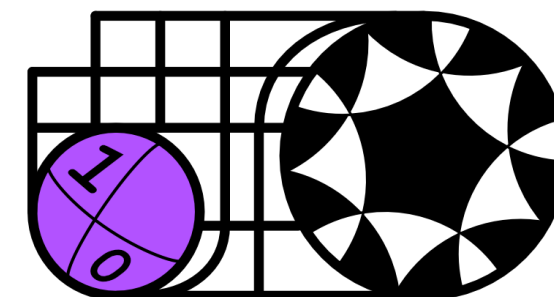


QCDと第一原理計算(その1)

京都大学 基礎物理学研究所 伊藤 悦子



計算物理春の学校 2024@ 沖縄県市町村自治会館 2024年3月15日

自己紹介

- 名古屋市出身 (向陽高等学校)
大阪大学(学部, 大学院)
- 今年度4月から「基礎物理学研究所」
1949年 湯川秀樹がノーベル賞を受賞したのを記念して1952年に設立
- 素粒子論グループ
 - 理論(hep-th): 超弦理論, 量子重力, 場の理論
(現実と関係なくてもいい)
 - 現象論(hep-ph): 加速器実験結果を説明・予言
 - 格子理論(hep-lat): 数値計算を用いて理論の解析



歴代所長一覧 [編集]

代	氏名	在任時期	専門分野	備考
初代	湯川秀樹	1950年5月 1日 - 1970年3月31日	素粒子論	
第2代	牧二郎	1970年4月 1日 - 1976年3月31日	素粒子論	
第3代	佐藤文隆	1976年4月 1日 - 1980年3月31日	宇宙論・相対論	
第4代	牧二郎	1980年4月 1日 - 1986年3月31日	素粒子論	再任
第5代	西島和彦	1986年4月 1日 - 1990年3月31日	素粒子論	
第6代	長岡洋介	1990年4月 1日 - 1997年3月31日	物性理論	
第7代	益川敏英	1997年4月 1日 - 2003年3月31日	素粒子論	
第8代	九後汰一郎	2003年4月 1日 - 2007年3月31日	素粒子論	
第9代	江口徹	2007年4月 1日 - 2011年3月31日	素粒子論	
第10代	九後汰一郎	2011年4月 1日 - 2013年3月31日	素粒子論	再任
第11代	佐々木節	2013年4月 1日 - 2017年3月31日	宇宙論・相対論	
第12代	青木愼也	2017年4月 1日 - 現職	素粒子論	

Wikipediaより

講義の目的

- 全体の雰囲気、重要な基本事項を伝えるのが目的
(普通素粒子論を専攻してM1の終わりくらいでやっとQCDの勉強を始めるくらい。
3時間では無理なので、本気でやるには是非、素粒子論を専攻してください!)
- **ハンズオンはありません**
公開されているシミュレーションコード
Bridge++ (by C++) : KEKの松古さんたちを中心に作られた汎用コード
Lattice tool kit (by fortran) : 元広島大学の中村さんを中心に作られた, MPIに対応
LatticeQCD.jl (by Julia) : 富谷くんを中心に作られた
(実際にスパコン富岳等で使われているのは高度のチューニングされたfortran)
- 私が研究で実際に作った・使ったコード一覧は [こちら](#)
(著作権の問題で公開にはしていません. 研究したいから使いたいという人がいれば応相談)

目次

1. QCD(量子色力学)とは？
2. 古典計算のアルゴリズム
擬熱浴法, Hybrid Monte Carlo, (Rational HMC)
3. 色々な物理量の測定法
(プラケット、閉じ込めポテンシャル、ハドロン質量、熱力学量)
4. 古典計算でわかってきたQCD/非可換ゲージ理論の性質
5. 古典計算における問題：符号問題に対する様々な取り組み
6. 量子計算について

目次

1. QCD(量子色力学)とは？

2. 古典計算のアルゴリズム

擬熱浴法, Hybrid Monte Carlo, (Rational HMC)

3. 色々な物理量の測定法

(プラケット、閉じ込めポテンシャル、ハドロン質量、熱力学量)

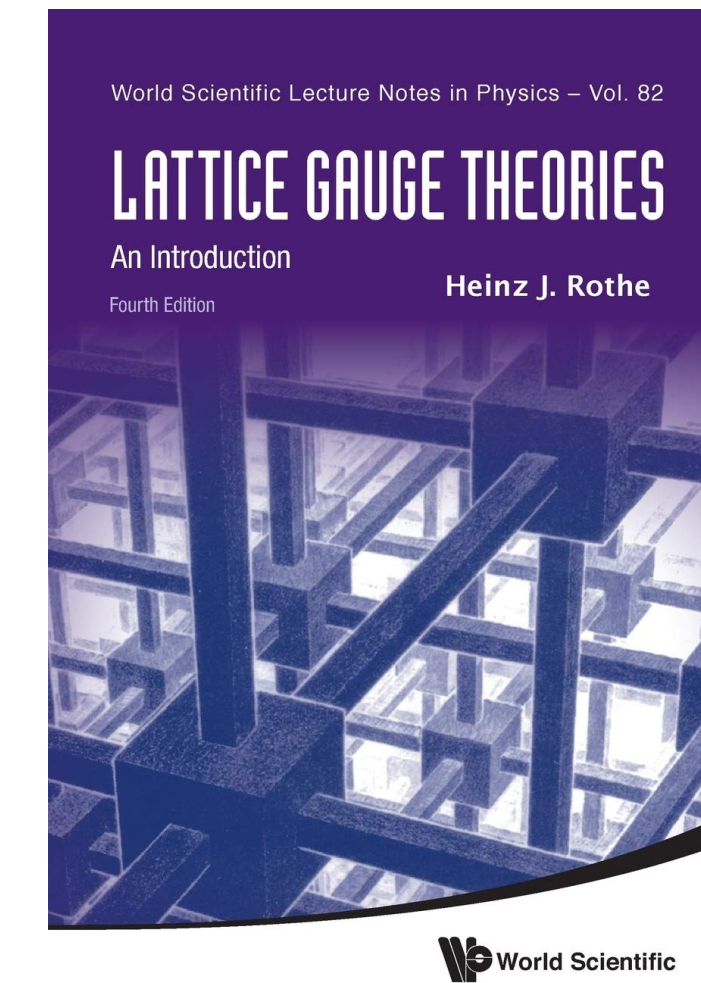
4. 古典計算でわかってきたQCD/非可換ゲージ理論の性質

5. 古典計算における問題：符号問題に対する様々な取り組み

6. 量子計算について

代表的な教科書

- 青木慎也「格子上の場の理論」
理論的なことはこの本！



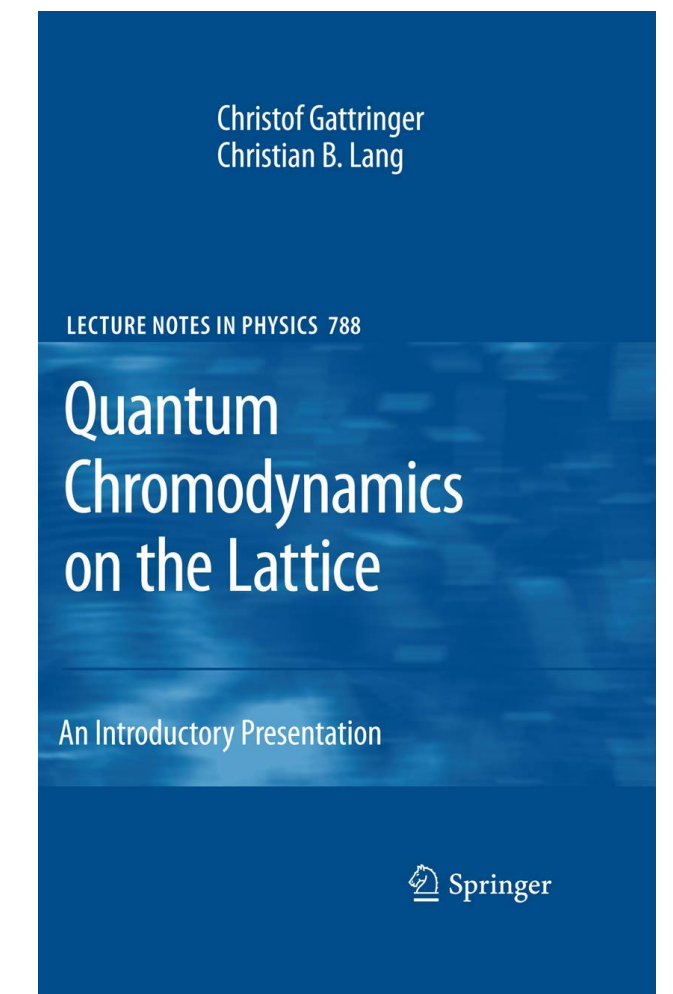
- Heinz J. Rothe「Lattice Gauge Theories」
QCDの計算の基礎はこの本！

格子場の理論のフォーミュレーション

基本的物理量(Wilson loop, hadron correlator, topology)の測定

古い文献などもまとまっていてとても良い

- 大川正典・石川健一「格子場の理論入門」
アルゴリズム的なこと、行列模型(twisted Eguchi-Kawai)



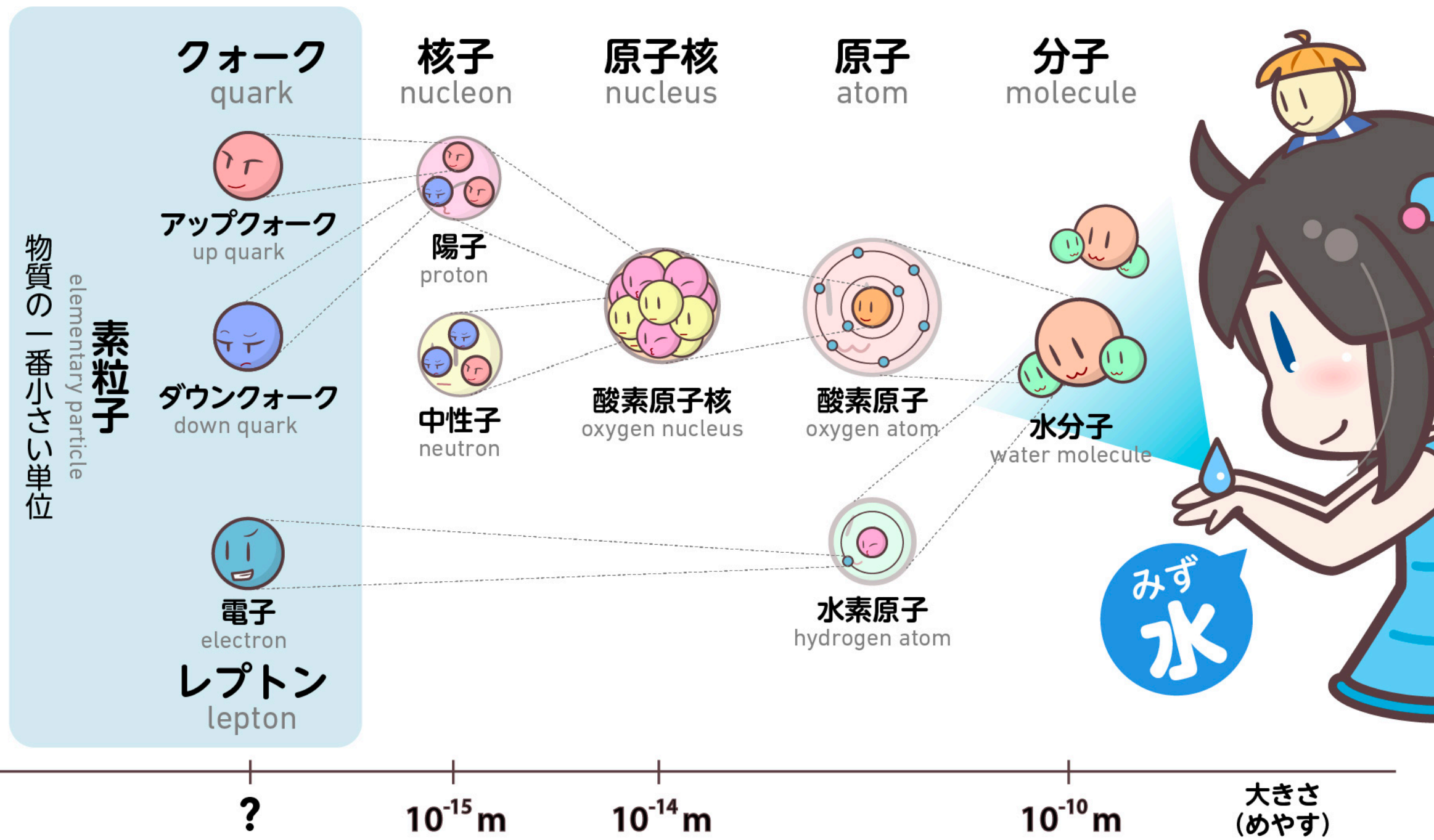
- Christof Gattringer, Christian B. Lang「Quantum Chromodynamics on the Lattice」
有限密度QCDのことが書いてある

1. QCDとは？

素粒子とは？

物質の基本構成要素と
それらの間の力を媒介する粒子(とヒッグス)

