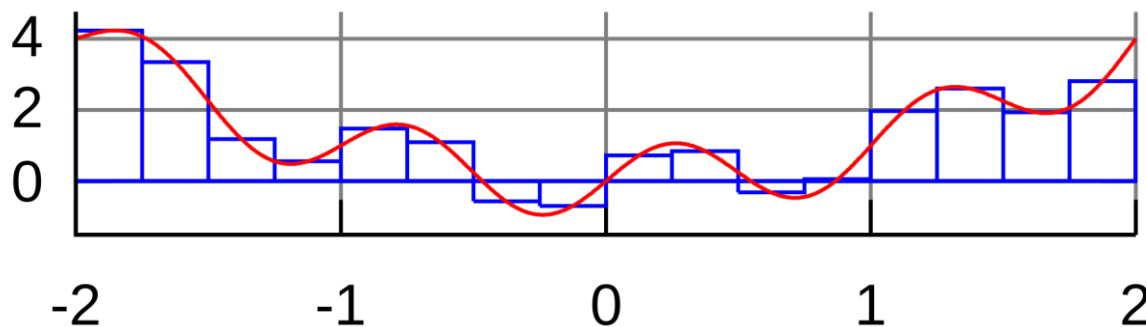
$$Z = \int dx e^{-S(x)}$$

# 第一原理計算

第一原理計算 = 以下の形の積分を数値的に実行すること

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{D}q e^{-S_{\text{QCD}}[U]}$$

しかし、QCDなどの場の量子論では、  
積分変数の数(=格子点数 × 内部自由度)が膨大



← こうやる訳にはいかない

Wikipedia  
(Numerical integration)

# モンテカルロ法

非常に汎用性の高い数値計算手法:

$$\langle O \rangle \equiv \frac{1}{Z} \int dx O(x) e^{-S(x)}$$

$$= \int dx O(x) P(x)$$

$$\sim \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(x_i)$$

**正定値**かつ規格化可能  
→確率密度関数とみなせる

$P(x)$  に従う確率変数

# 再重み付け (Reweighting)

モンテカルロ法は、**形式上はどんな作用にも適用可能**

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O} \rangle &= \frac{\int dx \mathcal{O}(x) e^{-S_R(x) - iS_I(x)}}{\int dx e^{-S_R(x) - iS_I(x)}} \\ &= \frac{\int dx \mathcal{O}(x) e^{-iS_I(x)} e^{-S_R(x)} / \int dx e^{-S_R(x)}}{\int dx e^{-iS_I(x)} e^{-S_R(x)} / \int dx e^{-S_R(x)}} \\ &= \frac{\langle \mathcal{O} e^{-iS_I} \rangle_{Z_R}}{\langle e^{-iS_I} \rangle_{Z_R}}\end{aligned}$$

# 符号問題 (sign problem)

作用の虚部が大きい場合、分母・分子の期待値は0に近づく

$$\langle \mathcal{O} \rangle_Z = \frac{\langle \mathcal{O} e^{-iS_I} \rangle_{Z_R}}{\langle e^{-iS_I} \rangle_{Z_R}} \rightarrow \frac{0}{0}$$

符号問題 = S/N比(signal to noise ratio)が指数関数的に悪化

場の理論では、この問題は深刻

$$e^{-i \int d^d x \text{Im} \mathcal{L}} \sim e^{iV}$$

# 符号問題

符号問題は、問題を形式的に書き換えただけでは、  
解決しないことがほとんど  
(いわゆる、困難保存の法則)

モンテカルロ法もreweightingも、式としてはどこも  
間違っていないので、何が問題なのか分かりにくい

こうすれば符号問題は解決できるのでは！  
→ やっぱり駄目でした...  
というパターンに陥りやすい

# 符号問題が起きる系

符号問題そのものは、純粹に数值計算上の問題だが、物理的に面白い系においてしばしば発生する

- ◆ **有限密度QCD( $N_c=3$ )** ..... QCD臨界点、中性子星
- ◆ QCD +  $\theta$ 項 ..... CP対称性の破れ
- ◆ 回轉系におけるQCD ..... 重イオン衝突
- ◆ type IIB matrix model ..... 超弦理論の非摂動的定式化
- ◆ Lipkin模型 ..... 原子核の集団運動
- ◆ BCS理論 w/ imbalance ..... FFLO状態、Sarma相
- ◆ Hubbard模型 ..... 銅酸化物超伝導体

格子QCDの未来を考える上では不可避

# 符号問題を体感する

どのような時に符号問題が発生するのかを、肌で感じて経験値を増やすのが大切

$$\frac{\langle x^2 \rangle}{1-p^2} = \frac{1}{1-p^2} \frac{\int dx x^2 e^{-x^2/2+ipx}}{\int dx e^{-x^2/2+ipx}} = 1$$

$p \gg 1$  のとき、モンテカルロ法がworkするかどうか調べる



# 符号問題を体感する

$$\frac{\int dx x^2 e^{-x^2/2+ipx}}{\int dx e^{-x^2/2+ipx}} = \frac{\int dx x^2 e^{ipx} e^{-x^2/2} / \int dx e^{-x^2/2}}{\int dx e^{ipx} e^{-x^2/2} / \int dx e^{-x^2/2}}$$
$$\simeq \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 e^{ipx_i}}{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e^{ipx_i}}$$

$x_i$  は標準正規分布に従う確率変数、  
N はサンプル数

# Mathematica code

```
rnorms1 = RandomVariate[NormalDistribution[0, 1], 100000];
```

擬似乱数変量      正規分布

```
rnorms2 = RandomVariate[NormalDistribution[0, 1], 100000];
```

擬似乱数変量      正規分布

```
Deno[x_, p_] := Exp[i p x]
```

指数関数

```
Nume[x_, p_] := x2 Exp[i p x]
```

指数関数

```
Obs[p_] := Abs[Mean[Nume[rnorms1, p]] / Mean[Deno[rnorms2, p]] / (1 - p2)]
```

…      平均      平均

```
ListLogPlot[{Obs[0], Obs[2], Obs[4], Obs[6], Obs[8], Obs[10]}, PlotStyle → PointSize[Large]]
```

