

格子 QCD 入門

180 分でわかる格子上の場の理論

富谷昭夫*

更新日: 2023 年 3 月 15 日

Abstract

格子 QCD は数学的に厳密に定義され、定量的に計算できる場の量子論の一種である。このノートは、理学部物理学科 3 年生までの標準的なコースで習うような電磁気学、解析力学、統計力学、相対論などを学んだ学生に向けた格子 QCD 入門ノートである。

*大阪国際工科専門職大学 akio@yukawa.kyoto-u.ac.jp

まえがき

この講義ノートは、2023年3月13日 - 15日に行われる[計算物理 春の学校 2023](#) の格子 QCD の個別講義のために書き下ろされたものである。この講義の前には、科学技術用プログラミング言語である Julia 言語の講義があり、この講義に続いて、(機械学習における) 生成モデルの講義、および Flow based sampling algorithm に関する講義が行われる。

格子 QCD は、定量的に計算できる場の量子論の一種で、計算や記述のためのフレームワークがある。場の量子論は、特殊相対論と量子論の要請を矛盾なく満たせ、かつ素粒子実験の定量的なテストに耐えうる理論である。場の量子論の中には、10桁の精度で実験と整合する理論もある。そして格子 QCD は、摂動論に頼らずに強い力の量子論を計算できる理論である。また数学的に厳密に定義され場の理論でもある。

このノートは、理学部物理学科3年生までの標準的なコースで習うような電磁気学、解析力学、統計力学、相対論などを学んだ学生に向けた格子 QCD 入門ノートである。

スプリングスクールには、学部生から大学院生までなど幅広い学生が参加するというこ
とで、前半は、あまり QCD 特有の話はせず、むしろ格子上の場の理論とはなにかに着目して議論した。SU(N_c) ゲージ理論の場合には連続極限がとれることも、くりこみ群の立場から議論し、最後にはシミュレーションの話も簡単に議論した。

このノートは査読や監修を受けているわけではないため、多く誤植や勘違いが含まれている可能性がある。出来得る限りは注意して書いているが、何かおかしい、と思ったら知らせていただくと助かる。

このノートの太字は、索引に対応しているので、あとで気になる単語が出ても調べられると思う。

この講義ノートは、一方で完全な内容を含んでいるわけではない。時間の制限上、大切な部分の大部分を省略している。そのため今後、格子 QCD を学んで行くには、他の教科書を参照してほしい。

2023年3月3日 富谷昭夫
2023年3月15日 最終更新

Contents

まえがき	2
I 格子 QCD の理論	5
1 格子 QCD とは	6
1.1 なぜ場の量子論か	6
1.2 量子力学のフレームワーク	7
1.3 場の理論の計算	8
1.4 素粒子標準模型	10
1.5 格子 QCD が役立つこと	11
1.6 連続な場の理論はうまく定義されていない事	12
2 格子上のスカラー場の理論	15
2.1 「時間連続・空間離散」時空での場の理論	16
2.1.1 虚時間、実時間	18
2.1.2 虚時間の作用 \approx ハミルトニアン	19
2.2 時空離散化	19
3 群論	21
3.1 群の定義	21
3.2 群の具体例	21
3.2.1 \mathbb{Z}_2	21
3.2.2 連続群: $U(1)$	21
3.2.3 連続群: $SU(2)$, リー代数	22
3.2.4 連続群: $SU(3)$	23
4 イジング模型	23
4.1 イジング模型とスピン模型	23
4.2 くりこみ群	24
4.3 \mathbb{Z}_2 ゲージ理論	27
5 $U(1)$ ゲージ場	28
5.1 連続時空の古典論	29
5.2 離散時空の電磁場の量子論	29
5.2.1 格子上の $U(1)$ ゲージ変換	32
5.2.2 連続群上の積分 ($U(1)$)	33
5.3 量子論としての連続極限	34
6 $SU(N_c)$ ゲージ理論	34
6.1 $SU(N_c)$ plaquette action から連続理論を出す	35
6.2 連続時空での Yang-Mills 理論	38
6.3 連続群上の積分 ($SU(3)$)	38
6.4 格子 QCD	39
6.5 量子論的な連続極限	39
6.6 実際シミュレーションでの連続極限のとり方	42
6.7 格子 QCD はトイモデルなのか理論なのか	43

7	第一部まとめ	43
II	格子 QCD の数値計算	44
8	なぜモンテカルロ積分か	45
8.1	高次元積分における次元の呪い	45
8.2	確率の用語	47
8.3	モンテカルロ法	47
9	マルコフ連鎖モンテカルロ法	47
10	HMC	50
10.1	格子上のスカラー場むけの HMC	50
11	自己相関時間と臨界減速	54
12	まとめ	56
12.1	格子 QCD で出来ていること	56
12.2	格子 QCD でどうやって良いか分からない問題	57
13	格子 QCD の実践	59
13.1	LatticeQCD.jl の準備	59
13.2	LatticeQCD.jl での計算	59
14	まとめ	60
III	付録	61
A	格子上のクォーク	62
A.1	ダブリング問題	62
A.2	さまざまな定式化。メリット・デメリット	64
A.3	経路積分とクエンチ近似	65
B	a の求め方	66
C	統計誤差の解析	68
C.1	$N_b = 1$ のジャックナイフ	68
C.2	$N_b = 2$ のジャックナイフ	69
C.3	一般の N_b のジャックナイフ	69

Part I

格子QCDの理論

1 格子 QCD とは

ここでは、格子 QCD について説明する。この講義では、指定がない限り自然単位系 $c = \hbar = 1$ を用いる。

1.1 なぜ場の量子論か

格子 QCD は場の量子論の一種であるので、まず簡単に場の量子論の説明を行う。場の量子論は場の理論とも言われる¹。

よく知られた事実として、高エネルギーの物理現象を計算するには特殊相対性理論が必要で、また原子のようなミクロな世界は量子論によって計算される。場の量子論は量子論の枠組みに従いつつ、特殊相対性理論からの要請を満たすことが出来る理論体系である²。

場の量子論の大きな特徴としては、粒子数が保存しない様な量子力学過程を計算出来ることにある。統計力学のグランドカノニカルアンサンブルが便利だったのと同様である³。このため、素粒子反応の素過程の記述のみならず、核子スケールの反応、さらには物性理論などでも役に立つ⁴。

場の量子論は物理学の 1 つの枠組みであり、手続きとして理解されている。比較のために古典力学・解析力学の計算の手順を振り返っておく。

1. 系で考慮する自由度を同定する。(例えば質点)
2. 対称性や局所性から作用を書き下す。
3. オイラーラグランジュ方程式を用い、微分方程式を書き下す。もしくはハミルトン形式で運動方程式をたてる。
4. 数個の物理量を計算し、実験値を再現する様に理論内のパラメータを決める。以下ではこれは動かさない。
5. 以下を繰り返す。
 - (a) 物理量を計算する。
 - (b) 実験値と比較する。

これが量子力学では少し変更を受け、

1. 系で考慮する自由度を同定する。(例えば質点)
2. 対称性や局所性から作用を書き下す。
3. 量子化手順 (ハミルトン形式なら正準量子化・ラグランジュ形式なら経路積分) を用いて量子化する。
4. 数個の期待値を計算し、実験値を再現する様に理論内のパラメータを決める⁵。以下ではこれは動かさない。

¹古典場の理論は、場の理論といったときには含まれないことも多いが、一方で理論の \hbar 展開の最低次は古典論になっているので含まれるといえは含まれる。

²ちなみにもう 1 つ満たすことが出来る理論体系が知られており、それは弦理論である。

³たとえばプロッホ・ド・ドミニシスの定理の証明はグランドカノニカルアンサンブルが前提である。

⁴物性理論のエネルギースケールでは確かに素粒子の生成消滅はもちろん考慮しなくても良い。しかしながら、ランダウの準粒子描像を取り入れると相互作用効果を含めた有効的な粒子の描像をつくれたり、いろいろな理由で粒子の生成消滅を考えるほうが便利であったりする。

⁵場の量子論だと、ここがしばしば“無限大”となるが、期待値が有限なら全く問題はない。なぜなら我々が測定できるのは期待値だけだからだ。

5. 以下を繰り返す。

- (a) 期待値を計算する。
- (b) 実験値と比較する。

と期待値に置き換わる。

場の量子論も量子論の一種であるため量子力学と同様に計算が進められる。以下では素粒子標準模型という大きな枠組みからはじめ、QCDを導入する。

1.2 量子力学のフレームワーク

格子 QCD も量子論の一種である。量子論の典型例として、具体的に量子力学での量子化について復習しておく。

まずは**正準量子化 (Canonical quantization)** から、具体例として質量が 1 の調和振動子を考えよう。ポテンシャルが $\frac{1}{2}x^2$ なので、ラグランジアンは、

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

であり、共役運動量は、

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \dot{x} \quad (2)$$

とわかる。するとルジャンドル変換から

$$H = p\dot{x} - L = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2 \quad (3)$$

と分かる。そして交換関係、

$$[x, p] = i \quad (4)$$

を課すと量子化は完了する。つまり**正準量子化では x と p は演算子**に格上げされる。演算子として p と x を用いたハミルトニアンを \hat{H} と書くことにすると、系 (の状態) の時間発展は**シュレーディンガー方程式 (Schrödinger equation)**

$$i \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (5)$$

で記述される。この形式解は

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Psi\rangle \quad (6)$$

である。

または**ハイゼンベルク描像 (Heisenberg picture)** では任意の演算子 $O(t)$ が

$$i \frac{d}{dt} O(t) = [O, \hat{H}] \quad (7)$$

というハイゼンベルク方程式 (**Heisenberg equation**) によって時間発展する。時刻の離れた 2 つの演算子 $O(t)$ と $O(0)$ の相関関数は、

$$\langle O(t)O(0) \rangle = \langle \Psi | O(t)O(0) | \Psi \rangle \quad (8)$$

となる。

経路積分量子化は、作用を

$$S = \int dt L = \int dt \left[\frac{1}{2} \dot{x}^2 - \frac{1}{2} x^2 \right] \quad (9)$$

として、経路積分では x と \dot{x} はただの古典的な変数として (無限次元) 積分を行う。(例えば) 時刻の離れた2つの演算子 $O(t)$ と $O(0)$ の相関関数を

$$\langle O(t)O(0) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}x O(t)O(0)e^{iS} \quad (10)$$

と計算するものであり、正準量子化と同じ答えを与える。ただし Z は分配関数と呼ばれる規格化因子である。ここで

$$\mathcal{D}x = \prod_{t \in [t_0, t_1]} dx(t) \quad (11)$$

は積分測度であり、物理的には全ての経路の和の意味である。経路積分は、一種の多重積分ではあるのだが、積分変数のラベルが整数でなく実数で指定されているため、連続無限次元積分となっている。これの近似的な計算法が確立しているのをあとで確認する。重要なのは、どちらの量子化法でも同じ結果を与えるということである。

多自由度でも話は同じで、 x や p を x_i や p_i の様に添字をつけ、 $[x_i, p_j] = i\delta_{ij}$ と量子化すれば良い⁶。相互作用がない場合、ハミルトニアンは

$$H = \sum_i \left[\frac{1}{2} p_i^2 + \frac{1}{2} x_i^2 \right] \quad (12)$$

となる。経路積分定式化も同様にできる。

1.3 場の理論の計算

つぎに準備として、場の理論 (field theory) のフレームワークを抑えておく。

まず任意の時空点を $x = (x, y, z, t)$ と書くことにする⁷。そして場とよばれる時空点の関数があり、たとえばスカラー場 (scalar field) であれば、 $x \in \mathbb{R}^{3,1}$ に対して、

$$x \mapsto \phi(x) \in \mathbb{R}, \quad (13)$$

となる (図 1)。これを古典場という (波動関数とは異なることに注意せよ)。古典場の他の例だと電磁場 $E_i(x)$ や $B_i(x)$ があるが ($i = 1, 2, 3$)、相対論の文脈では4元のベクトルポテンシャル $A_\mu(x)$ である ($\mu = 0, 1, 2, 3$)。ベクトルポテンシャル $A_\mu(x)$ はゲージ場 (gauge field) の一種である。

多自由度の力学と比較するとラベルと力学的な自由度は

$$\begin{aligned} \text{多自由度} &\leftrightarrow \text{場の理論} \\ i &\leftrightarrow x \\ x_i &\leftrightarrow \phi(x) \end{aligned}$$

⁶ただし多体系では基底状態が簡単には求まらなくなる。定式化出来ることと、計算できることは異なるのだ。

⁷左辺の x は4元ベクトル、右辺の x は1つの成分である、念の為。

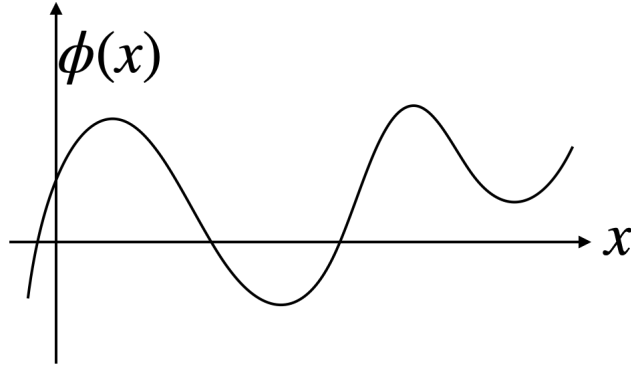


図 1: スカラー場の配位の一例 (ただし 1 次元空間)。

と対応する。つまり番号 i が連続変数のラベル x に昇格されている。「場」に対する力学を考える。特に量子化を行って場の量子論を構成してみよう。

$S[\phi]$ は古典場の作用で対称性から決まり、たとえば相対論的不変性を課す⁸と、

$$S = \int dt d^3x \left(\frac{1}{2} (\partial_0 \phi(x))^2 - \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^3 (\partial_{\mu} \phi(x))^2 - \frac{m^2}{2} \phi^2(x) \right) = \int dt d^3x \mathcal{L} \quad (14)$$

のような形になる。ここから運動量は、

$$\pi(x) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_0 \phi(x))} = \partial_0 \phi(x) \quad (15)$$

と計算でき、ルジャンドル変換を行うとハミルトニアンがえられる。そして同時刻交換関係⁹を課せば量子論に移行できる。この手法も量子力学と同じく正準量子化と呼ぶ。例えば、相関関数は

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle = \langle 0 | \hat{\phi}(x_1) \hat{\phi}(x_2) | 0 \rangle \quad (16)$$

のようにえられる¹⁰。 $\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle$ などを一般に、グリーン関数 (Green's function) とよぶ。

$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle$ や $\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \phi(x_3) \rangle$ などのグリーン関数の計算が終われば、ここから様々な物理量を引き出すことが出来る。たとえば、加速器実験で重要となる粒子と粒子の散乱断面積 (の作用内のパラメータ依存性) である。

一方で同じ量子論は、経路積分量子化でも得られる。例えば、相関関数は

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \phi(x_2) e^{iS[\phi]} \quad (17)$$

とえられる。この様な (経路) 積分が計算できることが場の理論の計算の中間目標である。

そして $\int \mathcal{D}\phi \dots$ は全ての場の配位 (関数 $\phi(x)$ の形) の足し上げを意味しており、量子力学と同様に連続無限次元の多重積分である。これについては後述する。

⁸それに加えて $\phi \rightarrow -\phi$ で不変になるという \mathbb{Z}_2 不変性も課している。

⁹同時刻でない交換関係は、色々な情報をもつ。たとえば光円錐の外側の異なる時間の交換子は因果律から交換すべきである。その条件を課すとスピンに対して制限がつく。これをスピン統計定理という。

¹⁰正確には時間順序を入れるべきだが、説明すると時間がかかるため省略している。詳しくは、相対論的な場の理論の教科書を参照のこと。

経路積分形式では、作用を

$$S[\phi, J] = \int dt d^3x \left(\frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^3 \partial_\mu \phi \partial_\mu \phi(x) - \frac{m^2}{2} \phi^2(x) \right) + \int dt d^3x J(x) \phi(x) \quad (18)$$

とソース項 (source term)、つまり外場を追加しておくことで、

$$\langle \phi(x_1) \phi(x_2) \rangle = \left[\frac{\partial}{\partial(iJ(x_1))} \frac{\partial}{\partial(iJ(x_2))} \int \mathcal{D}\phi e^{iS[\phi, J]} \right]_{J \rightarrow 0} \quad (19)$$

で相関関数が求まるため、便利に使われる。

1.4 素粒子標準模型

今、人類が知っている素粒子についての知識は、**素粒子標準模型 (standard model)** と一般相対論という形でまとめられている。

$$S = \int d^4x \sqrt{-\det G_{\mu\nu}(x)} \left[\frac{1}{16\pi G_N} (R[G_{\mu\nu}(x)] - \Lambda) \right. \quad (20)$$

$$\left. - \frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 \text{tr} (F_{\mu\nu}^{(i)}(x))^2 + \sum_f \psi^{(f)}(x) i \not{D} \psi^{(f)}(x) \right. \quad (21)$$

$$\left. + \sum_{g,h} (y_{gh} \phi(x) \psi^{(g)}(x) \psi^{(h)}(x) + h.c.) \right. \quad (22)$$

$$\left. + |D_\mu \phi(x)|^2 - V[\phi(x)] \right] \quad (23)$$

この理論は、ローレンツ対称性、非可換ゲージ対称性、カイラル対称性、などの対称性の要求とヒッグス機構、そして量子論の要請から定まる。

これを経路積分で量子化すると、

$$Z = \int \mathcal{D}G \mathcal{D}A \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\phi e^{iS} \quad (24)$$

となる。ただし $\mathcal{D}G \mathcal{D}A \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\phi$ は経路積分測度である。ここから様々な期待値をもとめ、実験と比較するのである。ただし、重力場 $G_{\mu\nu}$ については、この定式化で良い保障はなく、量子論としては精密計算はできない¹¹。

上記のように経路積分で書いて計算すれば(重力以外は)、高精度で計算できる。標準模型の計算のほとんどは摂動論を用いる。摂動論は複雑な計算であるが、基本的には

$$z = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2 - gx^4} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2} e^{-gx^4} \quad (25)$$

という式を考えて定数 g が小さいとしてテイラー展開し、和と積分の順序交換をし、展開を途中で打ち切ってしまうことに対応する。各項はガウス積分になるため計算可能であるが、これは正確な計算が出来ない事が知られている。

¹¹以下で述べるような摂動展開を行うと、高次項からくる発散をくりこめない。しかし摂動論の枠外でくりこめないかは分からない。少なくとも古典論では成立しているので何らかの有効模型であるはずではあるのだが。Wilson の意味でくりこみが出来ないということは、高エネルギーの寄与を低エネルギーの自由度に押し付けられないということであるが、どういう意味なの是不明である。

摂動論の様子を見てみる。この被積分関数をテイラー展開し、和と積分の順序交換を行うと、

$$z = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2} e^{-gx^4}, \quad (26)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-gx^4)^n, \quad (27)$$

$$\stackrel{?}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{1}{2}x^2} (-gx^4)^n, \quad (28)$$

である。最後の式までたどり着くと、ガウス積分さえできれば各項ごとに積分計算をして足し上げれば良さそうに思える。実はこれは破綻することが知られている。“?”をつけた部分の入れ替えは許されておらず、足し上げると発散が起きてしまう(これを漸近級数という)。そのため摂動論の計算を無限に続けても元の積分を行うことには対応していない。また摂動展開によって色々な物理的な効果を取り込みきれないこともわかっている¹²。

一方で摂動級数は、ある程度の次数までは、次の補正項が小さくなることも知られており、たとえば標準模型の一部である量子電気力学 (QED, Quantum Electro-Dynamics) の場合には10次までの計算がなされており [1] 超高精度で実験結果と矛盾のない結果を与えている。これは量子電気力学については人類は相当良く理解できていることを意味している。

1.5 格子 QCD が役立つこと

QCD は、量子色力学 (QCD, Quantum Chromo-Dynamics) のことで詳細は後述するが、クォーク (物質) とグルーオン (力) の力学で、

$$S_{\text{QCD}} = \int d^4x \left[-\frac{1}{4} \text{tr} \underbrace{(F_{\mu\nu}(x))^2}_{\text{グルーオン}} + \sum_f \underbrace{\psi^{(f)}(x)(i\not{D} + m^{(f)})\psi^{(f)}(x)}_{\text{クォーク}} \right] \quad (29)$$

という作用で書かれる理論である。量子化は、

$$Z = \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{iS_{\text{QCD}}} \quad (30)$$

と行われる。

QCD の基底状態 (QCD vacuum)、真空は非常に複雑な状態であり、図 2 の様に図示される。この真空は摂動論を使って調べることは出来ないと考えられている。

この作用は標準模型の作用の2行目に入っていたものである¹³。 $F_{\mu\nu}$ と \not{D} の中に結合定数 g が入っているが、これは大体1であることが知られており、電磁気学の結合定数が $1/137$ であることを考えると非常に強い (なので強い力と呼ばれる)。多体系量子系の言葉でいうと、基底状態が強結合になっている。なので基本的に摂動をつかって低エネルギーでの情報、たとえば陽子・中性子の質量等を取り出すことが難しい。

この理論を連続時空でなく、離散時空に載せたものが格子 QCD であり、 g での展開に頼ることなくスーパーコンピュータ等で期待値の計算が可能である。近年の素粒子実験では始状態・終状態がハドロンになっていたり関わってくるが、ハドロンとクォークをつなぐ“係数” (正確には形状因子) の計算には格子 QCD での計算が必須である。またクォークグルーオンプラズマを作る実験の結果の理解にも格子 QCD での計算が必要である。

¹² これらを非摂動効果という。

¹³ ただしヒッグスの真空期待値を入れた形で湯川結合も質量として書き換えた。

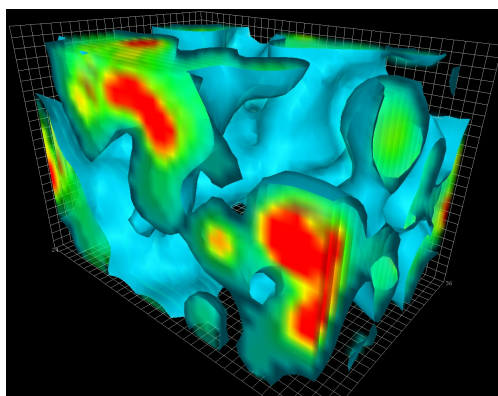


図 2: QCD 真空 [2]。QCD 真空はエネルギー密度が場所によって異なる。量子効果により、沸騰したお湯のように沸き立っている。

格子 QCD の役立ちポイント 格子上で定義された QCD を用いると、以下の役に立つ

1. QCD 摂動論で計算したクォークを含む遷移行列要素をハドロンの言葉に変換する係数を求める。これは実験結果と標準模型ラグランジアンをつなぐ鍵である。
2. ハドロンの質量の測定や、ハドロンの相互作用の決定
3. QCD の状態方程式や、相転移を調べられる (クォークとグルーオンの量子統計力学)。クォーク凝縮が何ケルビンで溶けてなくなるか、相転移次数は? 圧力などを調べられる。クォークグルーオンプラズマの性質も調べられる。
4. 現実とは関係のないタイプの場の理論の非摂動計算に使える。たとえば $N_c = 8$ のゲージ理論のゲージ場に関連する期待値を調べたりできる。くりこみ群の解析も出来る。
5. 場の理論の厳密な定義を与えている。これは場の理論の理論自体を調べる事ができる。

このように、現実と理論をつなぐ道具や、理論を調べる道具として非常に役立つ。

1.6 連続な場の理論はうまく定義されていない事

さて最初に素粒子標準模型を見せ、そのあと格子 QCD の分配関数を見せた。ここでは 1 次元の場の理論を例に、連続時空では場の理論はうまく定義されていない事を見る。

場の量子論は典型的に、場を ϕ として以下の形の分配関数をもつ。

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]} \quad (31)$$

ただし作用の符号は前と異なるが、これの正当化は後で行う。ここで問題を起こすのが経路積分測度で

$$\mathcal{D}\phi = \prod_{x \in \mathbb{R}} d\phi(x) \quad (32)$$

?