小さい 大きい

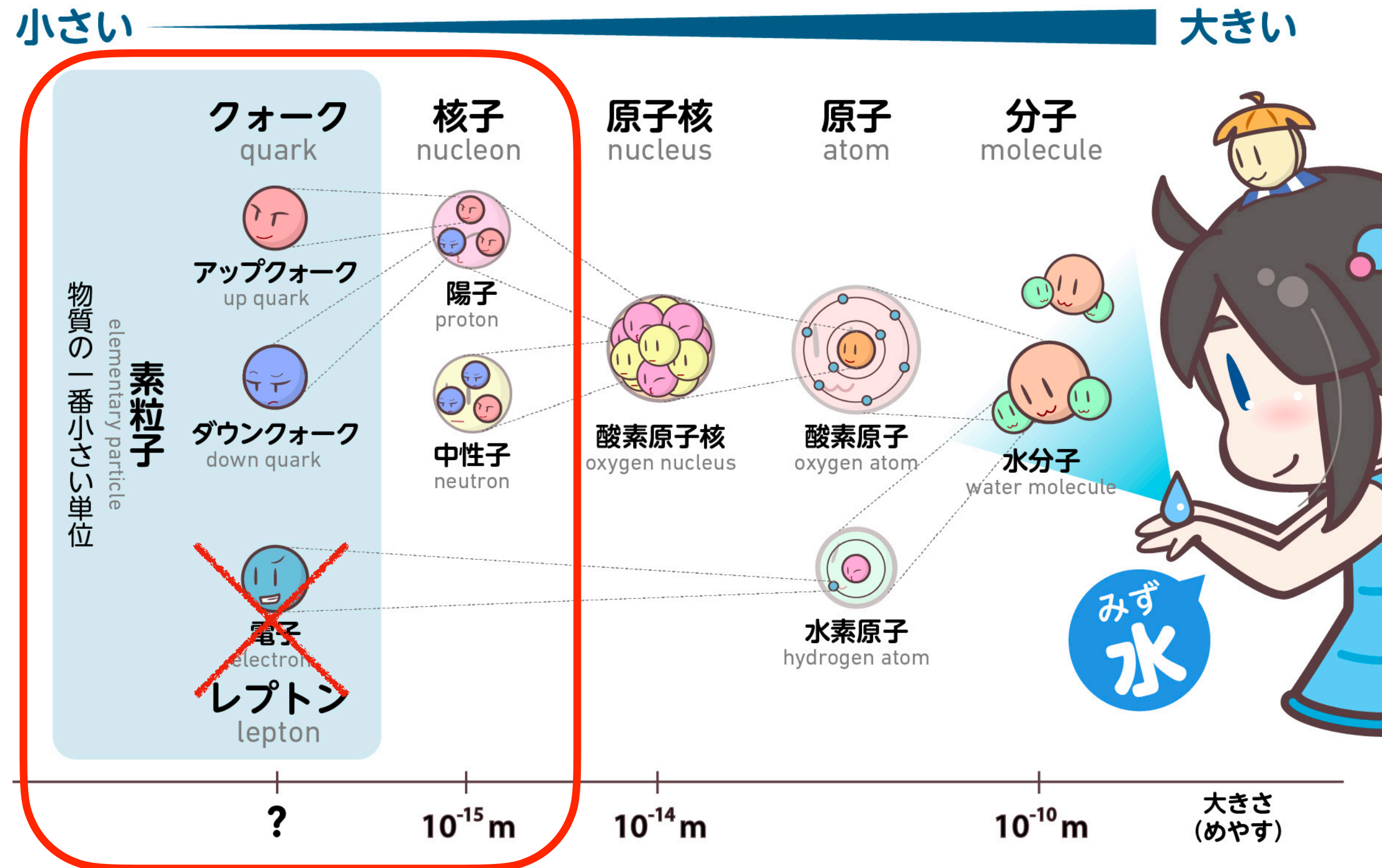


イラスト：ひぐすたん

物質粒子 matter (fermions)			ゲージ粒子 gauge bosons	
クォーク quarks	u アップクォーク	c チャームクォーク	t トップクォーク	γ 光子 (フォトン)
	d ダウクォーク	s ストレンジクォーク	b ボトムクォーク	g グルーオン
	e 電子	μ ミュー粒子	τ タウ粒子	Z, W± ウィークボソン
	ν _e 電子ニュートリノ	ν _μ ミューニュートリノ	ν _τ タウニュートリノ	H ヒッグス粒子 Higgs bosons ヒッグス粒子
				電磁力 electromagnetic
				強い力 strong
			弱い力 weak	

素粒子とは？

物質の基本構成要素と
それらの間の力を媒介する粒子

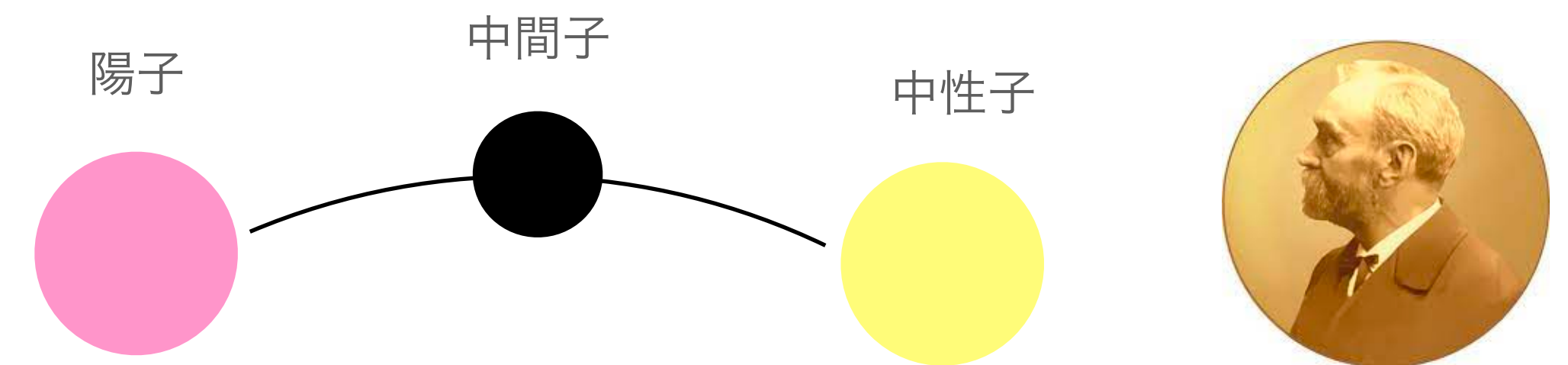


イラスト：ひぐすたん

- 原子核の中：
陽子(電荷+e),中性子(電荷0)
電気力より強い力がくっつけている
「強い力」

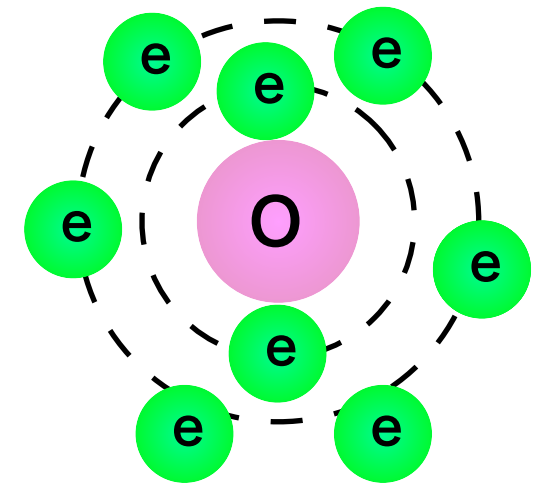
湯川秀樹の中間子論

(1935年論文,1949年ノーベル賞)

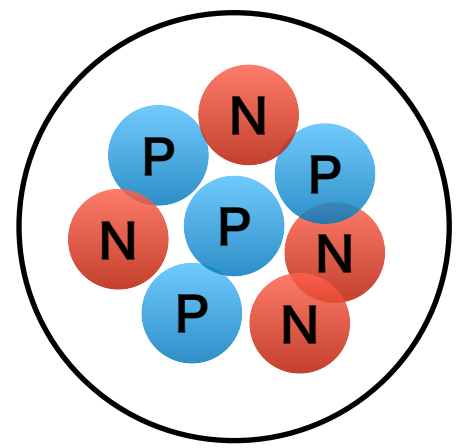


- 強く相互作用しているものを人間の手で解くのは難しい....
計算機を使って明らかにしよう！

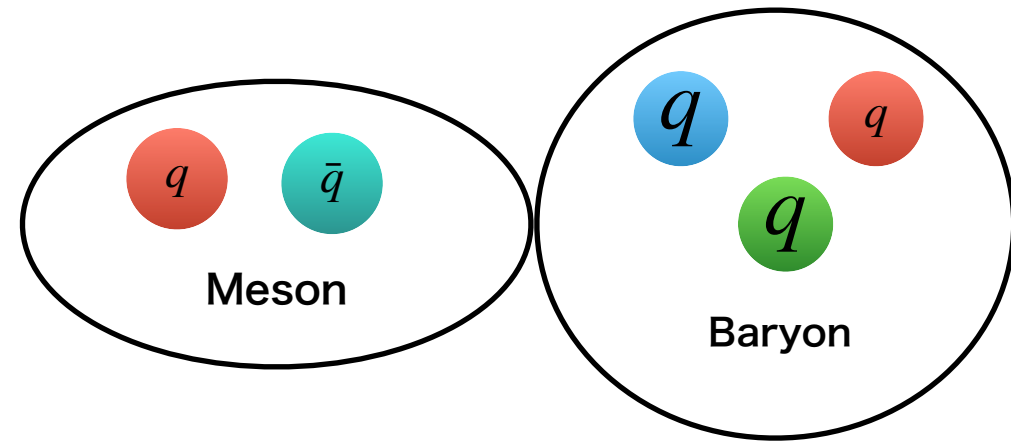
QCD (quantum chromo dynamics)



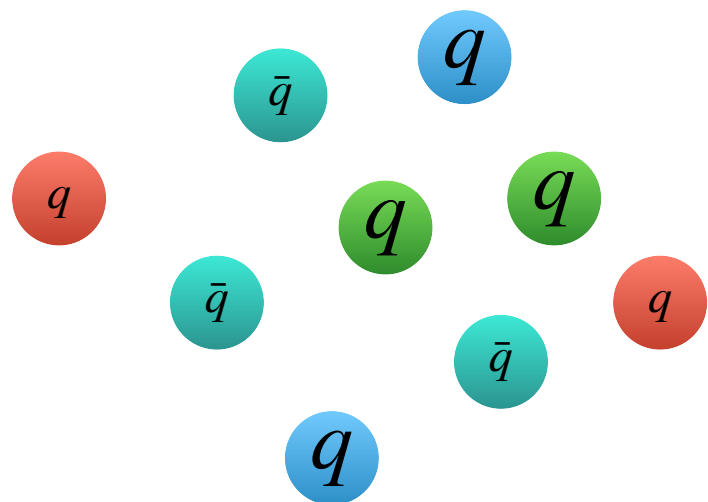
Atom



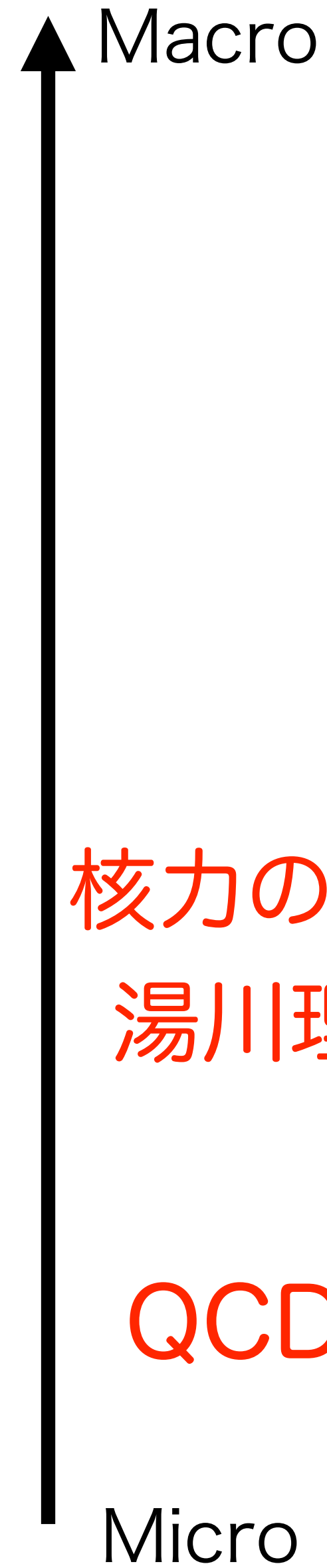
Nucleus



Hadron



quark
gluon



核力の理論
湯川理論

QCD

- 素粒子に働くの4つの力
重力
電磁気学
強い力
弱い力

- 量子電磁気学
(quantum electromagnetic dynamics, QED)

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\gamma_{\mu}D_{\mu} + m)\psi$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu}, D_{\mu} = \partial_{\mu} - igA_{\mu}$$

- 量子色力学(強い力のミクロ理論)
(quantum chromo dynamics, QCD)

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \bar{\psi}(i\gamma_{\mu}D_{\mu} + m)\psi, a=1\dots 8$$

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_{\mu}A_{\nu}^a - \partial_{\nu}A_{\mu}^a + gf^{abc}A_{\mu}^b A_{\nu}^c, D_{\mu} = \partial_{\mu} - igA_{\mu}^a T^a$$



May, 2023 @ U. of Minnesota

場の理論

- 量子力学＋相対性理論

量子力学では…物質は状態(energyや運動量を量子的に変える)

場の理論では…物質は生成・消滅することが許される！

-> 時空の各点で無限大の自由度を持つ！！

-> しかし物理量は有限なはず

-> 系統的に理論の計算から無限大を取り除く方法が必要

=くりこみ(正則化)

摂動論的くりこみ、large-N展開、 ϵ 展開,,

- 格子正則化…時空を離散的にすることで自由度を有限にする！

K. Wilson, “Confinement of quarks”, Phys.Rev. D10 (1974)

格子ゲージ理論による正則化

- 格子ゲージ理論…ゲージ対称性を保った唯一の非摂動的な正則化

現実の物理はゲージ不変な物理量(カラーの自由度を持たない量)しか観測されない!!
(QCDの特徴, 「カラー電荷を測る」等はできない)

- ラグランジアン (QCDに限らず広くSU(N)ゲージ理論はこの形)

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \bar{\psi}(i\gamma_\mu D_\mu + m)\psi$$

- SU(N)ゲージ理論とは?