リストの対数プロット

プロットスタイル      ポイントサイズ      大きい

最近、Wolfram言語が公開された: <https://www.wolfram.com/engine/>

# Python code

```
1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3
4 deno = lambda x, p: np.exp(1.0j*p*x)
5 nume = lambda x, p: x**2 * np.exp(1.0j*p*x)
6 obs = lambda x, p: np.abs(nume(x, p) / deno(x, p) / (1 - p**2))
7
8 Nsample = 10000
9 list_p = np.arange(0, 100, 2)
10 list_obs = [np.mean([obs(np.random.normal(0.0, 1.0, 1), p) for i in np.arange(Nsample)]) for p in list_p]
11 plt.plot(list_p, list_obs)
12 plt.yscale('log')
13 plt.show()
```

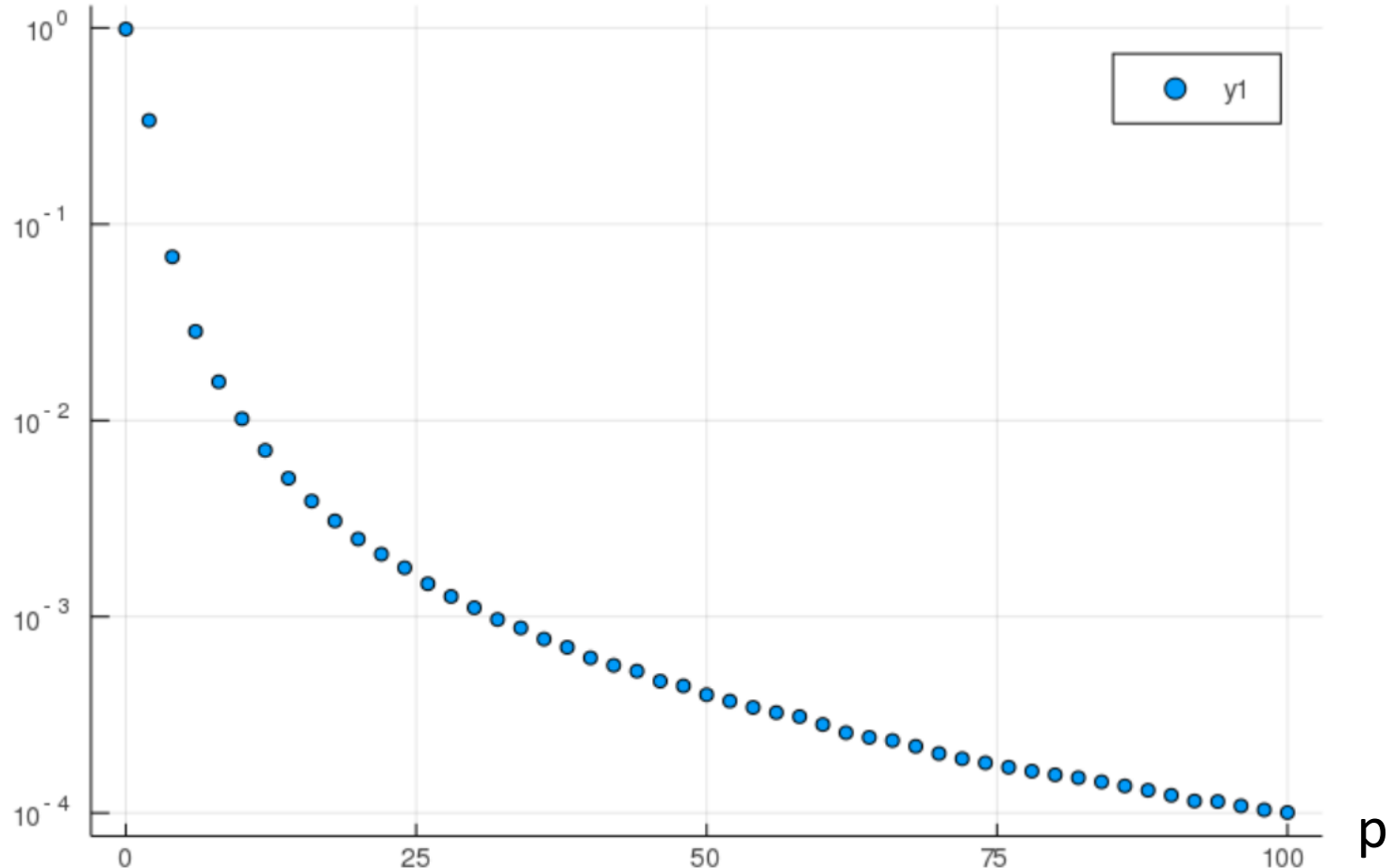
<https://www.python.org/>

# Julia code

```
1 using Plots, Statistics, Random, Distributions
2
3 deno(x, p) = exp(im*p*x)
4 nume(x, p) = x^2 * exp(im*p*x)
5 Obs(x, p) = abs(nume(x, p) / deno(x, p) / (1-p^2))
6
7 Nsample = 10000
8 list_p = 0:2:100
9 list_obs = [mean(Obs.(rand(Normal()), Nsample), p) for p in list_p]
10
11 plot(list_p, list_obs, yaxis=:log, seriestype=:scatter)
12
```

Pythonのように書けて、fortran並の速度がでる言語: <https://julialang.org/>

# 期待値の計算結果



被積分関数の振動が激しい(pが大きい)ほど  
S/N比が悪化している

# 格子QCD

# QCDラグランジアン(連続理論)

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F^{a\mu\nu}F_{\mu\nu}^a + \bar{q}(i\gamma^\mu D_\mu - m_q)q$$

グルーオンの運動項

クォークの運動項

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a - gf^{abc}A_\mu^b A_\nu^c$$

Field strength

$$D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu^a T^a$$

共変微分

$$[T^a, T^b] = if^{abc}T^c$$

SU(3)の生成子

# QCDラグランジアン(連続理論)

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F^{a\mu\nu}F_{\mu\nu}^a + \bar{q}(i\gamma^\mu D_\mu - m_q)q$$

グルーオンの運動項

クォークの運動項

ラグランジアンがもつ対称性:

