

# 有限密度格子 QCD と符号問題研究の現状と課題

永田桂太郎

February 18, 2020 (March 3, 2020 更新)

有限密度格子 QCD とは有限密度 QCD, すなわちクォークの統計的な多体系を強い相互作用の第一原理である量子色力学を用いて解き明かそうという研究分野で, 物理系としてはクォークグルーオンプラズマ, 原子核, 中性子星などを対象とする. マクロな系の性質をミクロなレベルから記述することは物理学の発展の自然な流れであり, 強い相互作用の理論的な完成を見るためには有限密度 QCD を解く必要がある. また, 上記の物理系のそれぞれに未解明の課題が残されているが, 実験/観測の困難な課題も多く, その解明のためにも有限密度格子 QCD の研究が切望されている.

有限密度格子 QCD の解析にはある難問が立ちはだかっている. それが本稿の主題である符号問題である. 符号問題はマルコフ鎖モンテカルロ法の破綻として知られるが, 端的に言えば, 性質の悪い被積分関数を持つ多重積分の数値解法に関する問題である. したがって, 統計的自由度を扱う分野であればどの分野においても発生する可能性があるが, 経験的には, 相転移など物理的に重要な応用例において発生することが多い. これは必ずしも偶然ではないようで, 理論的背景の 1 つとして相転移と分配関数のゼロ点に関する Lee-Yang ゼロ点定理があり, 相転移点の近傍においてボルツマン因子の位相振動が生じやすいことが挙げられる. いずれにせよ, 符号問題の解決を必要とする理論は多く, 符号問題は現代の理論物理学における重要課題の 1 つとなっている.

物理学は, 古典力学と微積分学, 一般相対性理論とリーマン幾何学, 量子力学と行列代数, 場の量子論とくりこみ, 素粒子論と群論など, 計算方法の開発と絡み合いながら発展してきた. 解析的アプローチでは困難な問題に対する数値的アプローチの必要性を考えれば, この流れに計算科学的テーマが入ってくるのは自然流れである. QCD という非摂動場の理論の登場は素粒子分野での計算科学の発展を促したし, 最近の例では数値相対論の予言が重力波の検出に役立ったことは記憶に新しい.

有限密度格子 QCD の研究は, 2000 年頃までは少数の専門的なグループが行うテーマであったが, 近年, スーパーコンピュータの普及によって広がりを見せている. 80 年代から 90 年代にかけて, reweighting 法やカノニカル法などの符号問題回避法が提案された. 2000 年代に入るとこれらの方法が複数のグループによって応用, あるいは拡張され, 2010 年頃までには QCD 相図の高温低密度領域の研究が進展した. 高密度領域のシミュレーションは非常に難しい課題と考えられていたが, 近年, 複素ランジュバン法や Lefschetz thimble など複素作用でも利用可能なサンプリング法が考案され, これまで研究不可能であった領域の研究が始まっている.

本稿では, 有限密度格子 QCD および符号問題研究が発展期に入りつつある現時点において, この分野におけるこれまでの取り組みと現状をまとめる. 符号問題を持つ理論を研究する際の難しい点は, 原理的に正しい方法であっても, 実際の数値解析結果が正しいとは限らない事, そしてその乖離を検知しづらい事にある. 本稿では様々な方法を紹介するがそのいずれにも落とし穴があり, 注意深く計算しないと落とし穴に落ち, 非物理的な結果を得ることになる.

これまでどのような研究が行われ, それらはどこまで成功し, どのような困難があったのか, 符号問題研究で提案される方法は原理的には正しいものの, 実際には正しい答えを与えないことがあるがそれは何故かを説明し, 今後この分野の研究に着手する意欲的な研究者に過去の研究から得られる教訓を提供することが本稿の目標である.

# Contents

<b>1</b>	<b>有限密度 QCD 研究の背景</b>	<b>7</b>
1.1	バリオン物質研究における残る課題と有限密度格子 QCD の必要性	7
1.1.1	残された課題	9
1.1.2	QCD の必要性と課題	10
1.2	有限密度格子 QCD 研究の歴史	11
1.3	本稿の構成	13
<b>2</b>	<b>有限密度 QCD と符号問題</b>	<b>17</b>
2.1	格子 QCD	17
2.1.1	ユークリッド格子時空の導入	17
2.1.2	QCD 作用の離散化	18
2.1.3	主要な物理量	24
2.1.4	重点サンプリングによるゲージ配位生成	26
2.2	符号問題	28
2.2.1	複素作用における重点サンプリングの破綻	28
2.2.2	QCD における複素作用の発生	28
2.2.3	「符号問題を解く」とは	30
2.2.4	QCD の位相ゆらぎと符号問題の難易度	31
<b>3</b>	<b>符号問題解法 1-重点サンプリングに基づく符号問題回避法</b>	<b>35</b>
3.1	Rewighting 法	35
3.1.1	Rewighting 法のアイデア	36
3.1.2	Rewighting 法の応用例とオーバーラップ問題	38
3.1.3	Rewighting を用いた符号問題回避法	41
3.1.4	Rewighting の改良法-Multi-parameter reweighting 法	43
3.1.5	Rewighting 可能な理論の例	47
3.1.6	計算量の問題-なぜ有限密度格子 QCD 計算は重いのか?	48

3.2	テイラー展開法	51
3.2.1	テイラー展開法のアイデアと状態方程式への応用	51
3.2.2	状態方程式の密度依存性. テイラー展開と reweighting の比較	56
3.2.3	相転移に関する議論	56
3.3	虚数化学ポテンシャルからの解析接続	58
3.3.1	虚数化学ポテンシャル相図	58
3.3.2	解析接続を用いた QCD 相図の研究-擬相転移線の決定	61
3.3.3	Roberge-Weiss 臨界点の性質	65
3.4	カノニカル法	70
3.4.1	カノニカル法のアイデア	70
3.4.2	縮約公式	72
3.4.3	カノニカル分配関数の計算	77
3.4.4	カノニカル法を用いた相転移の研究	81
3.5	ハドロン相高密度領域への課題	92
3.5.1	Early onset 問題とは	92
3.5.2	フェルミオン行列式のゼロ温度極限	93
3.5.3	$\mu > m_\pi/2$ での予想と重点サンプリングに基づく方法の限界	99
<b>4</b>	<b>符号問題解法 2-複素作用でも利用可能な配位生成法</b>	<b>109</b>
4.1	複素ランジュバン法	109
4.1.1	実ランジュバン法	110
4.1.2	複素ランジュバン法	113
4.1.3	複素ランジュバン法の正当性条件	115
4.1.4	格子 QCD への応用	120
4.1.5	ゲージクーリング法	122
4.1.6	低温への応用-特異ドリフト問題	125
<b>5</b>	<b>おわりに</b>	<b>133</b>
<b>A</b>	<b>2章の補足</b>	<b>137</b>
A.1	格子ゲージ理論の構成	137
A.1.1	連続ミンコフスキー時空における QCD	137
A.1.2	格子 QCD	138
A.1.3	Staggered fermion の反エルミート関係式	139
A.1.4	Haar 積分測度	140
A.1.5	ディラック演算子の性質と複素化の影響	140

<i>CONTENTS</i>	5
<b>B 3章の補足</b>	<b>145</b>
B.1 Z3 変換と Roberge-Weiss 周期性 . . . . .	145
B.2 Lee-Yang 零点定理 . . . . .	146
B.3 Fourier Integral . . . . .	148
<b>C 4章の補足</b>	<b>149</b>
C.1 Fokker-Planck 方程式の導出-離散化の場合 . . . . .	149
C.2 Fokker-Planck ハミルトニアンとその平衡解 . . . . .	151
C.3 第2量子化の例 . . . . .	152
C.4 格子 QCD に対するランジュバン法 . . . . .	153



# Chapter 1

## 有限密度 QCD 研究の背景

本章ではまず、有限密度格子 QCD の対象となる主たる物理系、そこでの未解明の疑問、現在の状況を振り返り、QCD を用いた解析の必要性を説明する。

### 1.1 バリオン物質研究における残る課題と有限密度格子 QCD の必要性

#### 物質の起源は？

物質は何からできているのか、そして、どのように生まれたのか？ 物質の起源に関する謎は古くから自然科学を牽引してきた原動力である。素粒子標準理論の完成やビッグバン宇宙論の発見など 20 世紀の物理学の発展は物質の起源に関する我々の理解を飛躍させた。宇宙はインフレーションによって始まり、ビッグバンによる膨張とともに冷却し、真空の相転移が起こり質量が生成される。クォークから陽子や中性子、陽子と電子から水素が形成され、水素が集まり星となり、星の燃焼によって元素が合成され、超新星爆発によって重元素が生成される。現代の我々は、冒頭の問いに対してこのように答えることができるだろう。もちろん、その全てが実証されているわけではない。科学の歴史を紐解けば、ある時代に主流であった考え方が覆った例は数多くある。我々の理解を一つ一つ検証していくことは科学の発展において重要なステップである。

#### クォーク、グルーオン、QCD

原子核やクォークグルーオンプラズマ (Quark Gluon Plasma: QGP) などクォークやグルーオン、あるいはハドロンから構成される物質をバリオン物質と呼ぶ<sup>1</sup>。バリオン物質は宇宙の全質量の 5% 程度を占めており、割合としては少ないものの、我々が思い浮かべる身近な「物質」の主成分は原子核、すなわちバリオン物質であろう。バリオン物質に関する素粒子であるクォークとグルーオンは既に特定され、基礎理論である量子色力学 (quantum chromodynamics: QCD) も確立されており、マクロからマイクロへという理論構築の発展は完

<sup>1</sup>本稿では、用語を統一するために、クォーク物質もバリオン物質も特に断らない限り、総称してバリオン物質と呼ぶことにする。

了している。一方, QCD からハドロン現象を記述する試み, ミクロからマクロを説明する試みは, 着実に進展してきているものの, QCD の解析の煩雑さのため未だ完成していない。

QCD はカラーに関する非可換ゲージ理論で, 物質場であるクォークとゲージ場であるグルーオンに対するラグランジアンで与えられる。最もよく知られたゲージ理論は量子電磁気学 (quantum electrodynamics: QED) であろう。QED と QCD はゲージ群が異なるため, QED のゲージ粒子である光子は自己相互作用を持たないのに対して, QCD のゲージ粒子であるグルーオンは自己相互作用を持つなど, 基本的な性質が大きく異なる。QCD の有効結合定数は低エネルギーで大きく, 高エネルギーで小さくなる性質を持っており, 電磁気力とは逆の振る舞いを示す。QCD の性質の中で特に重要なのが, 漸近自由性 (asymptotic freedom), カラー閉じ込め (color confinement), カイラル対称性の自発的破れ (spontaneous breaking of chiral symmetry: SBSC) である。漸近自由性は有効結合定数が近距離で弱くなる性質であり, SLAC における  $ep$  深部非弾性散乱で実験的に見付き, その後, Gross, Wilczek, Politzer によって非可換ゲージ理論の性質として記述されることが見付かった。カラー閉じ込めは色荷を持つ粒子が単独では観測されないという性質である。閉じ込めの証明は理論的な課題として研究が続けられているものの, 現象論的にはカラーをもつ粒子が単独で観測されないこと, 格子 QCD の観点ではクォーク間ポテンシャルが無限遠方で発散することや, 格子 QCD においてカラーを持つ演算子の期待値がゼロになること (エリツァーの定理) などで閉じ込めが記述されている。カラー閉じ込めのために, 観測される自由度は陽子や中性子などの色荷を持たないハドロンとなる。

SBSC によって Nambu-Goldstone (NG) 粒子である  $\pi$  中間子が生成される。NG 粒子はゼロモードであるが, クォークがわずかに質量を持つために QCD のカイラル対称性は近似的対称性であり, その結果  $\pi$  中間子も小さいがゼロでない質量 ( $m_\pi \sim 140$  MeV) をもつ。 $\pi$  中間子質量は核力の典型的な距離  $m_\pi^{-1}$  を与え, 電磁気力と強い相互作用のスケールの分離が起こる。また, SBSC は低エネルギーのハドロン反応を特徴づけることが知られている (PCAC 関係式)。核子は  $\pi$  中間子交換などの核力によって原子核を構成している。

### QCD の相構造と原子核, クォークグルーオンプラズマ, 中性子星

水 ( $\text{H}_2\text{O}$  の多体系) が温度や圧力によって異なる相を取るように, クォークの多体系も温度や化学ポテンシャルによって異なる相を取る。

QCD はクォークとグルーオンを自由度とする系だが, 通常はカイラル対称性が自発的に破れ, カラー閉じ込めの起こった相 (ハドロン相あるいは閉じ込め相) にある。一方, 温度が高くなると, QCD のカイラル対称性が回復し, クォーク間の閉じ込めポテンシャルの無限遠方での発散も消失し, クォークグルーオンプラズマ相 (quark-gluon plasma phase: QGP 相) あるいは非閉じ込め相 (deconfinement 相) に遷移する。これは高温でクォークの運動量が十分大きくなると, 漸近自由性から理論が古典的な真空に近づくことから予想された現象であったが, 格子 QCD による非摂動的解析で実際に確かめられている。密度が非常に高くなった場合も, クォーク間の平均距離が短くなり漸近自由性に近づくことからやはり QGP 的な状態の出現が予想される。しかし, 高密度領域の研究は理論的にも実験にも難しく, どのような相が実現されるかは分かっていない。

QCD の相構造は理論的な興味にとどまらず, 物質の起源や成り立ちにも関係している。初期宇宙の高温状態ではバリオン物質は QGP 状態にあり, 膨張冷却がある程度進んだ段階で閉じ込め相への相転移, クォー



クとグルーオンからハドロンへの転化が起きたと考えられる。閉じ込め-非閉じ込め相転移の様子がわかれば初期宇宙について宇宙の晴れ上がりよりかなり早い時間まで遡ることができる。

一旦, QGP 相からハドロン相への転移が起こり陽子が形成されると, 水素が形成され, 水素が集まって星ができ, 軽元素が合成される。星の質量が十分大きいと, 超新星爆発が起こり, 重元素が合成されるとともに中性子星が残る。中性子星は主として中性子から構成されており, 巨大な原子核と見なすことができるが, 原子核と異なり, その内部構造はよくわかっていない。核力は近距離において強い斥力 (斥力芯) をもつため, 原子核は, 通常, 一定以上の密度にはならない (原子核の飽和性)。しかしながら, 中性子星は重力によって高密度に圧縮されており, 中心部では標準的な原子核密度の数倍から 10 倍程度の密度が実現されていると予想されている。核子多体系をこれほど高密度に圧縮すると, 隣あう核子の波動関数が重なりを持つようになる。直観的には, クォークがどの核子に属するか判別できなくなるので核子多体系からクォーク多体系への転移が起こると予想されるが, 現時点では, 中性子星中心部で実現される相はわかっていない。高密度における QCD の状態方程式がわかれば中性子星内部で実現される状態も理解することができる。

### 1.1.1 残された課題

バリオン物質研究における残された課題の主要なものをまとめてみる。

#### QGP 生成の証拠, 重イオン衝突実験, QCD 臨界点

重要なテーマの 1 つは宇宙初期に起こったと考えられる QGP 相-ハドロン相間相転移の解明である。これに向けて, 原子核を光速近くまで加速し衝突させる相対論的重イオン衝突実験が渡り行われてきた [1]。相転移のシグナルが観測にかかるかどうかは, 相転移の温度や次数に関わってくる。1 次相転移であれば相転移のシグナルが実験で検出できると考えられているが, 近年の格子 QCD 解析により, この転移が 150 MeV 程度でおきたクロスオーバーであることがほぼ確実となっており [2], ゼロ密度において QGP 相-ハドロン相間相転移は不連続性を持たないようである<sup>2</sup>。アメリカブルックヘブン国立研究所の相対論的重イオン衝突装置 (Relativistic Heavy Ion Collider: RHIC) では, 衝突で生成されたレプトン対の温度分布から衝突初期の温度が推定された。これは格子 QCD で得られた転移温度よりも十分高く, RHIC で QGP 状態が実現されたことはほぼ確実と考えられている。最近では, 欧州 CERN の巨大ハドロン衝突器 (Large Hadron Collider: LHC) でも実験が行われており, さらに高い温度が実現されている。しかしながら, QGP-ハドロン相間の転移はクロスオーバーであるため, 転移の直接的なシグナルを観測することは難しいようである。

QGP-ハドロン相間相転移の直接観測として期待される試みの 1 つがビームエネルギー探索 (Beam Energy Scan: BES) プログラムである [3-5]。重イオン衝突後の火の玉物質が膨張冷却して行く過程で, 系の状態が QCD 臨界点を經由した場合, 臨界現象を通して衝突初期の情報が得られると期待されている。しかしながら, これまでのところ QCD 臨界点は発見されていない。QCD 臨界点については多くの現象論研究があるものの, そもそも存在するかどうか, また存在した場合の相図上の位置が全くわかっていない。QCD には QCD 相図

<sup>2</sup>そのため, この転移温度は擬転移温度 (pseudo critical temperature) とも呼ばれている。

上の臨界点の有無の決定, および臨界点が存在する場合はその温度, 密度の確定が期待されている.

ハドロンの性質への核媒質効果, および中性子星内部で実現される相

もう1つの未解明問題が, 原子核内部あるいは有限密度下でのハドロンの質量の測定である. 原子核を有限密度バリオン物質とみなすと, 原子核内部でカイラル凝縮が減少している可能性がある. ハドロンの質量, 結合定数などは SBCS に伴って生成されているため, カイラル凝縮の減少とともに値を変える. これは, カイラル対称性の部分的回復 (partial restoration of chiral symmetry) と呼ばれ, SBCS の直接検証方法の1つとして議論されている. 原子核内部でのハドロンの質量変化を示唆する実験報告もあるが, 他の実験施設で再現されたものは今のところないようである. 現象論的研究も多数行われているが, 有限密度下ではハドロンの質量, 結合定数, 相互作用距離全てが変化し, かつそれらの実験データがないため, 不定性を排除できず, 信頼できる結果を得るのは不可能である. 媒質中でのハドロンの性質を定量的に理解するためには QCD に基づく研究が必須である.

もう一つのテーマは上述した中性子星の内部状態の決定である. 中心部では標準原子核密度を大きく超える密度が実現されており, 直感的には非閉じ込め相に転移していると考えられるが, 閉じ込め状態を仮定すると状態方程式が柔らかくなる問題も知られており, どのような状態が実現するかは不明である.

## 1.1.2 QCD の必要性と課題

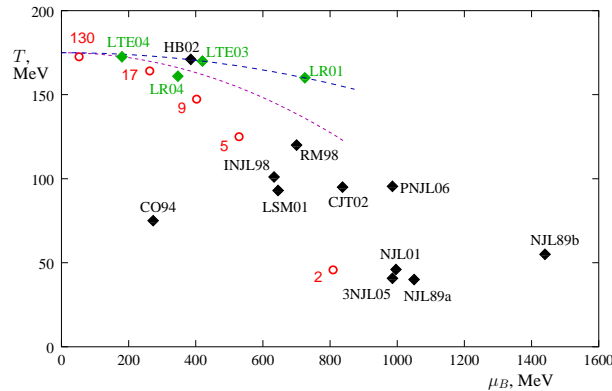


Figure 1.1: QCD 臨界点に関する様々な結果のレビュー. 文献 [6] より抜粋.

上で述べた問題はいずれも四半世紀にわたって研究が続けられてきたテーマである. これらの長年にわたる問題に結論を与えるための最も有力な手法が実験であることはいうまでもないが, 実験で達成可能な温度や密度, 測定可能な物理量には制限がある.