時空の各点で大きさを変えない独立な回転の下で不変な理論

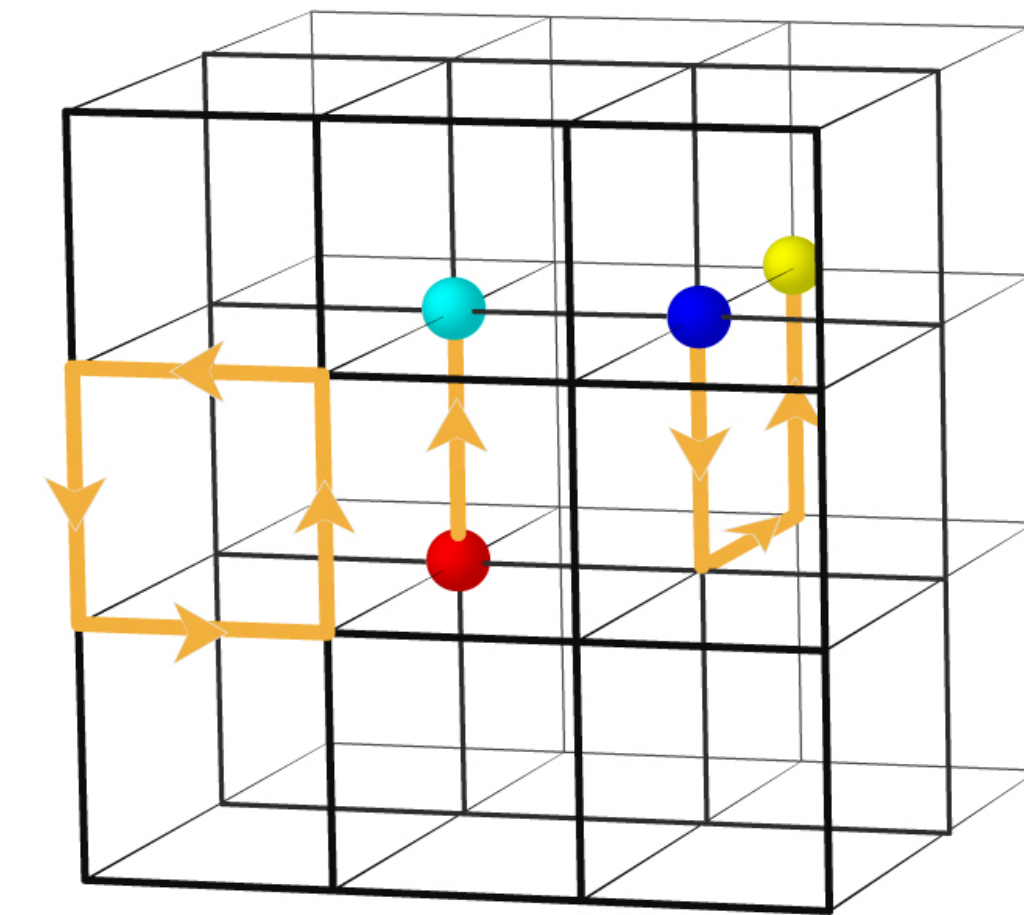
(物性系とかで多体の粒子間などの大局的な対称性とは異なる, 局所対称性)

- 時空を離散的にする

サイトにクォークの自由度、リンクにグルオンの自由度を載せる

(グルオン A_μ^a は時空の方向の足があるので、ちょうど良い)

- リンク変数の導入: $U_\mu = e^{igA_\mu^a T^a}$; T^a SU(N)の表現行列



©KEK

リンク変数の導入とゲージ不変性

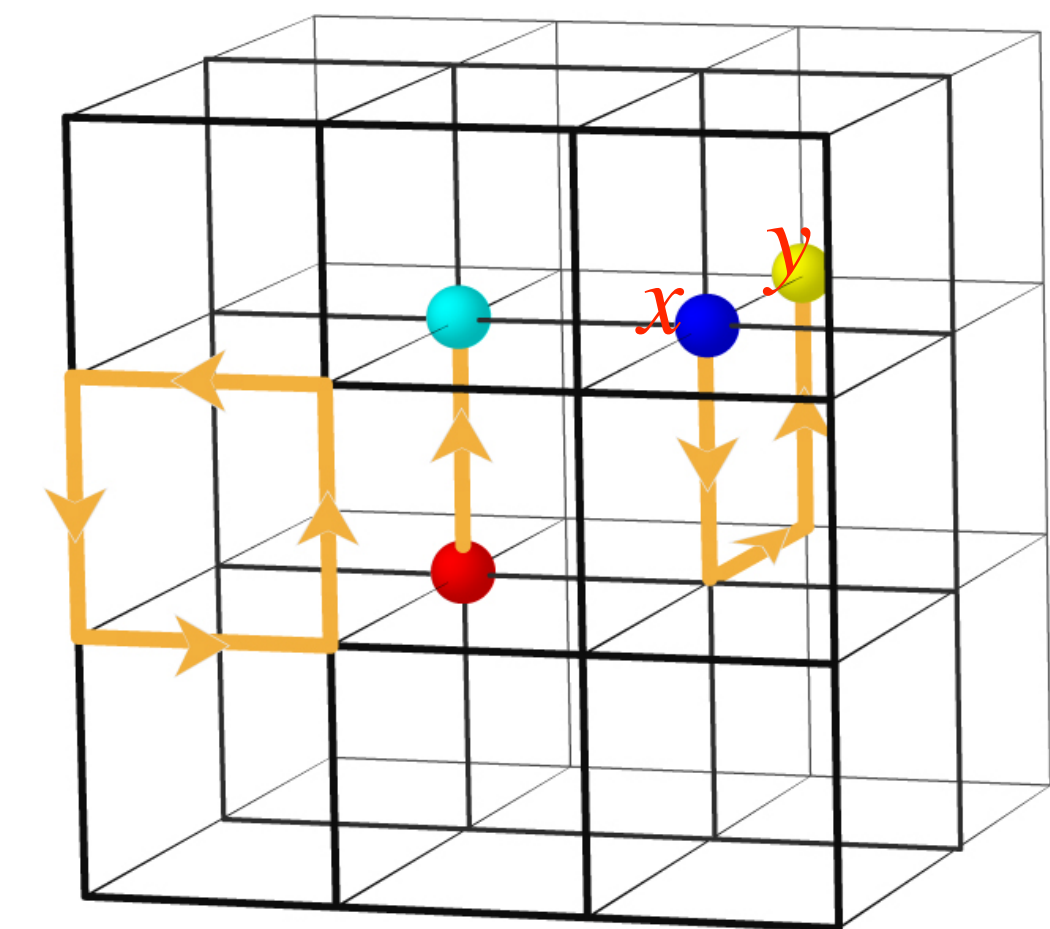
- ゲージ変換： $\Omega(x) \in \text{SU}(3)$ 局所ゲージ変換

$$\psi'(x) = \Omega(x)\psi(x), \quad \bar{\psi}' = \bar{\psi}\Omega(x)^\dagger, \quad A_\mu(x)' = \frac{1}{ig}\Omega(x)\partial_\mu\Omega(x)^\dagger + \Omega(x)A_\mu(x)\Omega(x)^\dagger$$

- $\bar{\psi}(x)\psi(x)$ ：ゲージ不変性 ○

$\bar{\psi}(x)\psi(y), x \neq y$ ：ゲージ不変性 ✕

$\bar{\psi}(x) \boxed{e^{i\int_x^y A_\mu dx_\mu}} \psi(y)$ ：ゲージ不変性 ○



- リンク変数： $U_\mu = e^{igA_\mu^a T^a}$, ゲージ変換： $U'_\mu(x) = \Omega(x)U_\mu(x)\Omega(x + \hat{\mu})^\dagger$

閉じた経路は全てゲージ不変：(例) プラケット $\text{tr}[U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_\mu(x + \hat{\nu})^\dagger U_\nu(x)^\dagger]$

さらに、無限大の自由度を持つグルオンをコンパクトな表現にした

(数値的に非常に重要： $-\infty \leq A_\mu^a \leq \infty$ の自由度をそのまま載せたら精度を保てない)

格子QCDと(古典)計算機

Slide of Lena Funcke @ Lattice2022

- 非摂動的・定量的に知りたい事

閉じ込め

カイラル対称性の破れ

ハドロンの質量

インスタントン

核力

熱力学量, 相転移

- 大型計算機の約40%を利用

Supercomputer usage for different fields (INCITE 2019)

→ **Lattice QCD: ~ 40%**

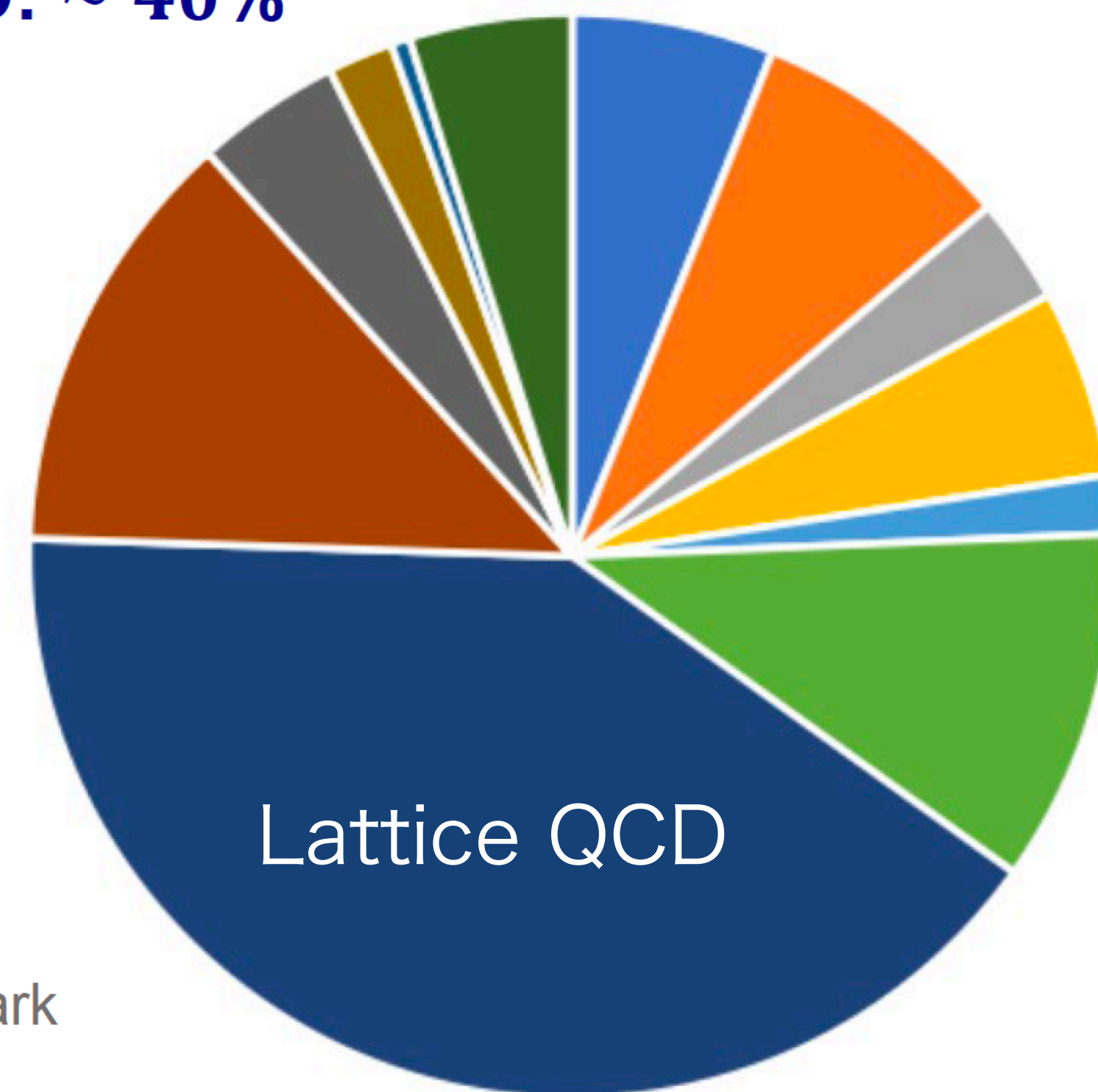
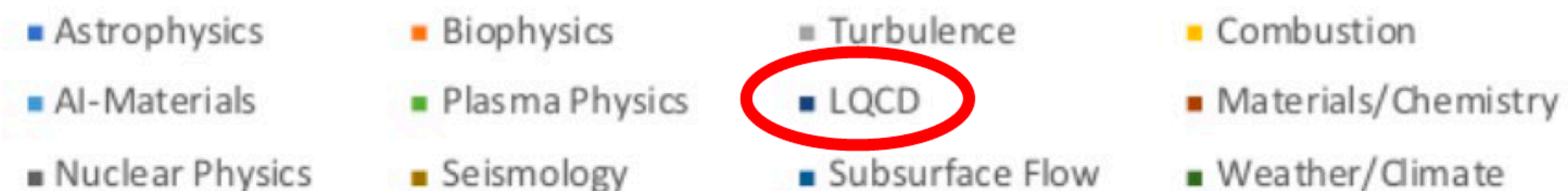


Figure credit:
Jack Wells, Kate Clark

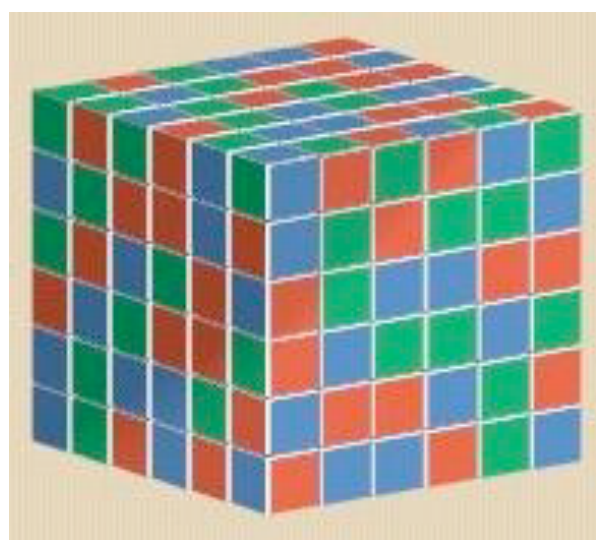


格子QCDの計算：概略

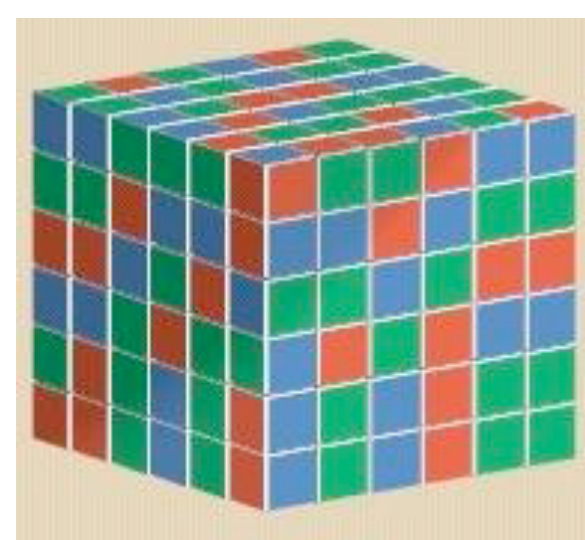
• 計算したいもの: $\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int D\phi \mathcal{O} e^{-S[\phi]}$