- ゲージ対称性
- カイラル対称性
- 時空並進対称性

ゲージ変換

$$q(x) \rightarrow q'(x) = V(x)q(x)$$

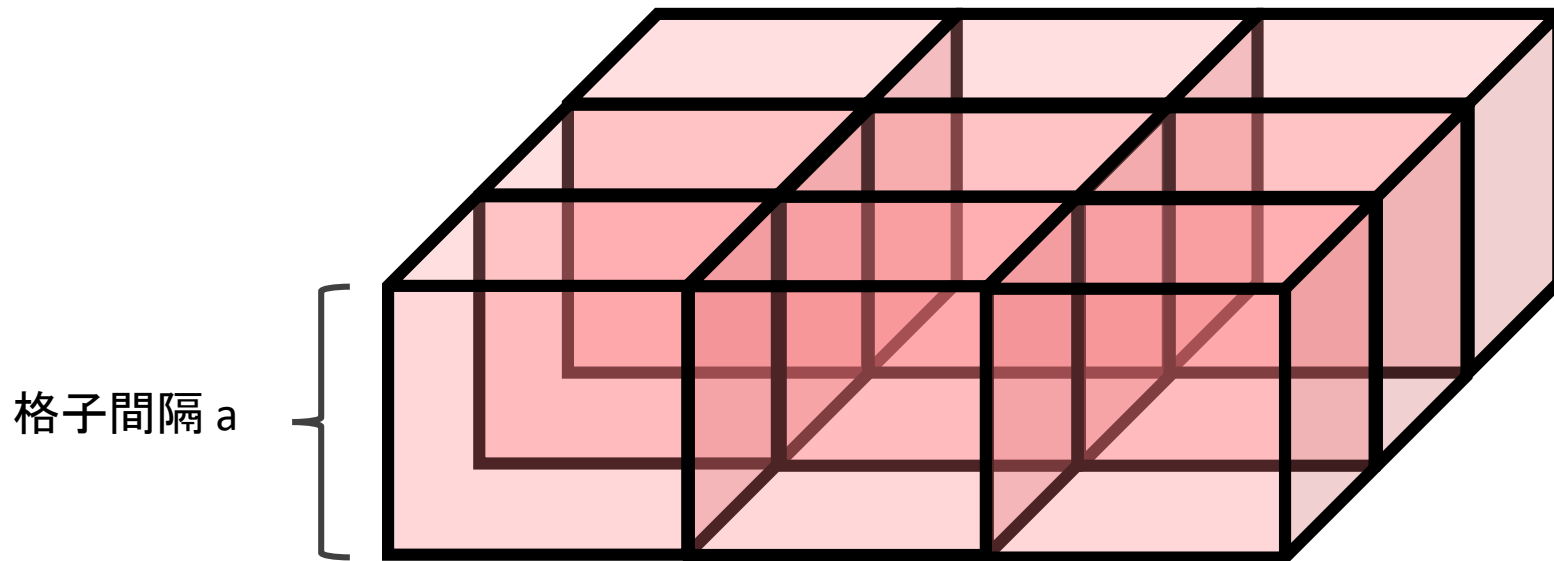
$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = V(x)\left(A_\mu(x) - \frac{1}{ig}\partial_\mu\right)V(x)^{-1}$$

$$V(s) \in \text{SU}(3)$$



# 格子理論の構成

時空を格子状に離散化して、  
クォーク、グルーオン場をその上で定義する



格子理論に対する要請:

$a \rightarrow 0$  で、連続理論に一致する  
対称性を尊重する

# 格子上のゲージ変換

格子間隔を  $a \rightarrow 0$  にする極限で、連続理論のゲージ変換を再現するようなものを考える

$V(s) \in \text{SU}(3)$  に対して

$$q(s) \rightarrow q'(s) = V(s)q(s)$$

$$U_\mu(s) \rightarrow U'_\mu(s) = V(s)U_\mu(s)V(s + \hat{\mu})^\dagger$$

$\hat{\mu}$  : 単位ベクトル

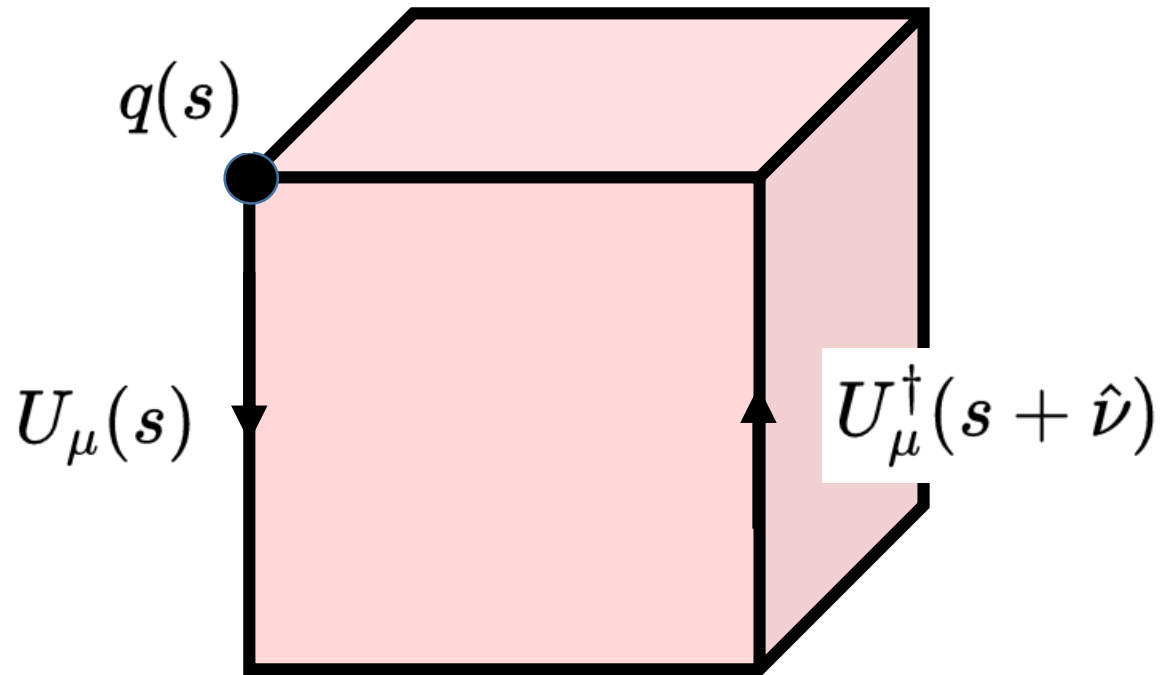
ただし、

$$U_\mu(s) = e^{iagA_\mu(s)}$$

これをリンク変数と呼ぶ

**リンク変数**の方が、ゲージ場より変換性が綺麗で扱いやすいので、むしろこれを基本変数にした方がよい。

# リンク変数のイメージ

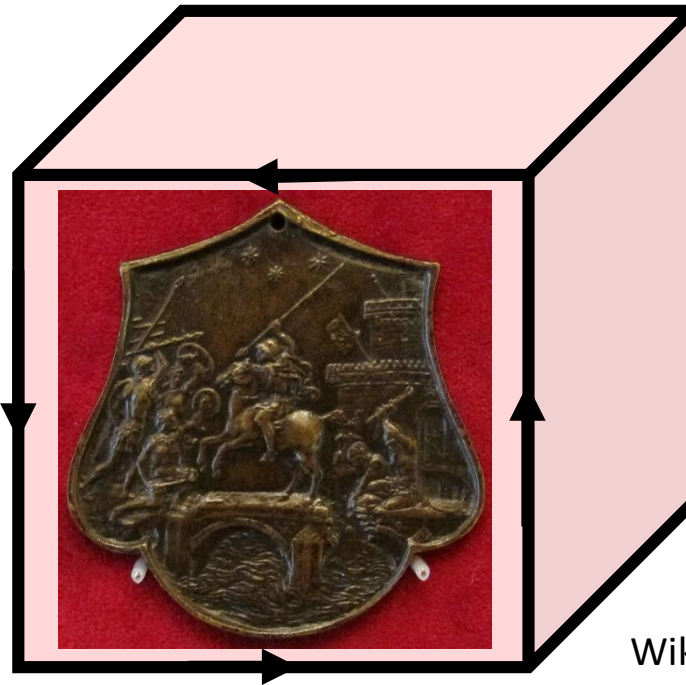


クォークは、頂点で定義される。  
一方、リンク変数向きの情報も持つので、辺に定義される。

# プラケット(plaquette)

プラケット = リンク変数を4個つなげたもの(ゲージ共変!)

プラケットは面に定義される



Wikipedia (Plaquette)

$$U_{\mu\nu}(s) = U_{\mu}(s)U_{\nu}(s + \hat{\mu})U_{\mu}(s + \hat{\nu})^{\dagger}U_{\nu}(s)^{\dagger}$$

# ブラケットとfield strength

ブラケットは field strength tensor の対応物

$$U_{\mu\nu}(s) = \exp [ia^2 g F_{\mu\nu}(s) + \mathcal{O}(a^4)]$$

Proof)  $A_\nu(s + \hat{\mu}) = A_\nu(s) + a\partial_\mu A_\nu(s) + \mathcal{O}(a^2)$  と展開して、  
 $e^A e^B = e^{A+B + \frac{1}{2}[A,B] + \dots}$  を使って頑張って展開する

つまり,

$$U_{\mu\nu}(s) + U_{\mu\nu}(s)^\dagger = 2 - a^4 F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \mathcal{O}(a^6)$$

# ゲージ場の運動項

$$S_g = \beta \sum_s \sum_{\mu > \nu} \left[ 1 - \frac{1}{2N_c} \text{Tr} (U_{\mu\nu}(s) + U_{\mu\nu}(s)^\dagger) \right]$$

$$\beta = \frac{2N_c}{g^2}$$

プラケット作用と呼ばれる

# 格子フェルミオン

$$S = \int d^4x \bar{q}(x) (\gamma_\mu \partial_\mu + m_q) q(x)$$

↓

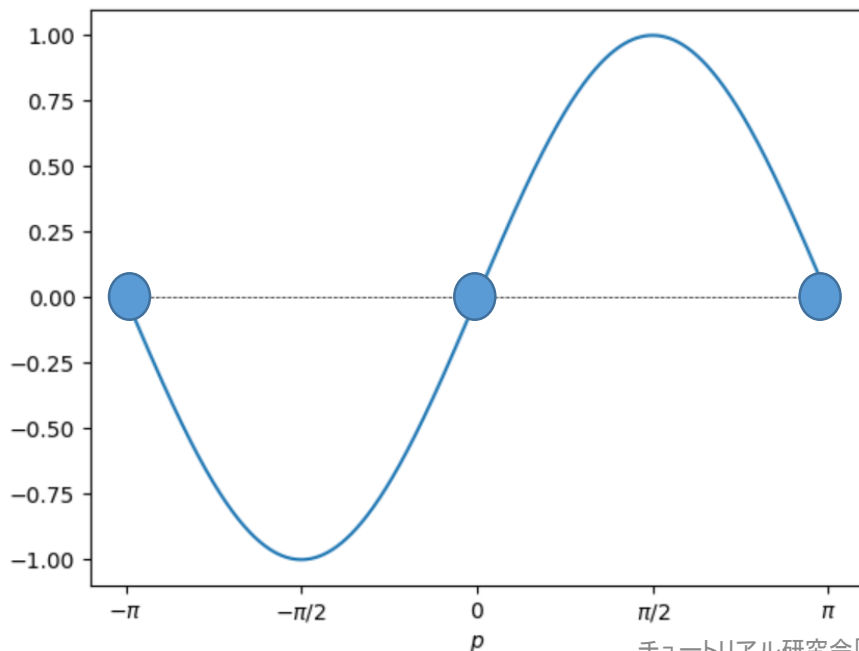
$$S_F = a^4 \sum_{\mathbf{n}} \bar{q}(s) \left( \gamma_\mu \frac{q(s + a\hat{\mu}) - q(s)}{a} + m_q q(s) \right)$$

ひとまず、単純に微分を差分に置き換える

# 格子フェルミオン

ところが、プロパゲーターを計算してみると

$$\langle \bar{q}_\alpha(s_1) q_\beta(s_2) \rangle = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{(-i\gamma_1 \sin(p_\mu a)/a + m_q)_{\alpha\beta}}{\sum_\mu \sin^2(p_\mu a)/a^2 + m_q^2} e^{ip(s_1-s_2)a}$$