である。時空の各点に対する無限積で積分が“定義”されているが、この操作はどうやって行えば良いか不明である¹⁴。連続無限個の積分を含んでおり、病的なのかも判別できない。

¹⁴正確には自由場のときにはうまく行うことが出来る。

離散時空で、しかも有限体積で経路積分を行う場合には、

$$\mathcal{D}\phi = \prod_{n \in \{1, 2, 3, \dots, L\}} d\phi_n = d\phi_1 d\phi_2 d\phi_3 \cdots d\phi_L \quad (33)$$

となる。ただし L は大きい整数とした。この積分は、(文字が ϕ_i となっていてわかりにくい) 学部で習うような多重積分である。

そのため離散時空の経路積分は操作が明確であり、場の量子論にありがちな発散の問題もなく、全ての操作がうまく定義されている (はずである)。そして計算の最後に、離散化間隔を 0 へ持っていく極限を操作、加えて系の大きさ L を大きくする極限を取れば元の積分が計算できているはずである。

これはちょうどリーマン和からリーマン積分を定義するのと似ている話であり、リーマン和の様なアイデアで場の量子論を定義しているのが格子上の場の理論である。

素粒子の模型の用語

ここは説明しないが、素粒子系の用語まとめておく。

自然単位系・質量次元 c [m/s] を光速、時間を t [s] とすると、 ct は長さの単位 [m] を持つ。 $c = 1$ のときには長さと同じ単位系 [m] で表される。これは**自然単位系**と呼ばれる。

$E = mc^2$ という式から、 $c = 1$ のときにはエネルギー [J] と質量 [kg] が同じ単位系で表される。

\hbar は [J s] (エネルギー掛ける時間) という単位をもつ。 $E = h\nu = hc/\lambda$ の関係を考え、 $c = 1$ と $\hbar = 1$ とすると、エネルギーの単位が長さと同じになることが分かる。

象徴的に以上をまとめると、 $\hbar = c = 1$ のとき、エネルギーと長さは逆の単位をもち、

$$[E] = -[L] \quad (34)$$

である。質量次元という。

あと便利な関係として、 $\hbar c = 197$ [MeV fm] である。これを使うと、エネルギーの単位 MeV と長さの単位 fm を行き来することができる。たとえばパイ中間子の質量は、約 140 MeV であるが、長さに直すと $(1/140)[1/\text{MeV}] \times 197[\text{MeV fm}] \approx 1.4$ [fm] となる。これはパイ中間子のコンプトン波長である。ちなみに陽子の (荷電) 半径は 0.8 fm 程度であるので、直径がだいたいパイ中間子のコンプトン波長程度である。

素粒子標準模型に出てくる力と対応する粒子

1. **電弱力 = 弱い力と電磁気力** $SU(2) \times U(1)$ 、ウィークボソン (W, Z) と光子、ウィークハイパー荷
2. **強い力** $SU(3)$ 、グルーオン、カラー荷

全て質量のないベクトル場 (スピン 1)

素粒子標準模型に出てくる物質と対応する粒子

1. **レプトン**: 強い力を受けないフェルミオン、カラー荷なし
2. **クォーク**: 強い力を受けるフェルミオン、カラー荷あり

上記はスピン 1/2 の場である。この他にヒッグス場 (スピン 0) もある。

QCD に出てくる物質 QCD ではクォークとグルーオンが主な登場人物だが、その結合状態には名前が付いている。

1. **ハドロン**: 強い力で結合したクォークの結合状態。バリオンとメソン。
2. **メソン**: パイ中間子のように、クォークと反クォークがあつまって出来るボゾン
3. **バリオン**: 陽子や中性子のように、クォークが 3 種あつまって出来るフェルミオン

QCD のダイナミカルスケールは、 Λ_{QCD} とかかれ、大体 200 MeV 程度であり、ざっくりとそこ以下が低エネルギーの計算に重要になる。

アップクォークを u 、ダウンクォークを d と書いた時、たとえば、陽子 (uud)・中性子 (ddu) は 1000 MeV 程度、パイ中間子 (u と d) は 140 MeV 程度である。(電子は 5 keV = 0.005 MeV 程度である)。

クォークは6種類あり、その質量は以下の通り (クォーク質量はくりこみスキームに依存するのでざっくりとした値を載せた)。

$$\begin{cases} m_{\text{up}} \approx 2 \text{ MeV}, \\ m_{\text{down}} \approx 5 \text{ MeV}, \end{cases} \quad \begin{cases} m_{\text{charm}} \approx 1,300 \text{ MeV}, \\ m_{\text{strange}} \approx 100 \text{ MeV}, \end{cases} \quad \begin{cases} m_{\text{top}} \approx 175,000 \text{ MeV}, \\ m_{\text{bottom}} \approx 4,200 \text{ MeV}, \end{cases} \quad (35)$$

ここでは各世代ごとに表記した。上側がアップタイプとよばれ電荷 $2/3$ で、下側がダウンタイプと呼ばれ電荷 $-1/3$ である (反クォークの場合は電荷の符号がひっくり返る)。大体 200 MeV 程度までで現れるのは、アップとダウン、そしてストレンジである。格子 QCD ではたいていアップとダウン、そしてストレンジまでを考慮するが、近年ではチャームやボトムまで考慮する場合もある。

グルーオンの質量はゲージ対称性から 0 である¹⁵。量子論まで含めてもゲージ対称性は保たれる。

陽子の質量は、 1000 MeV ほどであるが、それを構成するアップクォーク2つとダウンクォークの質量を足しても 9 MeV ほどにしかならない。この質量のかさ上げ分は、カイラル対称性の自発的破れの効果による。

2 格子上のスカラー場の理論

ここでは実スカラー場を例に、格子化や虚時間形式について学ぶ。ミンコフスキー計量での、連続時空での作用は、

$$S = \int d^4x \left(\frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi(x) - \frac{m^2}{2} \phi^2(x) \right) \quad (36)$$

である。なお、アインシュタインの規則を使って和記号を省略しており、

$$\partial_\mu \phi \partial^\mu \phi \equiv \sum_{\mu=0}^3 \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi, \quad (37)$$

$$= \partial_0 \phi \partial^0 \phi + \partial_1 \phi \partial^1 \phi + \partial_2 \phi \partial^2 \phi + \partial_3 \phi \partial^3 \phi, \quad (38)$$

$$= \partial_0 \phi \partial_0 \phi - \partial_1 \phi \partial_1 \phi - \partial_2 \phi \partial_2 \phi - \partial_3 \phi \partial_3 \phi, \quad (\text{空間座標のインデックスを下げた}) \quad (39)$$

$$= (\partial_0 \phi)^2 - (\partial_1 \phi)^2 - (\partial_2 \phi)^2 - (\partial_3 \phi)^2. \quad (40)$$

であり、同じ添字は和を取ることにする。また計量は $\eta_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$ とっている。

後の計算のために、作用の中の時間成分を分離しておく。

$$S = \int dt d^3x \left(\frac{1}{2} \dot{\phi}^2(x) + \frac{1}{2} \phi \Delta \phi(x) - \frac{m^2}{2} \phi^2(x) \right) \quad (41)$$

空間部分は部分積分を行った。また $\Delta = \sum_{j=1}^3 \partial_j \partial_j$ はラプラシアンである。そして $\dot{\phi} = \partial_0 \phi$ である。

¹⁵これに関連して、ゲージ対称性は自発的に破れないという**エルツァーの定理 (Elitur's theorem)**、そしてカイラル・ゲージ対称性が量子化で壊れるという**カイラルゲージアノマリー**がある。

2.1 「時間連続・空間離散」時空での場の理論

ここでは格子理論の入門として、時間を連続に保ったまま、空間を離散化してみる。これは **サスカインド格子 (Susskind lattice)** と呼ばれている。

離散化は単に微分を差分、積分は和に置き換えればよい。格子間隔 a として、積分を

$$\int d^3x \rightarrow a^3 \sum_{\mathbf{n}} \quad (42)$$

と置き換え、さらに空間の微分を差分に置き換えると以下を得る

$$S = \int dt a^3 \sum_{\mathbf{n}} \left(\frac{1}{2} \dot{\phi}^2(\mathbf{an}, t) + \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{an}, t)) - \frac{m^2}{2} \phi^2(\mathbf{an}, t) \right) \quad (43)$$

ただし、 \mathbf{n} は3次元ベクトルで

$$\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{an}, t) = \frac{1}{a^2} \sum_{j=1}^3 \left(\phi(\mathbf{an} + a\mathbf{e}_j, t) + \phi(\mathbf{an} - a\mathbf{e}_j, t) - 2\phi(\mathbf{an}, t) \right) \quad (44)$$

は離散化したラプラシアンである。これはただの差分で、 $a \rightarrow 0$ でもとのラプラシアンに戻ることは a でのテイラー展開からわかる。また \mathbf{e}_j は j 方向の単位ベクトルである。

つまりラグランジアン¹⁶は、

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2(\mathbf{an}, t) + \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{an}, t)) - \frac{m^2}{2} \phi^2(\mathbf{an}, t) \quad (45)$$

とわかる。ここから共役運動量は、

$$\pi(\mathbf{an}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(\mathbf{an}, t)} = \dot{\phi}(\mathbf{an}, t) \quad (46)$$

である。するとハミルトニアン密度はルジャンドル変換から、

$$\mathcal{H}(\mathbf{an}) = \pi(\mathbf{an}) \dot{\phi}(\mathbf{an}) - \mathcal{L} = \frac{1}{2} \pi^2(\mathbf{an}) - \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{an})) + \frac{m^2}{2} \phi^2(\mathbf{an}) \quad (47)$$

つまりハミルトニアンは

$$H = a^3 \sum_{\mathbf{n}} \mathcal{H}(\mathbf{an}) = a^3 \sum_{\mathbf{n}} \left(\frac{1}{2} \pi^2(\mathbf{an}) - \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{an})) + \frac{m^2}{2} \phi^2(\mathbf{an}) \right) \quad (48)$$

となる。これは多粒子系のハミルトニアンと実質的に同じものである。つまり、離散空間上の点 (格子点 \mathbf{an}) の上に1自由度 $(\phi(\mathbf{an}), \pi(\mathbf{an}))$ がそれぞれ載っている力学系である。第2項を除けば、ただの調和振動子であり、さらに第2項は隣の点との交換相互作用等を表していることになる。

$$\phi(\mathbf{an}) \Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{an}) = \frac{1}{a^2} \sum_{j=1}^3 \left(\phi(\mathbf{an}) \phi(\mathbf{an} + a\mathbf{e}_j) + \phi(\mathbf{an}) \phi(\mathbf{an} - a\mathbf{e}_j) - 2\phi(\mathbf{an}) \phi(\mathbf{an}) \right) \quad (49)$$

¹⁶相対論的な場の理論の文脈では、ラグランジアン密度のことをラグランジアンと呼ぶ。空間座標と時間を統一的に扱うため、 dt に関する積分だけを行うラグランジアンより $dt dx dy dz$ を全て積分するラグランジアン密度の方が頻出で、ラグランジアンは出てこないから間違えることはない。なお、大抵の場合ラグランジアン密度は、 \mathcal{L} の様な花文字で書かれる。一方でラグランジアンは L のように硬い文字で書かれる。

あとは、正準量子化してやれば量子論に移ることができる。つまり“座標” $\phi(a\mathbf{n}, t)$ と“運動量” $\pi(a\mathbf{n}, t)$ に対して同時刻交換関係

$$[\phi(a\mathbf{n}, t), \pi(a\mathbf{n}', t)] = i\delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} \quad (50)$$

を課せば離散空間上の場の理論が手に入る。

この系の時間発展は、シュレーディンガー方程式

$$i\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle \quad (51)$$

から

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi\rangle \quad (52)$$

で記述される。当然、ハイゼンベルク描像 $O(t) = e^{iHt}Oe^{-iHt}$ でもよい。

どういう状態ベクトルに作用するかをハイゼンベルク描像で見よう。このとき、ある格子上の座標点を \mathbf{n} とすると、演算子 $\phi(a\mathbf{n}, t)$ は、

$$\phi(a\mathbf{n}, t)|0\rangle_{\mathbf{n}} \quad (53)$$

の様に座標点ごとの状態ベクトルに作用する。つまり時空全体では、

$$\bigotimes_{\mathbf{n} \in \mathbb{L}_3} |0\rangle_{\mathbf{n}} = |0\rangle_{(0,0,0)} \otimes |0\rangle_{(0,0,1)} \otimes \cdots \quad (54)$$

ただし $\mathbb{L}_3 = \{(n_1, n_2, n_3) | n_j \in \mathbb{Z}\}$ は格子点全体の集合である¹⁷。このようにすると、場の量子論のわかりにくい点もいくらか緩和できる。

経路積分 もちろん作用

$$S = \int dt a^3 \sum_{\mathbf{n}} \left(\frac{1}{2} \dot{\phi}^2(a\mathbf{n}, t) + \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(a\mathbf{n}, t)) - \frac{m^2}{2} \phi^2(a\mathbf{n}, t) \right)$$

をそのまま用いて、

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{iS} \quad (55)$$

という経路積分形式で計算しても等価である。

どちらの形式でも計算の最後に $a \rightarrow 0$ の極限で、計算したかった元のものに一致するはずであるが、これについては後述する (実は相互作用するスカラー場の場合は駄目な事が知られている¹⁸)。

¹⁷つまり、量子スピン系と同じような感じである。

¹⁸正確に言うと格子理論で漸近自由でない理論を定式化しようとする、連続極限に近づくためには、結合定数が無限に大きい結合定数が必要となってしまう。格子正則化以外の非摂動正則化は見つかっていないが、漸近自由でない、相互作用のある理論が存在しないことを意味しない。

2.1.1 虚時間、実時間

ここでは、**虚時間**というアイデアを導入する。時間変数を虚数にするという計算上のトリックであり、計算が簡単になる。これは一種のトリックであり物理的なことではない。

ここで突然、統計力学を思い出すことにする。量子統計力学では、 $|n\rangle$ を適当な状態だと思つと、ハミルトニアンを H とするとき、

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle \quad (56)$$

のような計算が行われていた。 H のスペクトルが有限でない限り、 $\beta < 0$ では問題が生じる。つまりエネルギー固有値で分配関数を書くと、

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (57)$$

となるが、 n が有限でない限り、 $\beta < 0$ では発散してしまう。そのため $\beta > 0$ とする。

そして場の理論の時間発展、

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\Psi\rangle \quad (58)$$

とボルツマン重みを比べると、よく似た形をしている。そこで

$$t \rightarrow -i\tau \quad (59)$$

と置き換えれば、

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\tau H} |\Psi\rangle \quad (60)$$

という時間発展の形を得る。 τ を実数に取った場合、もとの t は虚数になるため、これを**虚時間形式**とよぶ。また後述する理由から**ユークリッド作用の場の理論 (Euclidian field theory)**とも言われる。

虚時間形式の方が一般的に位相の振動などの現象がなく使い勝手が良く、また統計力学の手法が使用可能になる。さらに虚時間形式でも、空間に依存する量などは問題なく計算できるためよく使われるうえ、計算した後に実時間に解析接続できれば元の量が復元可能である。**ハミルトニアン自体は共通であることは非常に重要である。つまり実時間・虚時間どちらの計算法でも、同じハミルトニアンを持つ系であり、ハミルトニアンの固有値(質量に対応する)はもちろん同じになる。**

虚時間への移行を経路積分形式でみると、先程の作用

$$S = \int dt a^3 \sum_n \left(\frac{1}{2} \dot{\phi}^2(\mathbf{a}\mathbf{n}, t) + \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{a}\mathbf{n}, t)) - \frac{m^2}{2} \phi^2(\mathbf{a}\mathbf{n}, t) \right) \quad (\text{再掲})$$

で $t \rightarrow -i\tau$ と置き換えれば良いので、 $\dot{\phi} \rightarrow i\partial_\tau \phi \equiv i\dot{\phi}$ になることに注意して、

$$S = -i \int d\tau a^3 \sum_n \left(-\frac{1}{2} \dot{\phi}^2(\mathbf{a}\mathbf{n}, \tau) + \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{a}\mathbf{n}, \tau)) - \frac{m^2}{2} \phi^2(\mathbf{a}\mathbf{n}, \tau) \right), \quad (61)$$

$$= iS^{(\text{eucl})} \quad (62)$$

を得る。そして経路積分に代入すると、

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S^{(\text{eucl})}} \quad (63)$$

となる。この $S^{(\text{eucl})}$ はユークリッド作用と呼ばれている。

この経路積分は古典統計力学の状態和

$$Z = \int \prod_i dq_i \prod_j dp_j e^{-\beta H(p,q)} \quad (64)$$

と似た格好をしている。

2.1.2 虚時間の作用 \approx ハミルトニアン

実のところ、虚時間での作用はハミルトニアンと同じ構造になっている。すなわちよく見てみると、ポテンシャル項に対応する部分の符号が反転している。

$$S^{(\text{実})} = \int dt a^3 \sum_n \left(\frac{1}{2} \dot{\phi}^2(\mathbf{a}\mathbf{n}, t) + \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{a}\mathbf{n}, t)) - \frac{m^2}{2} \phi^2(\mathbf{a}\mathbf{n}, t) \right), \quad (65)$$

$$S^{(\text{虚})} = \int d\tau a^3 \sum_n \left(\frac{1}{2} \dot{\phi}^2(\mathbf{a}\mathbf{n}, \tau) - \frac{1}{2} \phi(\Delta^{\text{lat}} \phi(\mathbf{a}\mathbf{n}, \tau)) + \frac{m^2}{2} \phi^2(\mathbf{a}\mathbf{n}, \tau) \right), \quad (66)$$

これはハミルトニアンと同じ符号である。つまり、

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S^{(\text{eucl})}}$$

は本当に古典統計力学と実質的に同じ形式になっている。

2.2 時空離散化

時間連続、空間離散という状況を見てきた。ハミルトン形式の定式化はこれで (原理的には) 問題が生じない¹⁹。

場の理論の経路積分をうまく定義したいという試みとしては (そして数値計算を行うためには) 不満足である。なぜならば、

$$\mathcal{D}\phi = \underbrace{\prod_{\tau \in \mathbb{R}}}_{?} \prod_n d\phi(\mathbf{a}\mathbf{n}, \tau) \quad (67)$$

となっており、時間部分が連続無限個の積になったままであるからである。

そこでいっそ、時間も含めて全ての時空の軸を離散化してしまう。つまり実時間・連続時空の作用、

$$S = \int dt d^3x \left(-\frac{1}{2} \phi \partial_0^2 \phi(x) + \frac{1}{2} \phi \partial_j^2 \phi(x) - \frac{m^2}{2} \phi^2(x) \right) \quad (68)$$

をまず虚時間に移し、

$$S = i \int d\tau d^3x \left(-\frac{1}{2} \phi \partial_\tau^2 \phi(x) - \frac{1}{2} \phi \partial_j^2 \phi(x) + \frac{m^2}{2} \phi^2(x) \right) \quad (69)$$

¹⁹これをうまくすれば量子コンピュータに乗せることだってできる。ただしキュービットとしてボソンをどう表現するかの話はあるがそれは別の問題。

因子の i を取り除いた部分を $S^{(\text{eucl})}$ と呼ぶことにする。そして積分を和、微分を差分に置き換えてしまえば良い。

$$S^{(\text{eucl})} = a^4 \sum_n \left(-\frac{1}{2} \phi [\partial^2 \phi]^{\text{lat}}(n) + \frac{m^2}{2} \phi^2(n) \right) \quad (70)$$

これが時空を離散化した格子作用である。ただし、 $n = (n_x, n_y, n_z, n_\tau)$ は4次元の格子点をあらわし、

$$[\partial^2 \phi]^{\text{lat}}(n) = \frac{1}{a^2} \sum_{\mu=1}^4 \left(\phi(n + \hat{\mu}) + \phi(n - \hat{\mu}) - 2\phi(n) \right) \quad (71)$$

は離散化した4元ラプラシアンである。これはただの差分で、 $a \rightarrow 0$ でもとのラプラシアンに戻ることは a でのテイラー展開からわかる。また $\hat{\mu}$ は μ 方向の単位ベクトルである。経路積分は、

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S^{(\text{eucl})}} \quad (72)$$

で与えられ、積分測度は(有限の格子点で計算していると)

$$\mathcal{D}\phi = \prod_n d\phi(n) \quad (73)$$

とただの多重積分になる。これを**格子上のスカラー理論**という。

相互作用は連続理論と同じ様に入れられ、

$$S^{(\text{eucl})} = a^4 \sum_n \left(-\frac{1}{2} \phi [\partial^2 \phi]^{\text{lat}}(n) + \frac{m^2}{2} \phi^2(n) + \frac{\lambda}{4!} \phi^4(n) \right) \quad (74)$$

の様になれば良い。ただし、4次元の相互作用するスカラー場の理論の連続極限は有限の相互作用を保ったまま取ることが出来ないことが知られている(スカラー理論の自明性)。

また、格子間隔 a を導入したため、 a をつかって作用の質量次元を消すことができる(質量次元とは単位のことだと思えば良い)。自然単位系での相対論的場の理論には単位が実質1つ(eV)しかないため、1つエネルギーの単位(長さ分の1の単位)を持つものがあれば質量次元を消すことができる。

たとえば、4次元において、 d^4x は質量次元 -4 をもち、 \mathcal{L} は4を持つ。作用 S は e^{iS} の形で入るため、無次元であり、無矛盾である。そして ∂_μ は質量次元1であり、 m も1、そして ϕ は1だと計算からわかる。そのため質量次元 -1 である a をつかって

$$\hat{\phi} = a\phi, \quad \hat{m} = ma \quad (75)$$

等と定義してみると(ここで $\hat{\cdot}$ は演算子の意味ではなく、無次元量を表す記号で格子QCDではよく使われる) $\phi = \hat{\phi}/a$ より、

$$S^{(\text{eucl})} = a^4 \sum_n \left(-\frac{1}{2a^4} \phi [\hat{\partial}^2 \hat{\phi}]^{\text{lat}}(n) + \frac{\hat{m}^2}{2a^4} \phi^2(n) + \frac{\lambda}{a^4 4!} \phi^4(n) \right), \quad (76)$$

$$= \sum_n \left(-\frac{1}{2} \hat{\phi} [\hat{\partial}^2 \hat{\phi}]^{\text{lat}}(n) + \frac{\hat{m}^2}{2} \hat{\phi}^2(n) + \frac{\lambda}{4!} \hat{\phi}^4(n) \right), \quad (77)$$

と表面上、格子間隔を消し去ってしまうことができる。これは数値計算する上では便利で、そのまま計算してしまい、計算の最後に適切な数だけ a を掛けて次元を戻すことができる。無次元化した場は $\hat{\phi}$ と書いたが、見た目が煩雑になるため、以下では、 $\hat{\cdot}$ を書かずに ϕ と書くこともある。

3 群論

格子QCDは、格子上のゲージ理論であるため、**群論**が必須である。特に連続群であるSU(3)という群を取り扱うため、ここで復習しておく。

3.1 群の定義

空集合でない集合 G と、任意の2つの要素 g_1, g_2 間に定義された演算 $g_1 \star g_2$ の結果が、また G の要素になり、以下の3条件を満たすとき (G, \star) の組を群という。

1. 結合則: $g_1, g_2, g_3 \in G$ のとき、 $g_1 \star (g_2 \star g_3) = (g_1 \star g_2) \star g_3$ を満たす。
2. 単位元の存在: 任意の $g \in G$ に対して $g \star e = e \star g = g$ となるある要素 $e \in G$ が存在する。
3. 逆元の存在: 任意の $g \in G$ に対して $g' \in G$ が存在し、 $g \star g' = g' \star g = e$ 。

演算が分かる場合には省略し、 G が群という言い方がよくされる。 G の要素は無限個あっても良いし、有限個でも良い。

さらに、単位元ではない任意の異なる2つの要素 $g_1, g_2 \in G$ が

$$g_1 \star g_2 = g_2 \star g_1 \tag{78}$$

を満たすとき**可換群**(**アーベル群**)といい、そうでないとき**非可換群**(**非アーベル群**)という。

群の全ての要素が離散的なラベル $i \in \mathbb{N}$ で特定できるとき**離散群**と呼ぶことにし、群の全ての要素が連続的なラベル $\theta_a \in \mathbb{R}^d$ ($a = 1, 2, \dots, d$ は適当な自然数) で特定できるとき**連続群**と呼ぶことにする。連続群は θ^d の区間が有限でも無限に多い要素を持つ。

3.2 群の具体例

3.2.1 \mathbb{Z}_2

例を見ていくと、

$$\mathbb{Z}_2 = \{1, -1\} \tag{79}$$

は掛け算に対して群になっている。この様に要素を列挙する方法を外延的定義という。

内包的定義で書くと、

$$\mathbb{Z}_2 = \{(-1)^n | n \in \mathbb{Z}\} \tag{80}$$

と書いても良いし、

$$\mathbb{Z}_2 = \{e^{i\pi n} | n \in \mathbb{Z}\} \tag{81}$$

とかくと後との整合性がある。

3.2.2 連続群: U(1)