(自由度= 6×10^9 @ スパコン富岳)

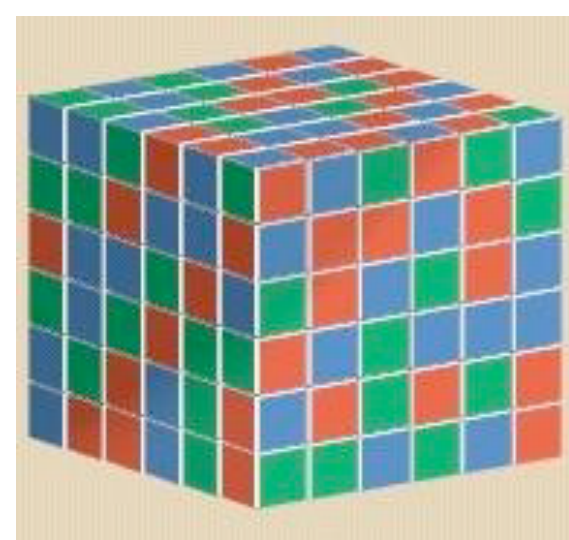
- Step1: 配位を作る
(年単位で時間がかかることも, 世界でシェアすることも, 人類の財産!!)
- Step2: 物理量を測定する (大変さは物理量に依存, 核力計算だと配位生成より大変な時も)



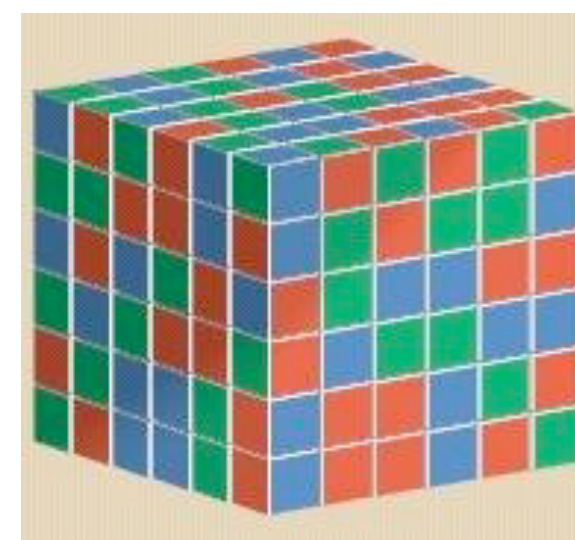
\mathcal{O}_1



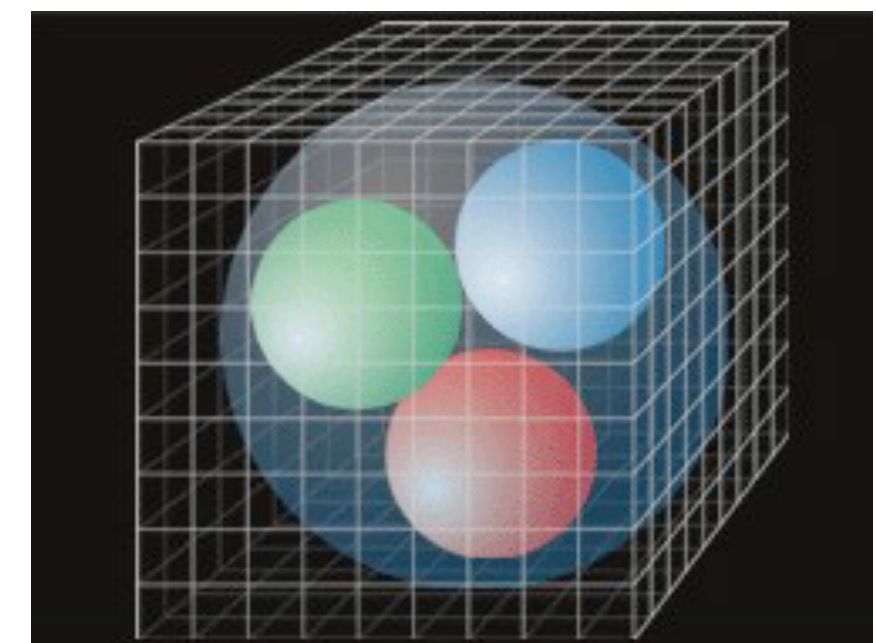
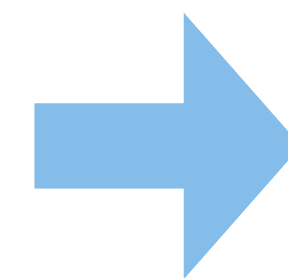
\mathcal{O}_2



\mathcal{O}_3



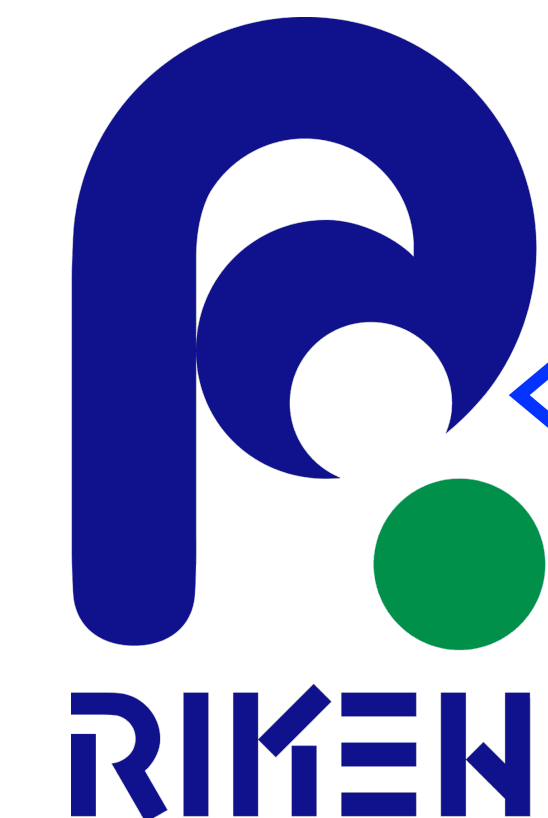
\mathcal{O}_N



$$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i^N \mathcal{O}_i$$

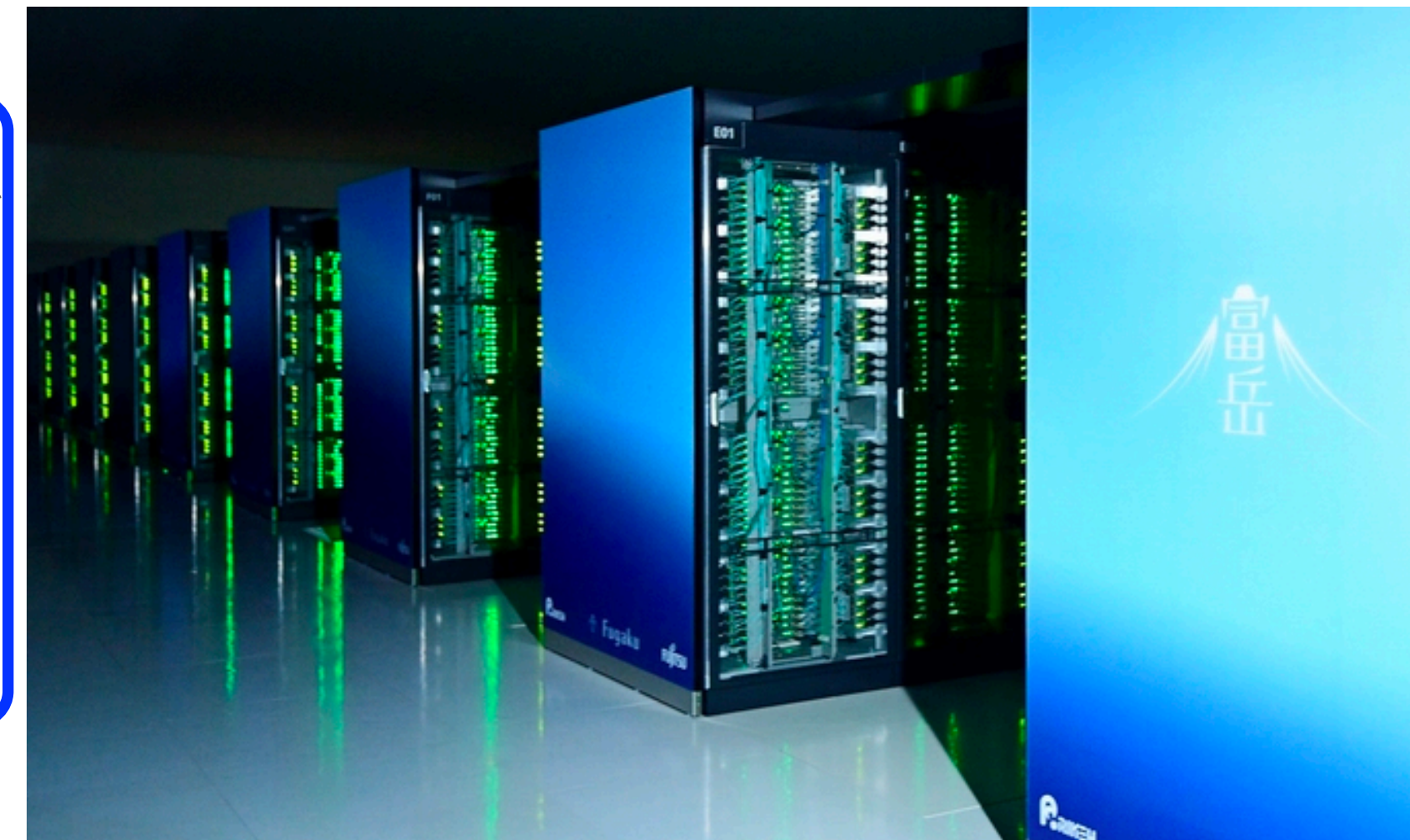
スーパーコンピュータ「富岳」

- スパコンに関する世界ランキング4つで2年間1位を獲得
「TOP500」「HPCG」「HPL-AI」「Graph500」
- 演算性能：400PFlops(ペタフロップス,倍精度)
1秒間に 4×10^{17} (400京)回の浮動小数点演算
- 総メモリー：4.85PiB(ペビバイト, $1\text{PiB}=2^{50}\text{B}$)



名前の由来は「富岳」は"富士山"の異名で富士山の高さが
ポスト「京」の性能の高さを表し、また富士山の裾野の
広がりがポスト「京」のユーザーの拡がりの意味します。

理化学研究所(2019年5月23日)



2. 古典計算のアルゴリズム

この章の流れ

・ ファインマンの経路積分： $\langle x'(t) | x(0) \rangle = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \langle x' | e^{-iH\Delta t} | x_N \rangle \cdots \langle x_2 | e^{-iH\Delta t} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-iH\Delta t} | x \rangle$

-> QCD作用を使った物理量の期待値 $\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int D\phi \mathcal{O} e^{-S[\phi]}$

1. モンテカルロ法とは? (導入)

2. 重点サンプリング法

(ハミルトニアン形式からラグランジアン形式へ)

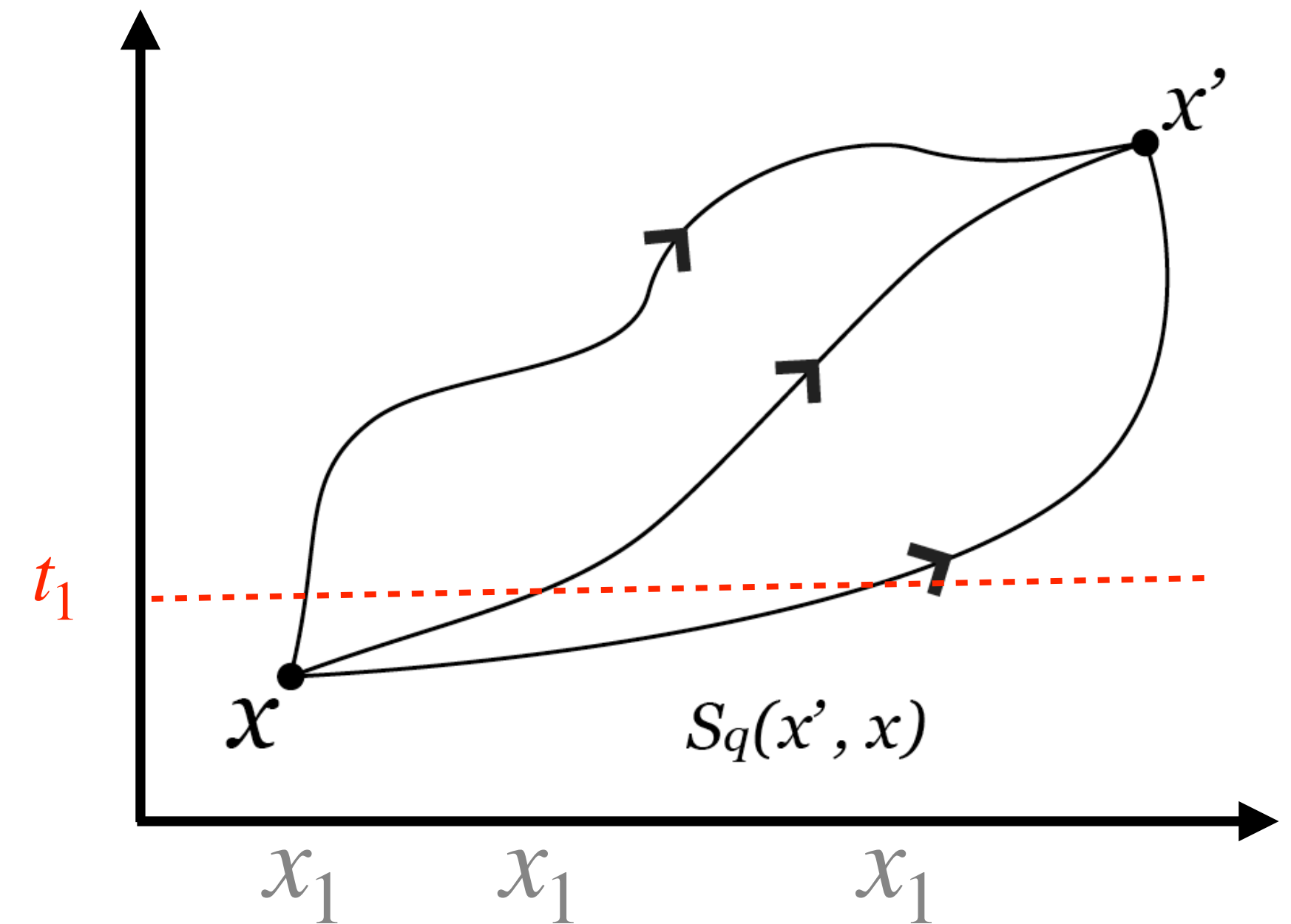
3. 格子QCD作用 (クォーク場の積分)