$p = 0$  以外にも、 $p = \pm\pi/a$  にpole  
が現れる。(doublerと言う)

4次元では、1つの物理的な粒子  
に対して、16個のpoleが出る。



# Wilsonフェルミオン

$$\langle \bar{q}_\alpha(s_1) q_\beta(s_2) \rangle = \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{(-i\gamma_1 \sin(p_\mu a)/a + \cancel{m_q})_{\alpha\beta}}{\sum_\mu \sin^2(p_\mu a)/a^2 + \cancel{m_q^2}} e^{ip(s_1-s_2)a} \rightarrow M(p)$$

$$M(p) \equiv m_q + \frac{2r}{a} \sum_\mu \sin^2(p_\mu a/2)$$

Doublerを重くする項  
(Wilson 項)

# Wilsonフェルミオン

$$S_F^{(W)} = S_F - \frac{r}{2} a^4 \sum_s \bar{q}(s) \hat{\partial}^2 q(s)$$

Wilson項は連続極限では効かない

# 格子上のQCD作用

$$S_{\text{QCD}} = S_g + S_F^{(W)}$$

ここでは、プラケット作用＋Wilsonフェルミオンとしたが、格子化のやり方は一意ではなく、様々なバリエーションがある。

# 格子上QCDの数値計算

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{D}q e^{-S_{\text{QCD}}[U]} \\ &= \int \mathcal{D}U \text{Det } K[U] e^{-S_g[U]} \\ &= \int \mathcal{D}U e^{-S_g[U] - \text{Tr Ln } K[U]} \end{aligned}$$

フェルミオン部分を積分し、リンク変数についての有効作用にしてから、モンテカルロ法を使う

# 格子QCDで計算できるもの

$$\langle O \rangle \equiv \frac{1}{Z} \int dx O(x) e^{-S(x)}$$

$$\sim \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(x_i)$$

モンテカルロ法では、**分配関数そのものは分からない**ので、  
オブザーバブルの関数形(Uの関数として)を知っている必要がある  
(例) Wilson loop, Polyakov loop, ハドロン質量, 状態方程式, etc

# 熱力学量

例) Trace anomaly (interaction measure, 自由ガスからのずれを特徴づける量)

$$\frac{\epsilon - 3P}{T^4} = T \frac{\partial}{\partial T} \frac{P}{T^4}$$

は、ブラケットの期待値から計算できる。

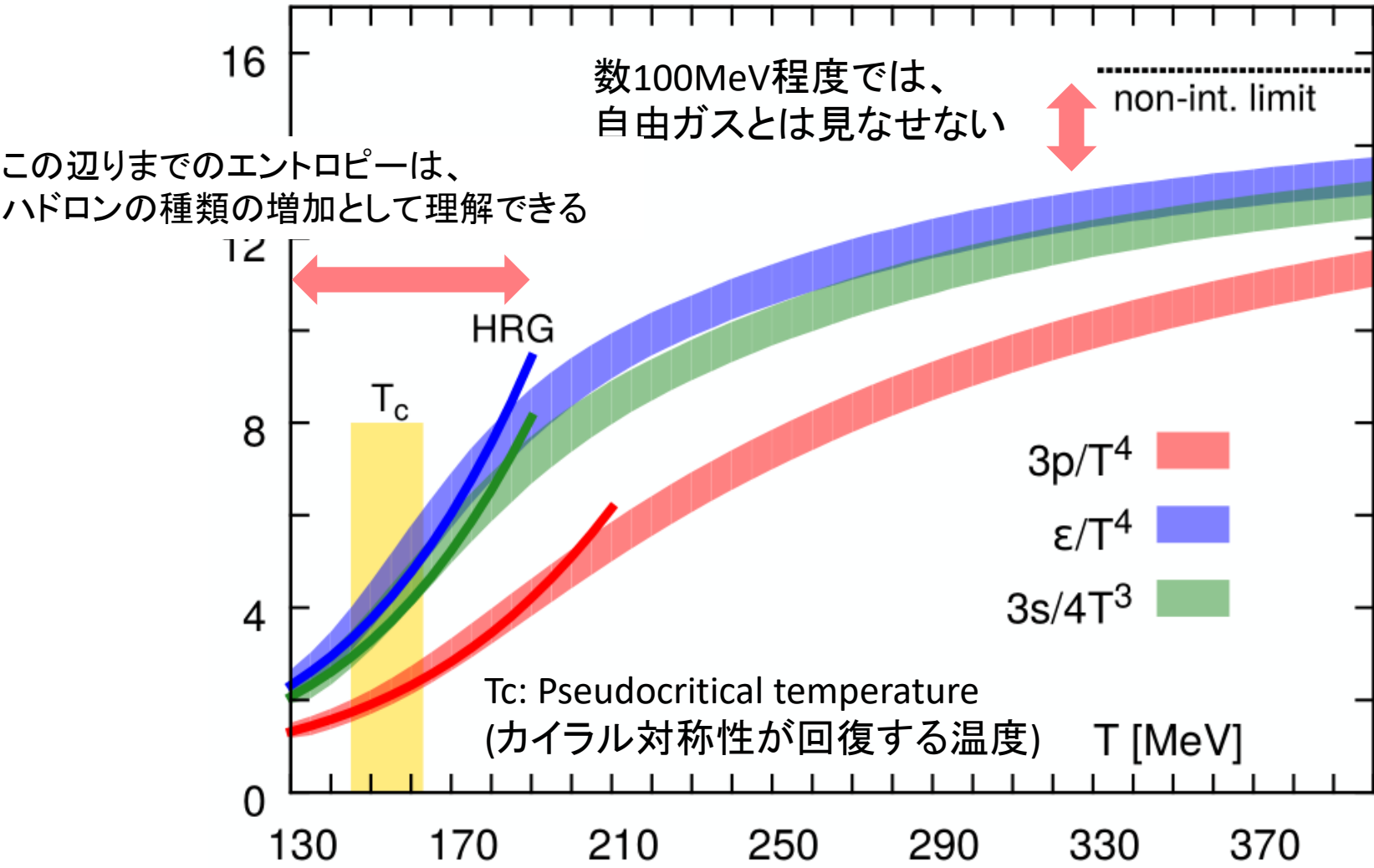
積分

エネルギー密度、圧力:

$$\epsilon = \frac{T^2}{V} \frac{\partial \ln Z}{\partial T}, \quad P = T \frac{\partial \ln Z}{\partial V}$$