U(1) は要素が無限個ある群 (**連続群**) で

$$U(1) = \{e^{i\theta} | \theta \in \mathbb{R}\} \tag{82}$$

と書かれるものである。量子電気力学 (QED, Quantum electro dynamics) は、ゲージ理論としてこの対称性をもつ。この群の要素同士の積は順序によらないため可換群である。また、要素がパラメータに対しての微分に対しうまく振る舞うので、**リー群**という言い方もされる²⁰。

²⁰リー群とは、群であり微分可能な多様体になっている集合の事であるが詳細は専門書を参照のこと。

3.2.3 連続群: SU(2), リー代数

さて次に連続群でかつ非可換群で一番簡単な SU(2) について説明する。

まず定数倍したパウリ行列を

$$t_1 = \frac{1}{2}\sigma_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad t_2 = \frac{1}{2}\sigma_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad t_3 = \frac{1}{2}\sigma_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (83)$$

として、

$$SU(2) = \left\{ e^{i\sum_a \theta_a t_a} \mid a = 1, 2, 3, \theta_a \in \mathbb{R} \right\} \quad (84)$$

と書かれるのが SU(2) と呼ばれる群である。

以下の SU(2) の 2 つの要素 $g_1, g_2 \in SU(2)$ をとって来て積を見てみる。

$$g_1 = e^{i\theta_1 t_1} = e^{i2\theta_1 \sigma_1}, \quad g_2 = e^{i\theta_2 t_2} = e^{i2\theta_2 \sigma_2}, \quad (85)$$

そしてパウリ行列を含んだオイラーの公式 $e^{i\theta_i \sigma_i} = \cos \theta_i + i\sigma_i \sin \theta_i$ (ただし i の和を取らない) とすると、

$$g_1 g_2 = e^{i\theta_1 t_1} e^{i\theta_2 t_2}, \quad (86)$$

$$= (\cos 2\theta_1 + i\sigma_1 \sin 2\theta_1)(\cos 2\theta_2 + i\sigma_2 \sin 2\theta_2), \quad (87)$$

$$= \cos 2\theta_1 \cos 2\theta_2 + i\sigma_2 \cos 2\theta_1 \sin 2\theta_2 + i\sigma_1 \sin 2\theta_1 \cos 2\theta_2 - \sigma_1 \sigma_2 \sin 2\theta_1 \sin 2\theta_2, \quad (88)$$

となるが、最後の項から明らかに $g_2 g_1$ とは異なる。よって非可換であることが分かる。

また SU(2) もパラメータの微分に対し上手く振る舞うため、リー群であることも分かる。しかし、リー群をそのまま取り扱うのは難しいため、対応する接空間を取り扱う事が多い。これをリー代数という。リー代数はベクトル空間 (線形空間) であるため、取り扱いがリー群に比べて易しい。リー代数は積と和の構造を持つため群ではなく環となるが定義は省略する。

今の場合、SU(2) のリー代数は、

$$su(2) = \left\{ \sum_j c_j t_j \mid c_j \in \mathbb{R}, j = 1, 2, 3 \right\} \quad (89)$$

で書かれるベクトル空間である。ただし t_j は先ほどと同様の定数倍したパウリ行列であり、基底の役割を果たす。またリー群との整合性から今の場合、

$$[t_i, t_j] = \sum_k \epsilon_{ijk} t_k \quad (90)$$

を満たす。

リー代数の要素は $a = \sum_j c_j t_j \in su(2)$ と書かれるため、これを指数関数に乘せるとリー群の要素となる

$$e^{ia} = e^{i\sum_j c_j t_j} \in SU(2) \quad (91)$$

3.2.4 連続群: SU(3)

QCD は、SU(3) をゲージ群に持つゲージ理論であるため、SU(3) はとりわけ重要である。SU(3) は SU(2) を拡張した群であり、以下のようなゲルマン行列を用いて表される。

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (92)$$

$$\lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (93)$$

$$\lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (94)$$

$$\lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} \quad (95)$$

3 × 3 のトレースレス行列の基底をなす。そして $t_a = \lambda_a/2$ と呼び、

$$SU(3) = \left\{ e^{i \sum_a \theta_a t_a} \mid a = 1, 2, 3, \dots, 8, \theta_a \in \mathbb{R} \right\} \quad (96)$$

と書かれるのが SU(3) と呼ばれる群である。

4 イジング模型

ここでは古典スピン模型であるイジング模型について復習する。ここで出てくる手法は格子 QCD でも使うようなアイデアである。この節は (特に関係ないが) 実時間で話をすすめる。

4.1 イジング模型とスピン模型

ここでは、古典スピン模型である 1 次元イジング模型について復習する。1 次元の強磁性イジング模型は、 $s_i \in \{1, -1\} = \mathbb{Z}_2$ として、

$$H[s] = - \sum_{j=1}^N s_j s_{j+1} - h \sum_{j=1}^N s_j \quad (97)$$

$s_{N+1} = s_1$ である。

分配関数は、

$$Z_h = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta H[s]} \equiv \sum_{\{s\}} e^{-\beta H[s]}, \quad (98)$$

となる。ただし $\beta = \frac{1}{T}$ は逆温度である。

対数をとったものはヘルムホルツ自由エネルギーで、

$$F_h = -\frac{1}{\beta} \ln Z_h \quad (99)$$

F_h の h 微分はスピン和を与える。

$$\frac{\partial}{\partial h} F_h = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \ln Z_h = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_h} \frac{\partial}{\partial h} Z_h = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{Z_h} \frac{\partial}{\partial h} \sum_{\{s\}} e^{-\beta H[s]}, \quad (100)$$

$$= \frac{1}{Z_h} \sum_{\{s\}} e^{-\beta H[s]} \left(\sum_{j=1}^N s_j \right) = \left\langle \sum_{j=1}^N s_j \right\rangle, \quad (101)$$

これは相転移の秩序変数になる。外場がない状態の計算がやりたければ、最後に外場を 0 に取れば良い。

座標に依存する外場 h_j を使えば、2点相関関数

$$\langle s_i s_j \rangle, \quad (102)$$

も同様に外場の微分として表すことができる。イジング模型とは関係は無いが、場の理論に出てくるグリーン関数

$$\langle \phi(x) \phi(y) \rangle, \quad (103)$$

も同様に外場を挿入し、その分配関数の微分から構成することができる。

イジング模型に似た模型として、量子スピン系の典型例である量子ハイゼンベルク模型もある。スピンを $\vec{S}_j = (S_j^x, S_j^y, S_j^z)$, $S_i^j \in SU(2)$ として、

$$H[S] = -\sum_{j=1}^N \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} \quad (104)$$

というハミルトニアンで記述される。この場合、各座標に3つの $SU(2)$ 行列が乗ることになる。また付随する状態ベクトルは先述の時間連続・空間離散模型と同様になる。

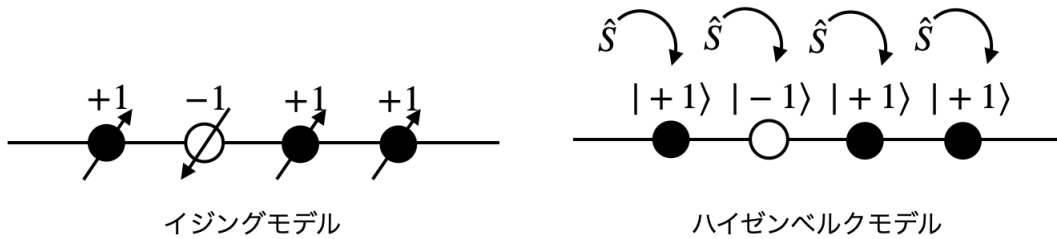


図 3: イジング模型とハイゼンベルク模型。

4.2 くりこみ群

ここでは1次元強磁性イジング模型に対してのくりこみ群 (renormalization group) を議論する²¹。くりこみ「群」とは呼ばれるが実際には逆元が存在しないため半群とよばれるものである。

これは格子上の場の理論の連続極限を考えるのに非常に重要となる。この小節では系の大きさを十分大きい(つまり適宜無限大として扱う)ことにするが、サイト数 N は計算を簡単にするため偶数にしておく。また外場は0に取っておく。

²¹この小節は大阪大学の菊池誠氏のノート [3] を参考に、細かい計算を具体的に補足したものである。

ここでやることは、系の分配関数を考え、偶数番目の状態和だけを実行、そしてその関数から再び元と同じ形に書き換えよう、ということである。そして何が起こるかをみると、物理量が不変になる変換があることが分かる。

ハミルトニアンは、以下のように偶数番目と奇数番目を分けて書き換えられる。

$$H[s] = - \sum_{j=1}^N s_j s_{j+1} = - \underbrace{\sum_{j=1}^{N/2} s_{2j-1} s_{2j}}_{\text{odd-even}} - \underbrace{\sum_{j=1}^{N/2} s_{2j} s_{2j+1}}_{\text{even-odd}}, \quad (105)$$

$$= - \sum_{j=1}^{N/2} s_{2j} (s_{2j-1} + s_{2j+1}) \equiv - \sum_{k:\text{even}} s_k (s_{k-1} + s_{k+1}), \quad (106)$$

なので分配関数は、

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta \sum_{k:\text{even}} s_k (s_{k-1} + s_{k+1})}, \quad (107)$$

$$= \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1} \prod_{k:\text{even}} e^{-\beta s_k (s_{k-1} + s_{k+1})}, \quad (108)$$

となる。

ここで分配関数の中で偶数番目の和

$$\underbrace{\sum_{s_2=\pm 1} \sum_{s_4=\pm 1} \cdots \sum_{s_N=\pm 1}}_{N/2 \text{ 個}} \quad (109)$$

のみを実行する。たとえば、 $k=4$ の部分を見ると、

$$\sum_{s_4=\pm 1} e^{-\beta s_4 (s_3 + s_5)} = e^{-\beta (s_3 + s_5)} + e^{\beta (s_3 + s_5)} = 2 \cosh(\beta (s_3 + s_5)), \quad (110)$$

となる。

全体では

$$Z = 2^{N/2} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_3=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} \prod_{k:\text{even}} \cosh(\beta (s_{k-1} + s_{k+1})), \quad (111)$$

$$= 2^{N/2} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_3=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} \prod_{k:\text{odd}} \cosh(\beta (s_k + s_{k+2})), \quad (112)$$

となる。2行目ではあとの計算に便利のように総乗の番号を1つずらした。具体的に書くと、

$$Z = 2^{N/2} \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_3=\pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1}=\pm 1} \cosh(\beta (s_1 + s_3)) \cosh(\beta (s_3 + s_5)) \times \cdots \quad (113)$$

である。

ここで $\cosh(\cdots)$ を $e^{-\beta(**)}$ という形で表したい。つまり、

$$\cosh(\beta (s_i + s_j)) \stackrel{?}{=} e^{\beta' s_i s_j + h} \quad (114)$$

を満たすように β' と h を β の関数として求めたい。

これは $s_i = \pm 1, s_j = \pm 1$ の組み合わせで両辺が一致する様に決めればよい。全ての組み合わせは

(s_i, s_j)	$\cosh(\beta(s_i + s_j))$	$e^{\beta' s_i s_j + h}$
(1, 1)	$\cosh(2\beta)$	$e^{\beta' + h}$
(1, -1)	1	$e^{-\beta' + h}$
(-1, 1)	1	$e^{-\beta' + h}$
(-1, -1)	$\cosh(2\beta)$	$e^{\beta' + h}$

である。これを満たすには

$$\beta' = h = \frac{1}{2} \ln \cosh 2\beta \quad (116)$$

と対応付ければ良いことがわかる。

すると分配関数は、

$$Z = \underbrace{2^{N/2 - hN/2}}_{\text{(期待値に効かない)}} \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_3 = \pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1} = \pm 1} \prod_{k:\text{odd}} e^{-\beta' s_k s_{k+2}}, \quad (117)$$

であり、具体的に書くと、

$$Z \propto \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_3 = \pm 1} \cdots \sum_{s_{N-1} = \pm 1} e^{-\beta' s_1 s_3} e^{-\beta' s_3 s_5} \times \cdots \quad (118)$$

となる。ただし期待値の計算に効かない定数は比例記号で表した。

ここで、番号を

$$1 \rightarrow 1, \quad 3 \rightarrow 2, \quad 5 \rightarrow 3, \quad \cdots, \quad N-1 \rightarrow N/2,$$

の様に k 番目を $(k-1)/2 + 1$ と再番号付けする。

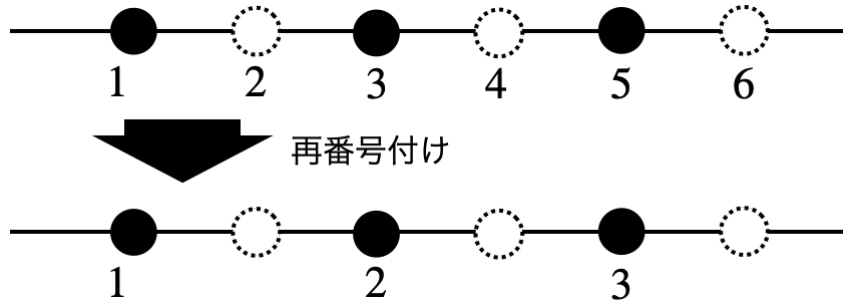


図 4: 再番号付け

すると、

$$Z \propto \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} \cdots \sum_{s_{N/2} = \pm 1} \prod_{j=1}^{N/2} e^{-\beta' s_j s_{j+1}} = \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} \cdots \sum_{s_{N/2} = \pm 1} e^{-\beta' \sum_{j=1}^{N/2} s_j s_{j+1}}, \quad (119)$$

となる。

ここまですをまとめよう。温度 β での N 個のイジングスピン系を考えて、偶数番目のスピンを先に和を取ったとする。すると温度 $\beta' = \frac{1}{2} \ln \cosh 2\beta$ と温度は異なるが、元と同じ期待値を返す系になっている²²。

元の系の格子間隔を a 、和をとった後の格子間隔を a' とする。和をとった後は偶数サイトが抜けているため、 $a' = 2a$ となる。

上記の2つの事実は何を意味するかというと、格子間隔 a と逆温度 β を共に動かす変換のうちで物理量を一定に保つ変換が存在する、ということである。今の場合、 a と β の組み合わせの計算と a' と β' の組み合わせの計算とが同じになる。これは、くりこみ群になっている(くりこみ群とは多義的で、これは例の1つである)。逆に、 β を調整することで別の格子間隔での計算を行うことが出来ることも意味している。なぜなら β が異なると作用・ハミルトニアンに a が明示的に含まれていないので自動的に異なる a で計算したことになるからである。以下で見る通り、格子 QCD においてこの視点が非常に大切である。

具体的に見ると、温度 β での期待値を $\langle \dots \rangle_\beta$ と書くことにする。このときに格子点の数で測った距離 $2k$ (k は正の整数) だけ離れた2点間の相関は、

$$G_\beta(2k) = \langle s_1 s_{2k} \rangle_\beta \quad (120)$$

である。一方で β' でも、もちろん期待値を計算できるので、距離が半分の格子で計算すると

$$G_{\beta'}(k) = \langle s_1 s_k \rangle_{\beta'} \quad (121)$$

となる。そして両者は一致する²³。

$$\overbrace{\langle s_1 s_{2k} \rangle_\beta}^{\text{格子間隔: } a} = \overbrace{\langle s_1 s_k \rangle_{\beta'}}^{\text{格子間隔: } a' = 2a} \quad (122)$$

虚時間形式での場の理論と統計力学の類似性から、場の理論でも同様の事ができ、格子理論の連続極限の理解に用いられる²⁴。

ただし、1次元イジング模型以外のスピン系および場の理論では、理論の自由度の一部を積分すると元のハミルトニアン・作用とは異なる形になることが知られている。また、スピンの大きさも変わらないという所も特殊である。1次元イジング模型以外では、場の再規格化(re-normalization)を行って作用の形を戻す必要がある。それが必要のない1次元イジング模型は非常に特殊な例となっている。またここでは、相互作用を保ったまま連続極限が取れるかどうかについては議論していないことに注意しよう。たとえば1次元イジング模型では、相互作用を保ったまま連続極限を取ることは出来ない。

4.3 \mathbb{Z}_2 ゲージ理論

この節の最後に、イジング模型の亜種として \mathbb{Z}_2 ゲージ理論 (もしくはイジングゲージ理論とも呼ばれる) を導入しておく。ここでは空間2次元以上を考える。

²² $\beta' = \frac{1}{2} \ln \cosh 2\beta$ を展開し、確認してみる。 β が小さいと、 $\cosh 2\beta = \frac{1}{2}(e^{2\beta} + e^{-2\beta}) \approx \frac{1}{2}(1 + 2\beta + \frac{1}{2}(2\beta)^2 + 1 - 2\beta + \frac{1}{2}(2\beta)^2) = 1 + 2\beta^2$ となる。つまり、 $\beta' \approx \frac{1}{2} \ln(1 + 2\beta^2) \approx \beta^2$ である。 $\beta = 0.1$ からはじめると、 $\beta' = 0.01$ となりどんどん高温へ向かっていく。

²³ 1次元イジング模型以外では、スケール倍右辺が変わってしまうことに注意。しかしスピンに依存せず単に定数倍されるだけである。場の理論でいうと、これが波動関数くりこみの因子 Z に相当する。たとえばスカラー場の理論の場合、 $\langle \phi(0)\phi(x) \rangle_\lambda = Z \langle \phi(0)\phi(xs) \rangle_{\lambda'}$ 、ただし s は正の実数でスケールの違いを表す数である。

²⁴ 連続場の理論を格子場の理論から得るためには、UV 固定点の存在 (2次以上の高次相転移) が必要であるが、ここでは説明しないので適宜、教科書を参考にすること。漸近自由な理論の場合には、ガウスの UV 固定点が存在し、連続極限を取ることが保証される。くりこみ群のさらなる解析が必要である。

イジング模型では、スピンの定義が格子点 \mathbf{n} 上に定義されていた。

$$H[s] = - \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{n}' \rangle} s_{\mathbf{n}} s_{\mathbf{n}'} \quad (123)$$

ただし $\langle \mathbf{n}, \mathbf{n}' \rangle$ は最近接格子点同士のペアを表す。

一方で \mathbb{Z}_2 ゲージ理論では、イジングスピン $\mathbb{Z}_2 = \{-1, 1\}$ の自由度 $s_{\mu}(\mathbf{n}) \in \mathbb{Z}_2$ が格子点をつなぐ辺(ボンド、リンク)に載せられており、以下のようなハミルトニアンを持つ理論として定義される。

$$H = \beta \sum_{\mathbf{n}} \sum_{\mu=1}^d \sum_{\nu > \mu} (1 - s_{\mu}(\mathbf{n}) s_{\nu}(\mathbf{n} + \hat{\mu}) s_{\mu}^{-1}(\mathbf{n} + \hat{\nu}) s_{\nu}^{-1}(\mathbf{n})) \quad (124)$$

ただし d は次元の数である。また β は逆温度に対応するパラメータであるが、後との整合性のためにハミルトニアンに含めた。図示すると、図 5 である。

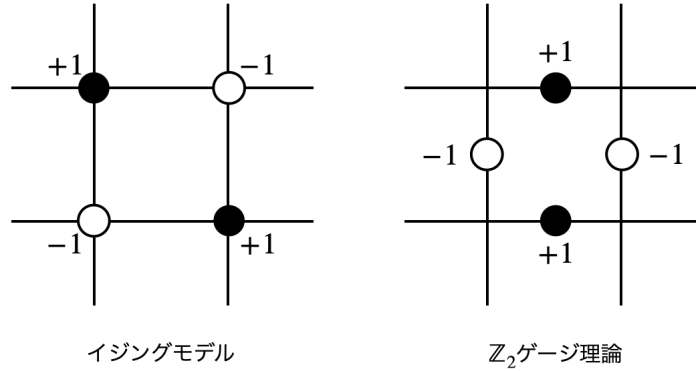


図 5: イジングモデルと \mathbb{Z}_2 ゲージ理論の配位の例。イジングは隣り合う 2 つのスピンを掛ける。 \mathbb{Z}_2 ゲージ理論は 1 つの面を囲う 4 辺を掛ける。統計系としては全ての配位を足し上げる。

そして分配関数は、

$$Z = \sum_{s_1(\mathbf{n}_1)=\pm 1} \sum_{s_2(\mathbf{n}_1)=\pm 1} \dots e^{-H} \quad (125)$$

である。状態和は、各リンクで全ての \mathbb{Z}_2 変数について足し上げることを意味する。この理論は、F. J. Wegner によってイジング模型の双対として 1971 年に提唱された [4]。このハミルトニアンは各点ごとに符号を入れ替える不変性 (ゲージ不変性、gauge invariance) を持つ

$$s_{\mu}(\mathbf{n}) \rightarrow g(\mathbf{n}) s_{\mu}(\mathbf{n}) g(\mathbf{n} + \hat{\mu}) \quad (126)$$

ただし $g(\mathbf{n}) \in \{-1, 1\}$ である。

5 U(1) ゲージ場

ここでは、再び場の量子論の話に戻る。連続時空 U(1) ゲージ理論を考え、格子に上に乗せることを考える。また特に指定がない限り、以降は虚時間で話をすすめる。

5.1 連続時空の古典論

ミンコフスキー計量の連続時空での U(1) ゲージ理論の作用、つまり真空の電磁気学の作用 (electro-magnetism in the vacuum) は、

$$S = -\frac{1}{2} \int d^4x (\vec{E}^2 - \vec{B}^2) \quad (127)$$

であり²⁵、これは相対論的な記法では、

$$S = -\frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (128)$$

である。ただし $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ であり、 A_μ はゲージ場である^{26 27}。この作用はゲージ変換

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) - \partial_\mu \Omega(x) \quad (129)$$

という座標に依存するシフトに対して不変である。ただし $\Omega(x)$ は時空座標に依存する微分可能な任意の実関数である。

虚時間に移行するには、 $t \rightarrow -i\tau$ と $\partial_0 \rightarrow i\partial_4$ そしてゲージ変換との整合性から $A_0 \rightarrow iA_4$ と置き換えればよい。結果は、

$$S = \frac{1}{4} \int d^4x F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (130)$$

となる。経路積分によって分配関数は、

$$Z = \int \mathcal{D}A e^{-S} \quad (131)$$

と与えられる (本当はゲージ固定などの話もあるがここでは省略しごまかしておくことにする)。経路積分測度は、

$$\mathcal{D}A = \prod_{x \in \mathbb{R}^4} \prod_{\mu=1}^4 dA_\mu(x) \quad (132)$$

と全ての可能なゲージ場配位についての足し上げ (積分) となっている。これを上手く格子化したいが、ゲージ対称性が連続時空を前提としているため一筋縄では行かないようにおもう。

5.2 離散時空の電磁場の量子論

電磁場を離散時空で定義したいが、どの様にするのが良いだろうか。格子理論の作用を作る場合、普通以下を要求する。

1. 局所的

²⁵ \vec{E}^2 が運動エネルギー (確かに時間微分を含む)、 \vec{B}^2 がポテンシャルエネルギーの役割を果たしている。

²⁶ $F_{i0} = E_i$ 、そして $F_{ij} = \sum_k \epsilon_{ijk} B_k$ である。

²⁷ ここで場の強さ $F_{\mu\nu}$ は、磁場と同じように平面を指定した量になっている。アンペールの法則やビオ・サバールの法則を思い出すと、円電流が磁場を作る。そこで xy 平面にそって円電流を考えると、 z 軸方向の磁場が発生する。つまり磁場の方向を指定するには、垂直な面を1つ指定することになる。今の場合、 $F_{\mu\nu}$ はその4次元版となっている。

2. 対称性をなるべく守る (例: 格子間隔ごとの並進や 90 度回転は残す等)
3. 実作用、下に有界 (ただし実作用が必要なのは数値計算が理由)
4. 離散化間隔 a を $a \rightarrow 0$ とすると、古典作用に戻る。

実際、スカラー場の理論を作るときにはこれに基づいていた。とはいえ、 $U(1)$ ゲージ理論を格子化するには、 \mathbb{Z}_2 ゲージ理論と同じ処方箋を取れば良い。

格子上の $U(1)$ ゲージ理論では、 $U(1)$ の自由度 $u_\mu(n) \in U(1)$ が格子点をつなぐ辺 (ボンド、リンク) に載せられており、以下のような作用を持つ理論として定義される²⁸ (図 6)。