4. 現在使われているアルゴリズムのフローチャート

(擬) 熱浴法(Pseudo-Heat-Bath algorithm, PHB)

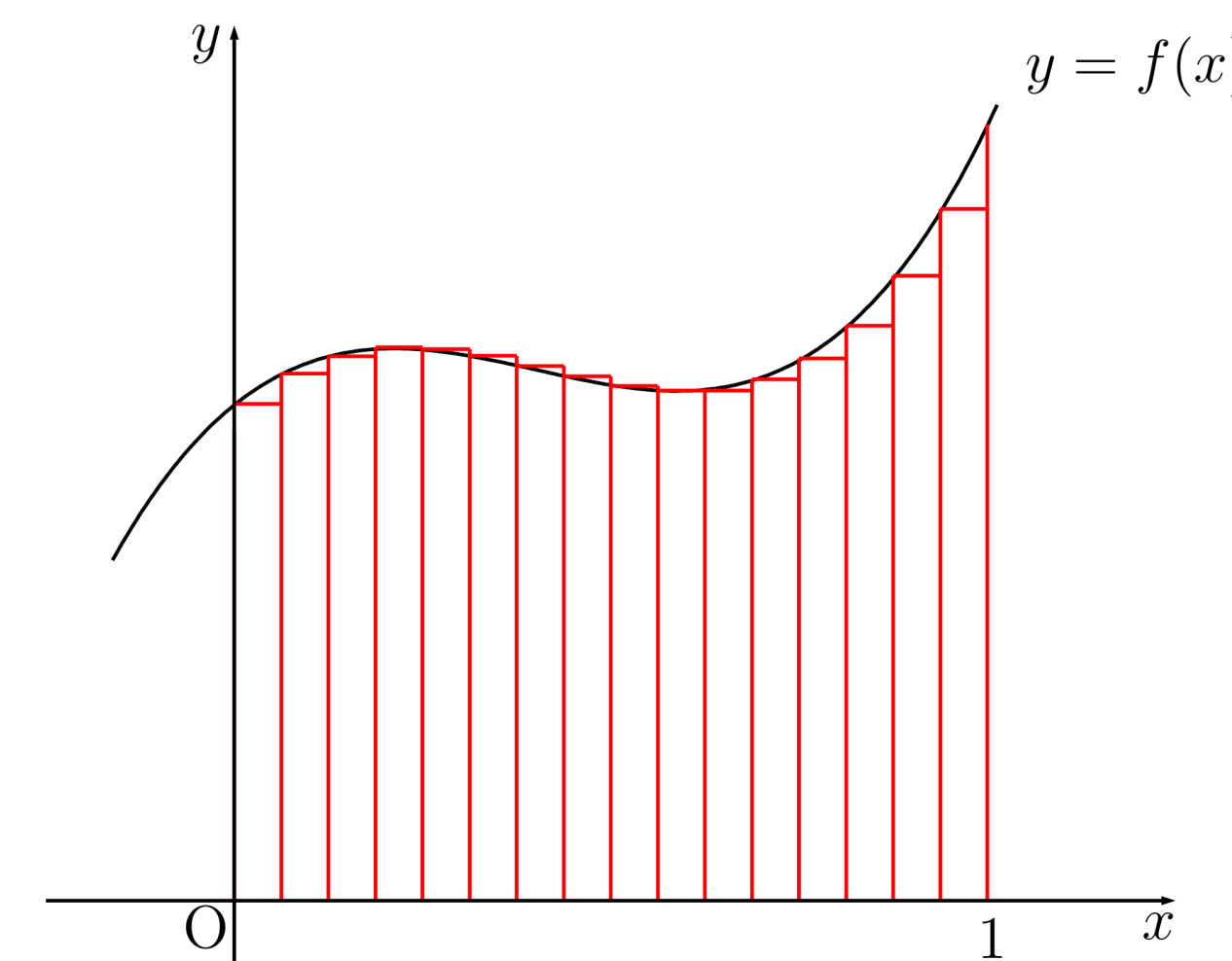
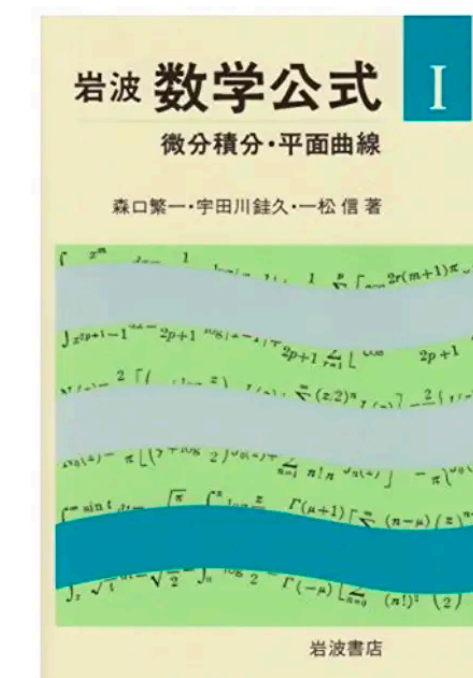
ハイブリッドモンテカルロ(HMC)

ラショナルハイブリッドモンテカルロ(RHMC)



積分を計算する

- ライブラリとして関数系とその答えを持っておき当てはめる
- 区分求積法
(有効自由度の範囲で精密に)数值的に解く
- **モンテカルロ法**
(人間にはできない方法)



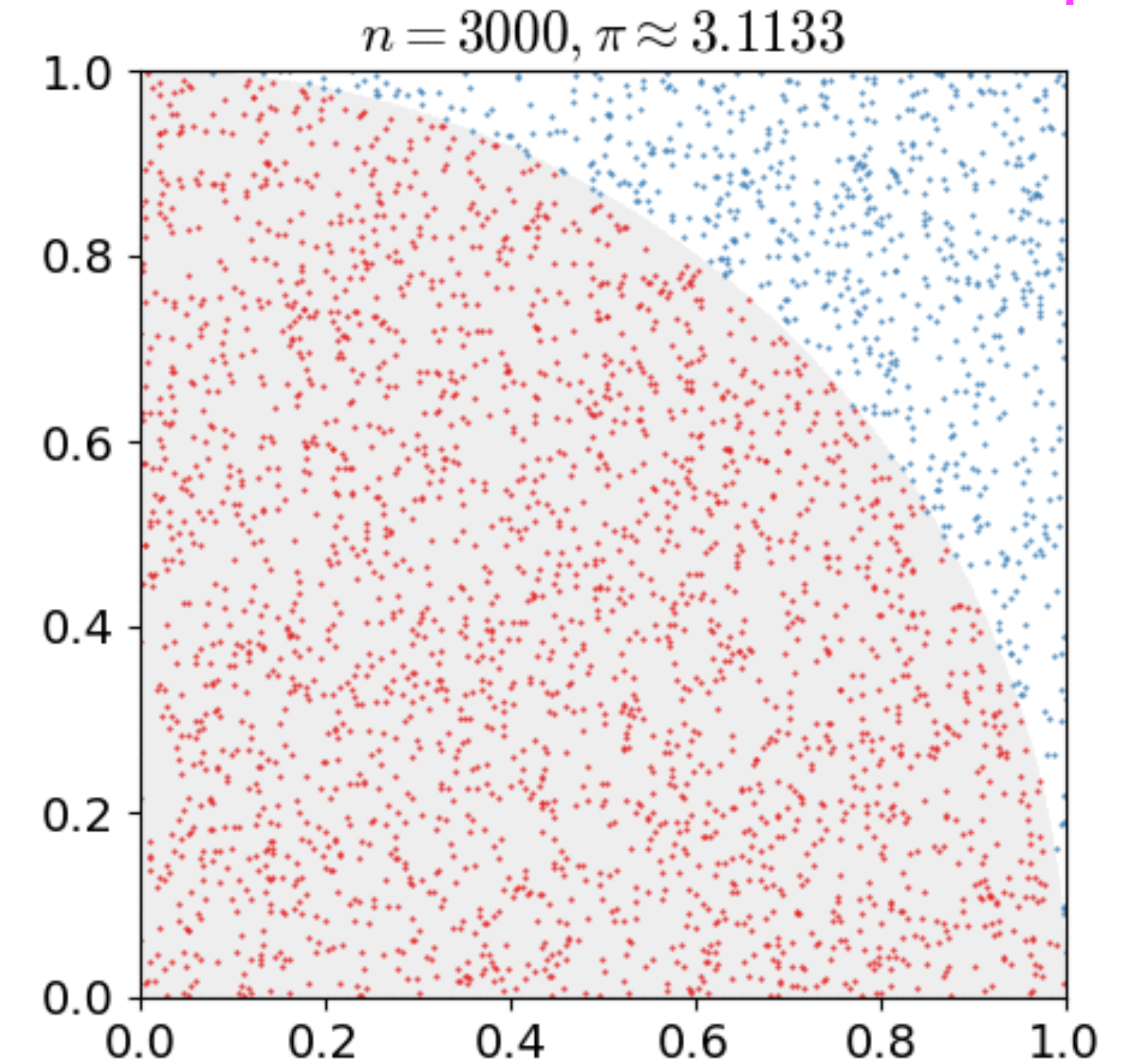
モンテカルロ法による積分

- 半径 1 の円の 1/4 の扇形の面積

$$S = \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx = \frac{\pi}{4}$$

- [0:1] の区間に一様乱数を 2 回振る
- それを (x,y) の組にして座標とする
- N 回繰り返した時, s 回が円の中に入った扇形の面積は

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} s(N)/N \text{ で求まる}$$



モンテカルロ法の手順

手順(1) 乱数 X_i を生成

手順(2) 各乱数で $f(X_i)$ の値を計算

手順(3) 平均値 $\frac{1}{N} \sum_i f(X_i)$ を取ると

期待値がわかる! $\langle f \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i f(X_i)$

モンテカルロ法の利点

- 自由度が大きくなると多重積分を真面目に解くより高速に解ける

n重積分

$$I = \int_0^1 dx_1 \int_0^1 dx_2 \cdots \int_0^1 dx_n f(x_1, \dots, x_n)$$

区分求積法は

"次元の呪い" (N^d) があって大変

[0:1]の値を取る $n \times N$ 個の一樣乱数 ($X_{i,j}$, $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, N$) から

$$I = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_j f(X_{1,j}, \dots, X_{n,j})$$

と評価できる. 真の値からの誤差も次元に依らず $1/\sqrt{N}$

- 高速に一樣乱数を作れば乱数を使った関数 f の平均値を計算するだけ!

量子論でのモンテカルロ法(重点サンプリング法)

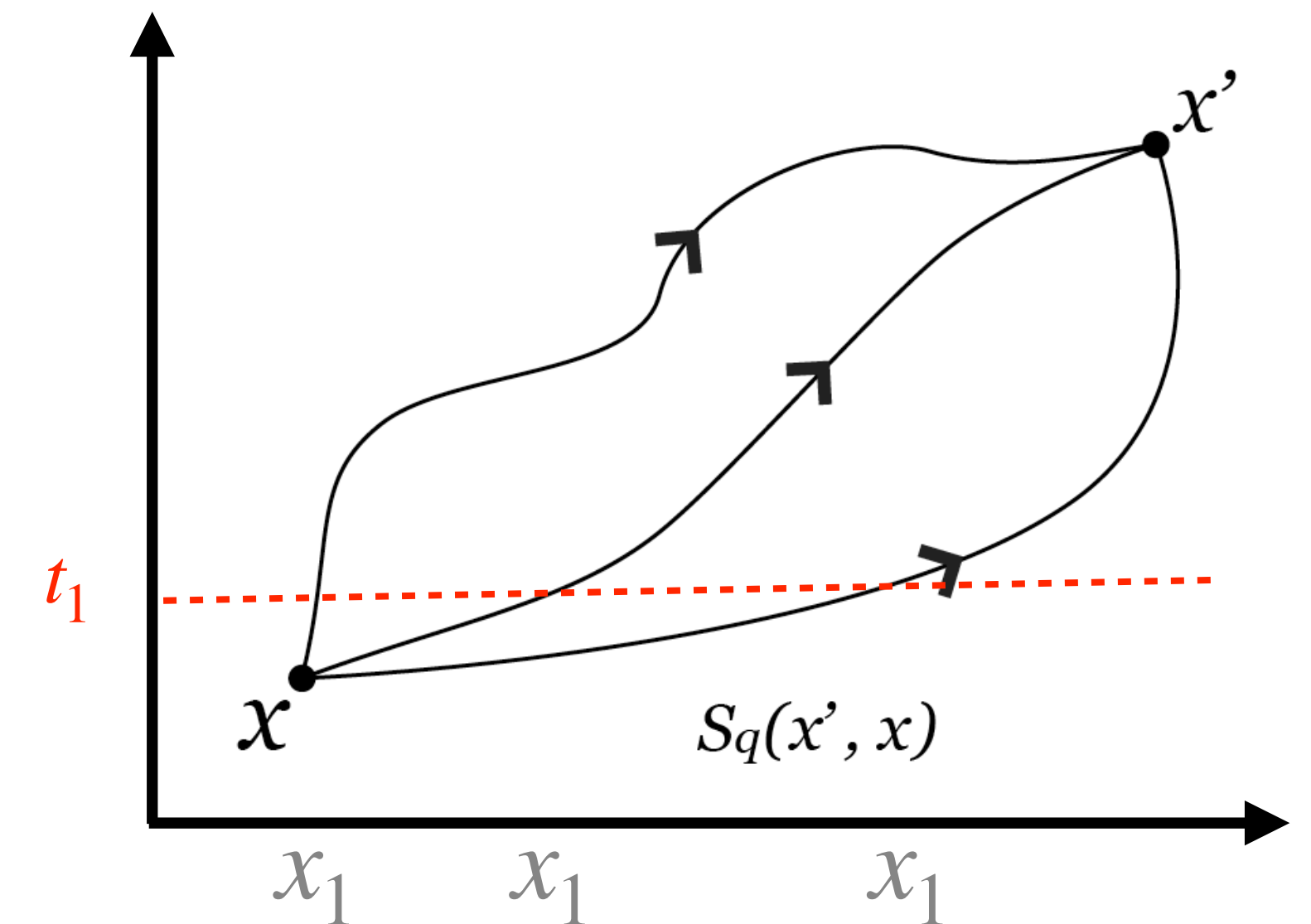
- あらゆる経路について足し合わせる

$$\langle x'(t) | x(0) \rangle = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \langle x' | e^{-iH\Delta t} | x_N \rangle \cdots \langle x_2 | e^{-iH\Delta t} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-iH\Delta t} | x \rangle$$