# 熱力学量

HotQCD Collaboration, PRD90 (2014) 094503



# QCDの符号問題

フェルミオンのinverse propagator:

$$M = \gamma^\mu D_\mu - m - \mu\gamma^0$$

$\gamma$ 行列に対する性質:

$$M^\dagger(\mu) = \gamma^5 M(-\mu^*)\gamma^5$$

$$\det(M(\mu)^\dagger) = \det M(-\mu)$$

なので、**detM は複素数**になってしまう



# 有限密度QCDへ

Reweightingで行けるところまで行く

Taylor展開法(0密度まわりで展開する)

$$P(T, \mu) - P(T, 0) = \sum_k c_{2k}(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^{2k}$$

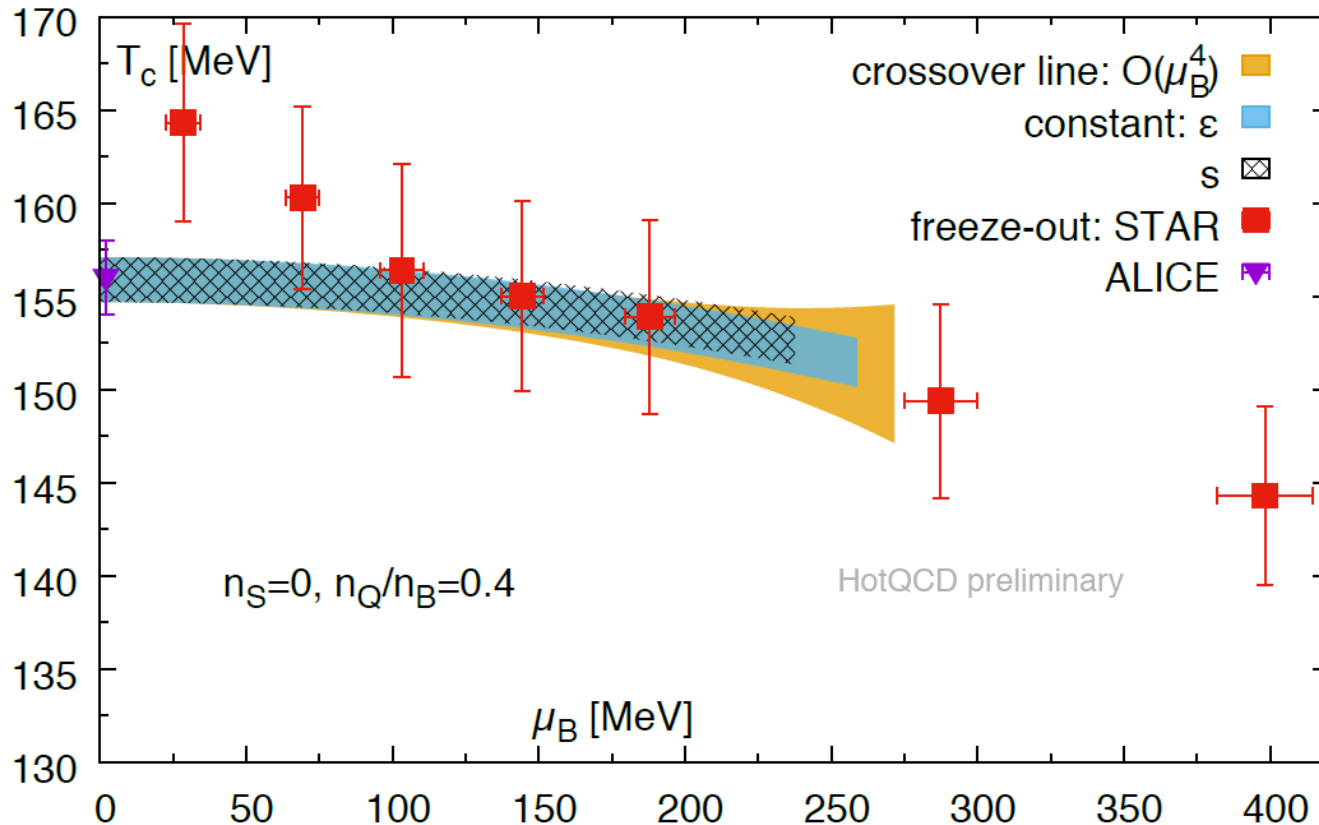
虚数化学ポテンシャル(符号問題がない)から解析接続

カノニカル法(カノニカル分配関数を計算する。)

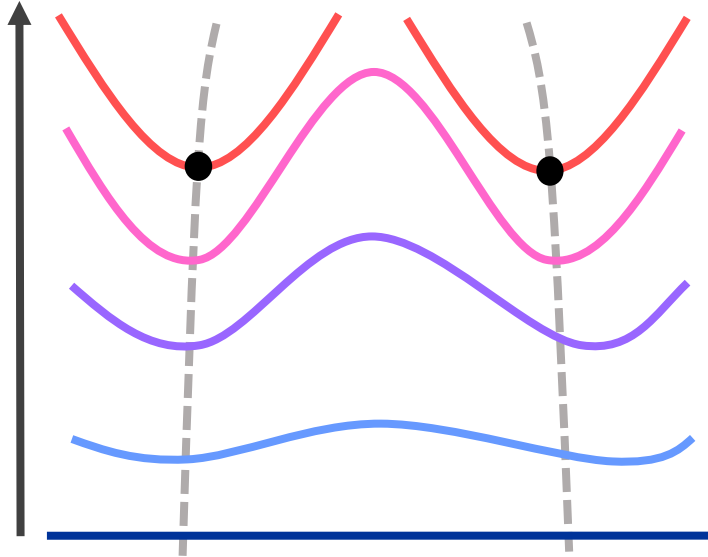
SU(3)-QCD そのものではないが、符号問題のないセットアップでとにかくやってみる (SU(2) QCD, G2 QCD)