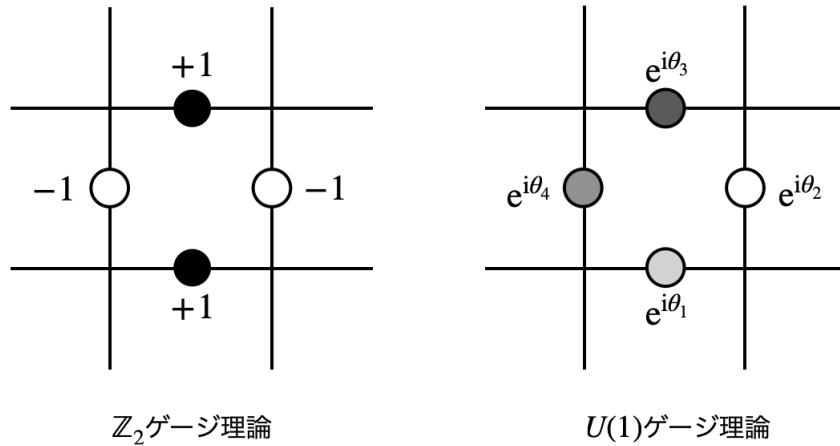


図 6: \mathbb{Z}_2 ゲージ理論と $U(1)$ ゲージ理論。 $U(1)$ ゲージ理論は各リンクに $U(1)$ の成分が載っている。

よく使われるのは (物理計算には効かない) 定数だけシフトした

$$S = \beta \sum_n \sum_{\mu=1}^d \sum_{\nu>\mu} \left[1 - \text{Re} u_{\mu\nu}(n) \right] \quad (133)$$

である。ただし

$$u_{\mu\nu}(n) = u_\mu(n) u_\nu(n + \hat{\mu}) u_\mu^*(n + \hat{\nu}) u_\nu^*(n). \quad (134)$$

は **Wilson loop 演算子 (Wilson loop operator)** と呼ばれるものの一種で、**プラケット (plaquette)** と呼ばれるゲージ不変な物理量であり、エネルギー密度のようなものである²⁹。プラケットとは、フランス語で「小さな板」という意味だそうである³⁰。

n は 4 次元の立方格子の格子点で、 d は時空次元の数である。また β は逆温度に対応するパラメータであり、連続理論との整合性から決めることができる。 $\hat{\mu}$ は μ 方向の単位ベクトルである。この作用は、 **$U(1)$ プラケット作用 ($U(1)$ plaquette action)** と呼ばれる。これが本当に $U(1)$ ゲージ理論の作用としてふさわしいかは、以下で見る。

²⁸虚時間形式では、作用がハミルトニアンと同じ符号になっていることを思い出しておこう。実際、電磁場テンソル $F_{\mu\nu}$ を電磁場で書き直すとハミルトニアンと同じ符号になっていることも分かる。

²⁹ここで場の強さ $u_{\mu\nu}(n)$ は、磁場と同じように平面を指定した量になっている。アンペールの法則やビオ・サバルの法則を思い出すと、円電流が磁場を作る。さらに $u_{\mu\nu}(n)$ は電流に関係している量だとみなせる。つまり、あとで見るように $u_\mu(n) = \exp(iagA_\mu(n))$ 、ただし a は格子間隔で g は電荷と思うとこのループ $u_{\mu\nu}(n)$ は、 $u_{\mu\nu}(n) = e^{iagA_\mu(n)} e^{iagA_\nu(n+\hat{\mu})} e^{-iagA_\mu(n+\hat{\nu})} e^{-iagA_\nu(n)} \sim \exp[ig \oint dx^\mu A_\mu(x)]$ となっている。指数の中は、電流のラグランジアンである。

³⁰<https://en.wikipedia.org/wiki/Plaquette>

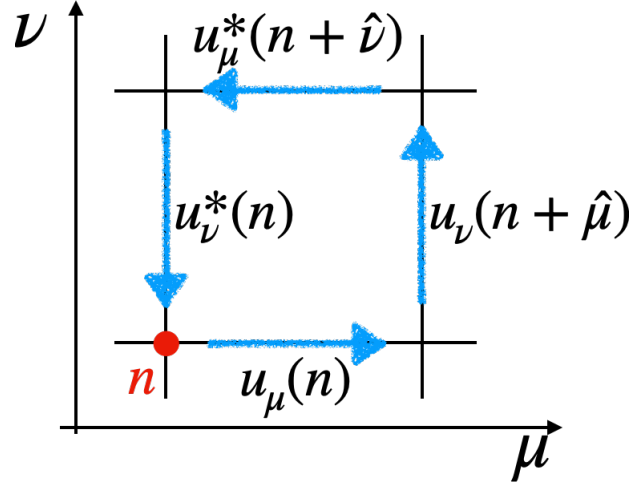


図 7: U(1) ゲージ理論のプラケット

経路積分によって分配関数は、

$$Z = \int \mathcal{D}u e^{-S} \quad (135)$$

と与えられる³¹。経路積分測度 $\mathcal{D}u$ については後述するが、 \mathbb{Z}_2 のときと同じく、各リンクで全ての U(1) の元について足し上げる、すなわち積分することを意味する。

$$\mathcal{D}u = \prod_n \prod_\mu du_\mu(n) \quad (136)$$

プラケットを使った格子作用が連続理論の作用とどう関係しているかは、格子間隔 a 、結合定数 g として³²

$$u_\mu(n) = \exp(iagA_\mu(n)) \quad (137)$$

と同定し、 a について展開することで明らかになる。

実際に $A_\mu(n)$ の言葉で展開を具体的にしていくと、

$$u_{\mu\nu}(n) = u_\mu(n)u_\nu(n + \hat{\mu})u_\mu^*(n + \hat{\nu})u_\nu^*(n), \quad (138)$$

$$= \exp[iaigA_\mu(n) + iaigA_\nu(n + \hat{\mu}) - iaigA_\mu(n + \hat{\nu}) - iaigA_\nu(n)], \quad (139)$$

$$= \exp[iaig\tilde{f}_{\mu\nu}(n)], \quad (140)$$

となる。ただし $\tilde{f}_{\mu\nu}(n) = A_\nu(n + \hat{\mu}) - A_\nu(n) - (A_\mu(n + \hat{\nu}) - A_\mu(n))$ である。さらに $\tilde{f}_{\mu\nu}(n)$ を a で展開すると、

$$\tilde{f}_{\mu\nu}(n) = A_\nu(n + \hat{\mu}) - A_\nu(n) - (A_\mu(n + \hat{\nu}) - A_\mu(n)), \quad (141)$$

$$= A_\nu(n) + a\partial_\mu A_\nu(n) - A_\nu(n) - (A_\mu(n) + a\partial_\nu A_\mu(n) - A_\mu(n)) + O(a^2), \quad (142)$$

$$= a\partial_\mu A_\nu(n) - a\partial_\nu A_\mu(n) + O(a^2), \quad (143)$$

$$= aF_{\mu\nu}(n) + O(a^2). \quad (144)$$

³¹格子理論では、ゲージ固定は必要ない。

³²普通は素電荷 e で書かれるが、紛らわしいので g とした。

となる。つまり、

$$u_{\mu\nu}(n) = \exp[a^2 ig F_{\mu\nu}(n) + O(a^3)], \quad (145)$$

$$= 1 + a^2 ig F_{\mu\nu}(n) - \frac{1}{2} a^4 g^2 F_{\mu\nu}^2(n) + O(a^5). \quad (146)$$

と、プラケットは電磁場テンソルであることが分かる。ここで $O(a^5)$ はゲージ不変性の議論から $O(a^6)$ であることが分かる。

よってプラケットの実部をみると、

$$\text{Re } u_{\mu\nu}(n) = 1 - \frac{1}{2} a^4 g^2 F_{\mu\nu}^2(n) + O(a^6). \quad (147)$$

である。

すなわち格子作用 $a \rightarrow 0$ では

$$\beta \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu>\mu} [1 - \text{Re } u_{\mu\nu}(n)] = \beta \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu \neq \mu} \frac{1}{4} a^4 g^2 F_{\mu\nu}^2(n) + O(a^6), \quad (148)$$

$$= a^4 \left[\sum_n \sum_\mu \sum_{\nu \neq \mu} \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^2(n) + O(a^2) \right], \quad (149)$$

となる。最後に $\beta = 1/g^2$ と同定した。

すなわち、プラケット作用 $1 - \text{Re } u_{\mu\nu}(n)$ は、 $O(a^2)$ の項を除いて $F_{\mu\nu}^2(n)$ であることがわかる。そして余剰な項は、場の理論の教科書に書いてある higher dimensional operators に対応している。つまり格子理論の作用は連続作用に低エネルギー物理に効かないような、カットオフスケールでの余剰な項がたくさん入った理論だとも思える。

まとめると $a \rightarrow 0$ の極限で、 $u_\mu(n) = e^{iagA_\mu(n)}$ そして $\beta = 1/g^2$ と同定すると

$$\beta \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu>\mu} [1 - \text{Re } u_{\mu\nu}(n)] \rightarrow \int d^4x \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (150)$$

となって、連続理論に一致していることが分かる。

5.2.1 格子上の U(1) ゲージ変換

さて、格子ゲージ理論でのゲージ変換は、 $G(n) \in U(1)$ の任意の微分可能な関数で

$$u_\mu(n) \rightarrow G(n) u_\mu(n) G^*(n + \hat{\mu}) \quad (151)$$

となる。 a が小さい極限で、連続理論でのゲージ変換が出るかを見るために $u_\mu(n) = e^{iagA_\mu(n)}$ を a で展開する。左辺は、

$$\text{LHS} = u_\mu(n) = 1 + iagA_\mu(n) + O(a^2) \quad (152)$$

である。右辺は、 $G^*(n + \hat{\mu}) = G^*(n) + a\partial_\mu G^*(n) + O(a^2)$ をつかうと

$$\text{RHS} = G(n)(1 + iagA_\mu(n) + O(a^2))(G^*(n) + a\partial_\mu G^*(n) + O(a^2)), \quad (153)$$

$$= \underbrace{G(n)G^*(n)}_{=1} + aG(n)\partial_\mu G^*(n) + iag \underbrace{G(n)A_\mu(n)G^*(n)}_{=A_\mu(n)} + O(a^2), \quad (154)$$

さらに $G(n) = e^{ig\Omega(n)}$ ただし $\Omega(n)$ は実関数³³、と書き直して、

$$\text{RHS} = 1 + ae^{ig\Omega(n)}\partial_\mu e^{-ig\Omega(n)} + iagA_\mu(n) + O(a^2), \quad (155)$$

$$= 1 + iagA_\mu(n) - iag\underbrace{e^{ig\Omega(n)}e^{-ig\Omega(n)}}_{=1}\partial_\mu\Omega(n) + O(a^2), \quad (156)$$

$$= 1 + iagA_\mu(n) - iag\partial_\mu\Omega(n) + O(a^2), \quad (157)$$

を得る。 $O(a)$ の部分から、

$$iagA_\mu(n) \rightarrow iagA_\mu(n) - iag\partial_\mu\Omega(n) \quad (158)$$

という変換が読み取れる。すなわち、

$$A_\mu(n) \rightarrow A_\mu(n) - \partial_\mu\Omega(n) \quad (159)$$

が分かる。これは連続時空でのゲージ変換そのものである。

5.2.2 連続群上の積分 (U(1))

ハール測度 (Haar measure) の簡単な例は、実数 \mathbb{R} での積分である。 c 定数のシフトに対して不変な関数 $f(x) = f(x+c)$ を考える。この時、

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x), \quad (160)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d(x+c) f(x+c), \quad (161)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x). \quad (162)$$

この積分で測度 dx は、定数分のシフト $dx \rightarrow d(x+c) = dx$ で不変である。すると積分自体もシフトする変換に対して不変になっている事がわかる。このような測度をハール測度という。

U(1) の場合、

$$du_\mu(n) = d(e^{i\theta_\mu(n)}) \quad (163)$$

は $\theta_\mu(n) \in [0, 2\pi)$ をシフトしても不変なため、ハール測度になっている。

ここで、格子上の経路積分は $\mathcal{D}u = \prod_\mu \prod_n du_\mu(n)$ であり、何の不定性も無いことに注意せよ。

ハール測度は何らかの変換に対して不変な測度のことであり、ゲージ場の経路積分には必須の概念である。他の例として、 $f(\lambda x) = f(x)$ ただし $\lambda \neq 0$ という対称性を持つ関数を積分することを考えよう。

$$I = \int_{\mathbb{R}_{++}} \frac{dx}{x} f(x) \quad (164)$$

ここでダミー変数 x を λx と書き換えると、

$$\int_{\mathbb{R}_{++}} \frac{d(\lambda x)}{\lambda x} f(\lambda x) = I. \quad (165)$$

³³ $u_\mu(n) = e^{iagA_\mu(n)} \in U(1)$ のときは A_μ が次元 1 なので次元を消すために指数内に a があったが、 $G(n) = e^{ig\Omega(n)} \in U(1)$ では、 Ω が無次元なので指数内に a はいない。

となる。これはいつでも正しい。

ここで $f(\lambda x) = f(x)$ という事実をつかうと、

$$\int_{\mathbb{R}_{++}} \frac{\lambda dx}{\lambda x} f(x) = I. \quad (166)$$

となる。つまり dx/x はこの場合にハール測度となっている。

5.3 量子論としての連続極限

ある物理量 O をカットオフ a の下で計算したとしよう。

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}u O[u] e^{-S[u]} \quad (167)$$

ただし、

$$S[u] = \beta \sum_n \sum_{\mu} \sum_{\nu > \mu} \left[1 - \operatorname{Re} u_{\mu\nu}(n) \right] \quad (168)$$

である。 a が明示的に含まれていないが、くりこみ群の議論から a を変化させるのと $\beta = 1/g^2$ を変化させるのは同等であることがわかっていた。つまり β を変化させて $a \rightarrow 0$ を考察することが出来る³⁴。実は相互作用のある $U(1)$ 格子ゲージ理論は、相互作用を保ったまま連続極限が取れないと考えられている。詳しくは $SU(N_c)$ 格子ゲージ理論のところで解説する。

6 $SU(N_c)$ ゲージ理論

ここからは、 $SU(N_c)$ ゲージ理論について考えよう。QCD の場合、 $N_c = 3$ である。ここでは格子理論からはじめ、連続理論を導出するという方向で話をすすめる。 $U(1)$ 理論が上手く行ったので、各リンクに $SU(N_c)$ の行列 ($N_c \times N_c$ の特殊ユニタリ行列) を載せる。これでうまくいくことは以下で見る。

さらに $SU(N_c)$ でも以下のゲージ変換で不変な作用をとることにする。

$$S_E^{SU(N_c)}[U] = \frac{\beta}{2N_c} \sum_n \sum_{\mu} \sum_{\nu \neq \mu} \operatorname{Re} \operatorname{tr} [\mathbf{1}_{N_c \times N_c} - \mathcal{P}_{\mu\nu}(n)], \quad (169)$$

ただし、

$$\mathcal{P}_{\mu\nu}(n) = U_{\mu}(n) U_{\nu}(n + \hat{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(n + \hat{\nu}) U_{\nu}^{\dagger}(n), \quad (170)$$

$$P_{\mu\nu}(n) = \operatorname{tr} \mathcal{P}_{\mu\nu}(n) = \operatorname{tr} [U_{\mu}(n) U_{\nu}(n + \hat{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(n + \hat{\nu}) U_{\nu}^{\dagger}(n)], \quad (171)$$

であり、 $SU(N_c)$ の**プラケット**である³⁵。そして $U_{\mu}(n) \in SU(N_c)$ で、 $N_c \times N_c$ の特殊ユニタリ行列だとする。また $\beta = 2N_c/g^2$ とした。これらの意味は後で明らかになる。この定式化は、1974年に Wilson によってなされたもので、これが通常、**Wilson プラケット作用 (Wilson plaquette action)** と呼ばれるものである [5]。

³⁴ イジング模型のときは $\beta = 1/T$ (質量次元 -1) という逆温度であったが、 $U(1)$ 格子ゲージ理論のときは $\beta = 1/g^2$ (質量次元 0) という逆結合定数である。同じ役割をするため、同じ記号で書かれていたのであった。

³⁵ イジング模型と \mathbb{Z}_2 ゲージ理論が対応していたのを思い出すと、古典ハイゼンベルク模型に対応するのが $SU(N_c)$ ゲージ理論である。

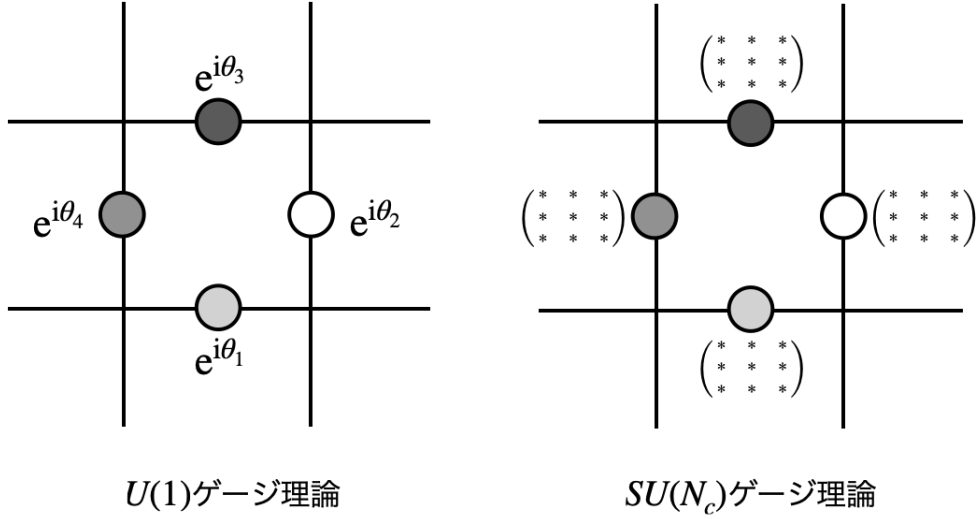


図 8: $U(1)$ ゲージ理論と $SU(N_c)$ ゲージ理論。 $SU(N_c)$ ゲージ理論は各リンクに $SU(N_c)$ 行列が載っている。QCD の場合には 3×3 行列を各辺に載せる。

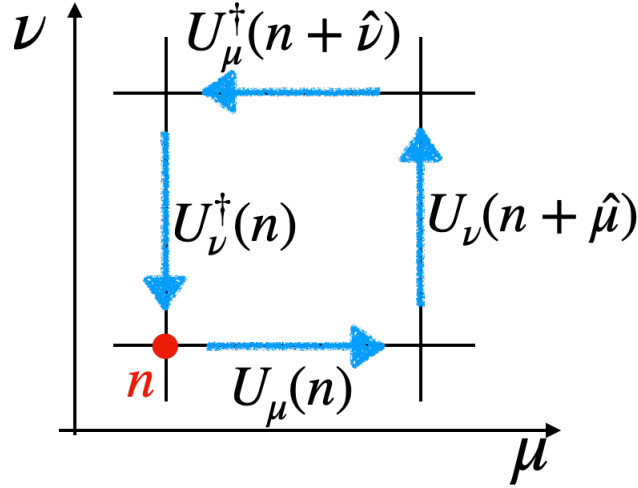


図 9: $SU(N_c)$ ゲージ理論のプラケット。

格子上の $SU(N_c)$ ゲージ理論は、

$$Z = \int \mathcal{D}U e^{-S_E^{SU(N_c)}[U]}, \quad (172)$$

$$\mathcal{D}U = \prod_{\mu} \prod_n dU_{\mu}(n). \quad (173)$$

また $dU_{\mu}(n)$ は $SU(N_c)$ に対するハール測度 (群変換で不変な積分) である。

この作用は、以下の座標に依存する変換で不変である。

$$U_{\mu}(n) \rightarrow G(n)U_{\mu}(n)G^{-1}(n+\hat{\mu}) \quad (174)$$

ただし $G(n) \in SU(N_c)$ である。これを格子上のゲージ変換という。

6.1 $SU(N_c)$ plaquette action から連続理論を出す

今までみたとおり、

$$\mathcal{P}_{\mu\nu}(n) = U_{\mu}(n)U_{\nu}(n+\hat{\mu})U_{\mu}^{\dagger}(n+\hat{\nu})U_{\nu}^{\dagger}(n), \quad (175)$$

が $SU(N_c)$ ゲージ理論の作用の実質的な部分であり、作用自体は、

$$S_E^{SU(N_c)}[U] = \frac{\beta}{2N_c} \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu \neq \mu} \text{Re tr} [\mathbf{1}_{N_c \times N_c} - \mathcal{P}_{\mu\nu}(n)], \quad (176)$$

である。ここで

$$U_\mu(n) = \exp[igaA_\mu(n)] = \exp \left[iga \sum_c A_\mu^c(n) T^c \right], \quad A_\mu^c(n) \in \mathbb{R} \quad (177)$$

そして a を格子間隔として展開する。ここで T^c ($c = 1, \dots, N_c^2 - 1$) は $N_c \times N_c$ のエルミート、トレースレス行列の基底であり、

$$\text{tr} [T^c T^{c'}] = \frac{1}{2} \delta^{cc'}. \quad (178)$$

を満たす。

$SU(N_c)$ ゲージ理論の場の強さ $F_{\mu\nu}$ を導出したい。ここでは $U(1)$ の時を参考に行っていく。

非可換なもの A, B に対する **Campbell-Baker-Housedorff 公式**は

$$e^A e^B = e^C \quad (179)$$

であった。ただし

$$C = A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}([A, [A, B]] + [B, [B, A]]). \quad (180)$$

である。

すると、2つのリンクの積は、

$$U_\mu(n)U_\nu(n + \hat{\mu}) = \exp[igaA_\mu(n)] \exp[igaA_\nu(n + \hat{\mu})] = \exp[K_1] \quad (181)$$

となる。ただし、

$$K_1 = igaA_\mu(n) + igaA_\nu(n + \hat{\mu}) + \frac{1}{2}[igaA_\mu(n), igaA_\nu(n + \hat{\mu})] + O(a^3). \quad (182)$$

である。テイラー展開

$$A_\nu(n + \hat{\mu}) = A_\nu(n) + a\partial_\mu A_\nu(n) + O(a^3), \quad (183)$$

をもちいると、

$$K_1 = igaA_\mu(n) + igaA_\nu(n) + iga^2\partial_\mu A_\nu(n) + \frac{1}{2}[igaA_\mu(n), igaA_\nu(n) + iga^2\partial_\mu A_\nu(n)] + O(a^3), \quad (184)$$

$$= iga(A_\mu(n) + A_\nu(n) + a\partial_\mu A_\nu(n)) + (iga)^2 \frac{1}{2}[A_\mu(n), A_\nu(n)] + O(a^3). \quad (185)$$

をえる。

もう一方の因子は、 $A_\nu^\dagger(n) = A_\nu(n)$ から

$$U_\mu^\dagger(n + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(n) = \exp[-igaA_\mu(n + \hat{\nu})] \exp[-igaA_\nu(n)], \quad (186)$$

$$= \exp [K_2] \quad (187)$$

となる。ただし、

$$K_2 = -igaA_\mu(n + \hat{\nu}) - igaA_\nu(n) + \frac{1}{2}[-igaA_\mu(n + \hat{\nu}), -igaA_\nu(n)] + O(a^3), \quad (188)$$

$$= -igaA_\mu(n) - iga^2\partial_\nu A_\mu(n) - igaA_\nu(n) + \frac{1}{2}[-igaA_\mu(n) - iga\partial_\nu A_\mu(n), -igaA_\nu(n)] + O(a^3), \quad (189)$$

$$= -iga(A_\mu(n) + A_\nu(n) + a\partial_\nu A_\mu(n)) + (iga)^2\frac{1}{2}[A_\mu(n), A_\nu(n)] + O(a^3), \quad (190)$$

である。

結局まとめると、

$$e^{K_1}e^{K_2} = e^{K_3} \quad (191)$$

ただし

$$\begin{aligned} K_3 &= iga(A_\mu(n) + A_\nu(n) + a\partial_\mu A_\nu(n)) + (iga)^2\frac{1}{2}[A_\mu(n), A_\nu(n)] \\ &\quad - iga(A_\mu(n) + A_\nu(n) + a\partial_\nu A_\mu(n)) + (iga)^2\frac{1}{2}[A_\mu(n), aA_\nu(n)] + (\dots) + O(a^3), \end{aligned} \quad (192)$$

である。… は交換関係で消える部分である。そして

$$K_3 = iga^2(\partial_\mu A_\nu(n) - \partial_\nu A_\mu(n)) + (iga)^2[A_\mu(n), A_\nu(n)] + O(a^3), \quad (193)$$

$$= a^2ig\left((\partial_\mu A_\nu(n) - \partial_\nu A_\mu(n)) + ig[A_\mu(n), A_\nu(n)]\right) + O(a^3). \quad (194)$$

となる。場の強さを

$$F_{\mu\nu} = F_{\mu\nu}(n) = \partial_\mu A_\nu(n) - \partial_\nu A_\mu(n) + ig[A_\mu(n), A_\nu(n)]. \quad (195)$$