H: ハミルトニアン

考えている系の相互作用(~力)などを表す

- 理論によって「通りやすい経路」と「あまり通らない経路」がある
- 一様乱数のモンテカルロ法から
重点サンプリング法へ



ラグランジアン形式の経路積分

- ハミルトン形式からラグランジアン形式へ

$H(x, p) \rightarrow L(x, \dot{x})$ このラグランジアン(密度)を時空について積分したのが作用

$$S = \int dt d\vec{x} L(x, \dot{x})$$

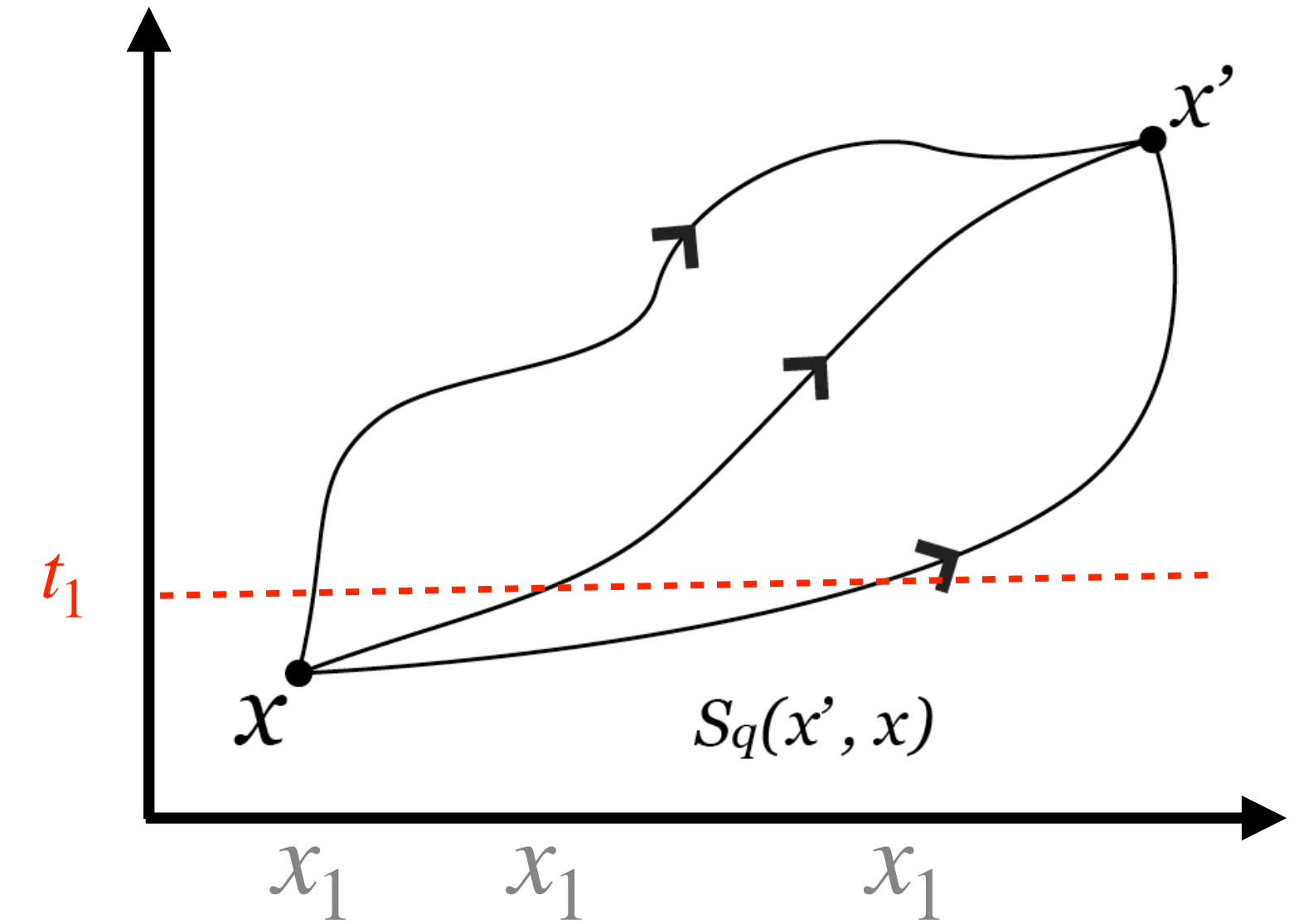
- ユークリッド化 ($it = \tau$ の導入)

ミンコフスキー計量

$$ds^2 = -dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2 = d\tau^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2$$

- 時間発展 $e^{iH\Delta t} \rightarrow e^{iL\Delta t} \rightarrow e^{-L_E\Delta\tau}$ となり時空積分して

$$S = \int dt d\vec{x} L(x, \dot{x}) \rightarrow S_E = \int d\tau d\vec{x} L(x, \dot{x}), \quad e^{iS} \rightarrow e^{-S_E}$$



(素粒子論での)重点サンプリング法は
(1) ハミルトン形式からラグランジアン形式に移る
(2) 実時間形式のミンコフスキー時空から虚時間形式のユークリッド空間での理論で定式化される

重点サンプリング法

- あらゆる経路について足し合わせる

$$\langle x'(t) | x(0) \rangle = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_N \langle x' | e^{-iH\Delta t} | x_N \rangle \cdots \langle x_2 | e^{-iH\Delta t} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-iH\Delta t} | x \rangle$$

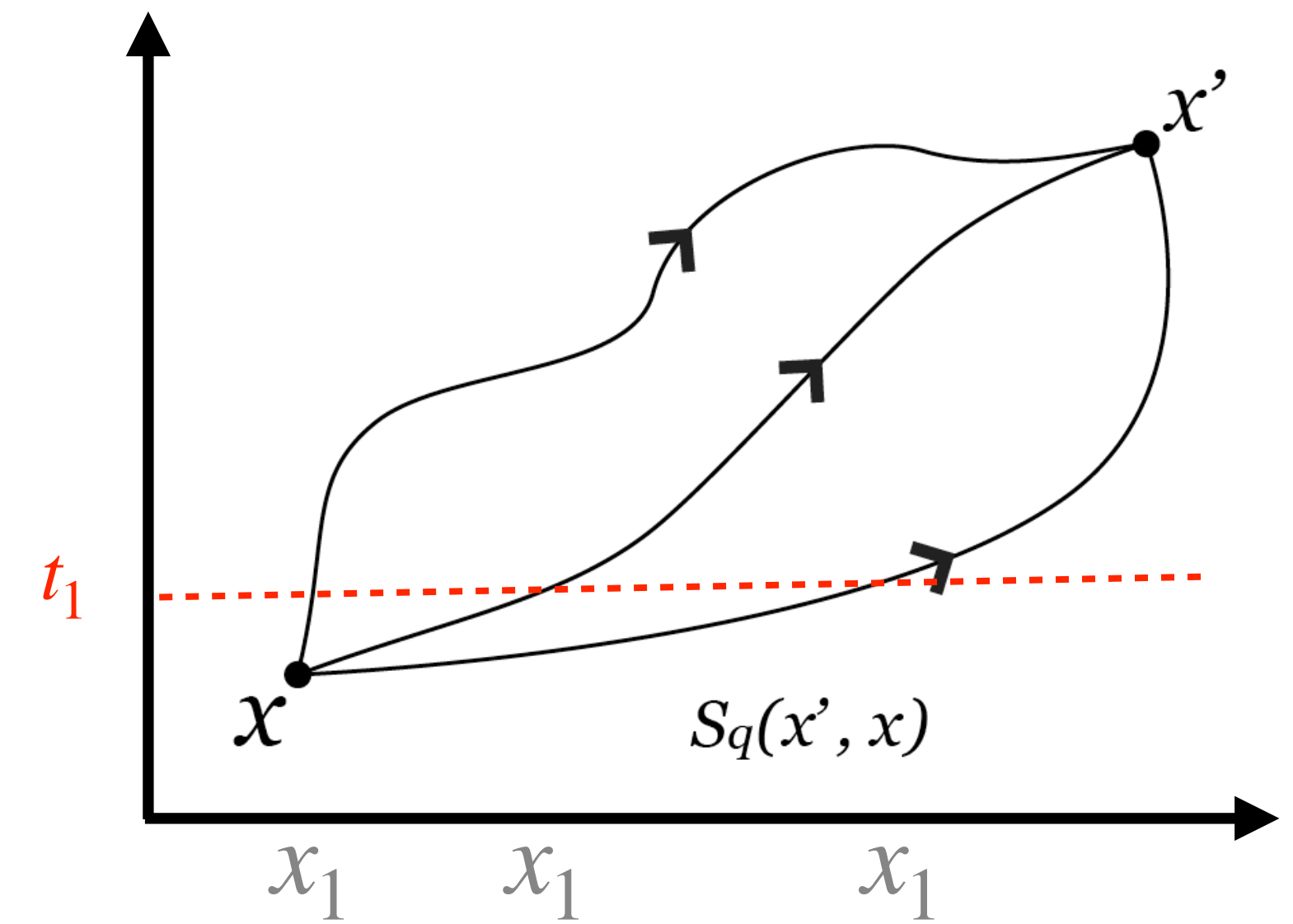
H: ハミルトニアン

- $S_q(x', x)$ は経路qについての作用

$$\langle x'(t) | x(0) \rangle = \int dx_1 \cdots dx_N e^{-S_q(x', x)} : e^{-S_q(x', x)} \text{の重み (Boltzmann weight) をかけて変数 } x \text{ を生成}$$

$S_q(x', x)$ が小さいと $e^{-S_q(x', x)}$ が大きくなるので積分に大きな寄与を与える

$S_q(x', x)$ が大きいと $e^{-S_q(x', x)}$ が小さくなり積分全体にはあまり効かない



重みをどう取るか?: 格子上のQCD作用

- フェルミオンの自由度(グラスマン数)は先に積分する

計算したいもの: $\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int D\phi \mathcal{O} e^{-S[\phi]}$, ラグランジアン: $\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \bar{\psi}(i\gamma_\mu D_\mu + m)\psi$

$$\int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \exp[-S_G + \int d^4x \bar{\psi}(D(A_\mu))\psi(x)] = \int \mathcal{D}A_\mu \sqrt{\det(D(A_\mu))} \exp[-S_G], \quad (\text{Dにmも入れた})$$

- 離散化する

ゲージパート: $S_G = \frac{1}{g^2} \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} \text{tr}[U_{n,\mu} U_{n+\hat{\mu},\nu} U_{n+\hat{\nu},\mu}^\dagger U_{n,\nu}^\dagger]$

リンク変数 $U_{n,\mu} = e^{iagA_\mu^a(n+\hat{\mu}/2)T^a}$ で展開する (aは格子間隔)

$$\text{tr}[U_{n,\mu} U_{n+\hat{\mu},\nu} U_{n+\hat{\nu},\mu}^\dagger U_{n,\nu}^\dagger] = \text{tr} \left[1 + ia^2 g F_{\mu\nu} + (*)a^3 + \frac{a^4 g^2}{2} F_{\mu\nu}^2 + O(a^5) \right], \quad \text{tr} T^a = 0 \text{ で第2,3項はゼロ. } O(a^5) \text{ は } a \rightarrow 0 \text{ でゼロ.}$$

$\text{tr}[F_{\mu\nu}^2]$ が残る: 連続極限でこれに戻るなら何でも良い! (連続極限への近さで改良作用も多数)

- フェルミオンパート: $\det D(A_\mu) \rightarrow \det D(U_\mu)$ とリンク変数で書ける. 具体的には格子フェルミオンの取り方に依存 (staggered fermion, Wilson fermion, Domain wall fermion, Overlap fermion...)