これまでに多く行われてきたのは, 有効理論を用いたアプローチであるが, 有効理論は扱いは容易なもの, 有効ラグランジアン of 不定性, 量子補正, パラメータの不定性など様々な不定性が有るため結果の客観性が低い. QCD 相図研究で関心のある量の多くは普遍量でないため, 結果が模型の詳細に依存してしまう. 有効ラグランジアンはカイラル対称性や閉じ込めなど QCD の性質の一部を抽出して構築されるが, 可能なラ

グランジアンは無数に存在する。また、それを解く際の量子補正も無数に存在する。低次のループで打ち切られることが多いが、収束性が保証されるかは不明である。有効理論は多数のパラメータを含むが、パラメータは実験で測定される物理量 (核子や  $\pi$  中間子の質量, パイオン崩壊定数  $f_\pi$ ) を用いて決定される。これらはゼロ温度, ゼロ密度で測定された量であるため, これらの量をインプットとして有効理論を有限密度に拡張してよい保証もない。様々な不定性のために, 現象論研究で得られる結果は文献によって異なる。例えば, Stephanov によるレビューでは, QCD 臨界点の相図上の位置に対する有効理論の結果に大きな不定性があることが報告されている [6](図 1.1)。現象論研究の限界を露呈したもう 1 つの例は, 太陽質量 2 倍の質量を持つ中性子星の発見 [7] である。従来の現象論研究では太陽質量の 2 倍は中性子星質量の限界値とされており, Demorest らの発見はそれまでの現象論研究に疑問を投げかけるものとなった。現象論的モデルを改良する試みは続いているが, その信頼性を保証する事は難しい課題と思われる。現象論的手法は扱いやすく, QCD 相図の定性的な理解の進展に大きく貢献したが, 実験データのない領域に対する定量的予言は欠く。

現時点では, 有限密度バリオン物質に対して確立された解析法は存在せず, バリオン物質の起源に迫るためにはこの状況を打破する必要がある。バリオン物質はクォークから構成されている。統計力学的場の理論の利用を許せば, 全てのバリオン物質は QCD に温度や化学ポテンシャルを導入することで記述できるはずである。実験/観測が困難な状況においても, QCD であれば不定性なく定量的研究を行うことが可能である。

## 1.2 有限密度格子 QCD 研究の歴史

バリオン物質を不定性なく定量的に研究するためには, クォーク化学ポテンシャルを導入した有限密度 QCD を解く必要があるが, その解析法が確立されていない。QCD の非摂動的解析法である格子ゲージ理論では経路積分を解くために重点サンプリング (importance sampling) を用いる。クォーク化学ポテンシャルが非ゼロ有限の場合には, ユークリッド作用が複素数となり, 重点サンプリングが破綻する。複素作用あるいは非エルミートなハミルトニアンを持つ分配関数に対して重点サンプリングが破綻する問題は「符号問題」あるいは「複素作用問題」と呼ばれている。符号問題は相転移など応用上重要な問題で発生することも多く, 現代物理学における挑戦的な課題の 1 つとなっている。この問題を打破するためにこれまでに様々な研究が行われてきた。本稿では, それらのうちのいくつかを解説していくが, 本稿の記述は時系列に沿ったものではないので, ここで, 有限密度格子 QCD のこれまでの歴史を簡潔に振り返っておく。

格子 QCD は QCD の非摂動的解法として K. G. Wilson によって 1970 年代半ばに提唱された。それからしばらく経った 1980 年代中頃に格子 QCD を有限バリオン密度系へ応用する試みが始まった。格子 QCD ではモンテカルロ法を用いて経路積分を解くが, 多重積分の数値解法は計算コストの大きい問題である<sup>3</sup>。特に, フェルミオンを加えた計算には大規模行列 (ランクの大きい行列) の行列式計算が必要であり, 最初の試みは計算コストが少ない 2 カラー QCD の研究に対して行われた [8]。2 カラー QCD の研究の後, 3 カラーの場合にクォーク化学ポテンシャルを導入すると, 作用が複素数となりモンテカルロ法が破綻することが明ら

<sup>3</sup> 計算科学において, 計算コストといった場合, 計算に要する CPU 時間, 計算に必要なメモリのどちらかあるいは両方を指す。どちらか一方が不十分だと数値計算に困難が生じ, あまりに不足が大きければ計算遂行が不可能となってしまう。

かになった。分配関数は、基本的に、素朴な数値積分は実現不可能なような多重積分だが、モンテカルロ法はそのような計算を実行可能にしている強力な計算手法である。しかしながら、被積分関数が複素数の場合、モンテカルロ法が破綻してしまい経路積分を解く事ができない。

有限密度格子 QCD の研究は符号問題に対する方法の開発とともに進展してきた。これまでの研究の流れは 2000 年および 2010 年頃を境に 3 つの時代に大別できる。1980, 90 年代は黎明期であり、現在よく知られている方法の基礎となるアイデアの多くがこの時期に提案されている。この時期によく研究されたテーマは原子核、中性子星に関連する低温・有限密度領域である。しかし、低温にはある難問があり、格子 QCD に基づく核物質の再現は成功しなかった。実は、低温有限密度領域は現在でも難問として知られており、これは本稿でも度々現れる。格子 QCD の研究は、基本的に、時代とともに計算機の性能が向上し計算が高精度化するため、最新の研究が重視され過去の論文は忘れられる傾向にあるが、ハード面で今と比べるべくもないこの時期に、多くの方法が提案され、数値計算が遂行された事は特筆に値する。

2000 年頃を境に、RHIC 実験と関連した高温低密度領域の研究が増加している。2000 年代初頭には Fodor と Katz が QCD 臨界点探索を行い [9]、これを契機として QCD 臨界点やハドロン相-QGP 相間相転移に関する研究が盛んに行われるようになっていく。また、2000 年代に入ると、スーパーコンピュータの普及のおかげで、有限密度格子 QCD に取り組む研究者の数も増加している。複数のグループによって独立な計算が行われたこと、計算機性能の向上によって個々の計算が高精度化したことで、計算結果の比較検証が可能になり、研究が一層進展した。de Forcrand は高温・低密度領域におけるハドロン相と QGP 相間のクロスオーバー転移の境界線に関する複数の結果をまとめ、それらが低密度領域で概ね無矛盾であること、高密度領域では計算法や計算グループによって結果に差異が発生することを示している [10]。異なる手法や異なるグループの研究が無矛盾な答えを与えたことは結果の客観性を示唆する 1 つの傍証であり、有限密度格子 QCD 研究が一定のレベルまで進展したと判断してよいものと思う。後に詳しく述べるが、低温高密度領域に比べて高温低密度領域では符号問題が比較的マイルドであり、有限密度格子 QCD 研究は行いやすい。扱いやすい領域をターゲットとした事も 2000 年代の発展の一因であったように思われる。

2010 年頃がもう 1 つの転換期となっている。まず、reweighting などの応用が進むと同時にその限界が明らかになり、高密度領域の解析には新しい方法が必要であるとの認識が広まった。この頃から、有限密度格子 QCD 研究は 2 つの方向性で進展してきている。1 つは低密度領域で従来の方法の高精度化を図るもので、物理的には  $T_c$  近傍におけるバリオン数ゆらぎなど RHIC 実験へ応用を目指す方向である。もう 1 つは高密度領域を調べるために新しい符号問題解法を構築する試みである。2010 年頃からこの方向性が急速に進展しつつあり、複素ランジュバン法、レフシェッツシンプル法、テンソルネットワーク法、双対変数法、ダイアグラマティックモンテカルロ法など新しい方法の提案が続いている。テンソルネットワークは、量子情報や物性分野で発展してきたテンソルくりこみ群の応用であり、このような観点で分野融合も進んできている点は注目すべき点である。また、テンソル繰り込みと関連したテーマとして量子もつれ(エンタングルメントエントロピー)があるが、ゲージ理論や QCD へのエンタングルメントエントロピーの研究も始まっている。これらの新しい方法は厳密解の知られた理論のいくつかに対しては正しい結果を与えることが報告されている。QCD への応用の観点では複素ランジュバン法が一步進んでおり、2015 年頃には高温高密度 QCD に対するシミュ

レーションが遂行されている。また、周辺的话题に目を向けると、2010年頃にはRHICにおけるビームエネルギー探索実験 [3] の開始、Demorestらによる太陽質量2倍の質量を持つ中性星の発見 [7] があり、実験・観測の点でも状況に変化が見られる。一方、複素ランジュバン法を低温有限密度領域に応用する際の困難も見つかっている。低温有限密度領域は複素ランジュバン法だけでなく、Lefschetz thimble法でも複数のthimbleの重ねあわせという難しい問題が生じることが指摘されている。これは1990年代に解けなかった問題と原因そして発生状況が同じで、核物質に相当するような密度領域で起こる。これまでのいくつかの研究によって、問題の起源がフェルミオン行列式のゼロ点に関係することも明らかになっている。このような問題は符号問題の中でも特に難しい問題のようである。近年もQCD臨界点、原子核密度領域、中性子星相当の密度領域を目指して、方法の改良が続けられている。

### 1.3 本稿の構成

有限密度格子QCD研究は以前に比べて飛躍的に発展しているが、非専門家にはあまり理解されていないようである。それにはいくつかの理由があるだろうが、1つには重点サンプリングの概念がシミュレーション経験がないとわかりづらい点が挙げられる。この点を理解していないと重点サンプリングの破綻がどのような困難をもたらすのか、またその対処方法がどのような役割を果たすのかが理解できない。もう1つの理由は符号問題に対する方法では形式上の正しさと実際の結果が乖離することがあり、またその問題を検知することも難しい点が挙げられる。

符号問題とはモンテカルロ法における重点サンプリング法の破綻であり、多重積分における積分点の抽出ができない問題である。性質の悪い被積分関数を持つ多重積分に対して、効率良い数値積分法を開発する問題と言い換えても良い。計算量に関連した問題であり、フェルマーの定理やポアンカレ予想のように命題の真偽を問う問題とは異なる。積分の一般的解法が存在しないように、数値積分法にも被積分関数の性質によらずに常に有効な一般的な方法はおそらく存在しない。数値積分の精度が被積分関数の性質に依存するように、符号問題の難易度も作用の性質に依存する。有限密度格子QCDでは、高温や低密度で有効な方法が、温度の低下あるいは密度の増加とともに破綻する事が多いが、それは方法に原理的な欠陥があるのではなく(原理的な欠陥が存在する場合もあるだろうが)、被積分関数であるQCD作用の性質が変化するのである。2章ではまず格子QCDについて簡潔にまとめた後、格子QCDにおいて符号問題が発生する仕組みを説明する。符号問題を解くとはどういうことかを考察し、符号問題の難易度の指標である平均位相因子の温度と化学ポテンシャル依存性についての結果を紹介する。

3章では、符号問題解法の中で、reweighting法、Taylor展開法、虚数化学ポテンシャルからの解析接続、カノニカル法に焦点をあて、方法のアイデア、妥当性、有効範囲などを詳しく説明する。3章で紹介する方法は、ゲージ配位生成を重点サンプリングに基づいており、その意味で同種の方法と分類できる。これらの方法はQCD相図の高温低密度領域で有効である。3.5章では、ハドロン相有限密度領域で発生するearly onset問題を紹介する。Early onset問題はreweightingやTaylor展開で解決することは難しく、この問題の存在のために、QCD相図の解明には複素作用でも利用可能な経路積分法/配位生成法の開発が必須である。近年、そう

いった方法を開発する研究が活発化している。4章では、このような方法の中から、QCDへの応用が実現されている複素ランジュバン法について説明する。

有限密度格子 QCD および符号問題に関する文献は細かい派生も数えるとかなりの数にのぼり、現在も方法開発が続いている。その網羅的なレビューを行うことは筆者の能力を超えている。むしろ、本稿では、筆者が実際に研究を行った題材を中心に、有限密度格子 QCD 研究の基礎をなすアイデアの紹介を目標とする。有限密度格子 QCD に関するレビューは複数あるが、80, 90 年代の Glasgow グループによる結果は [11] にまとめられている。2003 年の文献なので紹介されている結果は少し古いですが、[12] が様々な方法を簡潔にまとめており、入門向けのレビューである。最近のレビューとしては、2010 年頃までの状況が [13]、2015 年頃の状況が [14] にまとめられている。これらのレビューは約 5 年をあけて出版されているがその間に様々な進展があることが見てとれる。

有限密度格子 QCD に関する研究成果の多くは毎年開催される国際会議 Lattice Field Theory で紹介され、紀要に発表されているので、そちらを参照すると最新の成果をある程度追うことができる。

## 参考文献

- [1] 秋葉康之, クォーク・グルーオン・プラズマの物理実験室で再現する宇宙の始まり. 共立出版, 2014.
- [2] Y. Aoki, G. Endrodi, Z. Fodor, S. Katz, and K. Szabo, *The Order of the quantum chromodynamics transition predicted by the standard model of particle physics*, Nature **443** (2006) 675–678, [[hep-lat/0611014](#)].
- [3] **STAR Collaboration** Collaboration, M. Aggarwal et. al., *Higher Moments of Net-proton Multiplicity Distributions at RHIC*, Phys.Rev.Lett. **105** (2010) 022302, [[arXiv:1004.4959](#)].
- [4] **STAR Collaboration** Collaboration, L. Adamczyk et. al., *Energy Dependence of Moments of Net-proton Multiplicity Distributions at RHIC*, Phys.Rev.Lett. **112** (2014) 032302, [[arXiv:1309.5681](#)].
- [5] **STAR Collaboration** Collaboration, L. Adamczyk et. al., *Beam energy dependence of moments of the net-charge multiplicity distributions in Au+Au collisions at RHIC*, [arXiv:1402.1558](#).
- [6] M. Stephanov, *QCD phase diagram: An Overview*, PoS LAT2006 (2006) 024, [[hep-lat/0701002](#)].
- [7] P. Demorest, T. Pennucci, S. Ransom, M. Roberts, and J. Hessels, *Shapiro Delay Measurement of A Two Solar Mass Neutron Star*, Nature **467** (2010) 1081–1083, [[arXiv:1010.5788](#)].
- [8] A. Nakamura, *Quarks and Gluons at Finite Temperature and Density*, Phys. Lett. **B149** (1984) 391.
- [9] Z. Fodor and S. Katz, *Lattice determination of the critical point of QCD at finite T and mu*, JHEP **0203** (2002) 014, [[hep-lat/0106002](#)].
- [10] S. Kratochvila and P. de Forcrand, *The canonical approach to finite density QCD*, PoS LAT2005 (2006) 167, [[hep-lat/0509143](#)].

- [11] I. M. Barbour, S. E. Morrison, E. G. Klepfish, J. B. Kogut, and M.-P. Lombardo, *Results on finite density QCD*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **60A** (1998) 220–234, [[hep-lat/9705042](#)].
- [12] S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, and T. Takaishi, *Lattice QCD at finite density: An Introductory review*, Prog.Theor.Phys. **110** (2003) 615–668, [[hep-lat/0306031](#)].
- [13] P. de Forcrand, *Simulating QCD at finite density*, PoS LAT2009 (2009) 010, [[arXiv:1005.0539](#)].
- [14] G. Aarts, *Introductory lectures on lattice QCD at nonzero baryon number*, J. Phys. Conf. Ser. **706** (2016), no. 2 022004, [[arXiv:1512.0514](#)].





## Chapter 2

# 有限密度 QCD と符号問題

この章では、有限密度格子 QCD において符号問題が発生する仕組みと、それがどのような問題をもたらすのかを解説する。まず、格子 QCD を定義し、その数値解法における重点サンプリングの役割を説明する。次に、クォーク化学ポテンシャルを導入すると QCD 作用が複素数となり、重点サンプリングが破綻することを説明する。符号問題を解くとはどういうことなのかを考察した後に、QCD 作用の虚部の性質が温度や密度に依存しており、そのために QCD 相図上でも温度密度によって符号問題の難易度が異なる事を説明する。

尚、格子 QCD に関する説明は本稿に必要最低限の内容に留めた。格子 QCD に関する詳しい内容が知りたい場合は、格子 QCD の専門書を参照してほしい。格子 QCD の標準的な教科書としては、和書では [1]、洋書では [2] がある。また、比較的新しい教科書として [3] には有限密度格子 QCD について簡単な説明がある。

## 2.1 格子 QCD

### 2.1.1 ユークリッド格子時空の導入

4次元ユークリッド時空における QCD を考える。QCD のゲージ作用  $S_g$ 、およびフェルミオン作用  $S_f$  は

$$S_g = \frac{1}{2} \int d^4x \operatorname{tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad (2.1)$$

$$S_f = \int d^4x \bar{\psi}(x) (\gamma_\nu D_\nu + m + \mu\gamma_4) \psi(x) \quad (2.2)$$

で与えられる<sup>1</sup>。  $x$  は 4次元ユークリッド座標  $(x_1, x_2, x_3, x_4)$ 、 $D_\nu$  は共変微分、 $F_{\mu\nu}$  は SU(3) Yang-Mills 理論における場の強度、 $\psi$  はクォーク場を表す。  $m$ 、および  $\mu$  はクォークの質量および化学ポテンシャルである。  $\gamma_\nu$ 、 $(\nu = 1, 2, 3, 4)$  はユークリッド化されたディラック行列を表し、 $\{\gamma_\alpha, \gamma_\beta\} = \delta_{\alpha\beta}$  を満たす。ユークリッド  $\gamma$  行列はエルミート行列  $\gamma_\nu^\dagger = \gamma_\nu$  であり、また共変微分は反エルミート  $D_\nu^\dagger = -D_\nu$  である。

<sup>1</sup>ゲージ不変性とくりこみ可能性を保つ項として、ラグランジアンに  $\theta$  項  $\mathcal{L} = \epsilon^{\mu\nu\alpha\beta} \operatorname{tr} F_{\mu\nu} \tilde{F}_{\alpha\beta}$  が加わることが許されるが、 $\theta$  項はゼロか、あっても極めて小さいと考えられており、本稿では議論しない。

次に経路積分量子化を行う. QCD ラグランジアンはクォーク場について双一次形式なので経路積分のグラスマン部分は解析的に解ける. グラスマン経路積分の公式

$$\int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} e^{-\int \bar{\psi} \Delta \psi} = \det \Delta$$

より, フェルミオン行列式  $\det \Delta$  が現れる. 簡単のために  $N_f$  個の縮退したクォークがある場合を考えると, QCD の分配関数は以下の式で与えられる.

$$Z = \int \mathcal{D}A_\mu (\det \Delta)^{N_f} e^{-S_g}. \quad (2.3)$$

有限密度格子 QCD の研究対象は QGP 相からハドロン相まで広いエネルギースケールを含むので, 非摂動的計算である格子 QCD による解析が必要である. QCD の非摂動解法として標準的なものは格子 QCD である. まず, 時空を格子状に離散化する.  $x, y, z$  および  $t$  方向の格子点の数をそれぞれ  $N_x, N_y, N_z$  および  $N_t$  とし, また格子間隔を  $a$  とする.  $a$  より短波長のモードが取り除かれるので, 紫外発散が除去され, 理論が正則化される. 格子の大きさは空間方向のサイズ,  $aN_x, aN_y, aN_z$  および時間方向のサイズ  $aN_t$  によって決まる. 格子サイズは物理的に十分な大きさに設定する必要があるが, 計算機資源の制約から, 現実的な時間で実行可能な格子サイズに制限される. 後述するように, 有限密度格子 QCD は通常の格子 QCD シミュレーションと比べて計算量が多くなるため, 小さい格子サイズでの計算が行われることも多い. 連続極限 ( $a \rightarrow 0$ ) をとることで連続時空における QCD が再現される.

2つの格子点  $n = (n_x, n_y, n_z, n_t)$  と  $n + \hat{\mu}$  の間のリンクに対してリンク変数  $U_{n\mu} = e^{igaA_\mu(n)}$  を導入する (図 2.1). ここで  $\hat{\mu}$  は  $\mu (= 1, 2, 3, 4)$  方向の単位ベクトルを表す. リンク変数は SU(3) 行列である. 経路積分および物理量  $O$  の期待値は以下の式で与えられる.

$$Z = \int \left( \prod_{n,\mu} dU_{n,\mu} \right) (\det \Delta)^{N_f} e^{-S_g}, \quad (2.4)$$

$$\langle O \rangle = Z^{-1} \int \left( \prod_{n,\mu} dU_{n,\mu} \right) O \cdot (\det \Delta)^{N_f} e^{-S_g}. \quad (2.5)$$

$dU$  は Haar 不変測度である (A.1.4 章参照).

## 2.1.2 QCD 作用の離散化

### ゲージ作用の離散化

時空の離散化に伴い, QCD 作用も離散化する必要がある. 格子上での QCD 作用は 2 条件, (i) 格子時空上で局所ゲージ不変性を持ち, (ii) 連続極限 ( $a \rightarrow 0$ ) で QCD 作用を再現する, を満たす必要がある.

条件 (i) を満たすために, まず ゲージ変換を考える. リンク変数のゲージ変換は

$$U_{n\mu} \rightarrow U'_{n\mu} = g_n U_{n\mu} g_{n+\hat{\mu}}^{-1} \quad (2.6)$$

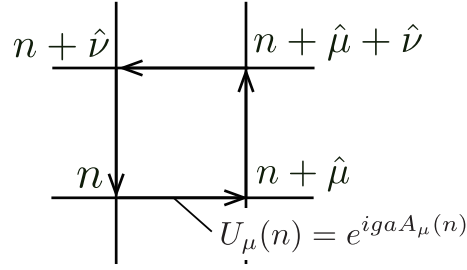


Figure 2.1: 単位正方格子 (プラケット): 格子点  $n$  と  $n + \hat{\mu}$  の間にリンク変数  $U_{n\mu}$  が定義され, 最小正方格子に沿うリンク変数の積をプラケットと呼ぶ.