# 有限密度におけるクロスオーバー

HotQCD Collaboration, PLB795 (2019) 15-21



# 新しいアプローチ



(1) 積分経路を複素平面上の性質の良い経路(Lefschetz thimble)に変更してから、モンテカルロ積分する

See Lattice 2019

<http://lattice2019.ccnucnu.edu.cn/>

Langevin 方程式

$$\frac{dz}{dt} = -\frac{\partial S(z)}{\partial z} + \eta$$

(2) 確率過程量子化法の拡張  
(いわゆる complex Langevin method)

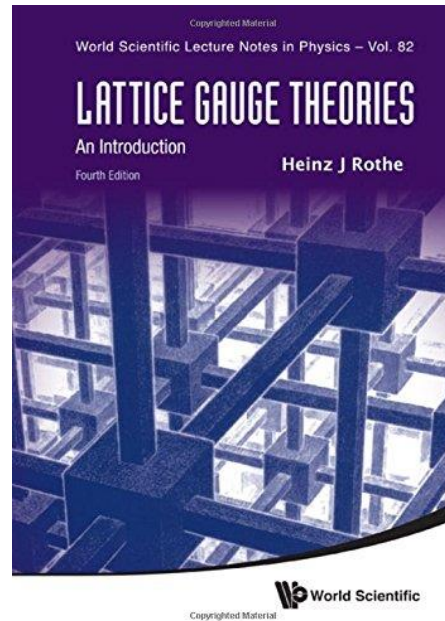
古典系の5次元方向への時間発展  
= 4次元の量子論

# 教科書

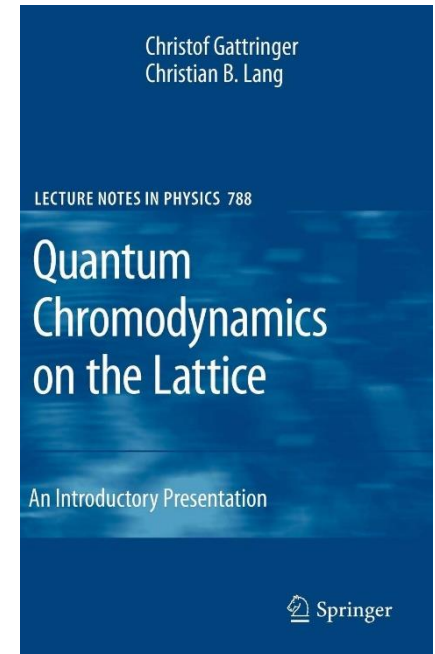
格子上の場の理論  
(青木真也)



Lattice gauge theories  
(Heinz Rothe)



Quantum Chromodynamics  
on the lattice  
(C. Gattringer, C. B. Lang)



# ソースコード

スライド本編で紹介したコード、モンテカルロ法の簡単な解説pdf、Hybrid Monte carlo法のコードを公開しています

<https://github.com/Shoichiro-Tsutsui/HeavyIonTutorial2019>

# Enjoy lattice QCD!

# 確率過程量子化

G. Parisi, Y.-S. Wu (1981)

レビュー: Damgaard, Huffel (1987)

教科書: Namiki (1992)

作用  $S(x)$  が実の場合:

$$Z = \int dx e^{-S(x)} \quad x \in \mathbb{R}, \quad S(x) \in \mathbb{R}$$

力学変数  $x$  が **Langevin方程式** に従うと仮定する

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial S(x)}{\partial x} + \eta \quad \begin{aligned} \langle \eta(t) \rangle &= 0 \\ \langle \eta(t)\eta(t') \rangle &= 2\delta(t-t') \end{aligned} \quad \begin{aligned} \eta &: \text{Gaussian ノイズ} \\ \langle \dots \rangle &: \text{ノイズ平均} \end{aligned}$$

力学変数  $x$  の確率密度関数は Fokker-Planck (FP) 方程式に従う

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \right) P(x, t) \quad \longrightarrow \quad P_{\text{eq}}(x) \propto e^{-S(x)}$$

Boltzmann weight を定常解にもつ

平衡状態では、ノイズ平均と経路積分期待値は等価

$$\langle \mathcal{O}(z(t)) \rangle \rightarrow \frac{1}{Z} \int dx \mathcal{O} e^{-S(x)} \quad (t \rightarrow \infty)$$

# 複素Langevin法

Parisi (1983) , Klauder (1984)  
Klauder, Pertersen (1985)

作用  $S(x)$  が複素数値をとる場合:

$$Z = \int dx e^{-S(x)} \quad x \in \mathbb{R}, \quad S(x) \in \mathbb{C}$$

実軸上で定義されている作用を**解析接続する(複素化)**

$$x \in \mathbb{R} \rightarrow z \in \mathbb{C}$$

“力学変数” $z$ が**Langevin方程式**に従うと仮定する

$$\frac{dz}{dt} = -\frac{\partial S(z)}{\partial z} + \eta \quad \langle \eta(t) \rangle = 0 \quad \eta : (\text{実})\text{Gaussianノイズ}$$
$$\langle \eta(t)\eta(t') \rangle = 2\delta(t-t') \quad \langle \dots \rangle : \text{ノイズ平均}$$

(何の意味があるかはさておき)ここまでは完全にwell-defined



# 複素Langevin法の正当化

複素Langevin方程式に対応するFPeq.