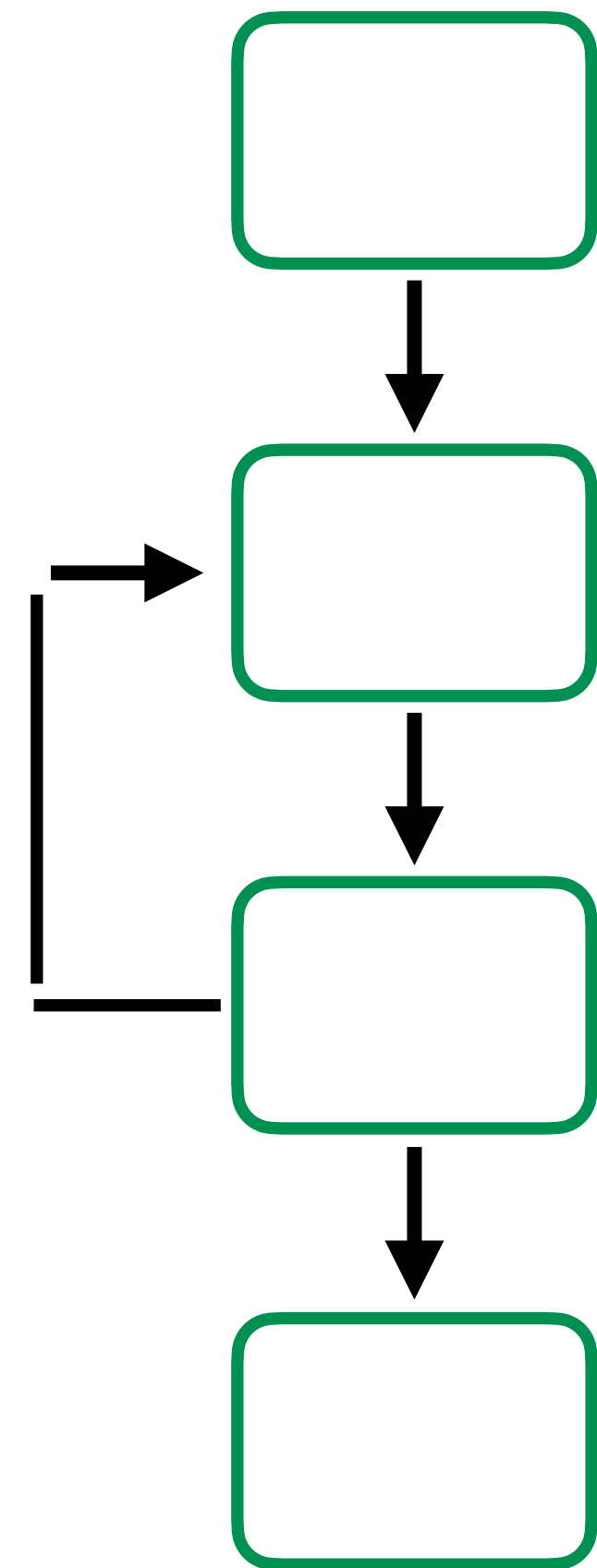
重みをどう計算するか？：現在使われる厳密アルゴリズム

- 擬熱浴法…乱数からSU(2)の行列を作る
最も効率的, 純ゲージ理論(pure Yang-Mills)は適用可能
(クォークは重くてdecoupleしていると考ええる, quenched QCD)
- Hybrid Monte Carlo (HMC) アルゴリズム
…分子動力学法とメトロポリステスト
- Rational Hybrid Monte Carlo (RHMC) アルゴリズム
… $(\det DD^\dagger)^{N_f/2}$ の作用を分数近似して解く
奇数個のクォークを取り扱える, multi-shift solver というテクニックを使う
(Polynomial 近似などもあり：青木さんの教科書)

(擬)熱浴法

擬熱浴法の計算アルゴリズム：フローチャート

MAIN



初期配位の設定(cold start, hot start, 前の配位を読む)
乱数列の設定(seedを渡して生成するか、前の続きを開始)

熱浴法 (+過緩和法)によるリンク変数のアップデート)

ゲージ配位を書き出しておく (autocorrelationがあるので毎回出なくても良い)

最後の配位を書き出し
最後の乱数の書き出し

熱浴法: SU(2)ゲージ理論(セットアップ)

- 一つのリンク $U_{n,\mu}$ のアップデートを考える

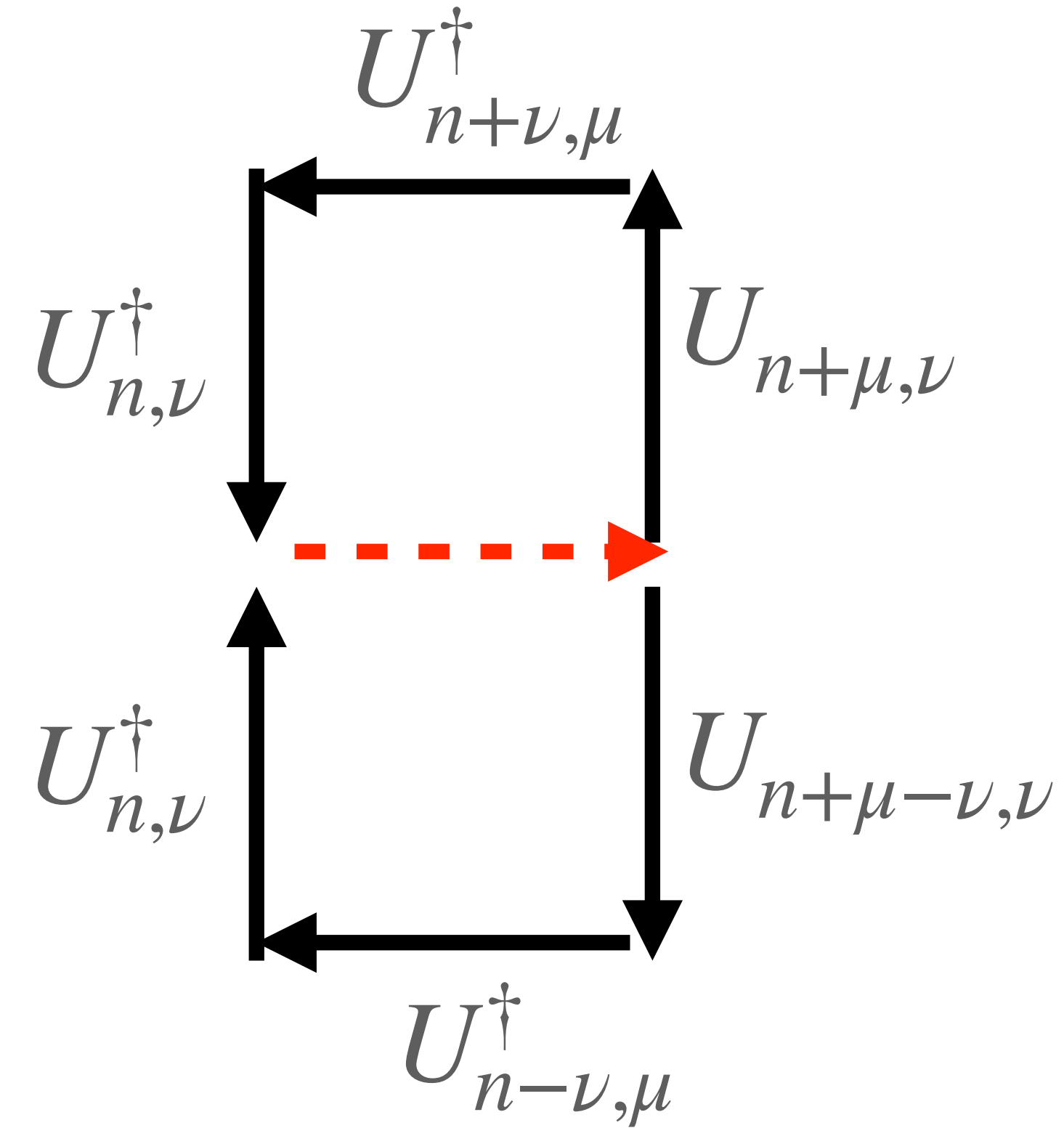
- このリンクが関わっている作用の部分は

$$\Delta = -S_G(n, \mu) = \beta[\text{tr}U_{n,\mu}V_{n,\mu} + \text{tr}U_{n,\mu}^\dagger V_{n,\mu}^\dagger]$$

$$V_{n,\mu} = \sum_{\nu \neq \mu} U_{n,\nu}^\dagger$$

- SU(2)行列の和は定数倍(R)を除いてまたSU(2)行列になるので

$$\text{staple: } V_{n,\mu} = b_0 1 + i \sum_{j=1}^3 b_j \tau^j = R V_0, \quad R^2 = b_0^2 + \sum_j b_j^2$$



- 新しいSU(2)の変数を導入

$$W = U_{n,\mu}V_0 = a_0 1 + i \sum_j a_j \tau^j, \quad a_0^2 + \sum_j a_j^2 = 1$$

して元の作用は、 $\Delta = 2\beta R a_0$ とかける(ここまで準備)

熱浴法: SU(2)ゲージ理論(概略)

- 熱浴法の概略

(1) 一様乱数から作用をweightとして (a_0, a_j) を生成し、

新しい $W^{\text{new}} = UV_0$ を作る

(2) そこから新しいリンク変数 $U_{n,\mu}^{\text{new}} = W^{\text{new}} V_0^{-1}$ を計算して、

古い変数を新しい変数で「アップデート」

熱浴法: 一様乱数から (a_0, a_j) を生成する方法

- a_0 : 経路積分の $U_{n,\mu}$ が関係する部分

$$\int dU_{n,\mu} \exp[\beta \text{tr}(U_{n,\mu} V_{n,\mu} + U_{n,\mu}^\dagger V_{n,\mu}^\dagger)] = \int d(U_{n,\mu} V_0) \exp[2\beta R a_0] = \int \delta(a^2 - 1) d^4 a \exp[2\beta R a_0]$$
$$= \int da_0 r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \delta(a_0^2 + r^2 - 1) \exp[2\beta R a_0] = \int \sin \theta d\theta \int_{-2\beta R}^{2\beta R} \frac{de^{2\beta R a_0}}{4\beta R} \sqrt{1 - a_0^2}$$

と変形すると、一様乱数 y ($0 \leq y \leq 1$) から $a_0 = \frac{1}{2\beta R} \log(Ay + B)$, を作る

ここで、 $A = 2 \sinh(2\beta R)$, $B = e^{-2\beta R}$

- 作った a_0 を確率 $\sqrt{1 - a_0^2}$ で発生するように(もう一度別の乱数を作って) 調整

(N回ヒットの擬熱浴法) cf.) 青木さんの教科書P.176参照

熱浴法: 一様乱数から (a_0, a_j) を生成する方法

- 他の a_j たち

一様乱数 $0 \leq \phi \leq 2\pi$, $-1 \leq \cos \theta \leq 1$ を生成し

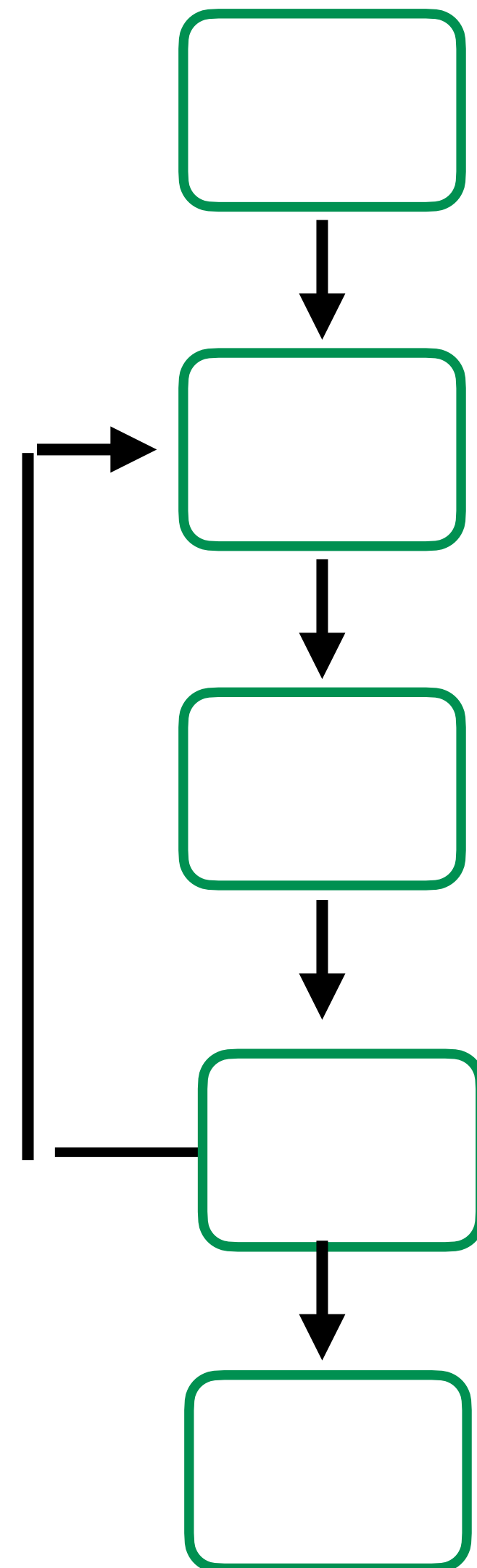
$$a_1 = \sqrt{1 - a_0^2} \cos \theta, a_2 = \sqrt{1 - a_0^2} \sin \theta \cos \phi, a_3 = \sqrt{1 - a_0^2} \sin \theta \sin \phi \text{ を構成 (終)}$$

- 実際の計算では熱浴法だけだと効率が悪く 「過緩和法(over-relaxation)」 と組み合わせる : $U_{\text{new}} = V_0 U_{\text{old}} V_0^\dagger$
この変換は作用の値を変えないので常に採用して良い
- SU(3)はSU(2)の部分群に分解して, SU(2)の熱浴法3回を組み合わせる構成 (SU(N)に拡張可能, cf.) 大川さんの教科書)

HMC

HMCの計算アルゴリズム：フローチャート

MAIN



初期配位の設定(cold start, hot start, 前の配位を読む)
乱数列の設定(seedを渡して生成するか、前の続きを開始)

分子動力学法によるリンク変数のアップデート (マルコフチェーンモンテカルロ)

$dH = H(\text{new}) - H(\text{old})$ を計算

Metropolis test, U_{old} か U_{new} かの選択
ゲージ配位を書き出しておく (testでrejectされたものも！！)

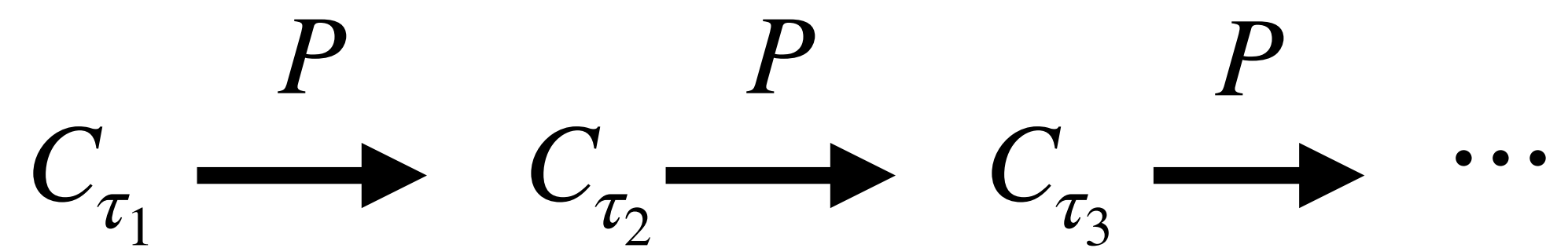
最後の配位を書き出し
最後の乱数の書き出し(1つのマルコフチェーンにするため重要)

理論的な話：確率過程と詳細釣り合いの原理

- マルコフチェーン

配位の状態 C_i が C_j に遷移する確率を $P(C_i \rightarrow C_j) \equiv P_{ij}$ とした時、

P_{ij} が C_i と C_j にしか依らないと仮定する. ここで一般にある遷移確率 P を用いて



と状態の系列が生成できる時、 P が1つ前の状態にしかよらない場合を「マルコフチェーン」と呼ぶ. この生成過程を一般に「マルコフ過程」

- P として P_{ij} と取ればマルコフ過程になる

マルコフ過程・状態などの言葉の定義

1. 既約である

任意の状態 C_i, C_j に対して, ある有限な N が存在して $P_{ij} \equiv \sum P_{ii_1} P_{i_1 i_2} \cdots P_{i_{N-1} j} \neq 0$ を満たす. (任意の2つの状態は有限回遷移で移り変わる)

2. 非周期的である

任意の C_i に対して $P_{ii}^{(N)} \neq 0$ が, 全ての N に対して成り立つ.