で定義される.  $g_n$  は  $SU(3)$  の元であり,  $g_n^{-1} = g_n^\dagger$  を満たす. リンク変数のゲージ変換はそのリンクの両端の座標によって決まるから, リンク変数を用いて閉じたループを構成すればゲージ不変な演算子となることがわかる. そのような演算子の中で最も簡単な演算子は単位正方格子 (プラケット)

$$U_{\mu\nu}(n) = U_{n,\mu} U_{n+\hat{\mu},\nu} U_{n+\hat{\nu},\mu}^\dagger U_{n,\mu}^\dagger, \quad (2.7)$$

である. プラケットを図示したものが図 2.1 である. (2.7) に (2.6) を用いると,

$$U_{\mu\nu}(n) \rightarrow g_n U_{\mu\nu}(n) g_n^\dagger$$

となり,  $\text{tr} U_{\mu\nu}(n)$  がゲージ不変となることがわかる. 同様の計算は閉じたループであれば成り立つので, 閉ループのトレースをとったものがゲージ不変な演算子である.

次に条件 (ii) を満たすような演算子, すなわち連続極限 ( $a \rightarrow 0$ ) において QCD 作用を与えるような演算子は何かを考えてみよう. 連続極限で QCD 作用を再現するような最も簡単な演算子はプラケット (2.7) である. プラケットを  $a$  で展開すると<sup>2</sup>,

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}(n) &= e^{iga^2 F_{\mu\nu}}, \\ &= \mathbf{1} + iga^2 F_{\mu\nu} + \frac{1}{2}(iga^2)^2 F_{\mu\nu}^2 + \dots \end{aligned} \quad (2.8)$$

と展開できる<sup>3</sup>. 右辺 3 項目は格子点  $n$  におけるゲージ作用の  $\mu, \nu$  成分  $F_{\mu\nu}^2$  を含むので, これを抜き出せばよい.  $F_{\mu\nu}$  は  $3 \times 3$  のエルミート行列であり, その固有値は実数なので,  $\text{tr} (F_{\mu\nu})^n$  は実となる. (2.8) 式のトレースをとったとき, 右辺の偶数番目の項は虚数, 奇数番目の項は実数となる. したがって, (2.8) 式のトレースをとり, さらにその実部を取れば

$$\text{Re tr} U_{\mu\nu}(n) = \text{tr} \left[ \mathbf{1} - \frac{1}{2} g^2 a^4 F_{\mu\nu}^2 + \dots \right],$$

を得る. 変形すると,

$$a^4 \text{tr} F_{\mu\nu}^2 = \frac{2}{g^2} \text{Re tr} [\mathbf{1} - U_{\mu\nu}(n)].$$

<sup>2</sup>[1] の 4 章参照

<sup>3</sup>  $F_{\mu\nu}(n)$  は  $n, \mu, \nu$  が与えられた時に 1 つの  $3 \times 3$  行列を表す.  $F_{\mu\nu}^2$  は  $\mu, \nu$  の繰り返しを含むが, これは  $SU(3)$  行列  $F_{\mu\nu}$  の積を表しており, ここでの  $\mu, \nu$  の繰り返しはアインシュタインの規約を表さない ( $\mu, \nu$  に関する和を意味しない) ことに注意.

ここから、ゲージ作用を

$$S_g = -\frac{2}{g^2} \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} \text{Re tr}[U_{\mu\nu}(n)], \quad (2.9)$$

$$= -\frac{1}{g^2} \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} \text{tr}[U_{\mu\nu}(n) + U_{\mu\nu}(n)^\dagger], \quad (2.10)$$

と定義すれば、 $S_g$  は格子上で局所ゲージ不変性を持ち、かつ  $a \rightarrow 0$  でゲージ作用 (2.2) を再現することがわかる。文献ではゲージ結合定数  $g$  の代わりに、 $\beta = 2N_c/g^2$  ととることが多い [2].

### フェルミオン作用の離散化

フェルミオン作用に対しては、ゲージ不変性と連続極限の 2 つの条件に加えてカイラル対称性を課す必要があるが、格子上的カイラル対称性の扱いは簡単ではない [1].

よく使われる格子フェルミオンの 1 つは

$$\Delta_{xy} = m \delta_{xy} + \sum_\nu \frac{\eta_\nu(x)}{2a} \left[ e^{\delta_{\nu 4} \mu a} U_{x\nu} \delta_{x+\hat{\nu}, y} - e^{-\delta_{\nu 4} \mu a} U_{x-\hat{\nu}, \nu}^\dagger \delta_{x-\hat{\nu}, y} \right] \quad (2.11)$$

で定義されるもので、スタaggerドフェルミオンまたは Kogut-Susskind(KS) フェルミオンと呼ばれる。 $x$  と  $y$  は格子座標を表す 4 元ベクトル、 $m$  および  $\mu$  はクォークの質量および化学ポテンシャル、 $\eta_\nu(x)$  は Kawamoto-Smit 位相と呼ばれるスカラー量である。 $\Delta_{xy}$  は連続時空では微分演算子で表されるが、格子上では時空と内部自由度の添字を持つ行列であり、 $\Delta_{xy}$  は格子座標  $x, y$  に関する行列であるということを表す。省略したが、演算子  $\Delta_{x,y}$  はカラーの添字も持っており、カラーについても行列となっている。化学ポテンシャル  $\mu = 0$  がゼロの場合、スタaggerドフェルミオン作用の中でディラック演算子に相当する項 ((2.11) 式右辺の 2 項目) は反エルミート性を持つ。さらに、 $\Delta$  自体は、 $\gamma_5$  行列を  $\epsilon_x = (-1)^{x_1+x_2+x_3+x_4}$  と定義すれば、 $\gamma_5$  エルミート性

$$\epsilon_x \Delta_{xy} \epsilon_y = \Delta_{yx}^\dagger \quad (2.12)$$

を満たす。スタaggerドフェルミオン作用における反エルミート性の証明については A.1.3 章を参照。ディラック演算子の反エルミート性は符号問題に関係しているため、2.2 章で詳しく説明する。

KS フェルミオンは主要な格子フェルミオンの中でシミュレーションの際の計算量が少く、実際のシミュレーションでもよく利用される定式化である。KS フェルミオンの伝搬関数は  $2^4 = 16$  個の極を持っており、フェルミオンダブラーと呼ばれる余分な粒子を含んでいる。その 16 個の自由度を利用して 4 フレーバに対応するフェルミオン作用と解釈されることがある<sup>4</sup>。KS フェルミオンを用いて 1 種類のフレーバを表現するためにはフェルミオン行列式の 4 乗根をとる操作が必要となり、この 4 乗根技法 (fourth root trick) の正当性については意見がわかれている。 $\mu = 0$  の場合、連続極限外挿を取れば 4 乗根技法は問題を起こさないと考えられている。一方、 $\mu \neq 0$  の場合、4 乗根技法がフェルミオン行列式の位相の不定性を引き起こす事が指摘されているが [4]、これまでの有限密度格子 QCD 研究はそれほど高精度ではないため、4 乗根技法の正当性

<sup>4</sup>物理的なフレーバと区別して“taste”と呼ばれることがある。

はあまり問題になっていない。本稿でも 4 乗根技法の正当性については議論しないが、将来的に計算が高精度化した際には、検証が必要となるだろう。

KS フェルミオンの他によく用いられるのが Wilson フェルミオンである。これは、作用に補正項を加えることでダブラーを除去する定式化である。具体的には、

$$\Delta = D_\mu \gamma_\mu + m + raD_\mu D_\mu$$

という形のフェルミオン行列となる。3 項目は Wilson 項と呼ばれる項で、ダブラーと物理モードを分離させる項である。格子上の Wilson フェルミオンは

$$\begin{aligned} \Delta_{x,y} = & \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\nu=1}^4 \{ e^{+\mu a \delta_{\nu 4}} (r - \gamma_\nu) U_{x\nu} \delta_{y,x+\hat{\nu}} + e^{-\mu a \delta_{\nu 4}} (r + \gamma_\nu) U_{y\nu}^\dagger \delta_{y,x-\hat{\nu}} \} \\ & - \delta_{x,y} C_{SW} \kappa \sum_{\mu \leq \nu} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \end{aligned} \quad (2.13)$$

で定義される。 $r$  のかかる項が Wilson 項である。連続の場合を考えると明らかだが、Wilson 項はスピノル空間において質量項と同じく対角成分に入り、これによりフェルミオンダブラーの縮退を解くことができるが、その代償としてカイラル対称性を破ってしまう欠点がある。Wilson 項は irrelevant な演算子なので、 $a \rightarrow 0$  極限をとると Wilson 項の寄与はなくなり、Wilson フェルミオンは連続時空中における正しいフェルミオン作用を再現する。ここで、 $\kappa$  はホッピングパラメータとよばれる。(2.13) 式は、質量項を 1 とするように規格化されており、 $\kappa$  はクォーク質量の関数である。Wilson フェルミオンの場合、この記法が標準的に用いられる。最後の  $C_{SW}$  の項は作用の離散化誤差を低減するために導入される項で、クローバー項と呼ばれる [5]<sup>5</sup>。

2 つの定式化を紹介したが、(2.11) はカイラル対称性を持つがダブラーと呼ばれる非物理的モードを持ち、(2.13) はダブラーを持たないがカイラル対称性を破ってしまう。この背景には、Nielsen-Ninomiya の定理と呼ばれる No-Go 定理があり、並進対称性、エルミート性、局所性およびカイラル対称性を持つ双一次形式のフェルミオン作用はダブラーを持つことが証明されており、フェルミオンダブラーの除去とカイラル対称性は、他の条件が満たされている限り、両立しない<sup>6</sup>。カイラル対称性を実現するような作用としてドメインウォールフェルミオンやオーバーラップフェルミオンの定式化が発見されている。これらのカイラルフェルミオンについては、化学ポテンシャルの導入法が確立されていない。例えば、オーバーラップフェルミオンに用いられる符号関数が一意的に定義できなくなってしまうという問題がある。現在のところ、オーバーラップフェルミオンは化学ポテンシャルの導入法が議論されている段階であり [6, 7]、実際の応用例は少ない。本稿で紹介する文献は全て KS フェルミオンと Wilson フェルミオンの 2 つの定式化を用いたものとなっている。

格子ゲージ理論には時空を格子状に離散化したことで生じる誤差（離散化誤差）や有限な格子サイズによる誤差（有限サイズ効果）が含まれるため、実際の理論である連続時空中における QCD とのずれが生じてしまう。しかしながら、QCD は漸近自由性を持つため  $a \rightarrow 0$  の極限（連続極限）をとる事ができ、連続極限  $a \rightarrow 0$

<sup>5</sup> クローバー項は単純な Wilson フェルミオンにおける不自然な結果（閉じこめ相-QGP 相相転移次数のクォーク質量依存性など）を除去するのに有効であり、Wilson フェルミオンを用いる際にはクローバー項が導入されることが多い。格子間隔の大きい格子でクローバー項のない Wilson フェルミオンを利用する場合は離散化の影響が強く出ることには注意が必要である。

<sup>6</sup>[1]5 章参照

において、格子 QCD の結果は現実の理論である連続時空中における QCD の結果を再現する。この意味で、格子 QCD は強い相互作用の第一原理計算と呼ばれる。

### ユークリッド経路積分における温度

ユークリッド経路積分において温度は、量子統計力学と経路積分の分配関数の対応関係にもとづき、

$$T = \frac{1}{aN_t}$$

で定義されている。ミンコフスキー時空中における経路積分は  $Z = \langle 0|e^{iHt}|0\rangle$  で与えられる。 $t$  を虚時間に解析接続 ( $t \rightarrow it$ ) すると、分配関数は  $Z = \langle 0|e^{-Ht}|0\rangle$  となる。一方、量子統計力学における分配関数は  $Z = \text{tr} e^{-H/T}$  で与えられる。これらを同一視することで、温度についての上の表式が得られる。

したがって、格子 QCD において系の温度は格子間隔  $a$  に依存する。 $T = (aN_t)^{-1}$  を固定して、 $a$  をゼロに近づけていくことで、温度  $T$  における現実の QCD における結果を得ることができる。物理量の温度依存性を調べるために温度を変化させる場合、理想的には、 $T$  を固定しながら  $a \rightarrow 0$  の極限を取るという操作を行う必要がある。近年の有限温度の格子 QCD 研究では連続極限外挿が達成されているが、有限密度格子 QCD の研究においては計算時間の観点から連続極限の操作が難しいことが多い。連続極限を取らずに  $T$  を変化させる場合、(a)  $N_t$  を固定し  $a$  を変える、(b)  $a$  を固定し  $N_t$  を変える、の 2 つの選択肢がある。(a) の方法は、 $T$  を連続に変化させることができるが、紫外切断  $a^{-1}$  が異なると離散化誤差の影響も異なるという課題がある。一方、(b) の方法は、 $a$  を固定するために紫外切断は固定されるが、温度は  $N_t$  によって離散的にしか変えることができないという課題がある。

Table 2.1: 格子間隔  $a$ , 結合定数  $g$ ,  $\beta \propto 1/g^2$ , および温度  $T = 1/(aN_t)$  の大小関係. 定量的な関係式は格子 QCD 作用の定義によって変わる.

$a$	小 (格子が細かい)	大 (格子が粗い)
$g$	小	大
$\beta$	大	小
$T$	高温	低温

ここで、格子 QCD 作用は格子間隔  $a$  に陽に依存しないため、 $a$  の値を直接コントロールすることはできない。コントロール可能な量は格子結合定数  $\beta$  もしくは  $g$  であり、 $a$  はくりこみを通して  $\beta$  の関数として与えられる<sup>7</sup>。 $a$  の  $\beta$  依存性は格子作用の定義やくりこみの方法に依存するが、定性的な振る舞いは近距離における漸近自由性および遠距離における非摂動性から理解できる。まず、格子間隔  $a$  が大きいほど紫外切断が小さくなるため、 $g$  が大きくなる。 $\beta$  は  $g$  の減少関数であり、したがって  $a$  の減少関数である。一方、温度  $T$  は  $a$  の減少関数である。これらの関係を表 2.1 に示した。

<sup>7</sup>Wilson 流のくりこみについては [8], [1] などがわかりやすい。

## 化学ポテンシャルの効果とそのダイアグラムの解釈

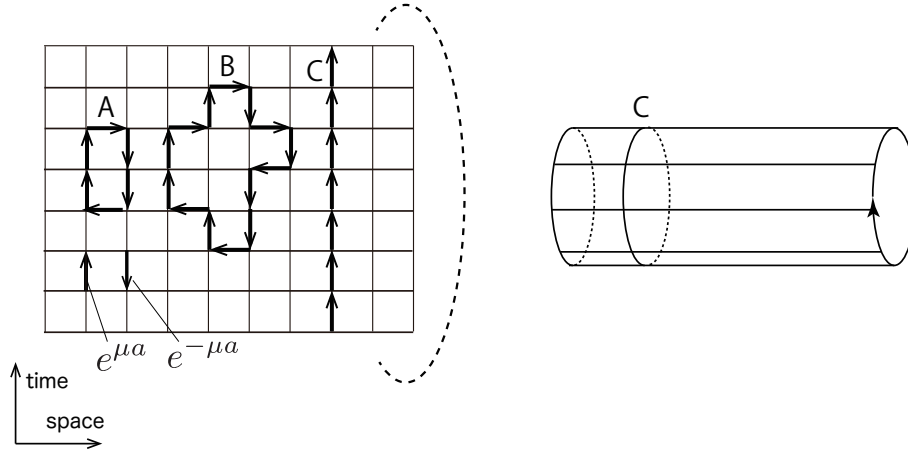


Figure 2.2: フェルミオン行列式のつくる閉ループ. A, B: 時間方向の巻き数を持たないループの例. このようなループは上向きと下向きのクォークラインを同数持つため,  $e^{\mu a}$  と  $e^{-\mu a}$  が相殺し,  $\mu$  依存性を持たない. C: 時間方向に周回するループの例. 上向きのクォークラインのみで閉ループを構成しており,  $\mu$  依存性を持つ. 下向きの閉ループも構成できる.

化学ポテンシャルは, 連続時空ではラグランジアンに  $\mu \bar{\psi} \gamma_4 \psi$  を加えることで導入されるが, 格子上では, 虚時間  $\nu = 4$  方向のリンク変数に  $e^{\pm \mu a}$  という形で導入される. 格子上でも線形 ( $\sim \mu U$ ) で導入することができるが, この場合, 連続極限において化学ポテンシャル項から強い発散が生じて, 正しい連続極限が取れない [9]. 指数的に導入する方法はゲージ場の第 4 成分  $A_\mu$  に化学ポテンシャルを導入することに対応しており, 物理的にも自然な格子化となっている. 連続極限 ( $a \rightarrow 0$ ) において, この項はカレントの第 4 成分と結合する項 ( $\gamma_4 \mu$ ) と一致することは直接確認できる.

化学ポテンシャルを指数的に導入した場合, フェルミオン作用の  $\mu$  依存性はダイアグラムの見通し良く理解できる. グラスマン経路積分を実行する前のクォーク場に対するラグランジアン  $\bar{\psi}_y \Delta_{xy} \psi_x$  を考える. クォーク場  $\psi_x$  を生成消滅演算子で表せば, この項はクォークが格子点  $x$  で生成され,  $y$  で消滅するような項を表すことがわかる.  $\Delta_{xy}$  はその間の伝搬関数 (の逆) である. 格子上のディラック演算子の中でリンク変数を含む項は格子座標に関するクロネッカーのデルタ  $\Delta_{xy} \sim \delta_{y, x \pm \hat{\mu}}$  を含んでいるが, これは格子点  $x$  でクォークが生成され,  $x \pm \hat{\mu}$  で消滅する項を表す. これはクォークが 1 つとなりのサイトに移動することを表しており, これらの項はしばしば hopping 項と呼ばれる. Hopping パラメータ  $\kappa$  はクォークが隣合うサイトへ移動する移動しやすさをコントロールするパラメータとなっている.

作用の  $\mu$  依存性を考えるために, 時間方向のリンク変数を考える. 図 2.2 は時間方向と残る 3 つの方向を平面に表した図で, クォークが格子の上向きに移動する場合  $e^{\mu a}$ , 下向きに移動する場合  $e^{-\mu a}$  という因子が発生する. フェルミオン行列式  $\det \Delta$  はグラスマン経路積分を実行した後に現れる項なので, クォークを内線を持つ様々な閉ループを含んでいる. クォークのつくる閉ループの中で, 化学ポテンシャル依存性を持つのは格子の時間方向を周回するものだけである. 時間方向に周回しないループでは  $e^{\mu a}$  と  $e^{-\mu a}$  がかならず同

数個生じて相殺してしまう (図 2.2 のループ A, B). 時間方向に一周するダイアグラムの場合, 前方あるいは後方のホップ項のみで閉じたループを構成する事ができ, 化学ポテンシャルが相殺されず残る (図 2.2 のループ C). 時間方向の格子点数は  $N_t$  であるから, 時間方向に一周するループは  $(e^{\pm\mu a})^{N_t} = e^{\pm\mu/T}$  を伴って現れる.  $n$  周するものは  $[(e^{\pm\mu a})^{N_t}]^n = e^{\pm n\mu/T}$  を伴う.  $e^{\mu/T}$  はフガシティと呼ばれ, フガシティのべきはクォークの時間方向の周回数と一致する<sup>8</sup>. 3.4 章で,  $\det \Delta$  が  $e^{\mu/T}$  のべきで展開できることを示すが, そのような展開はフェルミオン行列式を時間方向の周回数で展開することに対応する.

### 2.1.3 主要な物理量

ここで, QCD 相図研究でよく用いられる物理量をまとめておく.