とすると結局、

$$K_3 = a^2igF_{\mu\nu} + O(a^3). \quad (196)$$

となる。つまりプラケットは

$$\mathcal{P}_{\mu\nu}(n) = e^{a^2igF_{\mu\nu} + O(a^3)}. \quad (197)$$

となる。

ゲージ作用は a が小さいときに

$$S_E^{SU(N_c)}[U] = \frac{\beta}{2N_c} \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu \neq \mu} \text{Re tr} \left[\mathbf{1} - e^{a^2igF_{\mu\nu} + O(a^3)} \right], \quad (198)$$

$$= \frac{\beta}{2N_c} \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu \neq \mu} \text{Re tr} \left[\mathbf{1} - \left(\mathbf{1} + a^2igF_{\mu\nu} + \frac{1}{2}(a^2igF_{\mu\nu})^2 + O(a^6) \right) \right], \quad (199)$$

$$= \frac{\beta}{2N_c} \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu \neq \mu} \text{Re tr} \left[a^4\frac{1}{2}g^2F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} + O(a^6) \right], \quad (200)$$

$$= \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu \neq \mu} \text{Re tr} \left[a^4 \frac{1}{2} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + O(a^6) \right], \quad (201)$$

$$= a^4 \sum_n \sum_\mu \sum_{\nu \neq \mu} \text{tr} \left[\frac{1}{2} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + O(a^2) \right] \rightarrow \int d^4 x_E \frac{1}{2} \text{tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = S^{\text{YM}}. \quad (202)$$

となる。ただし $\text{tr} F_{\mu\nu} = 0$ (トレースレス) と $\beta = 2N_c/g^2$ を用いた。

さて、格子ゲージ理論でのゲージ変換は、 $G(n) \in SU(N_c)$ の任意の微分可能な関数で

$$U_\mu(n) \rightarrow G(n)U_\mu(n)G^{-1}(n + \hat{\mu}) \quad (203)$$

となる。 a が小さい極限で、連続理論でのゲージ変換が出るかを見るために $U_\mu(n) = e^{iagA_\mu(n)}$ を a で展開し、連続時空の座標に置き換えると、

$$A_\mu(x) \rightarrow G(x)A_\mu(x)G^{-1}(x) - G(x)\partial_\mu G^{-1}(x) \quad (204)$$

が分かる。これが連続時空での非可換ゲージ理論のゲージ変換である。

6.2 連続時空での Yang-Mills 理論

連続時空での $SU(N_c)$ ゲージ理論の作用は、

$$S_E = \int d^4 x_E \frac{1}{2} \text{tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \quad (205)$$

である。これは、**Yang-Mills 作用 (Yang-Mills action)** とも呼ばれる。U(1) のときの論理を逆転させて実時間、つまりミンコフスキー時空の理論を考えると、

$$S_{\text{YM}} = \int d^4 x \frac{1}{2} \text{tr} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}. \quad (206)$$

となる。ただし

$$F_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) + ig[A_\mu(x), A_\nu(x)]. \quad (207)$$

である。

経路積分で量子化すると、

$$Z \stackrel{?}{=} \int \mathcal{D}A e^{iS_{\text{YM}}}, \quad (208)$$

となりそうだが、そうはならない。なぜならゲージ不変性が作用にゼロモードを生じさせ、経路積分に除去不能な発散を生じさせる。この発散はゲージ場の積分体積が無限であることが原因である。そのため連続時空のゲージ場の理論の量子化はゲージ固定が必須である。

一方で格子上のゲージ理論ではこの様な発散を生じさせない。なぜならゲージ場の積分領域が有限であるため、体積が有限となるからである。

6.3 連続群上の積分 (SU(3))

SU(3) の場合、SU(3) という群の上の積分を考えることになる。1 変数の場合には

$$I = \int_{\text{SU}(3)} dU f(U) \quad (209)$$

というものである。

ここで、 $f(U)$ が $SU(N_c = 3)$ 変換のもとで不変だとする。 $N_c = 3$ のとき、 $SU(3)$ 行列は、3次元の複素ベクトルが3本集まったものと思える。

$$U = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \vec{u}_3) \quad (210)$$

ただし、 \vec{u} は実数で数えて6次元(複素だと3次元)のベクトルである。 $SU(3)$ は

$$|\vec{u}_1|^2 = 1, \quad |\vec{u}_2|^2 = 1, \quad \vec{u}_1 \cdot \vec{u}_2 = 0, \quad \vec{u}_3 = \vec{u}_1^* \times \vec{u}_2^*. \quad (211)$$

という条件を満たす行列の集まりと思っても良い。つまり積分は、

$$I = \int d\vec{u}_1 d\vec{u}_2 \delta(|\vec{u}_1|^2 - 1) \delta(|\vec{u}_2|^2 - 1) \delta(\vec{u}_1 \cdot \vec{u}_2) f(U) \quad (212)$$

と、2つの複素ベクトル(合計6次元)の積分に書き換えられる。

6.4 格子 QCD

格子 QCD と言った場合には、上記のゲージ場の作用の他に、クォークが結合した理論になっている。クォークが作用に入っている場合には、クォークの**真空偏極効果 (vacuum polarization)** も取り込むことが出来る。ただ、格子上のクォークについては少々込み入っているので、付録で解説した。以下でも、この講義ではクォークの偏極効果は無視することにする。

6.5 量子論的な連続極限

今まで、格子作用で $a \rightarrow 0$ で連続時空の作用に戻ることを見たが、これには量子効果が全く入っていないため**古典的な連続極限**と呼ばれる。

ここでは、**量子論的な連続極限**というものを考察する。ある物理量 O を格子間隔 a 、つまりカットオフ $1/a$ をもつ格子ゲージ理論で計算したとしよう。ただし a は明示的に作用には現れず、パラメータは $\beta \propto 1/g^2$ だけである。この時の物理量の期待値を

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int DU O[U] e^{-S[U]} \equiv M(g) \quad (213)$$

のように書こう。ただし、

$$S[U] = \frac{\beta}{2N_c} \sum_n \sum_{\mu} \sum_{\nu \neq \mu} \text{Re tr} [\mathbf{1}_{N_c \times N_c} - \mathcal{P}_{\mu\nu}(n)], \quad (214)$$

$$\mathcal{P}_{\mu\nu}(n) = U_{\mu}(n) U_{\nu}(n + \hat{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(n + \hat{\nu}) U_{\nu}^{\dagger}(n), \quad (215)$$

である。作用は a をパラメータとして明示的に含んでいない。

連続極限を考えたいので、 $a \rightarrow 0$ を取りたい。 a が明示的に含まれていないが、くりこみ群の議論から a を変化させるのと $\beta \propto g^2$ を変化させるのは同等である。つまり β を変化させると a の応答を調べることができる。

くりこみ群とは、物理量の a の依存性が作用の中の g の変化で吸収できるということであった。物理量は a を明示的に含まれないので、この事実は、

$$\left(a \frac{\partial}{\partial a} + a \frac{\partial g}{\partial a} \frac{\partial}{\partial g} \right) M(g) = 0 \quad (216)$$

という形でまとめられる。これを**キャラン・シマンチック方程式 (Callan-Symanzik equation)** という。結合定数のカットオフ依存性は β **関数** と呼ばれており、

$$\beta(g) = -a \frac{\partial g}{\partial a} \quad (217)$$

定義される。 $\beta = 2N_c/g^2$ とは同じ記号であるが異なるものなので注意。

するとキャラン・シマンチック方程式は

$$a \frac{\partial M(g)}{\partial a} - \beta(g) \frac{\partial M(g)}{\partial g} = 0 \quad (218)$$

と書ける。これは a と b に対しての偏微分方程式として書かれたくりこみ群方程式である。

一般的に、ある $a = a(t)$ と $g = g(t)$ に依存する 2 変数関数 $f(a, g)$ があったとき、 t による微分は、

$$\frac{da}{dt} \frac{\partial f(a, g)}{\partial a} + \frac{dg}{dt} \frac{\partial f(a, g)}{\partial g} = \frac{df}{dt} \quad (219)$$

とかける。 $f(a, g) = M(g)$ と同定し、キャラン・シマンチック方程式と比較すると、

$$\frac{da}{dt} = a, \quad \frac{dg}{dt} = -\beta(g), \quad \frac{dM}{dt} = 0 \quad (220)$$

と分かる。物理量の計算するスケールを μ とし、 $t = -\ln \mu$ と置くと³⁶、 $\frac{d}{dt} = \frac{d\mu}{dt} \frac{d}{d\mu} = -\mu \frac{d}{d\mu}$ から $\mu \frac{dM}{d\mu} = 0$ であり、さらに

$$\mu \frac{da}{d\mu} = -a, \quad \mu \frac{dg}{d\mu} = \beta(g) \quad (221)$$

である。この連立微分方程式の解曲線 $a(\mu)$ と $g(\mu)$ の上では、

$$\mu \frac{dM}{d\mu} = 0 \quad (222)$$

である。すなわち、物理量は計算するスケール μ に依存しない。 μ は人間が手で導入したスケールであるため物理量はそれには依存しない。³⁷

1 つ目の微分方程式

$$\mu \frac{da}{d\mu} = -a, \quad (223)$$

をとくと、

$$a(\mu) = \frac{C}{\mu} \quad (224)$$

とわかる。ただし C は積分定数である。

$g(\mu)$ のエネルギースケール μ 依存性を確かめてみよう。

$$\mu \frac{dg}{d\mu} = \beta(g) \quad (225)$$

³⁶いま、 β 関数は先に (手で導入した) 格子間隔の方で定義したが、 μ は自分で手で決めたエネルギーに対応する。どちらも任意な数だが、次元が逆のため、この様に設定しないとイケない。

³⁷もちろんくりこみスキームに依存した議論であり、依存させることももちろん可能である。

SU(N_c) ゲージ理論の β 関数は、

$$\beta(g) = -b_0 g^3 + O(g^5) \quad (226)$$

であることがわかっている (計算はけっこう大変である)。 $b_0 > 0$ は数係数³⁸である。つまり、 g^3 までで

$$\mu \frac{dg}{d\mu} = -b_0 g^3 \quad (227)$$

となる。両辺を μ で積分すると³⁹、

$$\int \frac{1}{b_0 g^3} \frac{dg}{d\mu} d\mu = - \int \frac{1}{\mu} d\mu \quad (228)$$

つまり

$$\frac{-1}{2b_0 g^2(\mu)} = -\log \mu + C \quad (229)$$

である。この μ より大きい別の点 (エネルギースケール) $\mu = \Lambda_{UV}$ での値

$$\frac{-1}{2b_0 g_0^2} \equiv \frac{-1}{2b_0 g^2(\Lambda_{UV})} = -\log \Lambda_{UV} + C \quad (230)$$

を引くと、定数 C が消去できて $g^2(\mu)$ について解くと

$$\frac{-1}{2b_0 g^2(\mu)} - \frac{-1}{2b_0 g_0^2} = \log \Lambda_{UV} - \log \mu \quad (231)$$

つまり

$$g^2(\mu) = \frac{g_0^2}{1 + 2g_0^2 b_0 \log \frac{\mu}{\Lambda_{UV}}} \quad (232)$$

を得る。これは物理量を一定に保つような、結合定数の変化を表している。まず、 $g_0^2 \ll 1$ 、という状況を考えよう。そして $\Lambda_{UV} > \mu \gg 0$ であれば、摂動論が使える。これを**漸近自由性**という。特に Λ_{UV} が無限であれば、 $\mu \rightarrow \infty$ がとれて、自由場の理論になる。

そして逆に着目しているエネルギースケール μ を下げていくと、以下のようなになる。仮定から $\mu/\Lambda_{UV} < 1$ なので $\log(\mu/\Lambda_{UV}) < 0$ である。つまり、着目しているエネルギースケール μ が小さければ小さいほど、そのエネルギースケールでの $g(\mu)$ は大きくなる。最終的に、

$$1 = -2g_0^2 b_0 \log \frac{\mu^*}{\Lambda_{UV}} \quad (233)$$

をみたま μ^* で $g^2(\mu)$ は発散してしまう。これを見てみると、

$$\mu^* = \Lambda_{UV} e^{-\frac{1}{2g_0^2 b_0}} > 0 \quad (234)$$

という有限のエネルギースケールであることが分かる。これは理論の欠点ではない。実は QCD の様な漸近自由な理論の場合には、 $0 < \mu^* < \Lambda_{UV}$ のような自発的なエネルギースケール

³⁸ $b_0 = -\frac{11}{48\pi^2} N_c$

³⁹偏微分方程式論での特性曲線法を行っていることに対応する。

ル生成が起こる⁴⁰。これを次元転移この μ^* は Λ_{QCD} (**ラムダ QCD**) と伝統的に呼ばれている量に対応する^{41 42}。これはカットオフ Λ_{UV} とは異なることに注意。改めて定義を書くと

$$\Lambda_{\text{QCD}} = \Lambda_{\text{UV}} e^{-\frac{1}{2g_0^2 b_0}} \quad (235)$$

である。左辺を QCD の物理的なスケールを与えるものとし、実験と整合するように決めることにする。(本当は大きいくりこみファクターが付くがここでは無視すると)、 $\Lambda_{\text{QCD}} \approx 200$ MeV とされる。そして格子 QCD の格子間隔 a [fm] を $a = 1/\Lambda_{\text{UV}}$ と同定する。つまり

$$\Lambda_{\text{QCD}} = a^{-1} e^{-\frac{1}{2g_0^2 b_0}} \quad (236)$$

をみると Λ_{QCD} を一定に保ちつつ $a \rightarrow 0$ を取るには、カットオフスケールでの結合定数 g_0^2 が 0 になるしか無い。

$$\underbrace{\Lambda_{\text{QCD}}}_{\text{固定}} = \underbrace{a^{-1}}_{\rightarrow \infty} \underbrace{e^{-\frac{1}{2g_0^2 b_0}}}_{\rightarrow 0} \quad (237)$$

漸近自由な理論の場合には、連続極限を取ることが出来る。
連続時空の非可換ゲージ理論の作用を思い出してみると、

$$S^{\text{YM}} = \int d^4 x_E \frac{1}{2} \text{tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (238)$$

はスケール不変性を持つ。スケールを変える対称性があるということである。一方で経路積分等で量子化をし期待値を求めてみると、期待値では**スケール不変性**が壊れていることがわかる。作用にある対称性が量子化で破れる現象を**アノマリー**と呼ぶが、これは**スケールアノマリー**と呼ばれる現象であり、量子論特有の現象である⁴³。

6.6 実際シミュレーションでの連続極限のとり方

今、体積が十分大きな系を考える⁴⁴。また作用の中にクォークも (簡単のために) ない状況を考える⁴⁵。この計算法を**クエンチ近似**といい、クエンチ近似した格子 QCD の事を**クエンチ QCD**という。作用の中にクォークがないというのは、海クォークのループ効果 (真空偏極) を全て無視するという近似に対応する。一方で価クォークとして (つまりプローブとして) クォークを入れることはできるため、クォークの束縛状態の質量を調べることは可能である。

このときには a を制御できるのは、格子の結合定数 β だけである。今の計算において、 β しか自由に動かせるパラメータは無い。

⁴⁰ というのは言い過ぎで、2-loop β 関数や非摂動効果で低エネルギーでスケール不変な理論を作る事もできる。割愛するが、格子 QCD の文脈でも many flavor 理論として研究されている。

⁴¹ こちらも本来の定義は 2-loop β 関数を使用するが、1-loop のものでここではごまかしておくことにする。また Λ_{QCD} はくりこみ群の不変量である。

⁴² これを**次元転移 (dimensional transmutation)**という。

⁴³ これは自発的対称性の破れとは異なる機構で起こる。自発的対称性の破れの場合には Ward-高橋恒等式から質量 0 の粒子が予言されるが、アノマリーの場合には Ward-高橋恒等式に補正が付き、質量 0 の粒子が予言されない。

⁴⁴ 具体的には、系の一番軽い粒子の質量 (典型的にはパイ中間子の質量 m_π) の逆数より、一般の長さが十分長いとする。

⁴⁵ ある場合には、近似としてクォーク質量が 0 を考えればよいが、 m_π もゼロになってしまい、有限体積効果を考えたりとややこしくなるのでここでは無視する。

β を決めると、(あとで述べる方法で) 経路積分が実行可能で、その β での物理量を計算することができる。そして、いくつかの β で計算を繰り返す。

たとえば、 β での物理量を $M(\beta)$ と書き、 $\beta = \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ で計算を実行したとする。すると、異なる格子間隔に対応する同じ物理量 (たとえば QCD の場合にはクォーク結合状態の質量)

$$M(\beta_1), M(\beta_2), M(\beta_3), M(\beta_4) \quad (239)$$

が計算出来たことになる。

そして、 β と a の換算表がわかっていたとする⁴⁶。つまり、 a は β の関数としてわかっていて、 $a = f(\beta)$ もしくは、 $\beta = f^{-1}(a)$ とわかっている。つまり今は、 $\beta = \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ で計算を実行していたので、 $f(\beta_1), f(\beta_2), f(\beta_3), f(\beta_4) = a_1, a_2, a_3, a_4$ で計算を行ったことに対応する。そして、 $a_1 < a_2 < a_3 < a_4$ であった場合には、 $M(\beta_1), M(\beta_2), M(\beta_3), M(\beta_4)$ を β_4 から β_1 に向かってフィットし、 $a \rightarrow 0$ での M を外挿すれば良い。

6.7 格子 QCD はトイモデルなのか理論なのか

ここでは、格子 QCD はトイモデルなのか理論なのかを議論したい。解答からいうと理論である。

イジング模型は現実の強磁性体を単純化し、相構造の研究などに用いられているが、現実の強磁性体は量子論的であり、古典スピンの描像は正しくない。

一方で格子 QCD を考える。まず連続時空の QCD はそのままでは定義になっていない。そして格子化した理論の連続極限をもって定義されていると考える。そのため、格子 QCD は現実をモデル化・トイモデル化したものではなく、むしろ理論を定義していると言える。

7 第一部まとめ

ここまでで以下の事を見てきた。

1. 格子上に場の理論を定義すると量子化=(有限の) 多重積分で十分
2. β を変えるとカットオフ $1/a$ を変えるのと同じ
3. 格子上にゲージ場を定義できる

この後は、以下に格子上の場の理論の経路積分を実行するかを議論していく。

⁴⁶なお、 a と β の換算表の作り方は、付録につけた。

Part II

格子QCDの数値計算

8 なぜモンテカルロ積分か

8.1 高次元積分における次元の呪い

今まで、格子上の場の理論の経路積分は、ただの多重積分であることをみた。数学の定式化上、それはありがたいが実際に計算できるかという問題は別である。ここでは、数値積分高次元積分における次元の呪いを簡単な例を通して見ていく。特に**台形則 (trapezoidal method)**をつかって高次元積分を精度良く行くと、天文学的な時間がかかることを見る。まず台形則の復習からしよう。さて、適当な関数 $f(x)$ を台形則を用いて積分することを考える。台形則は、(等間隔の)リーマン和で長方形で足していた部分を横に倒した台形で計算する手法である。積分で考えたい区間を $D = [0, 1] = [x_0, x_L]$ としよう。ただし L は次で使う積分区間の分割数である。

離散化間隔を h とし、 $[x_{i-1}, x_i = x_{i-1} + h]$ と $f(x_{i-1}), f(x_i)$ の4点がなす台形の面積は、

$$\frac{1}{2}(f(x_{i-1}) + f(x_i))h \quad (240)$$

である。これを区間全体で足すと、 L 項の和になって

$$\frac{1}{2}(f(x_0) + f(x_1))h + \frac{1}{2}(f(x_1) + f(x_2))h + \cdots + \frac{1}{2}(f(x_{L-1}) + f(x_L))h, \quad (241)$$

$$= \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_L)) + h \sum_{i=1}^{L-1} f(x_i) \quad (242)$$

となる。両端以外は、同じ数が2度出ることがポイントである。これを積分の近似値にする。すなわち、台形則とは

$$\int_0^1 dx f(x) \approx \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_L)) + h \sum_{i=1}^{L-1} f(x_i) \quad (243)$$

と定積分の計算を離散化する手法である。 $h = (x_N - x_0)/L = 1/L$ であり、 $x_j = jh$ である。

ここでは2階微分可能な関数に限って見ることにしよう⁴⁷。最初の区間の厳密な積分値は、

$$\int_0^h dx f(x) \quad (244)$$

であり、近似は

$$\frac{h}{2}(f(0) + f(0+h)) \quad (245)$$

である。そして誤差は引いたものをテイラー展開で計算すると、

$$e_1 = \int_0^h dx f(x) - \frac{h}{2}(f(0) + f(h)), \quad (246)$$

$$= \int_0^h dx (f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + O(x^3)) - \frac{h}{2}(f(0) + f(h)), \quad (247)$$

⁴⁷有界で連続な関数なら同等の証明が可能である。

$$= f(0)h + f'(0)\frac{1}{2}h^2 + \frac{f''(0)}{2!}\frac{1}{3}h^3 - \frac{h}{2}(f(0) + f(0) + hf'(0) + \frac{1}{2!}h^2f''(0)) + O(h^4), \quad (248)$$

$$= \cancel{f(0)h} + \cancel{f'(0)\frac{1}{2}h^2} + \frac{f''(0)}{2!}\frac{1}{3}h^3 - \cancel{f(0)h} - \cancel{\frac{1}{2}h^2f'(0)} - \frac{1}{2!}\frac{1}{2}h^3f''(0) + O(h^4), \quad (249)$$

$$= -\frac{f''(0)}{12}h^3 + O(h^4), \quad (250)$$

となる。なので粗いが、誤差として係数を無視して

$$e_1 = h^3 \quad (251)$$

と取ることにしよう。

今、 $h = 1/L$ なので、 L 個足し上げると、

$$e_{tot} = \sum^L e_1 = h^3L = h^3\frac{1}{h} = h^2, \quad (252)$$

なので $e_{tot} = h^2$ となる。雑な評価であるが、以下でもこれを使う。 $e_{tot} = h^2$ なので、 $h = (e_{tot})^{1/2}$ である。

多変数関数の積分を考える。特に今は d の変数があるとする。1方向あたり n 個に切ったとする。 $n = 1/h$ である。計算する点の総数 N すると、台形則の誤差が $O(h^2)$ というところから、

$$N = n^d = 1/h^d = 1/((e_{tot})^{1/2})^d = 1/(e_{tot})^{d/2} \quad (253)$$

これは、

$$N = (\text{計算の数}) = (e_{d,tot})^{-d/2} = (\text{数値誤差})^{-d/2} \quad (254)$$

を意味する。比例係数を全て無視して出た結果であるので精密に計算したものではないがこれを用いて、場の理論の経路積分について誤差を考える。

たとえば格子QCDの場合、格子サイズが一辺10として 10^4 の点があり、その点に対して4つのリンクが付いている。そして1リンクあたり、 3×3 の複素行列(実数としては自由度は2)が対応付けられている。つまり実変数で数えた積分変数の数は

$$d = 10^4 \times 9 \times 2 \approx 2 \times 10^5 \quad (255)$$

となる。また誤差を $1\% = 0.01$ とすると、必要な計算の数は、

$$(\text{計算の数}) \propto (10^{-2})^{-10^5} = 10^{10^5 \times 2} \approx 10^{10^5} \quad (256)$$

計算時間についても考えてみる。1秒間に浮動小数の計算が K 回可能なことを K flops と書く。たとえばパソコンは $K = 2.6 \text{ Tflops} = 2.6 \times 10^{12} \text{ flops}$ であり、スーパーコンピュータ富岳は $K = 537 \text{ pflops} = 537 \times 10^{15} \text{ flops}$ である。この場合、スパコンとパソコンでは3桁スピードが異なる。たとえば $K = 10^{15} \text{ flops}$ としておこう。計算時間は、例えば

$$T = \frac{(\text{計算の数})}{\text{計算量/s}} [\text{s}] = \frac{10^{10^5}}{10^{15}} [\text{s}] \approx 10^{10^5} [\text{s}] \quad (257)$$

となる。宇宙の年齢はおおよそ $1.0 \times 10^{17} [\text{s}]$ であることを思い出すと、現実的ではないことがわかる。一般に多次元積分は台形則だけでなく、シンプソン則を含めたニュートンコーツ型数値積分では同じような感じになる。

8.2 確率の用語

ここで, iid という単語を説明しておく。iid (independently and identically distributed) とは、同一の確率分布に従う確率変数 $r_1, r_2, r_3 \dots$ が互いに独立しているという意味である。 r_1 は、他の変数に影響を与えず、影響を与えない。