(何回遷移しても留まる, 戻る確率がゼロではない, 周期的な遷移は禁止)

3. 状態 C_i は正の状態である

状態 C_i から出発して n ステップで初めて戻ってくる確率を $P_{ii}^{(n)}$ と書くと

$\tau_i \equiv \sum_{n=1}^{\infty} n P_{ii}^{(n)} < \infty$ ならば, 状態 C_i は正である, という

マルコフ過程から詳細釣り合いを満たす確率分布

定理1. マルコフ過程が(1)(2)、状態が(3)を満たす時

$N \rightarrow \infty$ の極限で $\lim_{N \rightarrow \infty} P_{ij}^N = \pi_j$ (平衡状態の確率分布) が唯一存在する. これは 次の性質を満たす

$$\pi_j > 0, \quad \sum_j \pi_j = 1, \quad \pi_j = \sum_i \pi_i P_{ij}$$

定理2. マルコフ過程が(1)で,状態が(3)の時かつ $\tau_i^{(2)} = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 P_{ii}^{(n)} < \infty$ を満たす時

$$\text{確率変数の平均値は } \langle \mathcal{O} \rangle = \sum_i \pi_i \mathcal{O}(C_i) = \sum_i P_{ji}^{(N)} \mathcal{O}(C_i) + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

「色々な状態の平均がマルコフ過程で生成された状態(C_i)の平均で近似できる」

この条件を満たした上で, $\pi_i = Z^{-1} e^{-S_G(C_i)}$ となる P_{ij} を具体的に構成するのが重要.

定理3. マルコフ過程が $e^{-S(C)} P(C \rightarrow C') = e^{-S(C')} P(C' \rightarrow C)$ (詳細釣り合い) と, $\sum_{C'} P(C \rightarrow C') = 1$ (確率保存則) を満たすと

$$P_{eq}(C) = \frac{e^{-S(C)}}{\sum_C e^{-S(C)}} \text{ となる. つまり 「詳細釣り合いを満たすマルコフ過程を見つければ欲しい確率分布を作れる」}$$

HMCはこれを満たす(証明は青木さん教科書P.186)

ハイブリッド・モンテカルロ(HMC):一般論

HMC = 分子動力学法(Molecular Dynamics) + メトロポリステスト

1. 初期変数 ϕ を準備し、その共役運動量 π を確率 $P(\pi) \propto e^{-\pi^2/2}$ で生成

2. 分子動力学法で変数 ϕ を更新する

$$\dot{\phi}(t) = \frac{\partial H[\phi(t), \pi(t)]}{\partial \pi(t)} = \pi(t), \quad \dot{\pi}(t) = -\frac{\partial H[\phi(t), \pi(t)]}{\partial \phi(t)} = -\frac{\partial S(\phi(t))}{\partial \phi(t)} : \text{force}$$

$$\text{ここでハミルトニアン } H[\phi, \pi] = \frac{1}{2}\pi^2 + S(\phi)$$

計算としては差分化してカエル飛び法/Omelyan integratorなど。「可逆性」が重要。
連続時間でのMDは可逆性は自明に成り立つが離散化により破れる。カエル飛びはOK

差分化して時間発展させる時に
有限の刻み幅ではエネルギーが保存しない！！
メトロポリスで正しい確率分布にする

3. 変数 ϕ' と π' を詳細釣り合いを保つように以下の確率で受け入れる(メトロポリステスト)

確率 $P(\{\phi, \pi\} \rightarrow \{\phi', \pi'\}) = \min\{1, e^{-\Delta H}\}$ で新しい $\{\phi', \pi'\}$ をaccept. ここで $\Delta H = H(\phi', \pi') - H(\phi, \pi)$

$\min\{1, e^{-\Delta H}\}$ は、 $\Delta H < 0$ ならば自動的にaccept (エネルギーが下がるならOK!).

$\Delta H > 0$ ならば確率 $e^{-\Delta H}$ でaccept (rejectされたら $\{\phi, \pi\}$ を $\{\phi', \pi'\}$ として次へ進む)

ハイブリッド・モンテカルロ(HMC): QCD

- 特徴は2つ: (1) リンク変数は行列: $U_{n,\mu} = U_l = \sum_{a=1}^8 U_l^a t^a$, 共役運動量 $P_l = \sum_{a=1}^8 P_l^a t^a$
(2) フェルミオン作用の計算(擬フェルミオン(ϕ, ϕ^*)の導入)
- リンク変数(U)の満たす分布確率は $P(U) = [\det D(U)]^{N_f} e^{-S_G(U)}$, $D^\dagger = \gamma_5 D \gamma_5$ を満たすと仮定(異なる質量, 有限密度では✗)
 $[\det D(U)]^{N_f} = [\det D^\dagger(U) D(U)]^{N_f/2}$ となり($D^\dagger D$)の固有値は実数(後で重要)
- ($N_f=2$ の時) 分布関数は, $P(U) = e^{-S_G(U)} \int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi \exp[-\phi^* (D^\dagger(U) D(U))^{-1} \phi]$
ハミルトニアンは $H = \frac{1}{2} \sum_l P_l^2 + S_G + \phi^* (D^\dagger(U) D(U))^{-1} \phi$ とかける
- リンク変数の運動方程式(ある程度手で選ぶ): $\dot{U}_l(t) = iP_l(t)U(t)$
共役運動量の運動方程式(Hが保存するように決める): $\dot{H} = \sum_a P_l^a \left[\dot{P}_l^a + i \sum_{ij} (t^a U_l)_{ij} \frac{\partial S}{\partial (U_l)_{ij}} \right] = 0$ の[...]の中がゼロ

ハイブリッド・モンテカルロ(HMC): QCD

1. 初期状態 $\{U_i\}$ を準備して共役運動量 P_l^a を分布確率 $P(P_l^a) \propto e^{-(P_l^a)^2/2}$ で生成

2. 複素変数 ξ を分布確率 $P(\xi) \propto e^{-\xi^*\xi}$ を満たすように生成(ガウス乱数)

3. 生成した ξ から $\phi = D^\dagger(U)\xi$ を計算する. すると ϕ の分布確率が

$e^{-\xi^*\xi/2} = \exp[-\phi^*(D^\dagger(U)D(U))^{-1}\phi]$ となっている. 分子動力学の間 ϕ は時間変化させない

補足: 経路積分に $\int d\xi d\xi^* e^{-\xi^*\xi/2}$ を掛けた. これはファクターを出すだけで物理に効かない事を利用

4. 分子動力学ステップの実行

$$\dot{U}_l(t) = iP_l(t)U(t), \quad \dot{P}_l^a = -i \sum_{ij} (t^a U_l)_{ij} \frac{\partial S_G}{\partial (U_l)_{ij}} - \phi^* i \sum_{ij} (t^a U_l)_{ij} \frac{\partial [D^\dagger D(U(t))]^{-1}}{\partial (U_l)_{ij}} \phi$$

補足: $[D^\dagger D(U)]^{-1}$ の微分は、良くやるテクニックで $[D^\dagger D[U]]^{-1}$ と $D(U)$ の微分の積に出来るがいずれにせよ $[D^\dagger D[U]]^{-1}$ の計算が必要。

この時固有値が実数になる行列にしておくと(比較的)高速に解ける

5. メトロポリステストで新しいリンク変数を $\min\{1, e^{-\Delta H}\}$ でaccept.

ここで $\Delta H = H' - H$ のハミルトニアンは全ハミルトニアン

3. 色々な物理量の測定法

プラケットの測定(一番基本量)

Monte Carlo, SU(2) gauge, 10^4 lattice
M.Creutz, PRD21 (1980) 2308

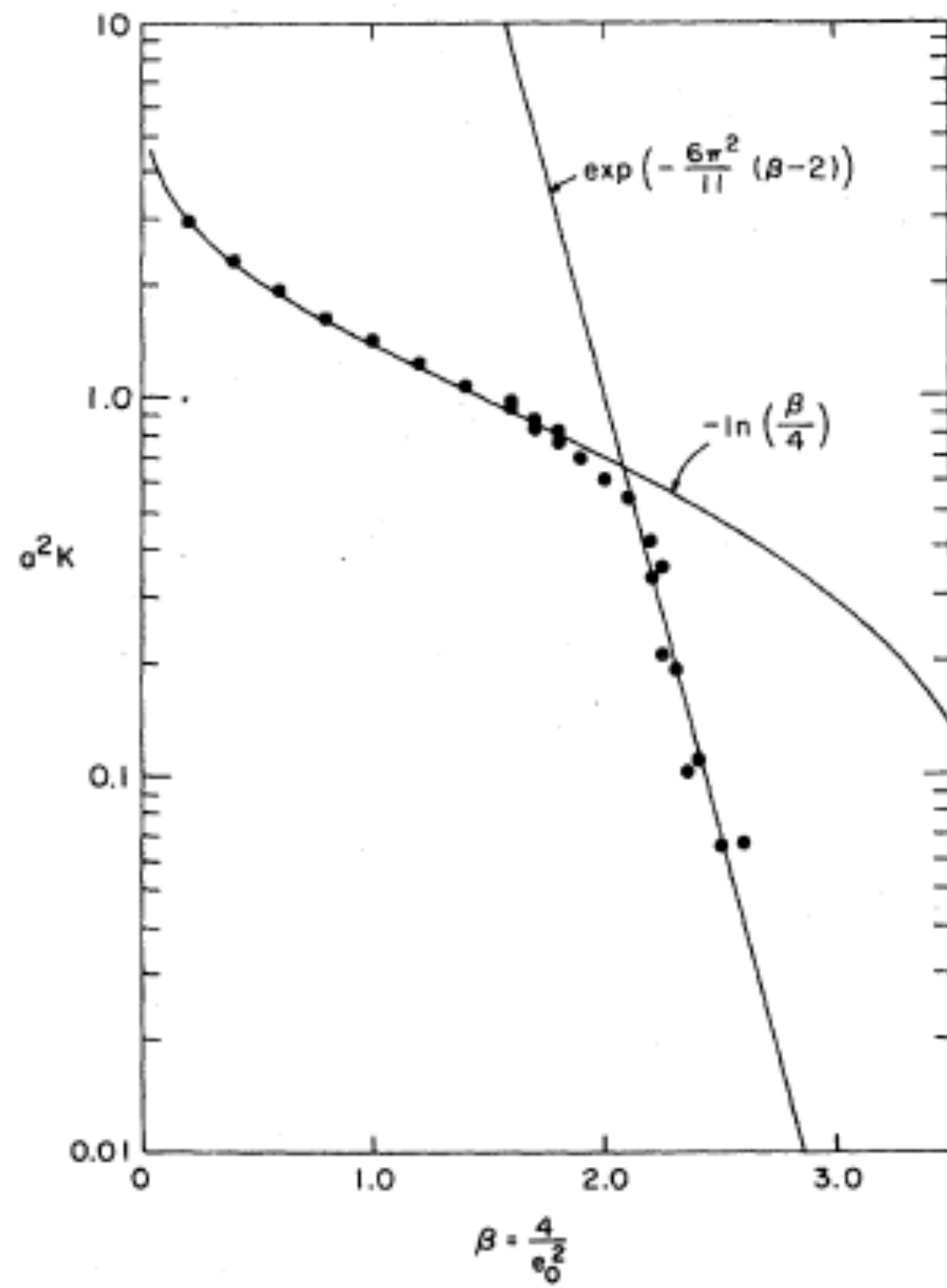


FIG. 6. The cutoff squared times the string tension as a function of β . The solid lines are the strong- and weak-coupling limits.

- どのコードでもUPDATEの度に plaquetteを測定しログファイルなどに記録している
- betaの値を変えながら計算して、平均値と誤差をbetaの関数でプロット
- 大きいbeta : 弱結合
小さいbeta : 強結合
理論的な式を一致するのを見る
途中で飛びなく滑らかに繋がる!
(連続極限を取れることを示唆)

ハドロン質量の測定

- quenched QCDでもHMCでも、まず配位を作って保存
- 配位を読み込んでquarkの2点相関関数を構成

$$S_N = \overline{\Psi(x)\Psi(y)}$$

- quarkの2点関数から欲しいハドロンの相関関数を構成
メソン演算子： $M(x) = \bar{\psi}\Gamma\psi(x)$, $\Gamma = 1, \gamma_5, \gamma_\mu, \dots$ の2点関数を計算

(各配位に関してデータ出力,ここまでスパコンで計算)

- 相関関数の長距離相関の振る舞いから質量を計算

$$\langle M(x)M^\dagger(0) \rangle = e^{-mx}$$

pion: $M = \bar{\psi}\gamma_5\psi$

rho meson: $M = \bar{\psi}\gamma_1\psi$