#### ゲージ物理量

閉じこめ相/非閉じ込め相の判別によく用いられるのはポリヤコフループ (Polyakov loop) である,

$$L(\vec{x}) = \frac{1}{3} \text{tr P} \left\{ \exp \left( ig \oint_0^{1/T} A_4(\vec{x}, \tau) d\tau \right) \right\}, \quad (2.14)$$

ここで, P は path ordering 演算子である.  $\vec{x}$  は空間座標,  $\tau$  は虚時間,  $g$  は QCD のゲージ結合定数,  $A_4$  はゲージ場  $A_\mu$  の  $\mu = 4$  成分を表す.  $A_\mu$  は  $\text{su}(3)$  行列であり, トレースはカラーの足についてとる. 格子状では

$$L(\vec{x}) = \frac{1}{3} \text{tr} \prod_{i=1}^{N_t} U_4(t_i) = \frac{1}{3} \text{tr} U_4(\vec{x}, t_1) U_4(\vec{x}, t_2) \cdots U_4(\vec{x}, t_{N_t}), \quad (2.15)$$

で定義される. ポリヤコフループの期待値は, 重クォーク極限におけるクォークの自由エネルギーと

$$\langle L \rangle \propto e^{-F/T}$$

の関係がある. ある時刻  $t_i$  における全ての  $\vec{x}$  に対してリンク変数を

$$U_4(\vec{x}, t_i) \rightarrow \omega U_4(\vec{x}, t_i)$$

と変換する操作は  $\mathbb{Z}_{N_c}$  変換と呼ばれる.  $\omega$  は  $\mathbb{Z}_{N_c}$  の元である. Yang-Mills 理論 (クエンチ近似の QCD) はこの変換のもとで不変で, これは中心対称性と呼ばれる. ポリヤコフループは  $\mathbb{Z}_{N_c}$  変換の下で不変でない. ハドロン相は中心対称性がある秩序相に対応し, ポリヤコフループの期待値は対称性から 0 となる. これは,  $F \rightarrow \infty$  に対応し, クォークを取り出すための自由エネルギーが無限大となることを表す. QGP 相では中心対称性は自発的に破れ, ポリヤコフループは 0 でない値をとり, 高温相では  $F$  が有限値となることを表している. このようなことから, ポリヤコフループは閉じこめの秩序変数として用いられる. ただし, 動的なクォークが存在する (重クォーク極限をとらない) 場合は, 中心対称性はクォーク作用によって陽に破れてしまい厳密に言うと, ポリヤコフループは閉じこめの秩序変数とはならない. しかしながら, 動的クォークが存在する場合でも, ポリヤコフループはハドロン相で小さい値, QGP 相で大きい値をとるため, 実効的に閉じこめの秩序変数として用いられることが多い.

<sup>8</sup>クォークが時間方向に 1 サイトずつ進むのは, フェルミオン行列の運動項が一階差分であることに起因する.



## 熱力学量

系の体積が大きいとき、グランドカノニカル系の圧力は

$$p(\mu, T) = \frac{T}{V} \log Z(\mu, T) \quad (2.16)$$

で与えられる。<sup>9</sup> クォーク数密度  $n_q$  は、

$$n_q = \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial \mu/T} \log Z, \quad (2.17)$$

で与えられる<sup>10</sup>. (2.4) 式を代入すると、格子上でのクォーク数密度が得られる、

$$n_q = \frac{1}{V} \left\langle N_f \text{tr} \left[ \Delta^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu/T} \Delta \right] \right\rangle. \quad (2.19)$$

$\Delta^{-1}$ , および  $\partial \Delta / \partial (\mu/T)$  はそれぞれクォークの伝搬関数, および頂点関数に対応している. 連続の場合のクォーク数密度を表すダイアグラムと同じ構造をしている. ただし, ここでの伝搬関数はリンク変数の関数であり, リンク変数を通してグルーオン場の関数にもなっている. したがって, 自由クォークの伝搬ではなく, 真空とグルーオンを交換しながら伝搬する相互作用混みの伝搬関数を表す. また, 連続極限  $a \rightarrow 0$  をとると, 頂点関数は  $\gamma_4$  となり, 連続におけるクォーク数演算子の定義と一致する.

(2.19) 式は物理次元でのクォーク数密度を表すが, その値を求めるためには格子間隔  $a$  の値を決定する必要がある.  $a$  の値は  $\pi$  中間子質量などの実験値をインプットとして決定する. 有限密度格子 QCD の研究では計算量の制限から中間子質量の計算が可能な格子サイズが難しいことが多く, 代わりに無次元化した量  $p/T^4, n_q/T^3$  を用いることが多い. 無次元化されたクォーク数密度は

$$\frac{n_q}{T^3} = N_f \left( \frac{N_t}{N_s} \right)^3 \left\langle \text{Tr} \left[ \Delta^{-1}(\mu) \frac{\partial \Delta(\mu)}{\partial (\mu/T)} \right] \right\rangle \quad (2.20)$$

で与えられる.

クォーク数感受率  $\chi_q = \partial n_q / \partial \mu$  は有限密度相転移の判別に用いられる. 無次元化した  $\chi_q$  は

$$\begin{aligned} \frac{\chi_q}{T^2} &= \frac{1}{VT^3} \left( \frac{\partial}{\partial (\mu/T)} \right)^2 \log Z, \\ &= \frac{1}{VT^3} \left\{ \frac{1}{Z} \left( \frac{\partial}{\partial (\mu/T)} \right)^2 Z - \left( \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial (\mu/T)} Z \right)^2 \right\} \end{aligned} \quad (2.21)$$

で与えられる. この式も具体的に書き下しておく. 簡単化のために,  $\partial \Delta / \partial (\mu/T) = \Delta'$  とおく. まず,

$$\frac{\partial^2 [\det \Delta(\mu)]^{N_f}}{\partial (\mu/T)^2} = \left\{ -N_f \text{Tr} [\Delta^{-1} \Delta' \Delta^{-1} \Delta'] + N_f \text{Tr} [\Delta^{-1} \Delta''] + N_f^2 (\text{Tr} [\Delta^{-1} \Delta'])^2 \right\} [\det \Delta(\mu)]^{N_f}.$$

<sup>9</sup>[10] の 8 章参照.

<sup>10</sup>クォーク数演算子を  $\hat{N}$ , 空間体積を  $V$  と書くと,

$$\begin{aligned} n_q &= \langle \hat{N} \rangle / V, \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr} \left[ \frac{\hat{N}}{V} e^{-(\hat{H} - \mu \hat{N})/T} \right]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

$Z = \text{tr} e^{-(\hat{H} - \mu \hat{N})/T}$  より, 上の式が得られる.

これを代入すると

$$\frac{\chi_q}{T^2} = \left(\frac{N_t}{N_s}\right)^3 \left\{ -N_f \langle \text{Tr} [\Delta^{-1} \Delta' \Delta^{-1} \Delta'] \rangle + N_f \langle \text{Tr} [\Delta^{-1} \Delta''] \rangle + N_f^2 \langle (\text{Tr} [\Delta^{-1} \Delta'])^2 \rangle \right\}. \quad (2.22)$$

更に次数の高い項も計算可能であるが、微分の階数とともに項数は急激に増加する。また、次数の増加とともに必要な統計数も増加するため、高次項の計算は2重の意味で難しくなっている。高階微分は BES 実験におけるゆらぎと関係している。関連した話題について 3.2, 3.4.4 章で議論する。

### 2.1.4 重点サンプリングによるゲージ配位生成

格子正則化と格子作用の定義により、格子 QCD の理論的定式化はできた。しかし、物理量の値を求めるためには経路積分を解かなければならない。(2.4) および (2.5) 式は (リンクの個数)  $\times (N_c^2 - 1)$  重の多重積分であり、これを解く方法がなければ、格子ゲージ理論が定式化できても現実の物理を知ることは出来ない。摂動展開や強結合展開など解析的な計算法もあるが、適用範囲に限られる。経路積分を定量的に正しく解く方法が、重み付けをしたモンテカルロ法、すなわち重点サンプリングである。

#### 台形公式

まず、1次元積分  $S = \int_a^b f(x) dx$  に対する台形公式を振り返る。積分区間  $[a, b]$  を有限個の積分点  $x_i \in [a, b], (i = 1, 2, \dots, N)$  に区切ると、積分値  $S$  は

$$S = h \sum_{i=1}^N f(x_i), \quad h = \frac{b-a}{N}$$

で与えられる。積分値を求めるために必要な積分点の個数  $N$  は、要求される精度や非積分関数の性質によるが、Simpson 法などの等間隔分割法や Gauss-Legendre 積分法などの Gauss 積分法では  $N$  を数十から数百程度にすれば十分良い精度で積分値を求めることが出来る。この種の求積法における積分点の個数は、2重積分では  $N^2$ 、3重積分では  $N^3$ 、 $M$  重積分では  $N^M$  と、次元とともに急激に増加していく。格子 QCD では  $M$  は格子点の数に比例している。例えば、各方向の格子点数が 10 個の場合、 $M \sim 10^4$ 、20 個の場合  $M \sim 10^5$  となり、積分点の数  $N^M$  は膨大な数となる。もちろん、このような計算は現実的には不可能である。

#### 重点サンプリング

これに対して、積分点  $x_i$  を無作為に抽出する方法がモンテカルロ法である。単純なモンテカルロ法は台形分割などに比べてもあまり効率の良い方法ではないが、モンテカルロ法を改良し収束を向上させた方法が重点サンプリングである。Simpson 法や Gauss 求積法では積分点  $x_i$  はアルゴリズム的に決定されており、被積分関数に依らずに積分領域の全域から抽出される。この方法は、しばしば、一様サンプリングとも呼ばれる。これに対して、重点サンプリングは被積分関数  $f(x)$  の大きいところでは積分点を多く、 $f(x)$  の小さいところでは積分点を少なくとる方法で、被積分関数に応じて積分値に主要に効くような積分点を抽出する方法である。

重点サンプリングのアイデアを,  $N$  個の粒子を持つ統計力学系を例に, 物理的に考察してみる. 系の自由度は粒子の位置および速度  $\{x_1, v_1, x_2, v_2, \dots, x_N, v_N\}$  であり, これらの値が決まると系の微視的な状態が決まる. これは速度と座標によって構成される  $2N$  次元位相空間上の点を定めることに対応する. このような, 系の微視的な状態を指定する集合, あるいは位相空間の一点を配位 (configuration) と呼ぶ. configuration の先頭の文字をとって記号  $\mathcal{C}$  で表し

$$\mathcal{C} = \{x_1, v_1, x_2, v_2, \dots, x_N, v_N\}$$

と書く. ユークリッド経路積分において, 系の分配関数, および物理量  $O$  の期待値は

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dx_i dv_i e^{-S},$$

$$\langle O \rangle = Z^{-1} \int \prod_{i=1}^N O dx_i dv_i e^{-S},$$

で与えられる. 位相空間内部の点を  $M$  個,  $\{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \dots, \mathcal{C}_M\}$ , 選ぶと,  $O$  の期待値は

$$\langle O \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M O(\mathcal{C}_i) \quad (2.23)$$

で与えられる. Simpson 法などの数値積分法は位相空間をメッシュ状に分割するが, その中には多数の粒子が空間の一部の領域に局在するような現実には出現しない状態も含まれるため, 効率が悪い. 熱平衡状態では粒子は空間的に一様に広がり, 速度は平均値を中心とする分布に従うから, 物理量の期待値はそのような配位で再現できるはずである. ユークリッド経路積分の被積分関数は  $e^{-S}$  で与えられるので, 作用が小さい物理的な状態は積分への寄与も大きい. 従って,  $S$  の値が小さくなるような配位を重点的に抽出することで経路積分を効率良く求めることが期待できる. このような積分点の抽出法が重点サンプリング法である.

格子 QCD における積分変数はリンク変数である. 格子全体に含まれるリンクの個数を  $N_{\text{link}}$  とすると, QCD における配位は  $\mathcal{C} = \{U_l | l = 1, 2, \dots, N_{\text{link}}\}$  で定義され, ゲージ配位と呼ばれる. 以降では簡単のため, ゲージ配位を  $\{U\}$  や, 単に  $U$  と書くこともある. 気体分子運動論との対応で例えると, 1つのリンク変数は1つの粒子の位置と運動量,  $\mathcal{C}$  は全ての粒子に対する位置と速度の集合に対応する. プラケットやポリヤコフ ループなど, 物理量  $O$  はゲージ配位の関数  $O = O(\mathcal{C})$  であり, ゲージ配位を決めると  $O$  の値も決まる. 位相空間から  $M$  個のゲージ配位  $\{\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \dots, \mathcal{C}_M\}$  を抽出すると, 物理量の期待値は

$$\langle O \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M O(\mathcal{C}_i) \quad (2.24)$$

で与えられる. (2.24) 式は  $O$  の期待値を位相空間内の  $M$  個の積分点を用いて表した式であるが, この段階では  $\mathcal{C}$  の選び方が指定されていない.  $\langle O \rangle$  を定めるためにはゲージ配位の抽出法も定義する必要がある.

重点サンプリングは  $e^{-S}$  を大きくするような配位を選択的に抽出することだが, それは  $e^{-S}$  の大小比較を行う Metropolis ステップによって実現される. 2つの配位  $\mathcal{C}_1$  と  $\mathcal{C}_2$  が与えられたとする. それぞれに対する作用の値は  $S_1 = S(\mathcal{C}_1)$ ,  $S_2 = S(\mathcal{C}_2)$  で与えられるから,  $S_1, S_2$  を比べて値の小さい方を採用すればよい.

ゲージ配位を生成するアルゴリズムは改良が進んでおり、現在標準的に用いられているのはマルコフ鎖モンテカルロ法の 1 つである Hybrid Monte Carlo 法である<sup>11</sup>。物理量を求めるために必要なゲージ配位の個数  $M$  は理論のパラメータ値 (クォーク質量, 温度, 格子間隔, 格子サイズなど), 対象となる物理量や要求される精度に依存するが, 標準的な格子 QCD 計算では 100 個程度のゲージ配位で計算されることが多い。この  $M$  の値は一様サンプリングで必要となる積分点数の数と比べて, 非常に少ないことがわかる。このような解析法がどの程度妥当であるかどうかだが, 最近の格子 QCD 計算では基底状態のハドロンスペクトルが高精度で再現されており, 格子 QCD が QCD の非摂動計算法として正しく機能していることの 1 つの証拠となっている。また, ハドロン相から QGP 相への相転移も高い精度で計算され,  $T \sim 150$  MeV 程度で起きるクロスオーバーであるという結果が得られている。  $T_c$  の値の実験的測定が未だ達成されていないため, 格子 QCD での予言が高温 QCD を議論する際の重要な指標となっている。

## 2.2 符号問題

### 2.2.1 複素作用における重点サンプリングの破綻

重点サンプリングは経路積分を解く標準的な方法だが, 応用可能な理論に制限がある。重点サンプリングの要点である Metropolis ステップは  $e^{-S}$  の大小比較である。2 つの配位  $C_1, C_2$  に対する作用を  $S_1 = S(C_1), S_2 = S(C_2)$  とする。このとき,  $S \in \mathbb{R}$  であれば,

$$e^{-S_1}, e^{-S_2}$$

の大小比較ができるが,  $S \in \mathbb{C}$  の場合は大きさの比較ができない。たとえば,  $S_2 = S_1 + i\pi$  のとき,

$$e^{-S_1} = a, e^{-S_2} = -a, (a \in \mathbb{R}).$$

この場合,  $C_1, C_2$  のどちらが経路積分に効くだろうか? これらは互いに相殺するため一方を無視することは妥当ではない。さらに, 相殺の結果, 絶対値  $|e^S|$  がより小さい配位も積分に寄与する可能性があり, 絶対値の小さい配位も無視できない。作用が複素数の場合, 作用の小さい配位を集める事が経路積分の正しい評価であることがもはや保証されず, 重点サンプリング法による配位生成が破綻してしまう。このような問題を符号問題, あるいは複素作用問題と呼ぶ。

### 2.2.2 QCD における複素作用の発生

ゲージ作用  $S_g$  は定義 (2.10) 式から実正である。一方, フェルミオン行列式  $\det \Delta$  は  $\mu = 0$  では実だが,  $\mu \neq 0$  のとき複素数となる。このことを詳しくみてみよう。以下では連続の場合の説明を行うが, 格子理論の場合も事情は変わらない。

ユークリッド時空において, ディラック演算子  $D_\nu$  は反エルミート性  $(D_\nu)^\dagger = -D_\nu$  を持ち, ガンマ行列はエルミート性  $\gamma_\nu^\dagger = \gamma_\nu$  を持つ。したがって,  $D \equiv D_\nu \gamma_\nu$  も反エルミート演算子であり, その固有値は純虚数

<sup>11</sup>具体的なアルゴリズムについては [2] の Chapter 16 を参照。

である.  $D_\nu \gamma_\nu$  と  $\gamma_5$  は反交換関係を満たすので, その固有値は純虚数の対  $\pm ix (x \in \mathbb{R})$  となる<sup>12</sup>. フェルミオン行列式を  $D$  の固有値  $\pm ix_n$  を用いて表すと

$$\begin{aligned} \det(D + m) &= \prod_{n=1}^N (ix_n + m)(-ix_n + m), \\ &= \prod_{n=1}^N (x_n^2 + m^2). \end{aligned} \quad (2.28)$$

したがって, フェルミオン行列式は実数である. 格子フェルミオン作用の場合でも, ディラック演算子が反エルミート性を持つスタaggered フェルミオンであれば, 連続の場合と同様の証明が成り立つ (A.1.3 章参照).

Wilson フェルミオンの場合, Wilson 項 ( $D_\nu D_\nu$ ) が反エルミート性を破るため上の証明は成り立たないが,  $\gamma_5$  エルミート性が証明できる.  $\Delta = D_\nu \gamma_\nu + m + r' D_\nu D_\nu$ , ( $r' = ra$ ) とおくと

$$\begin{aligned} \gamma_5 \Delta^\dagger \gamma_5 &= \gamma_5 (D_\nu \gamma_\nu + m + r' D_\nu D_\nu)^\dagger \gamma_5 \\ &= \gamma_5 ((D_\nu)^\dagger (\gamma_\nu)^\dagger + m + r' (D_\nu D_\nu)^\dagger) \gamma_5 \\ &= \gamma_5 (-D_\nu \gamma_\nu + m + r' D_\nu D_\nu) \gamma_5 \\ &= D_\nu \gamma_\nu + m + r' D_\nu D_\nu = \Delta \end{aligned} \quad (2.29)$$

を満たす. 正則行列  $A, B$  に対する公式  $\det AB = \det A \det B$  を用いると,  $(\det \Delta)^* = \det \Delta$  が得られるので, フェルミオン行列式は実数である. 次に, 任意の複素数  $\alpha$  に対して

$$\begin{aligned} \det(\Delta - \alpha) &= \det \gamma_5 (\Delta - \alpha) \gamma_5, \\ &= \det(\Delta^\dagger - \alpha), \\ &= \det(\Delta - \alpha^*)^\dagger, \\ &= (\det(\Delta - \alpha^*))^* \end{aligned} \quad (2.30)$$

が成り立つ. ここで,  $\alpha$  を  $\Delta$  のある固有値  $\forall \lambda$  と等しく選ぶと左辺はゼロとなる. (2.30) 式は任意の  $\alpha$  について成り立つから, 右辺もゼロとならなければならない. したがって,  $\Delta$  は  $\alpha^* = \lambda^*$  も固有値を持つ. つまり, Wilson フェルミオン  $\Delta$  の固有値は  $\lambda, \lambda^*$  の対を組む. したがって,  $\det \Delta$  は実正となる. フェルミオンに対する有効作用を  $S_f = -\log \det \Delta$  と書くと,  $\det \Delta$  が実正なら  $S_f$  も実となる.

<sup>12</sup>  $\lambda$  と  $\psi$  を  $D$  のある固有値と固有状態とする,  $D\psi = \lambda\psi$ . 反エルミート性から  $\lambda$  は純虚数である. このとき,

$$\gamma_5 D|\psi\rangle = \lambda(\gamma_5|\psi\rangle) \quad (2.25)$$

反交換関係  $\gamma_5 D = -D\gamma_5$  を用いると,

$$\gamma_5 D|\psi\rangle = -D\gamma_5|\psi\rangle \quad (2.26)$$

が成り立つ.  $\gamma_5|\psi\rangle = |\phi\rangle$  とおくと,  $|\phi\rangle$  は

$$D|\phi\rangle = -\lambda|\phi\rangle \quad (2.27)$$

を満たすから, これは固有値  $-\lambda$  を持つ  $D$  の固有状態である.  $D$  は 2 つの純虚数  $\pm i\lambda$  を固有値を持つ.

一方,  $\mu \neq 0$  の場合,  $D \equiv D_\nu \gamma_\nu + \mu \gamma_4$  の反エルミート性は破れる. また,

$$\begin{aligned} \gamma_5 \Delta^\dagger(\mu) \gamma_5 &= \gamma_5 (D_\nu \gamma_\nu + m + \mu \gamma_4)^\dagger \gamma_5, \\ &= \gamma_5 (-D_\nu \gamma_\nu + m + \mu \gamma_4) \gamma_5, \\ &= D_\nu \gamma_\nu + m - \mu \gamma_4, \\ &= \Delta(-\mu) \end{aligned} \tag{2.31}$$

となり,  $\gamma_5$  エルミート性も破れる. フェルミオン行列式は実条件を満たさず,  $\det \Delta(\mu) \in \mathbb{C}$  となるので,  $S_f = -\log \det \Delta$  も複素数となる. Wilson 項を加えた場合も同様で,  $\mu \neq 0$  の場合フェルミオン行列式は複素数となる. したがって, 化学ポテンシャルを導入した場合には, 重点サンプリングによる配位生成はできない.