8.3 モンテカルロ法

そこで乱数を使った積分法であるモンテカルロ法 (Monte-Carlo method) が用いられる。こちらは誤差が次元に依存しない。具体的に

$$I = \int_{\Omega} dx p(x) f(x) = \langle f(x) \rangle \quad (258)$$

という形の積分であったとする (定積分であるので、もちろん結果は関数でなく実数になる)。ただし Ω は積分領域であるが以下では明示的には書かないこととする。このとき $p(x)$ を x が出現する確率として⁴⁸ 期待値を

$$\langle f(x) \rangle \approx \frac{1}{N_{\text{smp}}} \sum_{t=1}^{N_{\text{smp}}} f(x_t) \quad (259)$$

と計算するものである。ここで N_{smp} は独立なサンプルの数である。これは期待値⁴⁹として、

$$\left\langle \frac{1}{N_{\text{smp}}} \sum_{t=1}^{N_{\text{smp}}} f(x_t) \right\rangle = \frac{1}{N_{\text{smp}}} \sum_{t=1}^{N_{\text{smp}}} \langle f(x_t) \rangle = \langle f(x) \rangle \quad (260)$$

を与える。
この分散も

$$\frac{1}{N_{\text{smp}}} [\langle f^2(x) \rangle - \langle f(x) \rangle^2] \quad (261)$$

とわかる。つまり $N_{\text{smp}} \rightarrow \infty$ ではモンテカルロ法の誤差は $1/\sqrt{N_{\text{smp}}}$ で減少する。導出を見る限り、誤差は次元には依存しない。

与えられた確率分布が低次元の確率分布の場合は、一様分布を使う事で直接的にサンプルを作成することができる。このような手法は、逆関数法や棄却法と呼ばれている。一方、単純でない確率分布の場合によく用いられるのが、下記のマルコフ連鎖モンテカルロ法である。

9 マルコフ連鎖モンテカルロ法

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (Markov Chain Monte-Carlo method) は、MCMC とも呼ばれる手法であり、特定の確率分布での期待値をサンプリングを用いて求める手法である。

⁴⁸つまり $p(x) \geq 0$ 、 $\int dx p(x) = 1$ を満たすということ。

⁴⁹ここでは x_i を iid (independently identically distributed) と仮定している。つまり全ての x_i が独立に同じ分布からサンプルされたということ。(適当な上手い) マルコフ連鎖モンテカルロの場合には自己相関まで含めるとこの仮定を満たしている。

ここでは、イジング模型のような状態が離散的である場合について具体的に議論する。 $s^{(k)}$ をあるスピン配位とする。1次元だとスピン配位は、

$$\begin{aligned} s^{(1)} &= \{\uparrow, \downarrow, \uparrow, \dots\}, \\ s^{(2)} &= \{\downarrow, \downarrow, \uparrow, \dots\}, \\ s^{(3)} &= \{\uparrow, \downarrow, \downarrow, \dots\} \end{aligned}$$

の様なものである。そしてそれに対して、マルコフ過程について説明する。

ある N_{smp} 個のスピン配位 $s^{(1)}, s^{(2)}, s^{(3)}, \dots, s^{(N_{\text{smp}})}$ を考える。すべての配位が同時に実現する場合の同時確率は、

$$p(s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(N_{\text{smp}}-1)}, s^{(N_{\text{smp}})}) \quad (262)$$

と書くことができる。条件付き確率の定義から $s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(N_{\text{smp}}-1)}$ という列を得ているとき、ある特定の配位 $s^{(N_{\text{smp}})}$ を得る条件付き確率は、条件付き確率の定義から

$$\begin{aligned} p(s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(N_{\text{smp}}-1)}, s^{(N_{\text{smp}})}) \\ = p(s^{(N_{\text{smp}})} | s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(N_{\text{smp}}-1)}) p(s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(N_{\text{smp}}-1)}) \end{aligned} \quad (263)$$

である。そしてマルコフ性とは、

$$p(s^{(N_{\text{smp}})} | s^{(1)}, s^{(2)}, \dots, s^{(N_{\text{smp}}-1)}) = p(s^{(N_{\text{smp}})} | s^{(N_{\text{smp}}-1)}) \quad (264)$$

のように1つ前の配位のみ遷移確率が依存することをいう。以下ではマルコフ性を持つ確率的な遷移確率 $p(\dots | \dots)$ を設計し、収束先として物理的なボルツマン重みになるようにする。

遷移確率 (という名の条件付き確率) は配位 s と s' に対し、 $p(s'|s)$ と書くことにする。そして遷移確率 $p(s'|s)$ は**詳細釣り合い条件 (detailed balance)**

$$p(s'|s)p_{\beta}(s) = p(s|s')p_{\beta}(s') \quad (\text{DB}) \quad (265)$$

を満たすとする。ここで $p_{\beta}(s)$ はパラメータ β に依存する s の確率分布である。また任意の s' について

$$\sum_s p(s|s') = 1 \quad (266)$$

を満たすと仮定する (つまり何かの配位には遷移する)。このとき、 $p_{\beta}(s')$ の遷移を考えると

$$\sum_{s'} \overbrace{p(s|s')}^{\text{use DB}} p_{\beta}(s') = \sum_{s'} \frac{p(s'|s)p_{\beta}(s)}{p_{\beta}(s')} p_{\beta}(s') = p_{\beta}(s) \sum_{s'} \overbrace{p(s'|s)}^{=1} = p_{\beta}(s) \quad (267)$$

となる。ただしDBは詳細釣り合いのことである。詳細釣り合い条件を満たす遷移は $p_{\beta}(s)$ へ収束する⁵⁰。

ある配位 s が実現する確率を

$$p_{\beta}(s) = \frac{1}{Z_{\beta}} e^{-\beta H[s]} \quad (268)$$

⁵⁰唯一か、については付加条件が必要である。詳しくはマルコフ連鎖モンテカルロ法に関する教科書等を参照のこと。今の場合には大丈夫であるが、唯一でない異なる分布へ収束してしまう。

とすると、収束先が統計力学のカノニカル分布になる。以下でもこれを仮定する。

メトロポリス・ヘイスティングス法 (Metropolis-Hastings) は、マルコフ連鎖モンテカルロ法の中でも汎用的に使えて便利である⁵¹。メトロポリス・ヘイスティングス法とは、以下のように**受容確率 (Acceptance rate)**を決めるものである。

$$p_{\text{MH,acc}}(s'|s) = \min \left(1, \frac{T(s|s')p_{\beta}(s')}{T(s'|s)p_{\beta}(s)} \right) T(s'|s) \quad (269)$$

ただし $T(s'|s)$ は s が与えられたときに s' を得る確率であり、 $T(s'|s) \neq T(s|s')$ でも良い。

正の実数 c に対して $\min(1, c) = c \min(1, 1/c)$ を満たすことを利用するとこのアップデートは詳細釣り合いの条件を満たすことを示せる。

$$p_{\text{MH,acc}}(s'|s) = \frac{T(s|s')p_{\beta}(s')}{T(s'|s)p_{\beta}(s)} \min \left(1, \frac{T(s'|s)p_{\beta}(s)}{T(s|s')p_{\beta}(s')} \right) T(s'|s), \quad (270)$$

$$= \frac{p_{\beta}(s')}{p_{\beta}(s)} \min \left(1, \frac{T(s'|s)p_{\beta}(s)}{T(s|s')p_{\beta}(s')} \right) T(s|s'), \quad (271)$$

$$= \frac{p_{\beta}(s')}{p_{\beta}(s)} p_{\text{MH,acc}}(s|s') \quad (272)$$

すると、詳細釣り合いを満たす。

さらに $T(s'|s) = T(s|s')$ となるとき**メトロポリス法 (Metropolis method)** に還元される。つまりメトロポリス法では、提案に関する条件付き確率は反転可能である必要がある。このときの受容確率は

$$p_{\text{Met,acc}}(s'|s) = \min \left(1, \frac{p_{\beta}(s')}{p_{\beta}(s)} \right) T(s'|s) \quad (273)$$

とする。 $p_{\beta}(s)$ がボルツマン重みで記述される場合には

$$p_{\text{Met,acc}}(s'|s) = \min \left(1, \frac{\frac{1}{Z_{\beta}} e^{-\beta H[s']}}{\frac{1}{Z_{\beta}} e^{-\beta H[s]}} \right) T(s'|s) = \min \left(1, e^{-\beta(H[s']-H[s])} \right) T(s'|s) \quad (274)$$

となる。重要な点として、分配関数の計算が必要ない事がある。分配関数はボルツマン分布を全ての配位について足し上げる必要があるが、この様な方法では分配関数は必要ない。

イジング模型の場合には、以下のように適応すれば良い。

1. s をある配位、 s' を1サイトのスピンを反転した配位とする。
2. エネルギー差を $dH = H[s'] - H[s]$ と計算
3. $dH < 0$ なら s' を s と思い直して1へ戻る
4. $r \in [0, 1]$ の一様乱数を発生させる。 $r < e^{-\beta dH}$ なら s' を s と思い直して1へ戻る。そうでなければ s を次の配位として1へ戻る。

これがイジング模型に対するメトロポリス法である。

メトロポリス法、およびメトロポリスヘイスティングス法は多くのアルゴリズムの原型となっている。例えば、機械学習を応用したフローベースサンプリングアルゴリズムでは、メトロポリスヘイスティングスが使われ、次に紹介するHMCもメトロポリスをベースにしたアルゴリズムである。

⁵¹ 効率がいいかは別問題である。熱浴法が構成できる場合にはそちらのほうが高効率で配位を生成できる。

10 HMC

厳密アルゴリズムの一種である、HMC (Hybrid Monte-Carlo もしくは近年だと **Hamiltonian Monte-Carlo** と呼ばれる) を説明する [6]。ゲージ場などの連続自由度を持つ理論に使用可能であり、またフェルミオンが入っていても使うことができるアルゴリズムでありデファクトスタンダードである。ここでは、時間の都合などもあり、QCD の代わりにスカラー場むけの HMC について説明する。簡単化はされているが本質は同じである。HMC にはいくつか見方があるが、基本的にはメトロポリス法であるといえる。

10.1 格子上のスカラー場むけの HMC

ここではゲージ場の代わりに格子上のスカラー場むけの HMC について説明する。

作用は、

$$S[\phi] = \sum_n \left(-\frac{1}{2} \phi [\hat{\partial}^2 \phi]^{\text{lat}}(n) + \frac{\hat{m}^2}{2} \phi^2(n) + \frac{\lambda}{4!} \phi^4(n) \right), \quad (275)$$

である。ただし、 $n = (n_x, n_y, n_z, n_\tau)$ は 4次元の格子点をあらわし、

$$[\partial^2 \phi]^{\text{lat}}(n) = \sum_{\mu=1}^4 \left(\phi(n + \hat{\mu}) + \phi(n - \hat{\mu}) - 2\phi(n) \right) \quad (276)$$

は離散化した 4元ラプラシアンである。また $\hat{\mu}$ は μ 方向の単位ベクトルである。

経路積分をもちいた期待値の定義は、

$$\langle O \rangle = \int \mathcal{D}\phi O[\phi] e^{-S[\phi]} / \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]} \quad (277)$$

であり、

$$\mathcal{D}\phi = \prod_n d\phi(n) \quad (278)$$

なので、これはただの (ものすごく次元の高いが有限次元の) 多重積分である。

経路積分に以下の補助場 $\pi(n)$ を導入する (ただのガウス積分、つまり定数)。

$$\int \mathcal{D}\pi \exp\left[-\frac{1}{2} \sum_n \pi^2(n)\right] = \text{const.} \quad (279)$$

すると期待値の計算式は、

$$\langle O \rangle = \int \mathcal{D}\pi \mathcal{D}\phi O[\phi] e^{-\frac{1}{2} \sum_n \pi^2(n) - S[\phi]} / \int \mathcal{D}\pi \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2} \sum_n \pi^2(n) - S[\phi]}, \quad (280)$$

となる。これをみると、古典統計力学の形式そのものになっている。そこで補助場と元の作用を足して形式的にハミルトニアンと呼んでしまうことにする。

$$\langle O \rangle = \int \mathcal{D}\pi \mathcal{D}\phi O[\phi] e^{-H_{\text{HMC}}[\pi, \phi]} / \int \mathcal{D}\pi \mathcal{D}\phi e^{-H_{\text{HMC}}[\pi, \phi]} \quad (281)$$

ただし、

$$H_{\text{HMC}}[\pi, \phi] = \frac{1}{2} \sum_n \pi^2(n) + S[\phi] \quad (282)$$

これは、スカラー場の配位と共役運動量 (のように見えるので以下ではこう呼ぶが、別に共役運動量ではない) 補助場の配位を与えると実数値が決まる関数である。この仮想的なハミルトニアンを **HMC ハミルトニアン** とよぶ。

ここからいくつかの手法を作れるが、ここでは天下りの HMC を導入することにする。HMC は以下の手順で行うアルゴリズムである。

1. 適当なスカラー場の配位 ϕ を用意する。
2. 共役運動量 π をガウス分布からサンプルする。
3. (ϕ, π) の組を $H_{\text{HMC}}[\pi, \phi]$ から定義されるハミルトン方程式で数値的に仮想的な時間に対する時間発展させ、 (ϕ', π') を得る。
4. $H_{\text{HMC}}[\pi, \phi]$ と $H_{\text{HMC}}[\pi', \phi']$ に対してメトロポリステストを行う。これにより数値的な時間発展の誤差が補正される⁵²。これまでの操作を繰り返す。

すると、配位の列が得られるが、最初のいくつかは、ターゲットの確率分布からのサンプリングとは思えないので捨てる。そしてこれを並べて $\phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \dots, \phi^{(N_{\text{cnf}})}$ を得ることができ、期待値は、

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N_{\text{cnf}}} \sum_{c=1}^{N_{\text{cnf}}} O[\phi^{(c)}] + O\left(\frac{1}{\sqrt{N_{\text{cnf}}}}\right) \quad (283)$$

と計算される。ただし O はオーダーの記号である。

HMC のステップ 3 は **分子動力学法 (Molecular dynamics, MD)** と呼ばれるが、その部分について説明しよう。仮想的な時間を τ (虚時間と同じ記号であるが全くの別物であることに注意) まずハミルトン方程式は、

$$\frac{d\pi}{d\tau} = -\frac{\partial H_{\text{HMC}}}{\partial \phi(n)}, \quad \frac{d\phi}{d\tau} = \frac{\partial H_{\text{HMC}}}{\partial \pi(n)} \quad (284)$$

である。 $\phi(n)$ は仮想時間 τ を含んだ $\phi(n, \tau)$ となり、 $\pi(n)$ は仮想時間 τ を含んだ $\pi(n, \tau)$ となる。4次元の場の理論の計算を行うために、仮想時間を導入したので空間次元 4次元の古典力学になっている。また $\pi(n)$ がランダムに分布していることから、運動方程式とランダム力という、ランジュバン方程式的な視点もある。

ハミルトン方程式の右辺を具体的に計算すると、運動量のほうは、

$$\frac{\partial H_{\text{HMC}}}{\partial \pi(n)} = \pi(n) \quad (285)$$

であり、もう一方は、

$$\begin{aligned} -\frac{\partial H_{\text{HMC}}}{\partial \phi(n)} &= -\frac{\partial S}{\partial \phi(n)}, \\ &= -\frac{\partial}{\partial \phi(n)} \sum_k \left(-\frac{1}{2} \phi(k) \left(\sum_{\mu=1}^4 (\phi(k + \hat{\mu}) + \phi(k - \hat{\mu}) - 2\phi(k)) \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hat{m}^2}{2} \phi^2(k) + \frac{\lambda}{4!} \phi^4(k) \right), \end{aligned} \quad (287)$$

⁵²反転可能なアップデートを行って、メトロポリス法を行うと、分布が狙ったものに収束することを利用すると、アップデートが近似的な式であっても、狙った確率分布に収束してくれるという事実を利用している。

$$= - \sum_k \frac{\partial}{\partial \phi(n)} \left(- \frac{1}{2} \left(\sum_{\mu=1}^4 \left(\phi(k) \phi(k + \hat{\mu}) + \phi(k) \phi(k - \hat{\mu}) - 2\phi(k) \phi(k) \right) \right) + \frac{\hat{m}^2}{2} \phi^2(k) + \frac{\lambda}{4!} \phi^4(k) \right), \quad (288)$$

$$= - \sum_k \left(- \frac{1}{2} \left(\sum_{\mu=1}^4 \left(\delta_{kn} \phi(k + \hat{\mu}) + \phi(k) \delta_{(k+\hat{\mu}),n} + \delta_{kn} \phi(k - \hat{\mu}) + \phi(k) \delta_{(k-\hat{\mu}),n} - 4\delta_{kn} \phi(k) \right) \right) + \hat{m}^2 \phi(k) \delta_{kn} + \frac{\lambda}{3!} \phi^3(k) \delta_{kn} \right), \quad (289)$$

$$= \sum_{\mu=1}^4 \left(\phi(n + \hat{\mu}) + \phi(n - \hat{\mu}) - 2\phi(n) \right) - \hat{m}^2 \phi(n) - \frac{\lambda}{3!} \phi^3(n), \quad (290)$$

$$\equiv F[\phi] \quad (291)$$

となる。こちらは作用をポテンシャルと見なしたとき、ニュートン力学でのポテンシャル力に対応するため、**フォース**と呼ばれている⁵³。

結局、(仮想時間の)時間発展は、

$$\frac{d\pi(n, \tau)}{d\tau} = F[\phi], \quad \frac{d\phi(n, \tau)}{d\tau} = \pi(n, \tau) \quad (292)$$

という連立微分方程式を数値的に解くことになる。

時間発展は $\tau = 0$ から $\tau = 1$ で積分すればよいが、時間反転に対して対称でないメトロポリス法は使えないのだった。つまり、運動方程式を数値的に解くにしても時間反転対称な積分手法を用いる必要がある。また、単に数値積分だとエネルギーが保存することが保証できないので、エネルギーがなるべく保存する計算手法を用いることが重要である。なぜならば、HMCでは、運動方程式を数値的に解いた後のエネルギー差によって受容確率が決まってしまうからである。そこでここでは、エネルギーが上手く良い精度で保存し、時間反転対称な積分手法である

リープフロッグ法を説明する⁵⁴。

まず、仮想時間に対する発展演算子を

$$e^{\tau \frac{d}{d\tau}} \equiv \exp \left(\tau \left\{ \frac{\partial \pi(n; \tau)}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial \pi(n; \tau)} + \frac{\partial \phi(n; \tau)}{\partial \tau} \frac{\partial}{\partial \phi(n; \tau)} \right\} \right) \quad (293)$$

と定義する。すると、運動方程式から、

$$\exp \left(\tau \frac{d}{d\tau} \right) = \exp \left(\tau \left\{ F[\phi] \frac{\partial}{\partial \pi(n; \tau)} + \pi(n, \tau) \frac{\partial}{\partial \phi(n; \tau)} \right\} \right), \quad (294)$$

$$= e^{\tau(\hat{P} + \hat{Q})} = e^{\tau H} \quad (295)$$

と分かる。ただし、

$$\hat{P} = F[\phi] \frac{\partial}{\partial \pi(n; \tau)}, \quad \hat{Q} = \pi(n, \tau) \frac{\partial}{\partial \phi(n; \tau)} \quad (296)$$

⁵³ちなみに、これはグラディエントフロー方程式に出てくるものと同じである。

⁵⁴リープフロッグ法はシンプレクティック積分法の一つであり、位相空間の体積を保存するという性質がある。

そして、

$$\hat{H} = \underbrace{F[\phi] \frac{\partial}{\partial \pi(n; \tau)}}_{\hat{P}} + \underbrace{\pi(n, \tau) \frac{\partial}{\partial \phi(n; \tau)}}_{\hat{Q}} \quad (297)$$

とした。このハミルトニアン \hat{H} が保存すればよい。しかしこの計算は実現できないため、リープフロッグ法を用いることになる。

リープフロッグ法では以下の演算子を使う。場 $(\phi(n; \tau), \pi(n; \tau))^\top$ に対して、

$$e^{\delta\tau\hat{Q}} : \begin{pmatrix} \phi(n; \tau) \\ \pi(n; \tau) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \phi(n; \tau) + \pi(n, \tau)\delta\tau \\ \pi(n; \tau) \end{pmatrix}, \quad (298)$$

$$e^{\delta\tau\hat{P}} : \begin{pmatrix} \phi(n; \tau) \\ \pi(n; \tau) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \phi(n; \tau) \\ \pi(n; \tau) + F[\phi]\delta\tau \end{pmatrix} \quad (299)$$

とはたらく。要は各場に対してのオイラー法である。

リープフロッグ法の全体のアップデートを $U_{QPQ}(\tau)$ とすると、

$$U_{QPQ}(\tau) = \left(e^{\hat{Q}\delta\tau/2} e^{\hat{P}\delta\tau} e^{\hat{Q}\delta\tau/2} \right)^{N_{\text{MD}}} \quad (300)$$

とする積分法がリープフロッグ法である⁵⁵。ただし N_{MD} を正の整数として、 $\tau = N_{\text{MD}}\delta\tau$ である。これは $\phi(n)$ と $\pi(n)$ を片方ずつ、発展させていく方法であり、時間反転対称なアルゴリズムになっている。

リープフロッグ ((leapfrog)) とは、馬^{うま}跳びのことである。馬跳びは小学生のときにやったと思うが、2人で行うと、片方が止まった馬役で片方がその上を跳ぶ。リープフロッグ法は入れ替わりに、お互いを利用して交互に飛んで進んでいく様子を表している。

交換しない A と B に対するキャンベルベーカーハウスドルフの公式

$$e^A e^B = \exp \left[A + B + \frac{1}{2}[A, B] + \frac{1}{12}[A - B, [A, B]] \cdots \right] \quad (301)$$

から、

$$U_{QPQ}(\tau) = \left(e^{\hat{Q}\delta\tau/2} e^{\hat{P}\delta\tau} e^{\hat{Q}\delta\tau/2} \right)^{N_{\text{MD}}} = e^{\tau\hat{H}_{QPQ}} \quad (302)$$

ただし

$$\hat{H}_{QPQ} = \hat{H} + O(\delta\tau^2) \quad (303)$$

と分かる。この \hat{H}_{QPQ} は閉じた形で求まらないが、シャドーハミルトニアンとよばれるものである。リープフロッグ法では、ハミルトニアン \hat{H} の代わりにシャドーハミルトニアンが厳密に保存する。そしてこの2つは、仮想時間の離散化を $\delta\tau$ としたとき、 $O(\delta\tau^2)$ だけずれている。ここの部分があるため、メトロポリス法の受容確率が100%にならない。

HMC のアルゴリズムを一部リープフロッグ法について書き加えて再掲すると、HMC は以下の手順で行うアルゴリズムである。

⁵⁵ P と Q を入れ替えたバージョンもある。これらは、 QPQ 型や PQP 型などと呼ばれる。さらに高次の積分法としてオメリヤン積分法などのシンプレクティック積分法が知られている。この他よく使われている手法として Sexton-Weingarten のマルチタイムスケール法などもあるが時間の都合上、ここでは詳細は省略する。

1. 適当なスカラー場の配位 ϕ を用意する。
2. 共役運動量 π をガウス分布からサンプルする。
3. (ϕ, π) の組を $H_{\text{HMC}}[\pi, \phi]$ からリープフロッグ法で (ϕ', π') を得る。
4. $H_{\text{HMC}}[\pi, \phi]$ と $H_{\text{HMC}}[\pi', \phi']$ に対してメトロポリステストを行う。これにより数値的な時間発展の誤差が補正される。これまでの操作を繰り返す。

$\delta\tau > 0$ をどんどん 0 に近づけると、 H が保存する振る舞いをみせ、また 0 への近づき方が 2 次であることも重要である。

$\delta\tau$ が小さいとメトロポリステストの受容確率が上昇していく。ただし小さすぎる $\delta\tau$ は後述の自己相関の問題もあり、現実的には、約 7 割から約 8 割程度で行われる。

ゲージ場の場合には、

1. 適当な格子ゲージ場の配位 U を用意する。
2. 共役運動量 π をガウス分布からサンプルする⁵⁶。
3. (U, π) の組を $H_{\text{HMC}}[\pi, U]$ からリープフロッグ法で (U', π') を得る。
4. $H_{\text{HMC}}[\pi, U]$ と $H_{\text{HMC}}[\pi', U']$ に対してメトロポリステストを行う。これにより数値的な時間発展の誤差が補正される。これまでの操作を繰り返す。

となる。

この手法は、フェルミオンを含む状況でも使うことが出来る。というより、フェルミオンがない場合には熱浴法と呼ばれるより効率の良いアルゴリズムがある。逆に、フェルミオンがある場合には、基本的には HMC しか厳密アルゴリズムはない。そのため現在の格子 QCD 計算のほぼ全ては、HMC (もしくはそのちょっとした拡張) で行われている。