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi(x, y, t) = \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \operatorname{Re} \left( \frac{\partial S}{\partial z_i} \right) + N_R \frac{\partial}{\partial x_i} \right\} + \frac{\partial}{\partial y_i} \left\{ \operatorname{Im} \left( \frac{\partial S}{\partial z_i} \right) + N_I \frac{\partial}{\partial y_i} \right\} \right] \Phi(x, y, t)$$

ある条件の下では、 $\Phi$ で計算した期待値と複素化する前の期待値が一致する

$$\int dx dy O(x + iy) \Phi(x, y) = \int dx O(x) P(x)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \right) P(x, t)$$

このとき、定常状態ではBoltzmann weightを再現する

$$P_{\text{eq}}(x) \propto e^{-S(x)} \quad \langle O(z(t)) \rangle \rightarrow \frac{1}{Z} \int dx O(x) e^{-S(x)}, \quad t \rightarrow \infty$$

# CLMのQCDへの適用

$$Z = \int dU \det M[U, \mu] e^{-S_g[U]}$$

[Parisi '83], [Klauder '84]  
[Aarts, Seiler, Stamatescu '09]  
[Aarts, James, Seiler, Stamatescu '11]  
[Seiler, Sexty, Stamatescu '13]  
[Sexty '14] [Fodor, Katz, Sexty, Torok '15]  
[Sinclair, Kogut '16]  
[Nishimura, Shimasaki '15]  
[Nagata, Nishimura, Shimasaki '15]

力学変数(リンク変数)の複素化:

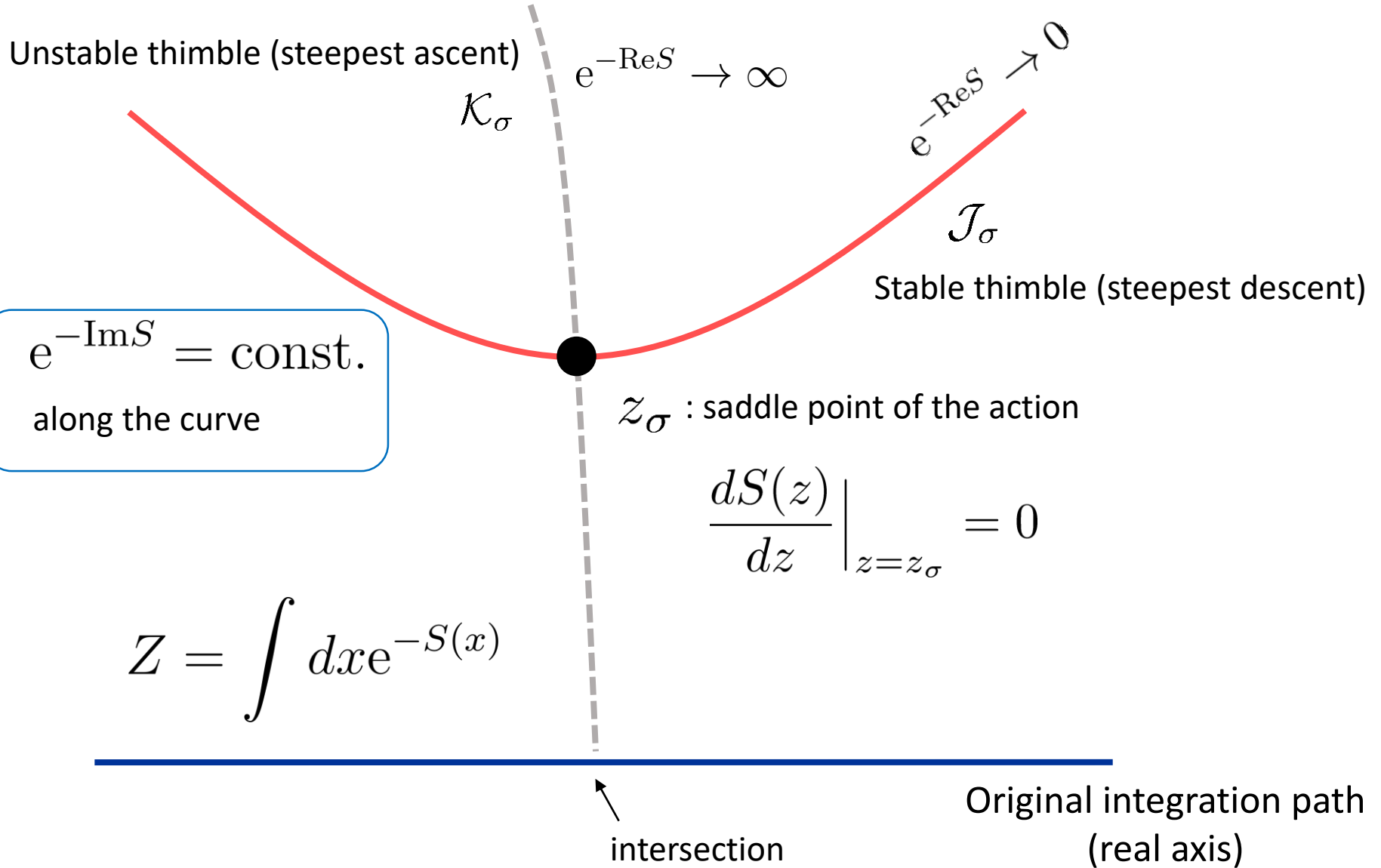
$$U_{x\mu} \in SU(3) \rightarrow \mathcal{U}_{x\mu} \in SL(3, \mathbb{C}) \quad S(U) \rightarrow S(\mathcal{U})$$

## 複素Langevin方程式

$$\mathcal{U}_{x\mu}(t + \epsilon) = \exp \left[ i \left( -\epsilon \mathcal{D}_{x\mu} S[\mathcal{U}] + \sqrt{\epsilon} \eta_{x\mu}(t) \right) \right] \mathcal{U}_{x\mu}(t)$$

**Drift term**

# Lefschetz thimble



# Thimble decomposition

Pham (1983), Witten (2001)

$$Z = \int dx e^{-S(x)} = \sum_{\sigma=1}^{N_{\text{sp}}} n_{\sigma} e^{-i\text{Im}S(z_{\sigma})} \int_{\mathcal{J}_{\sigma}} dz e^{-i\text{Re}S(z)}$$

---

Original partition fnc.

Decomposition to Lefschetz thimbles

$z_{\sigma}$  : saddle point of the action

$$\left. \frac{dS(z)}{dz} \right|_{z=z_{\sigma}} = 0$$

$N_{\text{sp}}$  : Number of saddle points

$\mathcal{K}_{\sigma}$  : Unstable thimble (steepest ascent)

$n_{\sigma}$  : intersection number of the original integration path and unstable thimble

$\mathcal{J}_{\sigma}$  : Stable thimble (steepest descent)

Basically,  $n_{\sigma} = 0, 1$