### 2.2.3 「符号問題を解く」とは

重点サンプリングが利用できない場合, 多重積分をどう計算したらよいだろうか? 今のところ, 複素作用をもつ経路積分に対する一般的数値解法は知られていない. そのため, 有限密度格子 QCD の研究では符号問題に対するアイデアが必要である. 次章以降で様々なアプローチを紹介していくが, ここでは準備として, そもそも「符号問題を解く」とはどういうことかを考えてみる. 特に, 符号問題の解法において重要となる概念として計算量に言及する. この点を理解することで次章以降の議論もスムーズに理解できるものと思う.

「符号問題を解く」とは「複素作用をもつ経路積分を解くこと」と言い換えてもよい. ただし, その方法が現実的に遂行できなければならない. たとえば, Simpson 法などの初等的な求積法は形式的には正しいが, 数十万次元という多重積分に応用することは少なくとも現在の計算機では不可能であろう. 原理的には正しいアルゴリズムであっても, 実際に実行することが出来なければ解けたことにはならない. したがって, 符号問題を解くことを「現実的な計算量で複素作用を持つ経路積分を解く事」と定義してもよさそうである.

では, 「現実的な計算量」とはどの程度であろうか? 計算量とはアルゴリズムを遂行するために必要となる演算回数と考えてよい. 現実的かどうかは, 用いる計算機の性能やその計算に投入可能な人的あるいは時間的な資源に依存するため, 明確に決めづらい指標である. 計算科学において計算量と言った場合, 問題の典型的なスケール, 例えば系のサイズ, に対して計算量がどの程度強く依存するかで評価することが多い. 積分の次元  $N$  に対して, 計算量が指数的に依存する場合 ( $e^N$ ), どれだけ性能の良い計算機を用いても  $N$  が増加すると計算は実行できなくなる. 依存性がべきであって ( $N^x$ ), べき  $x$  が大きい場合はやはり計算は難しい.

必要な計算量は理論のパラメータに依存する. 簡単な例を用いて具体的に見てみよう. 作用が複素数の場合でも, 物理的要請から分配関数  $Z$  は実かつ正の量となる. 簡単な例としては  $\int dx e^{inx}$  や  $\int dx \cos nx$  などが考えられる. 振動が緩やかな場合 ( $n \sim 1$ ) には積分点の個数が少なくとも十分な精度で積分値が求まるが, 振動が早くなる ( $n \gg 1$ ) につれて積分点の個数を増やす必要がある. 被積分関数がガウス分布のように単峰性の関数であれば, ピークの近傍の積分点を選べば良いが, 振動関数の場合, ピークが複数個あり, そのそれぞれに対して積分点を抽出する必要があるから, ピークの個数に比例して積分点を増やす必要がある. 経路積分において, 被積分関数の振動数に対応するのは作用の虚部である. 作用はラグランジアンの時空積分な

ので、作用の大きさは系の体積に比例する;  $S \propto V$ . したがって、作用の虚部も体積に比例し、 $\text{Im}S \propto V$  となる。また、作用の虚部は化学ポテンシャルにも線形で比例する。なぜなら、作用の虚部の発生要因である密度項は  $S \propto \mu \int d^4x \bar{\psi} \gamma_4 \psi$  で与えられ、平均密度を  $\hat{n}$  と書くと  $S \propto \mu V \hat{n}$  と振る舞うからである。このように、作用の虚部は化学ポテンシャルや格子体積に比例し、 $\mu$  や  $V$  の増加とともに被積分関数の振動が激しくなり、したがって、経路積分を解くために必要な計算量も増加することになる。必要な計算量がパラメータ値に依存するという事は、符号問題の難易度もパラメータ値に依存することを示唆している。有限密度格子 QCD 研究では、化学ポテンシャルや格子体積が小さい場合に有効な方法がパラメータ値が増加すると信頼度が低下するということが多くあるが、それは計算量の増加のためである。しかし、必要な計算量を知る事は実際には難しく、そのため、結果の妥当性の判断が難しいのが、符号問題の難しい点であろう。

### 2.2.4 QCD の位相ゆらぎと符号問題の難易度

有限密度格子 QCD で符号問題の難易度に関係するフェルミオン行列式の位相部の温度・密度依存性を見てみよう。そのためには  $\mu \neq 0$  における計算が必要となり、符号問題の対処法を導入する必要がある。ここでは **reweighting** を用いるが、方法の詳細は次章で説明することにして、まず結果を眺めてみることにする。

フェルミオン行列式を絶対値と位相に分離する

$$(\det \Delta(\mu))^{N_f} = |\det \Delta(\mu)|^{N_f} e^{i\theta}. \quad (2.32)$$

$\theta$  が作用の虚部  $\text{Im}S$  を与える。 $\theta$  の期待値はゼロ<sup>13</sup>なので、 $\theta$  の振る舞いを評価する際にはゆらぎを考えることが多い。一般に、ある量  $X$  のゆらぎは  $\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$  で与えられ、 $\langle \theta \rangle = 0$  を考慮すると

$$\langle (\theta - \langle \theta \rangle)^2 \rangle = \langle \theta^2 \rangle \quad (2.33)$$

となる。他の量として、平均位相因子  $\langle e^{i\theta} \rangle$  もよく用いられる。オイラーの公式を用いると

$$\langle e^{i\theta} \rangle = \left\langle \left( 1 - \frac{1}{2}\theta^2 + \dots \right) \right\rangle \quad (2.34)$$

となる。ここで  $\theta$  の奇数次の項は対称性を用いて除去した。平均位相因子は 1 から位相ゆらぎを引いた量となっており、これがゼロに近いほど位相ゆらぎが激しいことを表す。

図 2.3 は  $\langle e^{i\theta} \rangle_0$  を温度の関数として表している。ここで添字 0 は、次章で導入する **reweighting** 法を用いて計算したことを表している。 $T_{pc}$  は  $\mu = 0$  におけるハドロン相と QGP 相間の擬相転移温度を表す。

$\mu$  を固定し  $T$  依存性を見ると、平均位相因子は低温では 1 に近く、 $T_c$  に近づくにつれて急激に減少し、 $T_c$  を越えると再び増加する。つまり、 $\theta$  のゆらぎは低温で小さく、 $T_c$  近傍で大きく、高温で再び小さくなる。位相ゆらぎは符号問題の難易度を示しているの、 $T_c$  よりやや低温の領域 ( $T = (0.7 \sim 1)T_c$ ) は符号問題が難しいことがわかる。低温 ( $T < 0.5T_c$ ) では位相ゆらぎが小さいが、この領域では化学ポテンシャル依存性そ

<sup>13</sup> 分配関数が実正であることから、

$$\int \mathcal{D}U |\det \Delta(\mu)|^{N_f} \sin \theta e^{-S_g} = 0,$$

が成り立つ。 $Z$  は  $\theta$  の偶関数であり、 $\theta$  の期待値はゼロとなる。

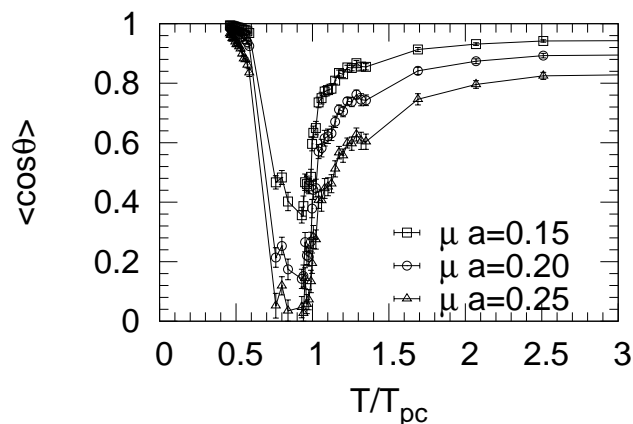


Figure 2.3: 平均位相因子の  $T, \mu$  依存性. 値が小さいほど符号問題が激しい.  $T_{pc}$  近くと  $\mu$  の増加に伴う低下が見られる. 格子体積  $8^3 \times 4, 2$  フレーバ QCD での計算結果. 平均位相因子は格子体積の増加でも低下する.

のものが小さい. これは低温では化学ポテンシャル  $\mu$  が閾値を超えるまで  $\mu$  依存性が生じないというフェルミ分布の性質に起因している. 図は  $\mu$  が閾値より小さい状況に対応しており,  $\mu$  を増加させると, ある値を境に  $\langle e^{i\theta} \rangle_0$  が急激に減少する. 低温領域の難しさについては後の章で説明する.

$T$  を固定し  $\mu$  依存性を見ると,  $T$  の全領域で  $\mu$  の増加に伴い  $\langle \cos \theta \rangle$  が小さくなることから,  $\theta$  のゆらぎは  $\mu$  とともに増大する. 同様の傾向がカイラル摂動論を用いた解析でも報告されている [11]. 既に述べたように, 作用の虚部は化学ポテンシャルに比例するためである. ちなみに, 図 2.3 では平均位相因子の体積依存性はわからないが,  $\theta$  は空間体積にも比例するので, 体積が増加すると平均位相因子は急速にゼロに近づく.

まとめると, 有限密度格子 QCD における符号問題の難易度は温度  $T$ , 化学ポテンシャル  $\mu$ , 格子体積  $V$  などのパラメータに依存しており,  $\mu$  と  $V$  の増加に伴い位相ゆらぎが激しくなる. また, 温度については  $T_c$  よりやや低温において激しい位相ゆらぎがあり, また低温領域では化学ポテンシャルがある閾値を超えると急激に符号問題が激しくなる.

## 参考文献

- [1] 青木慎也, 格子上の場の量子論. シュプリンガー・フェアラーク 東京, 2006.
- [2] J. H. Rother, LATTICE GAUGE THEORIES, An Introduction, Fourth Edition. World Scientific, 2012.
- [3] C. Gattringer, C. Lange, Quantum Chromodynamics on the Lattice - An Introductory Presentation. Springer, 2006.
- [4] M. Golterman, Y. Shamir, and B. Svetitsky, *Breakdown of staggered fermions at nonzero chemical potential*, Phys. Rev. **D74** (2006) 071501, [[hep-lat/0602026](#)].



- [5] B. Sheikholeslami and R. Wohlert, *Improved Continuum Limit Lattice Action for QCD with Wilson Fermions*, Nucl. Phys. **B259** (1985) 572.
- [6] J. C. R. Bloch and T. Wettig, *Overlap Dirac operator at nonzero chemical potential and random matrix theory*, Phys. Rev. Lett. **97** (2006) 012003, [[hep-lat/0604020](#)].
- [7] J. C. R. Bloch and T. Wettig, *Domain-wall and overlap fermions at nonzero quark chemical potential*, Phys. Rev. **D76** (2007) 114511, [[arXiv:0709.4630](#)].
- [8] 園田英徳, 今度こそわかるくりこみ理論. 講談社, 2014
- [9] P. Hasenfratz and F. Karsch, *Chemical Potential on the Lattice*, Phys.Lett. **B125** (1983) 308.
- [10] 田崎晴明, 統計力学 I, II(新物理学シリーズ). 培風館, 2006.
- [11] K. Splittorff and J. Verbaarschot, *The Approach to the thermodynamic limit in lattice QCD at  $\mu$  not equal 0*, Phys.Rev. **D77** (2008) 014514, [[arXiv:0709.2218](#)].



## Chapter 3

# 符号問題解法 1-重点サンプリングに基づく

## 符号問題回避法

符号問題の対処には2つの方向性がある。1つは複素作用に対しても適用可能な配位生成法を開発することである。これが実現できれば符号問題は解けるのだが、容易ではない。もう1つは、一旦符号問題が存在しないケースで配位を生成し、その配位を用いて符号問題がある状況での物理量を求めるという方向性である。これは一種の近似であり、抜本的な解決法ではないため、符号問題の解法ではなく、「回避法」と呼ばれることが多い。後者には派生も含めれば様々な方法が提案されている。この章では、このようなアプローチとして reweighting 法、テイラー展開、虚数化学ポテンシャル、カノニカル法を紹介する。それぞれの方法のアイデア、応用例、利点と限界について説明する。また本章の最後で符号問題回避法の共通の限界について言及する。

### 3.1 Reweighting 法

重点サンプリングでは、理論のパラメータ (温度, 質量, 化学ポテンシャルなど) の値ごとに配位を生成する必要がある。  $e^{-S}$  のピーク位置や幅などの被積分関数の性質がパラメータに依存しており、位相空間内で積分値に寄与する領域も変わるためである。しかし、パラメータ変化が微小であれば作用の変化も微小であり、積分値に寄与する領域の変化も微小であろう。例えば、  $e^{-S} = e^{-x^2}$  の場合、重点サンプリングで生成されるのは  $x = 0$  近傍の積分点である。  $e^{-S} = e^{-(x-\alpha)^2}$  を考えると、積分値に寄与するのは  $x = \alpha$  近傍の積分点であるが、  $\alpha$  が十分小さければ  $x = 0$  近傍の点で積分値を評価しても良い近似になりそうである。

Ferrenberg と Swendsen は、あるパラメータ値において生成した配位を用いて異なるパラメータ値の物理量を求める方法 reweighting 法を開発した [1]。これはパラメータ空間の一点でのシミュレーションから異なる点の情報を引き出す方法となっている。Reweighting 法はもともと、モンテカルロシミュレーションにおける配位生成に要する時間を削減するために導入されたもので、符号問題と関係なく一般的に利用可能な方法である。しかし、パラメータ値のシフトという考え方が符号問題の回避法として利用できる。実際、reweighting

法はこの章で説明する符号問題回避法の基礎をなすアイデアである. 有限密度 QCD の作用を実となるように変形した上で重点サンプリングを用いて配位を生成し, 作用の差異を reweighting で補正する, というのが符号問題回避法の 1 つの典型的な方法となっている. 問題となるのはその応用範囲であるが, reweighting 法は位相ゆらぎが激しい場合に破綻するため, 位相揺らぎがマイルドなケースにおいて有効な方法となる. これはモンテカルロ法に基づく符号問題回避法を理解する上での重要なポイントとなるので, 重点的に説明する. 以下では, まず符号問題がない場合を例に reweighting 法のアイデアと応用上の注意点を説明し, その後 reweighting 法の符号問題への応用, 改良型 reweighting である multi-parameter reweighting 法を紹介する. また, 本章の最後で, 有限密度格子 QCD 研究の計算量が増大する原因について考察する.

### 3.1.1 Reweighting 法のアイデア

ここでは, 量子統計力学の分配関数に対して reweighting 法を導入するが, 経路積分に対しても同様に応用することができる. ハミルトニアン  $\hat{H}$  を持つ量子系を考える. 温度  $T$  におけるカノニカル分配関数および物理量  $O$  の期待値は

$$Z(T) = \text{tr} e^{-\hat{H}/T}, \quad (3.1)$$

$$\langle O \rangle(T) = Z(T)^{-1} \text{tr} \left[ O e^{-\hat{H}/T} \right], \quad (3.2)$$

で与えられる. 簡単のため  $\hat{H}$  は温度に陽に依存しないと仮定する. シミュレーションを行い  $M$  個の配位  $\{C_i | i = 1, 2, \dots, M\}$  を生成したとすると, 温度  $T$  における  $O$  の期待値は以下の式で与えられる;

$$\langle O \rangle(T) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M O(C_i). \quad (3.3)$$

ここで,  $Z(T)$  を

$$\begin{aligned} Z(T) &= \text{tr} e^{-\hat{H}(1/T - 1/T_0) - \hat{H}/T_0}, \\ &= \text{tr} \left[ R e^{-\hat{H}/T_0} \right], \quad R \equiv e^{-\hat{H}(1/T - 1/T_0)} \end{aligned} \quad (3.4)$$

と変形してみる. これは,  $e^{-\hat{H}/T}$  を  $e^{-\hat{H}/T_0} \times R$  に書き換えた恒等式にすぎない. しかし, 2 行目において  $e^{-\hat{H}/T_0}$  を重点サンプリングにおける重み,  $R$  を測定量と解釈すると,  $Z(T)$  は

$$Z(T) = Z(T_0) \langle R \rangle_0 \quad (3.5)$$

と表される. ここで,  $\langle \cdot \rangle_0$  は, 温度  $T_0$  で生成した配位による平均

$$\langle O \rangle_0 = \frac{\text{tr} O e^{-\hat{H}/T_0}}{\text{tr} e^{-\hat{H}/T_0}} \quad (3.6)$$

を表す. (3.5) の左辺  $Z(T)$  は温度  $T$  における分配関数, 一方, 右辺は温度  $T_0$  における分配関数  $Z(T_0)$  と温度  $T_0$  で求めた  $\langle R \rangle_0$  の積である. つまり, (3.5) は温度  $T$  における量を温度  $T_0$  における量で表す式となっている

る. 温度  $T_0$  で生成した配位を  $\{C'_i | i = 1, 2, \dots, M'\}$  とすると,  $Z(T)$  は

$$Z(T) = Z(T_0) \frac{1}{M'} \sum_{i=1}^{M'} R(C'_i) \quad (3.7)$$

と表される. 同様の変形を物理量  $O$  の期待値に応用すると

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle(T) &= \frac{\text{tr} \hat{O} e^{-\hat{H}/T}}{Z(T)}, \\ &= \frac{\text{tr} [O R e^{-\hat{H}/T_0}]}{\text{tr} [R e^{-\hat{H}/T_0}]} \end{aligned} \quad (3.8)$$

を得る. これも恒等式にすぎないが,  $T_0$  で生成した配位を用いて表すと (3.8) 式は

$$\begin{aligned} \langle \hat{O} \rangle(T) &= \frac{\langle OR \rangle_0}{\langle R \rangle_0}, \\ &= \frac{\sum_i O(C'_i) R(C'_i)}{\sum_i R(C'_i)} \end{aligned} \quad (3.9)$$

となる. (3.9) 式は温度  $T_0$  で生成した配位を用いて, 温度  $T$  での物理量の期待値を求める公式を与えている. 気体分子のシミュレーションなら, 300K で生成した配位を用いて, 310K での圧力を求める, といった応用が考えられる. 上の例では温度を例に説明したが, シフトさせるパラメータは何でもよく, Ising 模型の外部磁場や格子 QCD のクォーク質量にも利用できる. さらにはパラメータは連続である必要もない.

このような, あるパラメータに対して生成した配位を用いてパラメータの値が異なる場合の物理量の期待値を求める方法を reweighting 法とよぶ. その名称は式の意味を考えると明らかである.

$$r(C'_i) = \frac{R(C'_i)}{\sum_{i=1}^{M'} R(C'_i)} \quad (3.10)$$

とおくと, (3.9) 式は,

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{i=1}^{M'} O(C'_i) r(C'_i) \quad (3.11)$$

と書き直される. これは物理量に重み因子  $r(C'_i)$  をかけたものになっている. もともとの定義 (3.3) 式は温度  $T$  で生成された配位に対して定義されるのに対して, (3.9) 式は温度  $T_0$  で生成された配位に対して定義される. (3.9) 式は, 2 種類の配位のずれを重み因子  $r$  によって補正することで, 温度  $T_0$  で得られた配位を用いて温度  $T$  での物理量の値を与える式となっている.

ある温度で得られた配位で異なる温度での物理量の計算が可能となるのは, 理論の温度依存性の情報が密度行列  $e^{-\hat{H}/T}$  に含まれているためである. 大雑把に言えば, 関数型が既知であれば外挿可能と言っているにすぎず, アイデアはシンプルである.

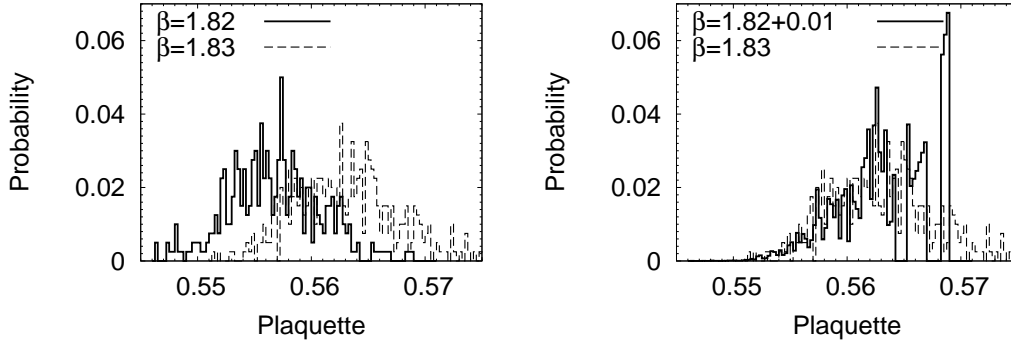


Figure 3.1: Reweighting の応用例. 左:  $\beta$  の 2 つの値でシミュレーションを行い生成したプラケット分布. 右:  $\beta = 1.82$  で求めた配位に reweighting 法を応用して求めた  $\beta = 1.83$  におけるプラケット分布と直接求めたプラケット分布の比較. Reweighting が正しく機能していれば右図の 2 つの曲線は一致するはずだが, プラケットの大きい領域で乖離が見られる. これが配位のオーバーラップのずれ, オーバーラップ問題である. シミュレーションはクローバ改良型 Wilson フェルミオン作用と Iwasaki ゲージ作用を用いたもので, 格子サイズは  $8^3 \times 4$ . オーバーラップ問題は体積を大きくするほど厳しくなる.