クォークが結合している場合には、計算時間の 90% がクォークの計算に費やされる⁵⁷。そして、計算時間はクォークの質量が軽くなればなるほど大変になる事が知られており、様々な改良法などが考案され、使われている。

11 自己相関時間と臨界減速

ここでは、マルコフ連鎖モンテカルロ法の抱える一般的な問題である自己相関時間の問題を取り上げる。

モンテカルロ法において、一般的に期待値は前述の通り、

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N_{\text{cnf}}} \sum_{c=1}^{N_{\text{cnf}}} O[\phi^{(c)}] + O\left(\frac{1}{\sqrt{N_{\text{cnf}}}}\right) \quad (304)$$

と評価される。右辺第 2 項は統計誤差と呼ばれる。

⁵⁶ これはリンク $U_\mu(n)$ と同様でベクトル場であり、 $\pi_\mu(n)$ と書かれる。

⁵⁷ フェルミオンの作用は、双線形形式であり、経路積分が実行でき、結果としてゲージ場に依存した分配関数 $Z[U]$ を得る。これを $e^{-\ln Z[U]}$ とみなすと $-\ln Z[U]$ が有効作用となり、 U だけで計算がすすむ (実際にはこの形では行わず、擬フェルミオンという方法をつかうが、実際も大体こういうことをやっている)。ここからくるフォース F の評価には、格子の箱の一辺を L としたとき、実数として数えた時 $(24 \times L^4) \times (24 \times L^4)$ 程度の大きさの線形システムの連立方程式を MD の 1 ステップ当たり 1 回解く必要がある。 $L = 20$ とすると $384 \text{ 万} \times 384 \text{ 万}$ の行列である。そのためクォークがあり非常に時間がかかり、スパコンを使う必要がある。

この評価は配位が独立だと思ったときのもので、もう少し精密には⁵⁸、

$$\langle O \rangle = \frac{1}{N_{\text{cnf}}} \sum_{c=1}^{N_{\text{cnf}}} O[\phi^{(c)}] + O\left(\frac{1}{\sqrt{N_{\text{indep}}}}\right) \quad (305)$$

とすべきである。ただし、

$$N_{\text{indep}} = \frac{N_{\text{cnf}}}{2\tau_{\text{ac}}} \quad (306)$$

である。 τ_{ac} は自己相関時間と呼ばれており、配位間の相関を定量化する数であり、あとで定義を紹介する。重要な点としてこれはアルゴリズムに依存する量であることである。アルゴリズムをかえると、自己相関時間は変わる。

自己相関時間を定義するために、まず自己相関関数を定義しよう。自己相関時間を τ と書き、 $O_c = O[\phi^{(c)}]$ という表記をつかう。まず

$$\Gamma(\tau) = \frac{1}{N_{\text{cnf}} - \tau} \sum_{c=1}^{N_{\text{cnf}} - \tau} \langle (O_c - \bar{O})(O_{c+\tau} - \bar{O}) \rangle \quad (307)$$

という関数を定義し、そしてこれを規格化した

$$\rho(\tau) = \frac{1}{\Gamma(0)} \Gamma(\tau) \quad (308)$$

を自己相関時間関数という。 $\rho(\tau)$ は典型的に $\tau \gg 1$ では、 $\rho(\tau) \approx e^{-\tau/\tau_{\text{ac}}}$ のように指数関数的に減衰する。これをフィットしても良いが、よく使われるのは積分された自己相関時間で、

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{\tau=1}^T \rho(\tau) \quad (309)$$

と定義される。

関係を見るために、 $\rho(\tau) = e^{-\tau/\tau_{\text{ac}}}$ としてみると、

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \lim_{T \rightarrow \infty} \sum_{\tau=1}^T e^{-\tau/\tau_{\text{ac}}} = \frac{1}{2} \frac{e^{1/\tau_{\text{ac}}} + 1}{e^{1/\tau_{\text{ac}}} - 1}. \quad (310)$$

これを図示したのが図 10 であり、 $\tau > 1$ だと 2 つはほぼ等しい事がわかる⁵⁹。

$2\tau_{\text{int}}$ は、独立な配位を与えるモンテカルロ時間をあたえ、配位が完全に独立であれば $\tau_{\text{int}} = 0.5$ となる。

もし、 $\tau_{\text{int}} \gg 0.5$ であれば、 N_{indep} は非常に小さくなり、おなじ N_{cnf} でも $\tau_{\text{ac}} = 0.5$ と比べると、 $\langle O \rangle$ の計算での統計誤差が増大する。例えば、1 つの配位を作る際に $\tau_{\text{int}} = 0.5$ と $\tau_{\text{int}} = 50.0$ の 2 つのケースで例えば同じ時間 (マシンタイム) がかったとする。そして N_{cnf} を同数用意できたとしよう。2 つは 100 倍ちがうため、 N_{indep} は 100 倍違うことになる。すると統計誤差は 10 倍異なることになる。例えば前者だと 1 年で統計誤差が 1% の精度の計算が出来たとしても、後者では、10% 程度になる。そして、後者の改善には N_{cnf} が

⁵⁸ オーダー評価だと同じではあるが、実際に統計誤差は自己相関の分だけずれる。

⁵⁹ $x = 1/\tau_{\text{ac}} \ll 1$ とおいて計算してみよう。 $\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} \frac{e^x + 1}{e^x - 1} \approx \frac{1}{2} \frac{1+x+1}{1+x-1} = \frac{1}{x} + \frac{1}{2} = \frac{1}{x} + \frac{1}{2} = \tau_{\text{ac}} + \frac{1}{2} \approx \tau_{\text{ac}}$ とわかる。

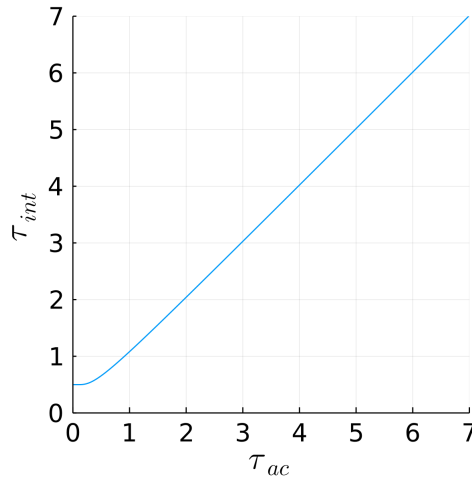


図 10: 自己相関時間と積分された自己相関時間の比較。

100 倍必要となる (統計誤差を 10 倍良くするには、100 倍の努力が必要)。すると、単純には 100 年かかることになる⁶⁰。

自己相関が長くなる状況というのは、どういう状況だろうか。マルコフ連鎖モンテカルロ法を統計系の場合に用いる場合、相転移点に近いパラメータで計算を行うと自己相関が長くなることが知られている。これを**臨界減速**という。

格子 QCD では (くりこみ群の解析から)、統計系として相転移点がちょうど連続極限 $a \rightarrow 0$ に対応していることが示される。一方で有限の a から来る離散化誤差は a が小さい方が当然小さくなるのでマルコフ連鎖モンテカルロ法の効率と離散化誤差にはトレードオフがある。

格子 QCD でも連続極限という外挿を行うとはいえ、離散化誤差をなるべく取り除きたいため、自己相関が短いアルゴリズムは非常に望まれている。

12 まとめ

12.1 格子 QCD で出来ていること

格子 QCD は、K. Wilson による 1974 年の提唱 [5]、および 1980 年の M. Creutz による SU(2) の初シミュレーション [7]、1987 年の Duane らによる HMC の発明 [6] と様々発展してきた。

特筆すべき結果について列挙しておく。以下は、スーパーコンピュータ上で HMC (およびその拡張) を実行し、得られた結果である。

ハドロン質量 (Hadron mass) [8]

ハドロン質量 (図 11)。ハドロンとは、クォークとグルーオンで出来た結合状態のことで、陽子や中性子、パイ中間子などを指す。

QCD 状態方程式 (QCD equation of state) [9]

クォークとグルーオンの量子統計力学を考えたときの、状態方程式 (図 12)。

⁶⁰もちろん、通常はこういうことは起こらない。なぜなら、自己相関が長い部分は並列的に配位をつくる事ができる。さらにアルゴリズムの工夫も可能であり、マシンの性能もどんどん良くなるのでここまで極端なことは現実では起こらない。

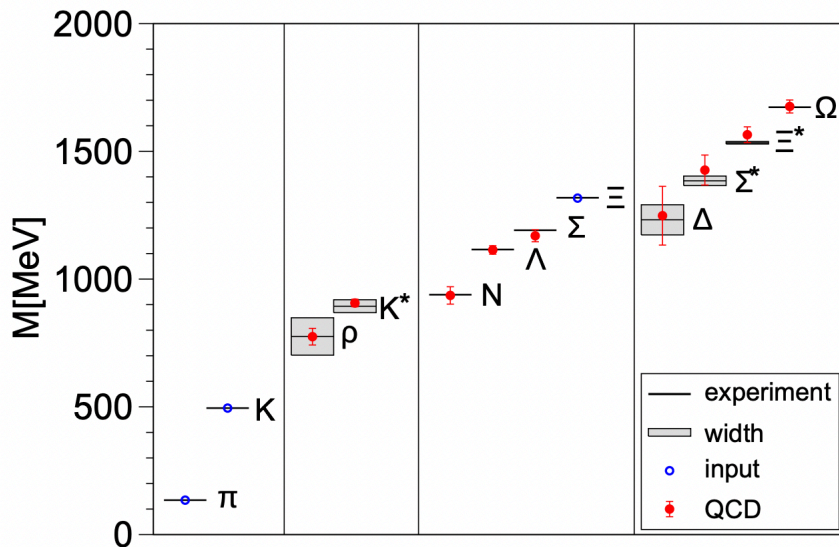


図 11: ハドロン質量。

核力 (Nuclear force) [10]

核子 (クォークの束縛状態) の間のポテンシャル (図 13)

強い力の結合定数 (strong coupling constant) [11]

強い力の結合定数のランニング (図 14)

フレーバー関連の量 (flavor physics) [12] 他にもクォークとハドロンを結びつけ、標準模型の摂動計算と実験をつなぐ係数の計算には格子 QCD の計算は必須である。

この他にも特筆すべき結果は多数あるが、ここに載せきれないので割愛する。年に一度ある格子会議 (Lattice conference) の議事録 (proceedings) を見ると進展を見ることが出来る [13]。

12.2 格子 QCD でどうやって良いか分からない問題

もちろん、格子 QCD (とその数値計算) は万能な手法ではなく、欠点もある。

たとえば理論サイドでは、カイラルゲージ理論がある。弱い力はカイラルゲージ理論であるが、これを格子に載せることは成功していない。

また数値計算としては、符号問題がある。クォークの平均密度が 0 出ない場合、もしくは実時間の場合にはモンテカルロ法が適用できない。こちらに関しては (トイモデルの) 量子計算の結果があるが、4次元の QCD に適用するにはまだまだ壁がある印象である。

他にも多く問題はある (ので研究すべき課題がたくさんある)。

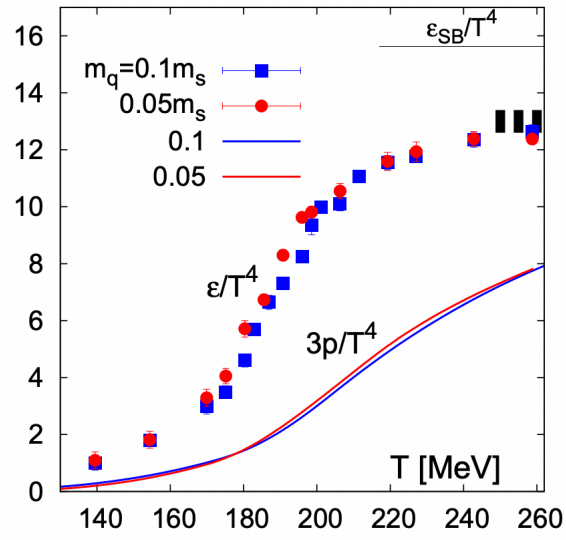


図 12: 状態方程式。

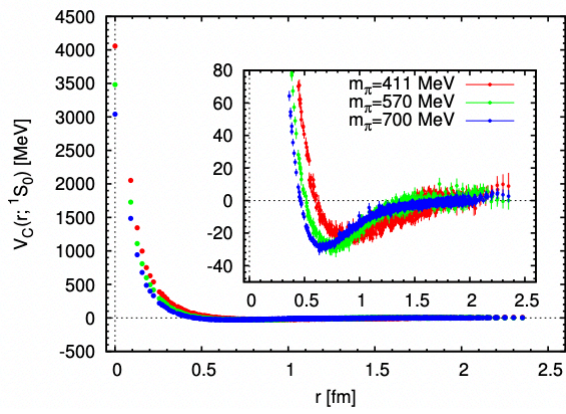


図 13: 核子間のポテンシャル。

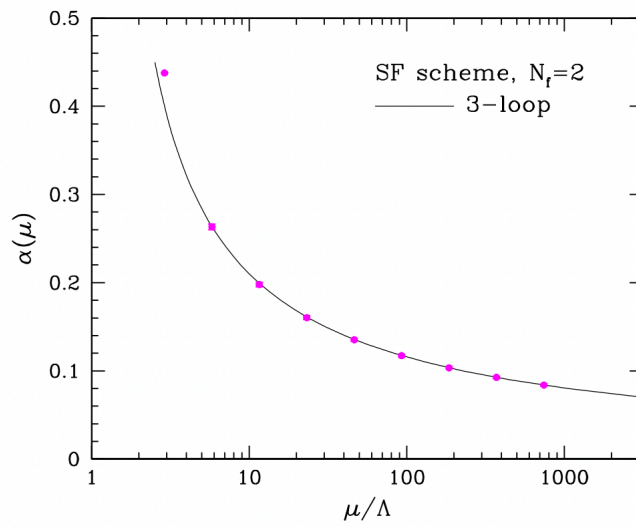


図 14: 強い力の結合定数のランニング。

13 格子 QCD の実践

最後に Julia で実装された格子 QCD コードである `LatticeQCD.jl` の一番簡単な使い方を紹介する。これで本格的な格子 QCD の計算が可能になる。詳しい使い方は、<https://github.com/akio-tomiya/LatticeQCD.jl> を参照のこと。

なおオープンソースのソフトで、コントリビューターは常に募集しています! 使った研究報告も待っています。

13.1 LatticeQCD.jl の準備

Julia 言語の実行環境がインストール済であることを前提に、Julia 言語で実装された Lattice QCD のコードである `LatticeQCD.jl` を用いて計算を行ってみる。

Julia 言語の実行環境のインストールは、

1. Windows, Linux: <https://qiita.com/ttabata/items/b05bb43d06239f968035>
2. mac: <https://www.geidai.ac.jp/~marui/julialang/misc/node1.html>

などを参考のこと⁶¹。

インストールは、

```
julia> import Pkg; Pkg.add("LatticeQCD")
```

で完了する。(もし上手く行かない場合は、“`]`” キーを押してパッケージモードにして、“`update LatticeQCD`” を実行すれば良い。)

13.2 LatticeQCD.jl での計算

```
julia> using LatticeQCD
```

設定ファイルを作成するために以下のコマンドを REPL に入力する。

```
julia> run_wizard()
```

すると、パラメータ作成ウィザードが起動する。ウィザードはシンプルモードとエキスパートモードがある。エキスパートモードを使うとより詳細な設定ができるが、今はシンプルモードでとりあえずパラメータファイルを作ってみよう。

```
> simple
```

でエンターキーを連打する。するとパラメータファイルが作成される。

設定ファイルは、“`my_parameters.toml`” という名前で保存される。設定ファイルはもちろん人間が手で書き換えても良い。

以下は設定ファイル“`my_parameters.toml`” を使った HMC と測定の実行を行うコマンドで、およそ 3 分程で終わる。

```
julia> run_LQCD("my_parameters.toml")
```

SU(3)、Wilson plaquette 作用、Wilson フェルミオンの HMC が走る。

プラケットの値、Polyakov loop、そしてパイ中間子の相関関数 (パイ中間子の質量の情報を含む)

⁶¹ スプリングスクールでは、Julia の講義があるので、すでにインストールしている者も多いと想定している。

Julia のインタラクティブモードは、“exit()”で抜けることができる⁶²。

この他、Daniel Hacket 氏が紹介してくれる Flow based sampling algorithm を実装した GormalizingFlow.jl もある [14]。

14 まとめ

この講義では以下を学んだ

1. 格子化すると場の理論も多重積分として理解できる・定義できる
2. 格子ゲージ理論は定義である
3. HMC を使うと場の量子論の期待値が計算できる

今回の講義では多くのことをカバーできなかった。この講義を踏み台に、発展的な教科書を読むとより理解が深まると信じている。

格子QCDの教科書については、https://zenn.dev/akio_tomiya/articles/3cfcae48182408を参照してください。

⁶²ターミナルで動作するアプリを使う場合には、必ず終了法を抑えておく必要がある。たとえば、vimなどは学生の頃うっかり起動して困ったことがある。

Part III
付録

A 格子上のクォーク

ここでは格子上のフェルミオンについて紹介する。格子上のフェルミオンは難しく、この講義時間だけではとても取り扱えないので、様子を簡単に見ていく。

フェルミオンはフェルミディラック統計に従うスピン1/2の粒子であり、

$$\{\psi(\mathbf{x}, t), \psi^\dagger(\mathbf{x}', t)\} = \psi(\mathbf{x}, t)\psi^\dagger(\mathbf{x}', t) + \psi^\dagger(\mathbf{x}', t)\psi(\mathbf{x}, t) = i\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (311)$$

という反交換関係で量子化される。

相対論的場の理論では、

$$S = \int d^4x \bar{\psi}(i\mathcal{D} - m)\psi \quad (312)$$

という作用で書かれ、また

$$\mathcal{D} = \gamma^\mu(\partial_\mu - igA_\mu) \quad (313)$$

は共変微分で、フェルミオンの伝播とゲージ場(グルーオン)とフェルミオン(クォーク)の相互作用を表す。またゲージ対称性を保つためにも必要な構造である。

虚時間では、

$$S = \int d^4x \bar{\psi}(\mathcal{D} + m)\psi \quad (314)$$

の様になり、経路積分は、

$$Z[A] = \int \mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-S} \quad (315)$$

となる。反交換するという性質と双線形であることから経路積分は A の関数として実行することができ、

$$Z[A] = \text{Det}(\mathcal{D} + m) \quad (316)$$

となる。ここで Det は汎関数行列式である。ガウス積分が $\int dx e^{-a^2x^2} = 1/a$ と逆数ができるのとは対称的な性質である。 $\text{Det}(\mathcal{D} + m)$ の意味であるが、 $\mathcal{D} + m$ はゲージ場の配位(形)に依存した演算子であり、固有値をもつ。(汎関数)行列式は固有値を全て掛けたものであるので、今の $\text{Det}(\mathcal{D} + m)$ も同様である。

A.1 ダブリング問題

ここからはゲージ場がなく、フェルミオンだけの場合を考えていく。つまり

$$S = \int d^4x \bar{\psi}(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi \quad (317)$$

を考える。フェルミオンの微分は $\partial_\mu \psi(x)$ だったのでナイーブには、

$$\partial_\mu \psi(x) \Rightarrow \frac{\psi(na + a\hat{\mu}) - \psi(na - a\hat{\mu})}{2a} \quad (318)$$

と離散化すれば良さそうであるのでこれを少し考えてみよう。

簡単のために1次元の問題で考える。つまり

$$\hat{\partial}^{\text{na}}\chi(n) = \frac{\chi(n+1) - \chi(n-1)}{2} \quad (319)$$

として、

$$S = \sum_n \bar{\chi}(n) \hat{\partial}^{\text{na}}\chi(n), \quad (320)$$

$$= \sum_n \bar{\chi}(n) \frac{\chi(n+1) - \chi(n-1)}{2}, \quad (321)$$

を考察する。ただし $\chi(n)$ は1成分の複素グラスマン数である。
フーリエ変換

$$\chi(n) = \int_{\Omega} \frac{dp}{2\pi} e^{i\hat{p}n} \chi(p) \quad (322)$$

ただし Ω は後で考察する積分領域、を行って、

$$S = \sum_n \int_{\Omega} \frac{dq}{2\pi} \int_{\Omega} \frac{dp}{2\pi} \bar{\chi}(q) e^{-i\hat{q}n} \frac{e^{i\hat{p}n} e^{i\hat{p}} \chi(p) - e^{i\hat{p}n} e^{-i\hat{p}} \chi(p)}{2}, \quad (323)$$

$$= \int_{\Omega} \frac{dp}{2\pi} \bar{\chi}(p) \frac{e^{i\hat{p}} - e^{-i\hat{p}}}{2} \chi(p) = \int_{\Omega} \frac{dp}{2\pi} \bar{\chi}(p) i \sin(\hat{p}) \chi(p), \quad (324)$$

となる。比較のために書いておくと連続理論では、

$$S^{\text{cnt}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} \bar{\chi}(-p) i p \chi(p), \quad (325)$$

となる。つまり運動量が p から $\sin(\hat{p}) = \sin(pa)$ と周期関数になってしまう。さて、ここで積分領域 Ω について考えてみる。これは a を復活させて見てみると $\Omega = [-\pi/a, \pi/a]$ となることがわかる。 $a \rightarrow 0$ の極限では $-\infty$ から ∞ になるが、一方で格子上では有限区間になる。

この端の点が問題を起こす。作用の $\bar{\chi}(\dots)\chi$ の (\dots) の逆数がプロパゲーターに対応し、プロパゲーターの極が(質量殻上の物理的な)粒子に対応しているのだった。 p も $\sin(pa)$ も $p=0$ で0になっているのでこれは、物理的な粒子に対応している。一方で $\sin(pa)$ は、 $p = \pm\pi/a$ のどちらかでも0になる。つまり余計に粒子的な寄与が出てきている。

これは4次元では、

$$\bar{\psi} \gamma_{\mu} \partial_{\mu} \psi(x) \Rightarrow \bar{\psi} \gamma_{\mu} i \sin(\hat{p}_{\mu}) \psi(x) \quad (326)$$

となっていることに対応し、 $\hat{p}_{\mu} = (0, 0, 0, 0)$ だけでなく、

$$\hat{p}_{\mu} = (0, 0, 0, \pi), (0, 0, \pi, 0), (0, 0, \pi, \pi), \quad (327)$$

$$(0, \pi, 0, 0), (0, \pi, 0, \pi), (0, \pi, \pi, 0), (0, \pi, \pi, \pi), \quad (328)$$

$$(\pi, 0, 0, 0), (\pi, 0, 0, \pi), (\pi, 0, \pi, 0), (\pi, 0, \pi, \pi), \quad (329)$$

$$(\pi, \pi, 0, 0), (\pi, \pi, 0, \pi), (\pi, \pi, \pi, 0), (\pi, \pi, \pi, \pi), \quad (330)$$

の15個、計 $2^4 = 16$ 個の粒子的な寄与があることになる。この問題の事をダブリング問題といい、余計な自由度をダブルという。

詳細は省くが、格子フェルミオン作用が

1. エルミート性を持つ
2. 双線形形式
3. 局所的
4. 格子上の並進対称性を持つ
5. 連続理論と同じカイラル対称性を持つ

を満たすときダブラーは避けられない事が知られている。これを**ニールセン二宮の定理**という。中でもカイラル対称性は重要な事項である。なぜなら QCD のダイナミクスはパイ中間子の軽さに依っている部分も多く、さらにパイ中間子が軽いのはクォークが良い近似でカイラル対称性を持っているからである。

A.2 さまざまな定式化。メリット・デメリット

Dirac operator	Chiral sym?	Cost	Discretization error
Wilson	No	<i>Baseline</i>	$O(a)$
Staggered	Partial	Cheap	$O(a^2)$
Domain-wall	Precise	expensive	$O(a^2)$
Overlap	exact*	super expensive	$O(a^2)$

表 1: * exact とは、格子上のカイラル対称性という意味である。格子上で $O(a)$ だけ連続極限と異なるカイラル対称性の定義を構成できさらに作用がその対称性に対して完全に不変にすることができる。この改変されたカイラル対称性の式は、Ginsparg-Wilson 関係式と呼ばれている。

特に一番標準的な Wilson fermion について説明する。まず 1 階微分を差分化しただけのディラック演算子は、

$$M_{n,n'}^{\text{Naive}} = \sum_{\mu=1}^4 \frac{1}{2} \gamma_{\mu} \left[\delta_{n+\hat{\mu},n'} - \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right] + \hat{m} \delta_{nn'}, \quad (331)$$

である。そして $M_{n,n'}^{\text{Naive}}$ はナイーブなフェルミオンと呼ばれることがある。

ダブラーを取り除くため、higher dimensional operator として 2 階微分項を手で加たい。係数は、 r であるがよく 1 に取られ、その項は、

$$M_{n,n'}^{2\text{nd}} = -a \frac{r}{2} \sum_{\mu=1}^4 \left[\delta_{n+\hat{\mu},n'} + \delta_{n-\hat{\mu},n'} - 2\delta_{n,n'} \right], \quad (332)$$

$$= -\frac{r}{2} \sum_{\mu=1}^4 \left[\delta_{n+\hat{\mu},n'} + \delta_{n-\hat{\mu},n'} - 2\delta_{n,n'} \right], \quad (333)$$

である。2 行目では、 a を r に吸収させた。

すると全体のディラック演算子は、

$$M_{n,n'}^{\text{W}} = M_{n,n'}^{\text{Naive}} + M_{n,n'}^{2\text{nd}}, \quad (334)$$

$$= \sum_{\mu=1}^4 \frac{1}{2} \gamma_{\mu} \left[\delta_{n+\hat{\mu},n'} - \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right] - \frac{r}{2} \sum_{\mu=1}^4 \left[\delta_{n+\hat{\mu},n'} + \delta_{n-\hat{\mu},n'} - 2\delta_{n,n'} \right] + \hat{m} \delta_{nn'}, \quad (335)$$

$$= \sum_{\mu=1}^4 \frac{1}{2} \gamma_{\mu} \left[\delta_{n+\hat{\mu},n'} - \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right] - \frac{r}{2} \sum_{\mu=1}^4 \left[\delta_{n+\hat{\mu},n'} + \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right] + (\hat{m} + 4r) \delta_{nn'}, \quad (336)$$

$$= \sum_{\mu=1}^4 \frac{1}{2} \left[\gamma_{\mu} \delta_{n+\hat{\mu},n'} - \gamma_{\mu} \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right] + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^4 \left[-r \delta_{n+\hat{\mu},n'} - r \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right] + (\hat{m} + 4r) \delta_{nn'}, \quad (337)$$

$$= - \sum_{\mu=1}^4 \frac{1}{2} \left[(r - \gamma_{\mu}) \delta_{n+\hat{\mu},n'} + (r + \gamma_{\mu}) \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right] + (\hat{m} + 4r) \delta_{nn'}. \quad (338)$$

となる。これを**ウィルソンフェルミオン (Wilson fermions)** とよぶ。

このフェルミオンはカイラル対称性を持たない。なぜなら

$$\{\gamma_5, M_{n,n'}^{2\text{nd}}\} \neq 0. \quad (339)$$

となるからである。

作用は、

$$S^{\text{W}} = \sum_n \sum_{n'} \bar{\psi}(n) M_{n,n'}^{\text{W}} \psi(n'). \quad (340)$$

と書ける。よく質量などをくくりだした形が使われる。すなわち、

$$\psi = \sqrt{2\kappa} \Psi \quad (341)$$

とリスケールする。ただし $2\kappa = 1/(\hat{m} + 4r)$ とした。このとき、

$$S^{\text{W}} = \sum_n \sum_{n'} 2\kappa \bar{\Psi}(n) M_{n,n'}^{\text{W}} \Psi(n'), \quad (342)$$

$$= \sum_n \sum_{n'} \bar{\Psi}(n) W_{n,n'} \Psi(n'). \quad (343)$$

ただし、

$$W_{n,n'} = -2\kappa \sum_{\mu=1}^4 \frac{1}{2} \left[(r - \gamma_{\mu}) \delta_{n+\hat{\mu},n'} + (r + \gamma_{\mu}) \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right] + 2\kappa (\hat{m} + 4r) \delta_{nn'}, \quad (344)$$

$$= \delta_{nn'} - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \left[(r - \gamma_{\mu}) \delta_{n+\hat{\mu},n'} + (r + \gamma_{\mu}) \delta_{n-\hat{\mu},n'} \right]. \quad (345)$$

である。この κ は**ホッピングパラメータ (hopping parameter)** と呼ばれる。

A.3 経路積分とクエンチ近似

アップクォークとダウクォークをまとめてライトクォークとよぶ。 $m_{\ell} = (m_{\text{up}} + m_{\text{down}})/2$ として、

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-2 \sum_n \bar{\psi} (D_{\text{W}} + m_{\ell}) \psi(n)} = \det(D_{\text{W}} + m_{\ell})^2 \quad (346)$$

とできる。

するとゲージ場を含めた全体の経路積分は

$$Z = \int \mathcal{D}U e^{-S_g} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-2 \sum_n \bar{\psi} (D_W + m_\ell) \psi(n)}, \quad (347)$$

$$= \int \mathcal{D}U e^{-S_g} \det(D_W + m_\ell)^2 \quad (348)$$

となる。すなわち、あるゲージ場 U の生成確率は、

$$P[U] = \frac{1}{Z} e^{-S_g} \det(D_W + m_\ell)^2 \quad (349)$$

となる。これを HMC などのアルゴリズムに従って生成すればよい。

B a の求め方

ここでは格子間隔 a [fm] の物理的な大きさどうやって決めるかを述べる。これを**スケールセッティング**と言う。次元のある物理量、たとえば静止している距離 r [fm] だけ離れた2つのクォーク間のポテンシャル力 $F(r)$ を考えてみる (この次元は2である)。これは例えば $F(r) \propto 1/r^2$ という形である。これは加速器などの実験で決定することができる。例えばボトムクォークの束縛状態の質量を同定し、非相対論的なシュレーディンガー方程式の固有値と比較することでポテンシャルの関数形を決めることができる。

次元のある物理量 $F(r)$ と物理的な長さ r を使うと無次元な量を作ることが出来る。例えば $r^2 F(r)$ である。これは r のみの関数であるが無次元である。すると、 $r^2 F(r)|_{r=r_0} = 1.65$ をみたく r_0 [fm] という大きさが決めることができる。これは実験から、 $r_0 \approx 0.5$ [fm] とわかっている。これを**ゾンマースケール (Sommer scale)** という。

一方で、クォークが起こす真空偏極を無視した格子 QCD を考える (つまりクエンチ QCD)。すると計算に入力するパラメータは β のみである。全ての期待値は、 β の関数として書けることになる。ここではある β を1つ固定しよう。

このセットアップで格子 QCD でクォークポテンシャルを計算すると⁶³、無次元化した距離を \hat{r} として、

$$\hat{V}(\hat{r}) = aV(r/a) = f(\hat{r}, \beta) \quad (350)$$

と計算される。ここで $f(\hat{r}, \beta)$ は何らかのフィットした関数で β に依存する。たとえば、

$$\hat{V}(\hat{r}) = \frac{c_1(\beta)}{\hat{r}} + \hat{\sigma}(\beta) \hat{r} \quad (351)$$

と決まったとしよう。係数は β に依存するため、明示的に書いた。

これを r で微分すると力になり、

$$\hat{F}^{(\text{lat})}(\hat{r}) = -\frac{\partial}{\partial \hat{r}} \hat{V}(\hat{r}) = -\frac{\partial}{\partial \hat{r}} f(\hat{r}, \beta) \quad (352)$$

となる。具体例では、

$$\hat{F}^{(\text{lat})}(\hat{r}) = \frac{c_1(\beta)}{\hat{r}^2} - \hat{\sigma}(\beta) \quad (353)$$

⁶³ このポテンシャル自身は、Polyakov loop 相関関数や、Wilson loop の期待値から計算できる。

となる。

そして \hat{r}^2 をかけると、

$$\hat{r}^2 \hat{F}^{(\text{lat})}(\hat{r}) = -\hat{r}^2 \frac{\partial}{\partial \hat{r}} f(\hat{r}, \beta) \quad (354)$$

具体例では、

$$\hat{r}^2 \hat{F}^{(\text{lat})}(\hat{r}) = c_1(\beta) - \hat{r}^2 \hat{\sigma}(\beta) \quad (355)$$

となる。右辺は β を決めると値が決まる β のみの関数である。これが 1.65 になる \hat{r} を $\hat{r}_0^{\text{lat}}(\beta)$ と呼ぼう。 $\hat{r}_0^{\text{lat}}(\beta)$ は (例えば) 5.0 などの次元のないただの数である。いま $\hat{r}_0^{\text{lat}}(\beta)$ は β のみに依存するため β の関数として書いた。

ここまで来ると、実験から決めた $r_0 \approx 0.5$ [fm] と比較すると、 a [fm] を決定することができる。

$$\hat{r}_0^{\text{lat}}(\beta) \stackrel{!}{=} \frac{r_0}{a} \approx \frac{0.5 \text{ [fm]}}{a(\beta) \text{ [fm]}} \quad (356)$$

最初の等式は、格子 QCD が現実の実験を説明する理論であることから成立する。すなわち、ある β での格子間隔 a [fm] は、

$$a(\beta) \text{ [fm]} = \frac{0.5 \text{ [fm]}}{\hat{r}_0^{\text{lat}}(\beta)} \quad (357)$$

と推定される。ここでは、格子間隔の同定という意味で \approx でなく $=$ で書いた。 $\hat{r}_0^{\text{lat}}(\beta)$ が、例えば 5.0 であった場合には $a(\beta) \text{ [fm]} = 0.1 \text{ [fm]}$ とわかる。このようにして a が β の関数として決定できる。

たとえば [15] によると、クエンチ QCD の場合は、表 2 であった。さらに彼らは、 $5.7 \leq \beta \leq 6.92$ で

$$\ln(a/r_0) = -1.6804 - 1.7331(\beta - 6) + 0.7849(\beta - 6)^2 - 0.4428(\beta - 6)^3 \quad (358)$$

という内挿式をえた。これと $r_0 \approx 0.5$ fm という値を使うと、 $a(\beta)$ が分かることになる。この表をみると、 $\beta = 6.0$ の Wilson plaquette 作用での計算は、だいたい $a \approx 0.1$ fm、 $\hbar c \approx 197$ fm MeV を使ってカットオフになおすと、 $1/a \approx 2$ GeV となる。パイ中間子の質量が 140 MeV 程度や $\Lambda_{\text{QCD}} \approx 200$ MeV だと思えば、大きいカットオフとも言える。

β	r_0/a
5.7	2.922(9)
5.8	3.673(5)
5.95	4.898(12)
6.07	6.033(17)
6.2	7.380(26)
6.4	9.74(5)

表 2: [15] から引用。

実際には、クォークの偏極効果 (ループ効果) をも取り込んだ計算で a は求められており、様々なセットアップでのスケールはわかっている。

実際問題としては、物理量は別にクォークポテンシャルである必要はない。物理量の選定としては、計算コストや体積依存性、クォーク質量依存性等が問題となる。つまり計算コスト、体積依存性、クォーク質量依存性等が無い物理量が好ましい。近年は、**グラディエントフロー**により平滑化したエネルギー密度がよく使われている。

C 統計誤差の解析

ここではジャックナイフ法を紹介する。一般論は教科書を参照してもらうことにして、ここでは具体例で見ていくことにする。

同じ体積、同じ β で測定した6個のデータがあるとする。

$$\mathcal{D} = \{O_1, O_2, O_3, O_4, O_5, O_6\} \quad (359)$$

1つのサンプルは1つのゲージ配位で測った物理量で、 O は例えばプラケットなどである。この時、中心値(平均値で計算する)

$$\bar{O} = \frac{1}{6} \sum_{i=1}^6 O_i \quad (360)$$

と標準誤差は、

$$\delta O = \sqrt{\frac{1}{6-1} (\overline{O^2} - \bar{O}^2)} \quad (361)$$

と評価される。しかしこれは各データが iid であることを仮定している。また誤差の伝播則で計算するため、煩雑である。また自己相関が大きい場合、統計誤差を過小評価してしまう。それらを解消する1つの手法がジャックナイフ法である。

C.1 $N_b = 1$ のジャックナイフ

以下のように6個のジャックナイフサンプルの元データを作成する。

$$\mathcal{D}_1 = \{\check{O}_1, O_2, O_3, O_4, O_5, O_6\}, \quad (362)$$

$$\mathcal{D}_2 = \{O_1, \check{O}_2, O_3, O_4, O_5, O_6\}, \quad (363)$$

$$\mathcal{D}_3 = \{O_1, O_2, \check{O}_3, O_4, O_5, O_6\}, \quad (364)$$

$$\mathcal{D}_4 = \{O_1, O_2, O_3, \check{O}_4, O_5, O_6\}, \quad (365)$$

$$\mathcal{D}_5 = \{O_1, O_2, O_3, O_4, \check{O}_5, O_6\}, \quad (366)$$

$$\mathcal{D}_6 = \{O_1, O_2, O_3, O_4, O_5, \check{O}_6\}, \quad (367)$$

ただし \check{O}_k は k 番目のデータを除くという意味である。そしてジャックナイフサンプルを作成する。

$$J_k = \frac{1}{6-1} \sum_{O \in \mathcal{D}_k} O \quad (368)$$

つまり、 k 番目を除いた平均になる。これらは、平均されていることから、ゆらぎの少ないデータセット

$$\{J_1, J_2, J_3, J_4, J_5, J_6\} \quad (369)$$

をなす。

ある操作 $f(J)$ によって物理量が別の量に変換されたとする。このときの平均値は、

$$\overline{f(J)} = \frac{1}{6} \sum_{j=1}^6 f(J_j) \quad (370)$$

となり誤差は、

$$\delta f(J) = \sqrt{(6-1)\left(\overline{f^2(J)} - \overline{f(J)}^2\right)} \quad (371)$$

となる。ここで、 $f(\cdot)$ を恒等変換に選ぶと通常の誤差評価と同じことが分かる。また恒等変換出ない場合にも自動的に誤差の伝播が行われていることが分かる。

C.2 $N_b = 2$ のジャックナイフ

以下のように $6/N_b = 3$ 個のジャックナイフサンプルの元データを作成する。

$$\mathcal{D}_1 = \{\check{O}_1, \check{O}_2, O_3, O_4, O_5, O_6\}, \quad (372)$$

$$\mathcal{D}_2 = \{O_1, O_2, \check{O}_3, \check{O}_4, O_5, O_6\}, \quad (373)$$

$$\mathcal{D}_3 = \{O_1, O_2, O_3, O_4, \check{O}_5, \check{O}_6\}, \quad (374)$$

ただし \check{O}_k は先程とおなじく k 番目のデータを除くという意味である。そしてジャックナイフサンプルを作成する。

$$J_k = \frac{1}{6-2} \sum_{O \in \mathcal{D}_k} O \quad (375)$$

これらは、平均されていることから、ゆらぎの少ないデータセット

$$\{J_1, J_2, J_3\} \quad (376)$$

をなす。

ある操作 $f(J)$ によって物理量が別の量に変換されたとする。このときの平均値は、

$$\overline{f(J)} = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 f(J_j) \quad (377)$$

となり誤差は、

$$\delta f(J) = \sqrt{(3-1)\left(\overline{f^2(J)} - \overline{f(J)}^2\right)} \quad (378)$$

となる。

C.3 一般の N_b のジャックナイフ

同じ体積、同じ β で測定した N_{dat} 個のデータがあるとする。

$$\mathcal{D} = \{O_1, O_2, \dots, O_{N_{\text{dat}}}\} \quad (379)$$

ただし、 N_{dat} は、 N_b の倍数であるとする。

以下のように N_{dat}/N_b 個のジャックナイフサンプルの元データを作成する。

$$\mathcal{D}_1 = \{\overbrace{\check{O}_1, \check{O}_2, \dots, \check{O}_{N_b}}^{N_b \text{ 個}}, O_{N_b+1}, O_{N_b+2}, \dots, O_{2N_b}, O_{2N_b+1}, \dots, O_{N_{\text{dat}}}\}, \quad (380)$$

$$\mathcal{D}_2 = \{O_1, O_2, \dots, O_{N_b}, \overbrace{\check{O}_{N_b+1}, \check{O}_{N_b+2}, \dots, \check{O}_{2N_b}}^{N_b \text{ 個}}, O_{2N_b+1}, \dots, O_{N_{\text{dat}}}\}, \quad (381)$$

$$\vdots$$

$$\mathcal{D}_{N_{\text{JK}}} \quad (382)$$

ただし \check{O}_k は先程とおなじく k 番目のデータを除くという意味である。また $N_{\text{JK}} = N_{\text{dat}}/N_b \in \mathbb{N}$ である。そしてジャックナイフサンプルを作成する。

$$J_k = \frac{1}{N_{\text{dat}} - N_b} \sum_{O \in \mathcal{D}_k} O \quad (383)$$

これらは、平均されていることから、ゆらぎの少ないデータセット

$$\{J_1, J_2, J_3, \dots, J_{N_{\text{JK}}}\} \quad (384)$$

をなす。

ある操作 $f(J)$ によって物理量が別の量に変換されたとする。このときの平均値は、

$$\overline{f(J)} = \frac{1}{N_{\text{JK}}} \sum_{j=1}^{N_{\text{JK}}} f(J_j) \quad (385)$$

となり誤差は、

$$\delta f(J) = \sqrt{(N_{\text{JK}} - 1) \left(\overline{f^2(J)} - \overline{f(J)}^2 \right)} \quad (386)$$

となる。

自己相関時間を τ_{ac} とする。そして N_b を 1 から順に大きくしていくことを考える。すると、 $N_b > 2\tau_{ac}$ となると、統計誤差は一定に落ち着く。このためジャックナイフ法を用いると自己相関を見積もることが出来る。また逆に $N_b > 2\tau_{ac}$ ならば自己相関を含めた誤差評価が可能である。このためジャックナイフ法は格子 QCD の計算でよく使われる。経験的に $N_{\text{JK}} \gtrsim 10$ が用いられる。

Index

- β 関数, 40
- \mathbb{Z}_2 ゲージ理論, 27
- 1次元イジング模型, 23

- Acceptance rate, 49

- Callan-Symanzik equation, 40
- Campbell-Baker-Housedorff 公式, 36
- Canonical quantization, 7

- detailed balance, 48
- dimensional transmutation, 42

- electro-magnetism in the vacuum, 29
- Elitur's theorem, 15
- Euclidian field theory, 18

- field theory, 8
- flavor physics, 57

- gauge field, 8
- gauge invariance, 28
- Green's function, 9

- Haar measure, 33
- Hadron mass, 56
- Hamiltonian Monte-Carlo, 50
- Heisenberg equation, 7
- Heisenberg picture, 7
- HMC, 50
- HMC ハミルトニアン, 51
- hopping parameter, 65
- Hybrid Monte-Carlo, 50

- iid, 47
- independently and identically distributed, 47

- LatticeQCD.jl, 59
- leapfrog, 53

- Markov Chain Monte-Carlo method, 47
- MCMC, 47
- MD, 51
- Metropolis method, 49
- Metropolis-Hastings, 49
- Molecular dynamics, 51
- Monte-Carlo method, 47

- Nuclear force, 57

- plaquette, 30

- QCD, 11
- QCD equation of state, 56
- QCD vacuum, 11
- QCD の基底状態, 11
- QCD 状態方程式, 56
- QED, 11
- Quantum Chromo-Dynamics, 11
- Quantum Electro-Dynamics, 11

- renormalization group, 24

- scalar field, 8
- Schrödinger equation, 7
- Sommer scale, 66
- source term, 10
- standard model, 10
- strong coupling constant, 57
- SU(2), 22
- SU(3), 23
- Susskind lattice, 16

- trapezoidal method, 45

- U(1) plaquette action, 30
- U(1) プラケット作用, 30

- vacuum poralization, 39

- Wilson fermions, 65
- Wilson loop operator, 30
- Wilson loop 演算子, 30
- Wilson plaquette action, 34
- Wilson プラケット作用, 34

- Yang-Mills action, 38
- Yang-Mills 作用, 38

- くりこみ群, 24
- アーベル群, 21
- イジングゲージ理論, 27
- イジング模型, 23
- ウィルソンフェルミオン, 65
- エリツァーの定理, 15
- キャラン・シマンチック方程式, 40
- クエンチ QCD, 42
- クエンチ近似, 42
- クォーク, 14

グラディエントフロー, 67
グリーン関数, 9
ゲルマン行列, 23
ゲージ不変性, 28
ゲージ場, 8, 29
ゲージ変換, 29
サスカインド格子, 16
シュレーディンガー方程式, 7
ジャックナイフ法, 68
スカラー場, 8
スケールアノマリー, 42
スケールセッティング, 66
スケール不変性, 42
ソース項, 10
ゾンマースケール, 66
ニールセン二宮の定理, 64
ハイゼンベルク描像, 7
ハドロン, 14
ハドロン質量, 56
ハール測度, 33
バリオン, 14
パウリ行列, 22
フォース, 52
フレーバー関連の量, 57
プラケット, 30, 34
ホッピングパラメータ, 65
マルコフ連鎖モンテカルロ法, 47
メソン, 14
メトロポリス・ヘイスティングス法, 49
メトロポリス法, 49
モンテカルロ法, 47
ユークリッド作用の場の理論, 18
ラムダ QCD, 42
リープフロッグ, 53
リープフロッグ法, 52, 53
リー群, 21
レプトン, 14

分子動力学法, 51
受容確率, 49
古典スピン模型, 23
古典場, 8
古典的な連続極限, 39
可換群, 21
台形則, 45
同時刻交換関係, 9, 17
場の理論, 8
弱い力, 14
強い力, 14

強い力の結合定数, 57
摂動論, 11
格子上のスカラー理論, 20
次元転移, 42
正準量子化, 7, 9
漸近級数, 11
漸近自由性, 41

真空の電磁気学的作用, 29
真空偏極効果, 39
素粒子標準模型, 10
経路積分量子化, 8, 9
群論, 21

臨界減速, 56
自然単位系, 14
虚時間, 18
虚時間形式, 18
詳細釣り合い条件, 48

連続群, 21
量子スピン系, 24
量子ハイゼンベルク模型, 24
量子色力学, 11
量子論的な連続極限, 39
量子電気力学, 11
電弱力, 14
電磁場, 8
電磁気力, 14
非アーベル群, 21
非可換群, 21

References

- [1] Tatsumi Aoyama, Toichiro Kinoshita, and Makiko Nio. Revised and Improved Value of the QED Tenth-Order Electron Anomalous Magnetic Moment. *Phys. Rev. D*, 97(3):036001, 2018.
- [2] Centre for the Subatomic Structure of Matter (CSSM) and 5005 Australia Department of Physics, University of Adelaide. Visualizations of quantum chromodynamics, 2003, 2004. <http://www.physics.adelaide.edu.au/theory/staff/leinweber/VisualQCD/QCDvacuum/>.
- [3] Makoto Kikuchi. Rg for 1d ising model, 1999. http://www.cp.cmc.osaka-u.ac.jp/~kikuchi/texts/RG_1.pdf.
- [4] F. J. Wegner. Duality in Generalized Ising Models and Phase Transitions Without Local Order Parameters. *J. Math. Phys.*, 12:2259–2272, 1971.
- [5] Kenneth G. Wilson. Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, 10:2445–2459, Oct 1974.
- [6] Simon Duane, A.D. Kennedy, Brian J. Pendleton, and Duncan Roweth. Hybrid monte carlo. *Physics Letters B*, 195(2):216 – 222, 1987.
- [7] Michael Creutz. Monte carlo study of quantized su(2) gauge theory. *Phys. Rev. D*, 21:2308–2315, Apr 1980.
- [8] S. Durr et al. Ab-Initio Determination of Light Hadron Masses. *Science*, 322:1224–1227, 2008.
- [9] M. Cheng et al. Equation of State for physical quark masses. *Phys. Rev. D*, 81:054504, 2010.
- [10] Sinya Aoki and Takumi Doi. Lattice QCD and baryon-baryon interactions: HAL QCD method. *Front. in Phys.*, 8:307, 2020.
- [11] Michele Della Morte, Roberto Frezzotti, Jochen Heitger, Juri Rolf, Rainer Sommer, and Ulli Wolff. Computation of the strong coupling in QCD with two dynamical flavors. *Nucl. Phys. B*, 713:378–406, 2005.
- [12] Y. Aoki et al. FLAG Review 2021. *Eur. Phys. J. C*, 82(10):869, 2022.
- [13] Lattice. Proceedings of lattice conference, 2005-2022. <https://pos.sissa.it/cgi-bin/reader/family.cgi?code=lattice>.
- [14] Satoshi Terasaki Akio Tomiya. Gomalizingflow.jl, 2022. <https://github.com/AtelierArith/GomalizingFlow.jl>.
- [15] Silvia Necco and Rainer Sommer. The $N(f) = 0$ heavy quark potential from short to intermediate distances. *Nucl. Phys. B*, 622:328–346, 2002.