### 3.1.2 Reweighting 法の応用例とオーバーラップ問題

#### Reweighting 法の QCD への応用

Reweighting 法は汎用性が高く, 様々なケースに応用可能であるが, オーバーラップ問題と呼ばれる副作用を伴うことがわかっている. 本節では, 符号問題がない場合を考え, QCD の格子結合定数  $\beta$  に対して reweighting を応用し, reweighting 法の特性和オーバーラップ問題を考察する.

パラメータ  $\beta$  に関して式変形するので,  $S_g = \beta S_G$  と定義しておくとう便利である.  $S_G$  はゲージ作用  $S_g$  において格子結合定数を 1 とおいたものに対応する. 次に, 分配関数を

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \int \mathcal{D}U (\det \Delta)^{N_f} e^{-\beta S_G}, \\ &= \int \mathcal{D}U e^{-(\beta-\beta_0)S_G} (\det \Delta)^{N_f} e^{-\beta_0 S_G} \end{aligned}$$

と変形する.  $(\det \Delta)^{N_f} e^{-\beta_0 S_G}$  を重点サンプリングの重み,  $R = e^{-(\beta-\beta_0)S_G}$  を物理量の一部と解釈すると,

$$Z(\beta) = Z(\beta_0) \langle e^{-(\beta-\beta_0)S_G} \rangle_0 \quad (3.12)$$

となる.

Reweighting 法は形式的には恒等式であるが, 実際のシミュレーションで機能するためには配位のオーバーラップが重要となる. シミュレーションで抽出された配位は位相空間上で作用の最小値周辺の領域を覆っている.  $\beta$  で生成した配位と  $\beta_0$  で生成した配位の覆う領域は異なるが, オーバーラップはそれらの重なり, 集合論的には共通部分あるいは類似度のようなものを指す. オーバーラップのずれを実際の計算結果を用いて考察してみる. 配位生成点を  $\beta_0 = 1.82$ , 調べたい点を  $\beta = 1.83$  とし, それぞれで 200 個のゲージ配位を生成する.  $\beta$  の値はどちらもハドロン相で  $T_c$  よりやや低温の温度に対応する.

$\beta_0 = 1.82$  で生成したゲージ配位を  $\{C'_i\}$ ,  $\beta = 1.83$  で生成したゲージ配位を  $\{C_i\}$  と書く.  $\beta_0$  で生成した配位と  $\beta$  で生成した配位のオーバーラップは位相空間上に 2 種類の配位が覆う領域をプロットすればわかるが, 位相空間が高次元なため, その様子を視覚的にみることは難しい. 配位の類似度をみる方法として, ここでは reweighting を適用するパラメータと相関の強い物理量の分布を比較してみる.  $\beta$  の reweighting の場合, そのような物理量の 1 つはブラケットである. (2.7) 式を用いて, ブラケットを

$$P = \frac{1}{N_c N_{\text{plaq}}} \sum_{n, \mu, \nu} \text{tr} U_{\mu\nu}(n)$$

と定義する.  $N_{\text{plaq}}$  はブラケットの個数である. Reweighting 法による期待値は (3.11) 式を用いて

$$\langle P \rangle_0 = \sum_i P(C'_i) r(C'_i).$$

図 3.1 左図は  $\beta = 1.82, 1.83$  それぞれにおけるブラケットのヒストグラムを表す.  $\beta$  が大きい程, 高温状態に対応し (表 2.1 参照), またブラケットの大きさはエネルギー密度に対応するので横軸は右側の方が内部エネルギーが高い状態に対応する.  $\beta$  が増えると分布が高エネルギー側にシフトするのは物理的に自然な結果である. ヒストグラムが凸凹しているのはサンプル数が少ないためで, サンプル数を増やせば分布はなめらかな釣鐘型に近づくが, ここでは reweighting 法の注意点を強調するためにあえて統計数を少なくして凹凸が出るような分布を用いている. ちなみに, ゲージ配位の個数 200 個は, 対象となる物理量にもよるが, 格子 QCD の研究において標準的な標本数と考えてよい.

ブラケットの確率分布を  $w(P; \beta)$  とする.  $\beta_0 = 1.82$  でのブラケット分布  $w_0 = w(P; 1.82)$  に reweighting 因子  $e^{-(\beta-\beta_0)S_G}$  をかけたもの, すなわち

$$w(P; 1.82)$$

が右図の実線である. Reweighting 法が正しければ, この分布は  $\beta = 1.83$  の分布  $w(P; 1.83)$  に対応するはずである.  $P = 0.55 \sim 0.56$  の区間では, この 2 つの分布は良く一致しており,  $\beta_0$  で生成したブラケット分布に reweighting 法を適用することで  $\beta$  におけるブラケット分布を得ることができた. 一方, ブラケットの値が大きくなると 2 つの分布にずれが生じてくる.  $P > 0.57$  の領域では実線の確率分布は 0 となってしまう, 2 つの分布は一致していない. このように恒等式であるはずの reweighting を用いても, 正しい結果が再現できないことがある. この問題を引き起こしているのが配位のずれ, オーバラップ問題である.

物理量を求める際には, オーバラップのずれが系統誤差を生じる点に注意が必要である<sup>1</sup>. 図 3.1 右図では, reweighting 法で生成された分布 (実線) は  $P$  の大きい領域において打ち切られているため, ブラケットの

<sup>1</sup> 誤差には系統誤差 (バイアス) と統計誤差 (バラツキ) があり, 正しく測定するためには 2 種類の誤差を制御する必要がある. 統計誤差とは偶然発生するバラツキのことを指す. 例えば, 1m の棒の長さを測定すると, 測定毎に 1m5mm, 99.5cm などのばらついたデータが得られる. 測定法が正しければ, 測定値は真の長さ 1m の周りでばらつき, 測定を繰り返すことで平均値は真の値 1m に近づく. 一方, 測定機器の異常や測定法の間違い/不正確さなど測定が正しく行われなかった場合, 測定値は真値から外れた値の周りでばらつき, 測定を繰り返しても, 得られる値は真値からずれてしまう. このようなずれはバイアスと呼ばれる. 統計学において, これらは精密さ, 正確さとも呼ばれ, 正確とは測定値にバイアスがないこと, 精密とは測定回数が十分多いことを意味する. 測定が正確でない場合, 精密度を向上させても真値を得る事はできない.

期待値は真の値より過小評価される. 逆に,  $\beta$  を小さい値にずらしていった場合は分布の左裾が打ち切られることになり, プラケットの期待値は真の値より過大に評価される. このようにオーバーラップ問題は裾の片側を打ち切るような効果があり, 系統誤差をもたらす.

### オーバーラップ問題の原因

オーバーラップ問題の原因は, シミュレーションで求めた確率分布  $w_0$  が真の確率分布と異なることにある.  $\beta_0$  においてゲージ配位の従う真の確率分布を  $\tilde{w}_0$  とする. シミュレーションで得られる  $w_0$  は  $\tilde{w}_0$  を近似したもののだが,  $\tilde{w}_0$  が非常に小さい状態は有限時間のシミュレーションでは出現せず,  $w_0$  がゼロに近似されてしまう. Reweighting の要点は reweighting 因子 (3.10) をかけることで, 状態の出現確率を再構成することにあるが, 出現確率が 0 に打ち切られた状態は reweighting 因子をかけても取り出せないのである. つまり  $w_0$  は分布の裾の低確率状態を正しく再現しておらず, そのため reweighting で得られる分布も真の分布からずれてくる. このような分布のずれの問題はオーバーラップ問題と呼ばれる. 重点サンプリングは積分値への寄与の大きい配位を重点的に抽出する方法であるが, 別の言い方をすれば, 積分値に寄与しない配位を捨てる方法とも言える. 分布の裾の領域は積分値への寄与が小さく, 重点サンプリングで切り捨てられてしまうのは避けられないことであり, オーバーラップ問題は重点サンプリングの特性に起因していると言える.

分布の裾をどの範囲まで正しく取り込めるかは, 出現確率とサンプリングの回数 (配位の個数) によって概ね決まってくる. たとえば, サイコロ 10 個を同時に投げる, という試行を考える. 全て 1 となる確率は  $(1/6)^{10}$  である. 試行回数が少ない場合, 例えば 10 回程度の試行の場合, 全て 1 となるような事象は発生しないかもしれない. 試行回数が十分大きければそのような事象も観測できるだろう.

格子 QCD の例で分布の中央と裾の出現頻度を概算してみよう. プラケットは単位体積辺りのエネルギーなので, 作用  $S$  を (プラケット)  $\times$  (系の体積) と近似する. 厳密に言うと, 状態数やフェルミオンからの寄与もあるが, ここではオーバーラップ問題の概要を把握することが目的なのでゲージ作用のみで概算を行う. そうするとプラケット  $P$  を持つ状態の出現頻度は  $e^{-\beta_0 S_G} \sim e^{-\beta_0 V P}$  で与えられる. 上の計算では格子体積は  $8^3 \times 4$  である.  $\beta_0 = 1.82$  のとき, 分布のピーク  $P = 0.555$  と  $P = 0.57$  の出現頻度の比は

$$\frac{e^{-0.57\beta_0 V}}{e^{-0.555\beta_0 V}} = e^{-(0.57-0.555)\beta_0 V} \sim e^{-56}$$

となり, 配位の数  $M = 200$  と比べて無視できる程小さい.

### オーバーラップ問題の確認, 相転移の議論における注意点

Reweighting を行う際にはオーバーラップのずれが結果に影響していないかに注意を払う必要がある. 上述の例のようにターゲット点でのシミュレーションが可能であれば, 物理量のヒストグラムを比較することでオーバーラップ問題の影響を確認できる. そのときの物理量は reweighting されるパラメータと関連の強い物理量 ( $\beta$  の reweighting であればプラケット,  $\mu$  の reweighting であればクォーク密度など) を選ぶと良い. ターゲット点でのシミュレーションができない場合 (符号問題の回避に reweighting を用いる場合はほぼこのケースであるが) は reweighting 因子のヒストグラムを見ることで reweighting の破綻をある程度検知することがで



きる.  $R$  のヒストグラムの裾にピークがある場合は, ピーク近傍の少数のゲージ配位が支配的になっており, そのような場合は reweighting は破綻している可能性が高い. またもう 1 つの素朴な方法は, 統計数の増加に対する期待値の安定性を確認することである. オーバーラップ問題は多くの場合系統誤差を伴うため, 標本数を増やすと期待値の変化が見られる.

オーバーラップ問題は相転移が存在しない場合でも相転移と類似したシグナルを生じさせることがあるため, 相転移の議論の際には特に注意が必要である. 図 3.1 右図では  $P \sim 0.57$  のあたりにピークが形成されている. これは分布の右側が打ち切られたために生じたもので, もとの分布にはない.  $\beta$  のずれを大きくしていくと, このピークはより鋭くなり, ピーク近傍の配位が支配的になる. このとき, ピークから離れた配位は期待値へ寄与しないので, 実効的な統計数が減少していることになる. 誤差  $e$  と統計数  $n$  には  $e \sim 1/\sqrt{n}$  の関係があるので, 実効統計数の減少は物理量の誤差を増加させる. この誤差の増大を相転移点近傍での物理量の揺らぎの増大と誤認しやすい. また, 図 3.1 の実線の分布は片側が打ち切られたために, 非対称な形状になっている. 鋭いピークや分布の非対称性は元の分布 (点線) にはないもので, オーバーラップ問題のために発生した非物理的な特徴である. Reweighting 法で得られた分布に非対称性が現れた場合は, オーバーラップにずれの影響を検証する必要がある.

### 3.1.3 Reweighting を用いた符号問題回避法

化学ポテンシャルに対する Reweighting 法の定式化

(2.2) 章で説明したように, 化学ポテンシャルを導入すると, 作用が複素数となり重点サンプリングが利用できない. しかし, パラメータのシフトという reweighting のアイデアを利用するとこの問題を回避できる.

まず, 被積分関数を  $\mu$  に依存する部分と依存しない部分に分解する

$$\begin{aligned} \langle O \rangle(\mu) &= \frac{\int \mathcal{D}U O (\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-S_g}}{Z}, \\ &= \frac{\int \mathcal{D}U O \left( \frac{\det \Delta(\mu)}{\det \Delta(0)} \right)^{N_f} (\det \Delta(0))^{N_f} e^{-S_g}}{\int \mathcal{D}U \left( \frac{\det \Delta(\mu)}{\det \Delta(0)} \right)^{N_f} (\det \Delta(0))^{N_f} e^{-S_g}}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

$(\det \Delta(0))^{N_f} e^{-S_g}$  は実なので, これを重点サンプリングの重みと解釈し, 残りの因子

$$R = \left( \frac{\det \Delta(\mu)}{\det \Delta(0)} \right)^{N_f} \quad (3.14)$$

を測定量の一部と解釈すると, (3.13) 式は

$$\langle O \rangle(\mu) = \frac{\langle RO \rangle_0}{\langle R \rangle_0} \quad (3.15)$$

と書く事ができる. ここで,  $\mu = 0$  で生成した配位を用いた期待値を  $\langle \cdot \rangle_0$  と書いた.  $\mu = 0$  のシミュレーショ

ンで  $M$  個のゲージ配位  $\{C_1, C_2, \dots, C_M\}$  を生成したとすると, (3.15) 式は

$$\langle O \rangle(\mu) = \frac{\sum_{i=1}^M R(\mu, C_i) O(\mu, C_i)}{\sum_{i=1}^M R(\mu, C_i)} \quad (3.16)$$

となる. (3.16) 式を用いれば,  $\mu = 0$  で生成したゲージ配位を用いて  $\mu \neq 0$  における物理量の期待値を求めることが出来る.

### Rewighting を用いた符号問題回避の注意点

(3.1.2) 章でオーバーラップ問題は (3.16) 式でも発生する. さらに, 符号問題の回避に reweighting を用いた際には reweighting 因子の位相ゆらぎに注意が必要となる.

フェルミオン行列式  $\det \Delta(\mu)$  が複素数となり重点サンプリングが利用できないので, これを reweighting 因子  $R$  とし, 物理量の一部と解釈した. そのため,  $R$  が複素数となる.  $R$  の位相揺らぎが激しい場合,  $\langle R \rangle_0 \sim 0$  となることがある.  $Z(\mu)$  は, reweighting を用いて

$$Z(\mu) \propto \langle R(\mu) \rangle_0 \quad (3.17)$$

で与えられるので,  $\langle R \rangle_0 \sim 0$  であれば  $Z(\mu) \sim 0$  となる. 分配関数は物理的には実正の量であるが, 位相揺らぎが激しく, かつ計算精度や統計数が不十分だと, 誤差の範囲で 0 になってしまう. このとき, (3.16) 式右辺の分母がゼロとなり, 任意の物理量の期待値  $\langle O \rangle(\mu)$  が発散するので, reweighting の関係式が破綻している.

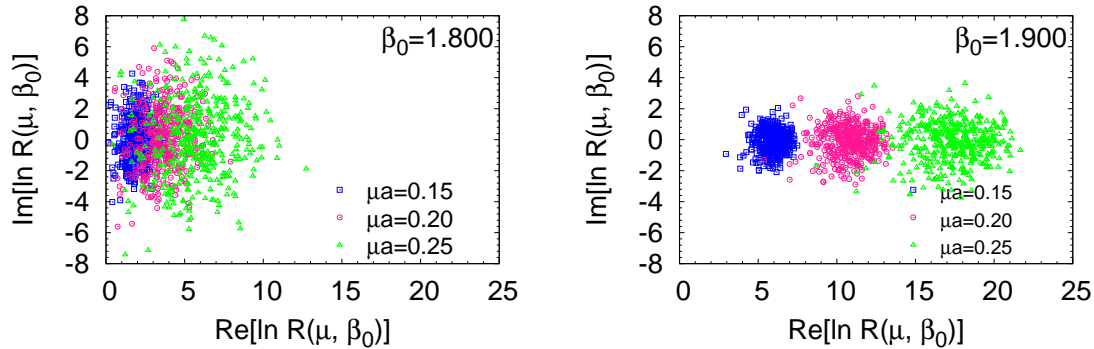


Figure 3.2: フェルミオン行列式の散布図 (文献 [2] より).  $\beta_0$  はゲージ配位を生成した際の  $\beta$  の値で,  $\beta_0 = 1.8$  は  $T_c$  よりやや低温, 1.9 は  $T_c$  よりやや高温に相当する. ほぼ円状に分布している振舞は,  $R$  の大きさと位相部の相関が弱いことを意味している.

では,  $R$  の  $\mu$  依存性を見てみる. 図 3.2 は  $\mu = 0, \beta_0$  で生成したゲージ配位  $C_i$  から求めた  $R(\mu, C_i)$  を複素平面上にプロットした散布図である. 左図はハドロン相 ( $T_c$  よりやや低温), 右図は QGP 相 ( $T_c$  よりやや高温) に対応する. 図の横軸  $\text{Re} \ln R$  は  $R$  の絶対値を対数スケールで表したもので, 縦軸  $\text{Im} \ln R$  は  $R$  の位相

を表している.  $\mu = 0$  のときは定義より全てのゲージ配位に対して  $R(\mu = 0) = 1$  であり, 図の原点にくる. ハドロン相, QGP 相どちらの場合でも,  $\mu$  の増加とともに  $R$  の分布が拡大していく. 横軸方向の広がりや  $R$  の大きさが配位によってどの程度異なるかの指標であり, オーバラップ問題の目安となる. 例として, 右図の  $\mu a = 0.25$  の結果では  $\text{Re} \ln R$  は 15 から 20 くらいまでひろがっており,  $|R|$  の大きいものと小さいものが 5 桁程度異なることがわかる. Reweighting 因子の配位平均は

$$\langle R \rangle_0 = \frac{1}{M} \sum_i R(C_i)$$

で与えられるが, 和の中のある項  $R(C)$  が極端に大きくなると,

$$\langle R \rangle_0 = \frac{1}{M} R(C)$$

となる. 1つの配位で値が決まってしまうため, 実効的な統計数は  $M$  ではなく, 1 である. この実効統計数の低下が述べたオーバラップ問題に相当している.

次に,  $R$  の位相ゆらぎを考える.  $R$  の位相が  $|\pi/2|$  を超えると  $R$  の実部は負になり,  $|\pi|$  となると  $R$  は複素平面の負の実軸上に達する. 図 3.2 の分布が縦方向に一様に広がると  $R$  の配位平均に正負の相殺が起こり,  $\langle R \rangle_0 \sim 0$  となる.  $T_c$  よりやや低温の領域で分布の縦方向の広がりが大きく, 位相ゆらぎが激しい. 図 2.3 で示した  $\langle \cos \theta \rangle_0$  が,  $T_c$  よりやや低温において 0 に近づくのは,  $R$  のこの振る舞いに起因している. Reweighting 法を用いて符号問題を回避するためには, これら 2つの問題に注意を払う必要がある.

### 3.1.4 Reweighting の改良法-Multi-parameter reweighting 法

前節で述べた 2つの問題に対する素朴な対処法は, reweighting におけるパラメータの変化を十分小さく抑えるか, パラメータのずれに応じて統計数を指数的に増やすことである. もう少し巧妙な方法として, Ferrenberg と Swendsen は複数のパラメータ値で生成した複数のアンサンブルを用いる方法 (multi-ensemble 法) や, 複数のパラメータに reweighting を応用する方法を提案している [3]. Multi-ensemble reweighting は, 配位生成をパラメータ空間上の 1 点ではなく, 複数の点で行うことでオーバラップの改善を図る方法である. 一方, 複数パラメータの reweighting は多次元のパラメータ空間内でパラメータをシフトする方法である. Fodor と Katz は, これを温度と化学ポテンシャルに応用した multi-parameter reweighting (MPR) 法を考案し [4] 1 パラメーターの場合に比べて結果が改善できることを示した (図 3.3). MPR でポイントとなるのが, 配位生成点の選び方とパラメータの動かし方である. 臨界点近傍で配位を生成した場合, 相の両側の情報が取り込めるため, reweighting 可能な領域が広い. また, パラメータの動かし方にもオーバラップのずれを抑制するような方法が存在する [2, 5, 6]. Fodor と Katz は QCD の擬相転移温度近傍を配位生成点として,  $\beta$  と  $\mu$  の 2つのパラメータに reweighting 法を応用し, QCD 臨界点を決定している [7, 8]. この節では, MPR 法の考え方を説明する.

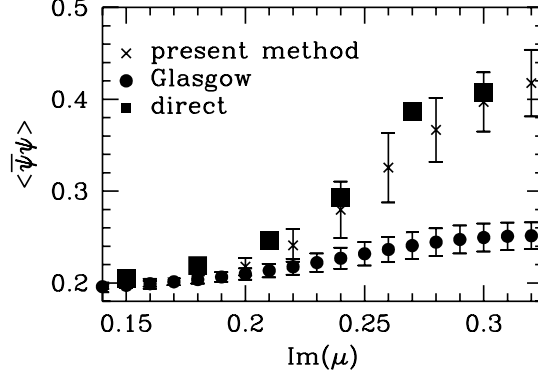


Figure 3.3:  $\mu$  についての reweighting(Glasgow) と  $\mu, \beta$  についての reweighting(present method) の比較. [4] から引用. 縦軸はカイラル凝縮, 横軸は虚数化学ポテンシャル. Reweighting パラメーターの複数化によって結果の改善が見られる.

### Multi-parameter reweighting の定式化

まず, ボルツマン因子

$$w(\mu, \beta) = (\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-\beta S_G}, \quad (3.18)$$

からスタートする. これを

$$w(\mu, \beta) = R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} w(0, \beta_0), \quad (3.19)$$

と書き換える. Reweighting 因子  $R$  は

$$R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} = \left( \frac{\det \Delta(\mu)}{\det \Delta(0)} \right)^{N_f} e^{-(\beta - \beta_0) S_G}, \quad (3.20)$$

で与えられ, 添字  $(0, \beta_0)$  は配位生成点を表す.  $w(0, \beta_0)$  は実なので, これを配位生成に利用する. 調べたい点  $(\mu, \beta)$  に対して, 2つのパラメーターをずらしている. 分配関数を書き直すと

$$\begin{aligned} Z_{GC}(\mu, T) &= \int \mathcal{D}U \left( \frac{\det \Delta(\mu)}{\det \Delta(0)} \right)^{N_f} e^{-(\beta - \beta_0) S_G} [\det \Delta(0)]^{N_f} e^{-\beta_0 S_G}, \\ &= \int \mathcal{D}U R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} w(0, \beta_0), \\ &= \mathcal{N} \langle R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} \rangle_0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

規格化因子  $\mathcal{N}$  は以下の議論には現れない.  $O$  の期待値も同様に書き直すと

$$\begin{aligned}\langle O \rangle &= \frac{\int \mathcal{D}U O R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} w(0, \beta_0)}{\int \mathcal{D}U R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} w(0, \beta_0)} \\ &= \frac{\langle O R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} \rangle_0}{\langle R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} \rangle_0}.\end{aligned}\quad (3.22)$$

式変形の上では前節までとほぼ同じだが, シフトするパラメータが2つあることが違いである. Fodor らは符号問題のない虚数化学ポテンシャル領域で通常の reweighting と MPR とを比較し, MPR によって応用範囲を拡大できることを示した [4, 6].

### 状態方程式への応用と reweighting 経路の選択

MPR では2つのパラメータを動かすことができるが, パラメータの動かし方にはコツのようなものがある. また, Ejiri は1次相転移ある理論に MPR を応用し, 相転移線に沿って reweighting 因子の揺らぎを最小化できることを指摘した [5]. さらに Ciskor らは“overlap measure”を指標とした最適な reweighting 線の導出を考案した [6]<sup>2</sup>. これを reweighting 因子の実部のゆらぎを最小化する条件として陽に定式化したのが [2] である. ここでは, そのポイントを QCD の状態方程式への応用を例に具体的に説明する.

圧力 (2.16) 式を, reweighting 法を用いて書き下す. 分配関数には規格化の不定性があるので,  $\mu = 0$  と  $\mu \neq 0$  での圧力差  $\Delta p(\mu, T) = p(\mu, T) - p(0, T)$  を考える. これを reweighting 法を用いて書き直すと

$$\frac{\Delta p}{T^4} = \left( \frac{N_t}{N_s} \right)^3 \ln \frac{\langle R(\mu, \beta)_{(0, \beta_0)} \rangle_0}{\langle R(0, \beta)_{(0, \beta_0)} \rangle_0}.\quad (3.23)$$

この式を用いると, 点  $(0, \beta_0)$  で生成した配位を用いて点  $(\mu, \beta)$  での圧力を求める事ができる.

原理的には  $(\mu, \beta)$  は任意であるが, 実際にはオーバーラップ問題や位相揺らぎのため制限が生じる. 3.1.2 章で説明したように, シミュレーションでは低確率状態の打ち切りが発生する. 打ち切られた配位が主要となるような状態は reweighting では再現できない. また, 位相揺らぎが激しい場合も reweighting は破綻する. しかし MPR では, オーバラップのずれを抑制するような  $\mu - \beta$  平面上の経路  $\beta = \beta(\mu)$  がある. このような経路の選択は1次元パラメータ空間での reweighting にはないもので, MPR の利点の1つである.

経路を選ぶ方針は一意ではないが, ここでは, ゆらぎ最小条件を例に基本的なアイデアを学ぶことにする [2]. 図 3.2 で見たように, reweighting 因子の広がりがあるためオーバーラップ問題の原因となるので, それを抑えるというアイデアである. はじめに, reweighting 因子のゆらぎ  $X$  を次の式で定義する

$$X(\mu, \beta) = \langle (R - \langle R \rangle_0)^2 \rangle_0.\quad (3.24)$$

まず, 点  $(0, \beta_0)$  から  $\mu$  を少し変化させる. このとき,  $R$  における  $\det \Delta(\mu)$  の部分は値が定まる. 次に  $\beta$  を変化させながら,  $X$  を計算し,  $X$  が最小となるような  $\beta$  を選ぶ. これで,  $R$  のゆらぎを抑えるような  $(\delta\mu, \beta_0 + \delta\beta)$  を選ぶことができる. 再度  $\mu$  を少し変化させて,  $X$  が最小となるような  $\beta$  の値を選ぶ. これを繰り返すこと

<sup>2</sup>筆者が調べた限り, “overlap measure” の具体的な定義は与えられていないようである.

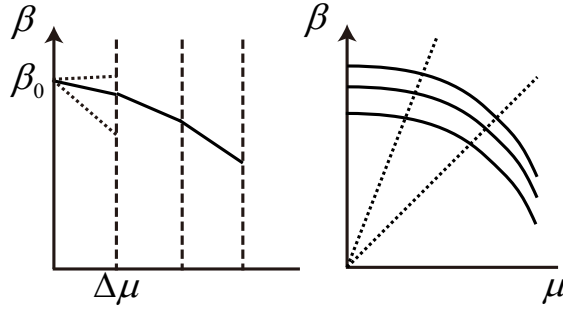


Figure 3.4: Reweighting 因子のゆらぎを抑える  $\mu, \beta$  の選び方の例.  $\mu$  を変化させ後, 様々な  $\beta$  で  $X$  の値を求め,  $X$  のゆらぎが最小となるような  $\beta$  を選ぶ (左図). この操作を繰り返すことで  $\mu - \beta$  平面上の線を得ることができる (右図).

で  $X$  の値を抑えるような  $(\mu, \beta)$  の経路が得られる (図 3.4). 経路から離れた領域に reweight することも可能だが, 離れるほどにオーバーラップのずれが増大していく. ただし, 経路上であってもオーバーラップのずれは 0 ではなく, ずれが比較的小さいにすぎない.

与えられた  $\mu$  に対して  $R$  のゆらぎを最小とするような  $\beta$  の値を決めることは,  $(\mu, \beta)$  平面上で  $X$  を高きとしたとき, 谷に沿ってパラメータを選ぶことに対応している. 上の説明では  $\mu$  の値ごとに  $X$  が最小となる  $\beta$  を数値的に探索するが,  $X$  を最小とするような  $\beta$  と  $\mu$  の関係式を導くこともできる. パラメータを  $(\mu, \beta) \rightarrow (\mu + \Delta\mu, \beta + \Delta\beta)$  とずらしたときの  $R$  の変化を  $\delta R$  とすると,  $X$  の変化は  $\delta X = 2\langle R\delta R \rangle_0 - 2\langle R \rangle_0 \langle \delta R \rangle_0$  で与えられる.  $R$  のゆらぎ  $X$  が最小となるのは  $\delta X = 0$  であるから,

$$\frac{\langle R\delta R \rangle_0}{\langle R \rangle_0} = \langle \delta R \rangle_0. \quad (3.25)$$

Reweighting 法の定義から, 左辺は

$$\frac{\langle R\delta R \rangle_0}{\langle R \rangle_0} = \langle \delta R \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U \delta R w(\mu, \beta), \quad (3.26a)$$

となる. つまり求めたい点において  $\delta R$  の期待値をとったものとなっている. 一方右辺は

$$\langle \delta R \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}U \delta R w(0, \beta_0). \quad (3.26b)$$

(3.25) 式が満たされるのは,  $w(\mu, \beta)/Z = w(0, \beta_0)/Z_0$  が成り立つとき, つまり, ターゲット点と配位生成点における重みが等しい場合となる.  $R$  の変分

$$\delta R(\mu, \beta) = \frac{\partial R}{\partial(\mu/T)} \frac{\Delta\mu}{T} + \frac{\partial R}{\partial\beta} \Delta\beta \quad (3.27)$$

を (3.25) に代入すると

$$\left( \left\langle \frac{\partial R}{\partial(\mu/T)} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial R}{\partial(\mu/T)} \right\rangle_0 \right) \frac{\Delta\mu}{T} = - \left( \left\langle \frac{\partial R}{\partial\beta} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial R}{\partial\beta} \right\rangle_0 \right) \Delta\beta. \quad (3.28)$$

ここで, reweighting の公式 (3.22) を用いると,

$$\Delta\beta = \frac{\langle R^2 a \rangle_0 - \langle R \rangle_0 \langle Ra \rangle_0}{\langle R^2 b \rangle_0 - \langle R \rangle_0 \langle Rb \rangle_0} \frac{\Delta\mu}{T}, \quad (3.29a)$$

を得る. ここで

$$a = N_f \text{tr} \left[ \Delta(\mu)^{-1} \frac{\partial}{\partial \mu/T} \Delta(\mu) \right], \quad (3.29b)$$

$$b = S_G. \quad (3.29c)$$

この式は  $\mu - \beta$  平面上の曲線を与えており, それに沿ってパラメータを変化させれば  $X$  のゆらぎの増加を抑えることが出来る. さらに, 無限小のパラメータ変化の場合,

$$\Delta\beta = \frac{\langle n \rangle - \langle n \rangle_0}{\langle S_G \rangle - \langle S_G \rangle_0} \left( \frac{\Delta\mu}{T} \right)$$

が得られる. この式と  $(p, T)$  平面上の Clausius-Clapeyron 方程式の類似が [5] において指摘されている.

上記の方法には 1 つ注意点がある. 上記の方法でオーバーラップのずれを抑制する仕組みはゲージ作用とフェルミオン作用の相殺にある. しかしながら, この仕組みは  $R$  の絶対値には効くが, ゲージ作用が実であるため位相部には効かない [5]. したがって, 上記の議論は reweighting 因子の位相部が小さい場合に有効で, 位相部のゆらぎが大きい場合には適用できない.

### 3.1.5 Reweighting 可能な理論の例

フェルミオン行列式が実であれば重点サンプリングを用いたゲージ配位生成が可能となる. フェルミオン行列式が実となるような作用は他にもあり, よく知られているものとしては,

- 虚数化学ポテンシャル: クォーク化学ポテンシャルが純虚数の場合
- クエンチ近似: フェルミオン行列式を 1 とした場合
- 位相クエンチ: フェルミオン行列式の大きさをとったもの
- アイソスピン QCD:  $N_f = 2$  でアップクォークとダウンクォークの化学ポテンシャルを逆符号にとったもの  $\mu_u = -\mu_d$
- カラー SU(2): カラー自由度が 2 の非可換ゲージ理論

などがある. これらは現実の QCD とは異なるが QCD と類似した性質を持つ理論であり QCD-like theory などと呼ばれる. QCD-like theory を利用してゲージ配位を生成し, reweighting で QCD の結果を再現するというのは, 符号問題回避の典型的なアプローチとなっている. 重点サンプリングに用いる QCD-like theory のボルツマン因子を  $w$  とすると, reweighting 因子を

$$R = \frac{\det \Delta(\mu) e^{-S_g}}{w},$$

と書くことで簡単に実装できる. どのような作用を配位生成に用いるにせよ,  $w \in \mathbb{R}$  である限りは,  $\det \Delta$  の位相ゆらぎが激しいと  $R$  の位相揺らぎも激しくなり, reweighting は破綻する. つまり, 程度の差はあるが, QCD-like theory からの reweighting の限界は  $\det \Delta$  の位相部の振る舞いで決められてしまう.

## Lee-Yang ゼロ点への応用における注意点

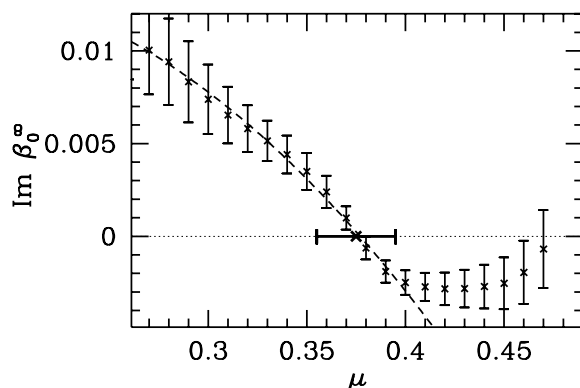


Figure 3.5: MPR で求めた Lee-Yang zero 点. [7] から引用.  $\beta$  を複素平面に拡し, 分配関数がゼロとなる点が導出されている. 相図上の臨界点の位置は  $\beta$  を温度に変換することで得られる. 後に, [9] で有限サイズスケールリングにおける問題点が指摘された.

文献 [7, 8] では,  $\mu, \beta$  に対する reweighting を用いて Lee-Yang 零点<sup>3</sup>計算によって QCD 臨界点が求められている (図 3.5). しかし, reweighting を用いた Lee-Yang ゼロ点の計算では, reweighting 法が非物理的なシグナルを生じさせることがあり注意が必要である [9]. (3.1.2) 章で説明したように, オーバラップのずれはパラメータのずれの大きさや体積の増加に対して指数的に増加する. Lee-Yang 零点定理は, 相転移を表す熱力学的な特異性が, 熱力学的極限において分配関数が零に近づく事を述べた定理で, 相転移点において

$$\lim_{V \rightarrow \infty} Z \rightarrow 0$$

となる事を指摘している (Lee-Yang ゼロ点定理については B.2 章を参照). Reweighting 法を用いた場合, 格子体積の増加に伴い  $Z$  の誤差も増大するため, 分配関数がゼロに近づいているのか, 誤差が増加して誤差の範囲にゼロが入っただけなのか判別できない. Lee-Yang ゼロ点を reweighting 法を用いて同定するためには, 誤差をコントロールしながら体積依存性を調べる必要がある. 高温 QCD における Roberge-Weiss 相転移に対してはこのような計算が達成されており [10], 3.4.4 章で説明する.

この節で紹介した方法の他にも, multi-ensemble を用いた reweighting 法 [3, 11, 12] やヒストグラム法 [13] などの改良法も提案されている. また, reweighting 法の一般化である状態密度法も近年進展している.

### 3.1.6 計算量の問題-なぜ有限密度格子 QCD 計算は重いのか?

格子 QCD 研究におけるテーマの中でも, 有限密度格子 QCD は標準的なテーマ (符号問題のないもの) に比べて計算量がかなり大きく, しばしば, 有限密度格子 QCD (の計算) は重い, と言われる. その原因はフェルミオン行列式  $\det \Delta$  の計算にあり, reweighting を始めとする符号問題回避法にしばしば現れる問題である. 数

<sup>3</sup> ゼロ点定理の温度への拡張は Fisher によって与えられたので, 複素化された  $\beta$  平面上における零点はフィッシャー零点と呼ばれる.



値計算において計算量の問題は実行可能な範囲を決める重要な要素であるので、ここで、なぜ行列式計算は重いのか、なぜ有限密度格子 QCD では行列式計算が発生するのか、を説明する。

行列式の計算は数値計算において計算量の大きい問題である。対角化や  $LU$  分解などを用いた行列式の直接計算は、3 重ループを伴う連立一次方程式の解法であり、行列のランク  $V$  に対して  $O(V^3)$  の計算量を必要とする。また、これらの計算を行うためには行列の値をメモリに格納する必要があるが、必要なメモリサイズは  $O(V^2)$  である。ランクが大きくなるほど行列式計算が煩雑になることは、ランク 2, 3, 4 の行列式計算を実際に行ってみればただちにわかる。フェルミオン行列  $\Delta$  は内部自由度と格子座標に関する多次元の行列であり、そのランクは格子の一辺を  $L$  とすると  $L^4$  に比例する。行列を格納するために必要なメモリは  $L^8$ 、行列式計算に必要な計算量は  $L^{12}$  となり、格子サイズの増加に対して、メモリ、計算量ともに急激に増加する。

フェルミオン行列式の計算量は格子サイズに強く依存するが、標準的な格子 QCD の配位生成法である Hybrid Monte Carlo 法では、作用そのものではなく作用の変分を用いるため、行列式の計算がトレース計算に置き換えられる。対角和の計算に必要なメモリは対角成分  $O(V)$  であり、計算量も 1 重ループでよいので、行列式計算と比べて計算量の格子体積依存性が格段に小さい<sup>4</sup>。カイラル凝縮やハドロン相関関数等、物理的に興味のある多くの物理量もフェルミオン行列のトレース演算で求めることができる。通常の格子 QCD 計算ではフェルミオン行列式計算が必要なく、そのために大きい格子での計算が実現できる。

では、reweighting 法などの符号問題回避法においてフェルミオン行列式計算が発生するのはなぜだろうか。回避することはできないのだろうか？それは reweighting 法などが配位生成点  $\mu = 0$  からの外挿法であることに起因している。配位生成点から  $\mu$  を大きくずらして計算の正しさを保持するためには、化学ポテンシャル依存性について正確な計算が必要であり、その為に reweighting 因子の化学ポテンシャル依存性についての厳密な扱いが必要となる。関数型が正確でなければ外挿の正しさが保障されないのである。したがって、reweighting 法に限らず、符号問題のないパラメーターでの配位を利用する符号問題回避法では行列式計算の発生は基本的には避けられない。次章以降で説明するように、テイラー展開や虚数化学ポテンシャルからの解析接続ではフェルミオン行列式計算は必要ないが、この場合は適用範囲と計算量のトレードオフとなる。例えば、テイラー展開で化学ポテンシャルの大きい領域を調べるためには、フェルミオン行列式のテイラー展開を高次まで計算する必要があるが、フェルミオン行列式を厳密に計算するのと計算量は変わらない。テイラー展開を低次で打ち切れば計算量は少ないが、適用範囲が化学ポテンシャルが小さい領域に限定される。

有限密度格子 QCD 研究は小格子サイズに対して行われることが多いが、それは計算量の格子体積依存性が通常の格子 QCD 計算と比べて格段に強いという上記の事情によっており、その依存性の強さは符号問題回避法が外挿法であることに起因している。フェルミオン行列式の計算は不可避だが、フェルミオン行列式に対してランクを小さくする公式があり、計算量のある程度削減することができる。これは 3.4.2 章で説明する。計算量の格子体積依存性の問題を解決するためには、調べたいパラメータ値で配位生成を行う必要がある。4.1 章では、この方向での近年の発展として複素ランジュバン法を紹介する。

この章では reweighting 法の考え方を説明した。reweighting 法の応用例については次章でテイラー展開法

<sup>4</sup> 厳密に言うと、フェルミオン行列式の逆行列のトレース計算であり、逆行列計算が必要となるが、それでも行列式計算に比べると格段に計算量が少ない。

と比較しながら議論する.

## 3.2 テイラー展開法

この章では、化学ポテンシャルが小さい場合に有効な方法であるテイラー展開について述べる。熱力学量は相転移点を除けば化学ポテンシャルの解析関数なので、 $\mu = 0$  の周りでテイラー展開できる

$$O(T, \mu) = \sum_n c_n(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^n. \quad (3.30)$$

ここで、展開係数は

$$c_n(T) = \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial^n O}{\partial \mu^n}\right)_{\mu=0} \quad (3.31)$$

で与えられる。テイラー係数  $c_n$  は  $\mu = 0$  において定義されているため、重点サンプリング (HMC) で計算可能である。求めた  $c_n$  を (3.30) 式に代入すれば、 $\mu \neq 0$  における物理量の期待値が求まる。テイラー展開の利用には熱力学量の微分可能性が必要となるが、QCD 相図の温度軸 ( $\mu = 0$ ) 近傍ではハドロン相と QGP 相はクロスオーバーで滑らかにつながっており、この領域ではテイラー展開可能である。原理的には任意の  $n$  に対して  $c_n$  の計算が可能であるが、次数が高くなるほど式が複雑になり、かつ、統計誤差も増加するため、難しい。現在のところ、実際に計算可能なのは低次項に限られる。そのため、テイラー展開は原理的には収束半径内で応用可能だが、低次で打ち切った場合には、応用範囲は  $\mu$  の小さい領域に限られる。

テイラー展開は、行列式計算が発生しないため計算量の格子体積依存性が緩やかである事が利点で、現在、有限密度格子 QCD 研究の中で物理点外挿が達成されているのは、このテイラー展開法と次章で説明する虚数化学ポテンシャル法の2つである。この章ではこの方法のアイデアと応用例を紹介し、QCD 相図への応用において、テイラー展開が妥当と判断できる温度密度領域について考察する。また、この章で reweighting 法とテイラー展開の比較を行い、それらの妥当性を検証する。

### 3.2.1 テイラー展開法のアイデアと状態方程式への応用

テイラー展開を用いて圧力、クォーク数、クォーク数感受率の  $\mu$  依存性を調べる。圧力 (2.16) 式を考える。ここで、格子シミュレーションでの計算を簡単化するために、 $T^4$  で割って無次元化した量を考える

$$\frac{p(\mu, T)}{T^4} = \left(\frac{N_t}{N_s}\right)^3 \ln Z(\mu, T). \quad (3.32)$$

$p(\mu, T)$  を  $\mu = 0$  周りで  $\mu/T$  について展開すると、

$$\frac{p(\mu, T)}{T^4} = \frac{p(0, T)}{T^4} + \sum_{n=2,4,\dots}^{\infty} c_n(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^n, \quad (3.33a)$$

を得る。QCD は CP 不変性、つまり、クォークと反クォークの入れ替えに関する対称性を持つため、 $\mu$  の偶べきで展開できる。テイラー係数  $c_n$  は次の式で定義される

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{n!} \frac{p^{(n)}(\mu = 0, T)}{T^4}, \\ &= \frac{1}{n!} \left(\frac{N_t}{N_s}\right)^3 T^n \frac{\partial^n \ln Z}{\partial \mu^n} \Big|_{\mu \rightarrow 0}. \end{aligned} \quad (3.33b)$$

$p$  の  $\mu$  に関する一階微分と二階微分は、それぞれクォーク数密度  $n_q$  とクォーク数感受率  $\chi_q$  を与える、

$$\frac{n_q}{T^3} = \sum_{n=2,4,\dots}^{\infty} n \cdot c_n(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^{n-1}, \quad (3.34a)$$

$$\frac{\chi_q}{T^2} = \sum_{n=2,4,\dots}^{\infty} n(n-1) \cdot c_n(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^{n-2}. \quad (3.34b)$$

$c_1$  および  $c_2$  は (2.20) 式および (2.21) 式において  $\mu$  をゼロとおくことで求まる。 $c_1$  は  $\mu = 0$  におけるクォーク数密度であるからゼロである。 $p(\mu)$  は  $\mu$  の偶関数なので、奇数次のテイラー係数は  $\mu = 0$  において 0 となる。 $c_n$  は  $T$  の関数なので、級数の収束のよさは温度に依存する。

格子 QCD の計算結果に進むまえに、クォーク自由ガス模型とハドロン共鳴ガス (Hardon Resonance Gas: HRG) 模型の 2 つの典型的なケースに対して  $c_n$  の振る舞いを調べてみる。まず、高温を考える。十分温度が高ければ、漸近自由性からクォーク間の相互作用は小さくなり、系はクォークの自由ガスとして記述できる。クォーク自由ガス模型の自由エネルギーは化学ポテンシャルのたかだか 4 次の関数で記述できる<sup>5</sup>

$$\frac{p(\mu)}{T^4} = \frac{p(0)}{T^4} + c_2 \left(\frac{\mu}{T}\right)^2 + c_4 \left(\frac{\mu}{T}\right)^4. \quad (3.35)$$

この場合、 $c_2$  と  $c_4$  を  $\mu = 0$  において求めれば、任意の化学ポテンシャルに対して  $p(\mu, T)$ <sup>6</sup> を求めることができる。自由ガスに対する  $c_2$  と  $c_4$  は

$$c_2 = \frac{N_f}{2}, \quad c_4 = \frac{N_f}{2\pi^2}, \quad (3.36)$$

で与えられる。

ハドロン共鳴ガス模型は  $T_c$  より低い温度領域で RHIC 実験や格子 QCD のデータをよく再現しており、ハドロン相低密度領域における QCD の現象論的有効模型である [15, 16]。その自由エネルギーは

$$\frac{p(\mu, T)}{T^4} = a(T) + b(T) \left[ \cosh\left(\frac{3\mu_q}{T}\right) - 1 \right] \quad (3.37)$$

で与えられる。奇数次の係数はゼロとなる。偶数次の係数は、

$$c_2 = \frac{9}{2}b(T), \quad c_4 = \frac{27}{8}b(T), \quad c_6 = \frac{81}{80}b(T), \quad \dots, \quad c_{2n} = \frac{3^{2n}}{(2n)!}b(T) \quad (3.38)$$

となる。自由ガスとは異なり、高次のテイラー係数も非ゼロである。

2 つの特徴的なケースを紹介したが、一般の温度において  $c_n$  を求めるためには QCD の非摂動計算が必要である。テイラー係数は  $\mu = 0$  で定義されているので重点サンプリング (HMC) で計算できる。(2.21) 式や (2.20) 式から推察できるように、高次の係数になるほど計算式が含む項数が増加し、計算時間、統計誤差がともに増大する。また、 $\mu$  についてのテイラー係数はフェルミオン行列やその逆行列を含む対角和で与えられるが、対角和はノイズ法を用いて計算することが多い。ノイズ法は行列の対角和計算において、規格直交条件を満たすような基底をランダムに生成することで計算量を減らす方法であり、 $\text{tr} \Delta^{-1}$  の計算回数を削減でき

<sup>5</sup> Kapsta[14]. 神吉健, パリティ物理学, クォークグルーオンプラズマ, 丸善 (1991).

<sup>6</sup> 体積無限大の極限では  $p(\mu, T)$  は自由エネルギー  $f(\mu, T)$  とみなせる。

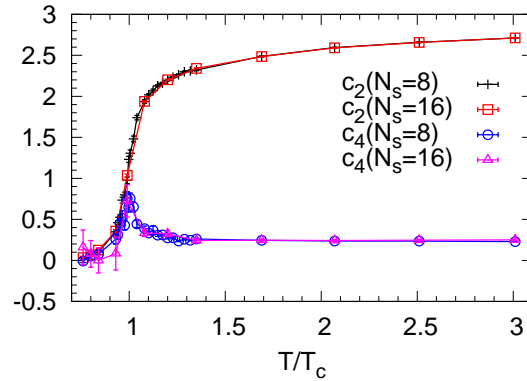


Figure 3.6: 状態方程式の2次と4次のテイラー係数の温度及び体積依存性.  $N_s$  は空間方向の格子サイズ.  $N_s = 8$ の結果は [2] から,  $N_s = 16$ の結果は [17] から抜粋. 2つのシミュレーションでは, 格子サイズ以外のパラメータは同一に揃えてある.

る. 一方で, 一つの配位に対するトレース計算において乱数に起因した誤差が発生してしまう. このような誤差は単純な物理量の場合には問題にならないのだが, 高次のテイラー係数計算では厳しい制約となる. 個々の配位に対して計算を精密化するためには規格直交基底を用いればよいが, 逆行列計算の回数が増加する. 任意の高次項に対して精度良くテイラー係数を求める方法として縮約公式があるが, 高精度の代償として計算量が多く大きい格子サイズへの適用は難しい (3.4.2 章参照). また, 1つの配位に対する計算を厳密に行っても, 統計揺らぎが次数とともに増加するため, 高次項の測定を行うには統計数の向上が必要となる.

まず低次のテイラー係数に対するノイズ法と厳密計算両方の結果を見てみる. 図 3.6 は  $c_2$  と  $c_4$  の結果を表しており,  $N_s = 8$  は縮約公式を用いた計算,  $N_s = 16$  はノイズ法を用いた計算である.  $c_2$  は温度とともに単調に増加し,  $c_4$  は  $T_c$  近傍でピークに達した後, 温度とともにある値に近づいていく. 自由ガス模型は高温で  $c_2, c_4$  が一定値となる事を示唆しているが, 格子計算の結果はこの予測と一致している<sup>7</sup>.  $c_2$  および  $c_4$  には  $N_s$ (空間方向の格子点の数) への依存性は見られない. これは  $c_2, c_4$  が格子体積で規格化された状態方程式に対する展開係数であることから自然な結果である.

次に高次項  $n = 6, 8, 10$  の結果を図 3.7 に示す. ここでは, 縮約公式を用いた結果のみをのせる.  $c_6, c_8, c_{10}$  は  $T_c$  近傍の温度領域では  $T$  の関数として振動し,  $T$  が  $T_c$  よりある程度大きくなると急速に減衰し,  $T/T_c \gtrsim 1.2$  程度ではほぼゼロとコンシステントとなる. まず, 高温領域に注目すると,  $T$  が  $T_c$  よりある程度大きければ  $c_{n \geq 6} \sim 0$  となり, 状態方程式は  $\mu$  の4次関数で近似できる. これは自由ガス模型の持つ性質と同じであるが, 高温極限をとらずとも,  $T$  がある程度高ければ4次関数の近似が妥当となる. 高次項がゼロとなる温度領域

<sup>7</sup>ただし,  $c_2$  と  $c_4$  が自由ガスの値からずれる問題が知られている. 原因として有限時間サイズ ( $N_t$ ) の効果, 有限体積効果 ( $N_x N_y N_z$ ) 及び温度が漸近自由領域に不十分であることなどが挙げられる. これは, QCD の有効結合定数  $g$  が高エネルギー領域 ( $Q^2 \gg 1$ ) において

$$\frac{g^2(Q^2)}{4\pi} \sim \frac{6\pi}{(33 - 2N_f) \ln(Q^2/\Lambda^2)}$$

のように対数的に減少するため,  $T \sim O(T_c)$  が  $g \sim 0$  となるには不十分であると考えられている.

はシミュレーションのセットアップなどに依存するが,  $T/T_c = 1.2 \sim 1.3$  程度である [17-19].

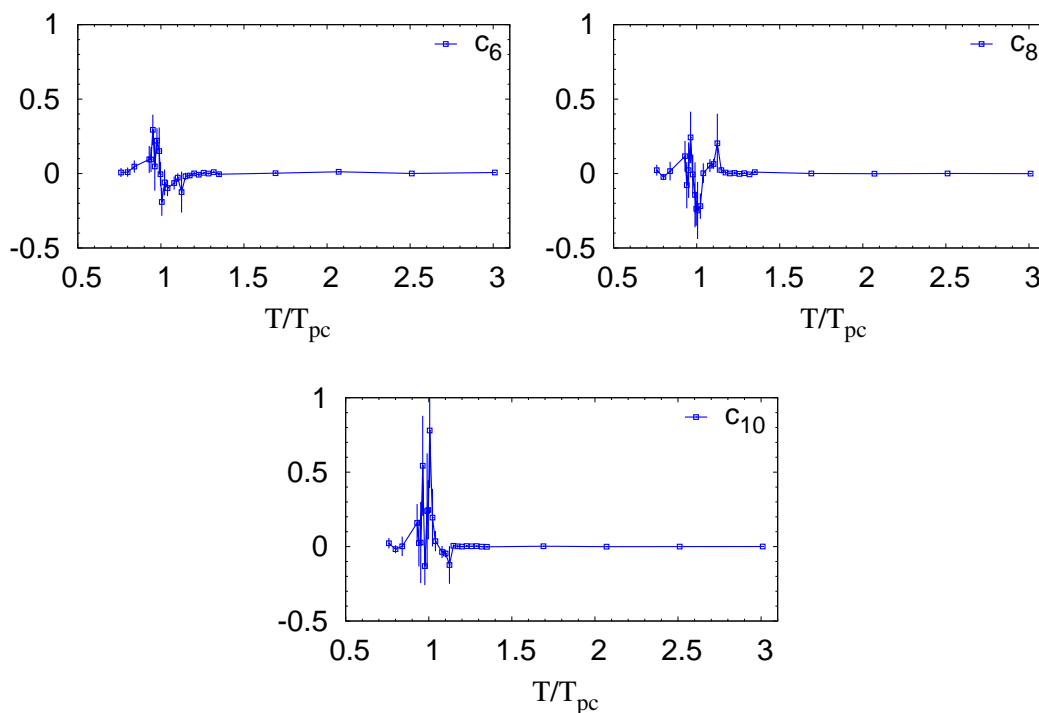


Figure 3.7: テイラー係数  $c_n$  の温度依存性. [2] より引用. カイラル有効理論の結果 [20] との類似が見られる.

$T_c$  近傍領域 ( $0.8T_c \lesssim T \lesssim 1.2T_c$ ) では,  $c_n$  はノードをうつような振る舞いを示し, ノードの数は  $n$  とも増える. 同様の振舞はカイラル有効理論にも見られる [20]. もう 1 つの特徴として, 高次項の減少が遅いことが挙げられる. ピーク点の大きさ  $\max_T |c_n(T)|$  は  $n = 6, 8, 10$  いずれにおいても  $\max_T |c_n| \sim 0.5$  程度となっており, 顕著な減少は見られない. さらに,  $c_n$  の符号が  $n$  によって正負どちらもとるため, テイラー級数 (3.33a) 式の収束が遅いことが予想される. また,  $T_c$  近傍領域では誤差が大きく, 例えば  $n = 10$  で  $c_{10}$  の温度依存性が誤差に埋もれて判別できなくなりつつある. つまり,  $T_c$  近傍では, テイラー級数の収束が遅くなり高次項の計算が必須となるが, 統計誤差も次数とともに増大していくことになる. 高次項を求めるためには, 統計数を増やしつつ,  $c_n$  の振動を正しく捉えるようシミュレーション点を増やす必要がある. 逆に, 有限項で打ち切った場合は, 打ち切られた項が十分無視できる程度に  $\mu/T$  を制限する必要がある.

低温領域を考えると,  $T$  が  $(0.7 \sim 0.8)T_c$  を下回ると,  $c_n$  はほぼゼロとコンシステントになってしまう.  $c_n$  の値が決まらないため, 状態方程式の  $\mu$  依存性を決定することも精度的に容易ではない. このシグナルのイズ比の低下は低温低密度領域の困難の 1 つである.

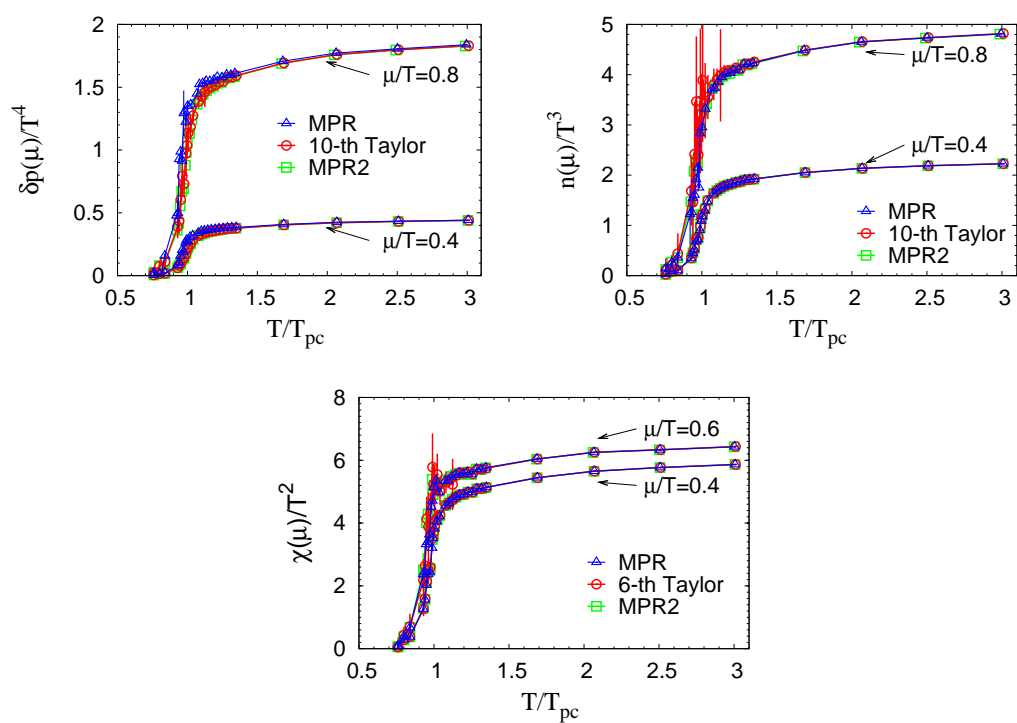


Figure 3.8: テイラー展開と MPR で求めた熱力学量の比較. 文献 [2] より抜粋. (左上図での  $\delta p(\mu)$  は本原稿の  $p(\mu)$  と同じ.)

### 3.2.2 状態方程式の密度依存性. テイラー展開と reweighting の比較

テイラー係数  $c_n$  が求まったので, 圧力, クォーク数密度, およびクォーク数感受率を求めることができる. テイラー展開法と multi-parameter reweighting(MPR) 法でこれらの物理量を計算し, 結果を比較したのが図 3.8 である. 圧力とクォーク数密度では  $c_n$  を  $n = 10$  まで, クォーク数感受率では  $n = 6$  まで和をとっている. テイラー展開と MPR は圧力と数密度に対しては  $\mu/T \sim 0.8$  程度まで, クォーク数感受率に対しては  $\mu/T \sim 0.6$  程度まで一致している. 高階微分になるほど  $T_c$  近傍で誤差が増大する傾向がある. これは高階微分に生じる階乗の因子  $(x^n)^{(m)} = n(n-1)\cdots(n-m+1)x^{n-m}$  が高次の  $c_n$  への依存性を強めるためである.

2つの方法で結果が一致することから, バイアスの可能性のうちいくつかは排除できる. テイラー展開は  $\mu$  の高次項の打ち切りの影響をうけるが, MPR ではフェルミオン行列式を厳密に扱っているため, 打ち切り誤差は存在しない. 一方, MPR はオーバーラップのずれの影響をうけるが, テイラー係数は  $\mu = 0$  における格子 QCD シミュレーションで計算されるため, オーバーラップのずれは発生しない. バイアスの要因が異なる 2 種類の結果の一致はテイラー展開における高次項の打ち切り誤差や, MPR におけるオーバーラップのずれが無視できることを示唆している. 2つの方法は  $\mu/T = 0.6 \sim 0.8$  程度まで一致しており, この領域ではこれらの結果は信頼して良さそうである.

### 3.2.3 相転移に関する議論

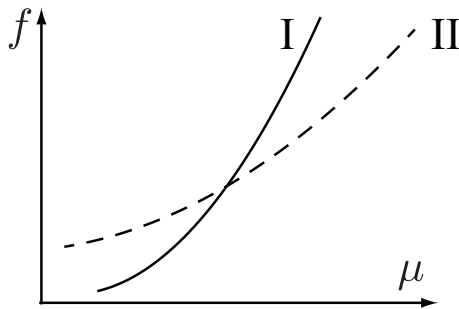


Figure 3.9: 自由エネルギーがカuspを持つ例の概念図. (I), (II) は状態 (I), (II) を仮定して求めた場合の自由エネルギー. 一方の状態でテイラー展開し収束半径を求めても相転移点を識別できない可能性がある. 実際に, 虚数化学ポテンシャルにおける Roberge-Weiss 相転移でこのような例が見られる.

収束半径の定義は複数あるが, 例えば, ダランベールの判定法を用いると, (3.33a) 式の収束半径は

$$r = \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{c_n}{c_{n+1}} \right| \quad (3.39)$$

で与えられる. これを用いて, QGP 相とハドロン相の境界線を求める計算がしばしば行われている. これに関する注意点を 2 つ述べる.

1 つ目の注意点として, 収束半径を求めるためには十分高い次数まで  $c_n$  を計算する必要がある. 図 3.7 で見たように, 1 次相転移が存在する可能性がある  $T < T_c$  の温度領域ではテイラー級数の収束はおそく,



$n = 10$  程度では明らかに不十分である. テイラー展開の収束半径を求める場合は収束条件を満たすかどうかの確認は必須である.

もう一つ注意点は,  $r$  と  $\mu_c/T$  の間の等号は必ずしも保障されておらず, 一般に言えるのは  $\mu_c/T \leq r$  という点である. 2つの状態 I と II があり, それぞれの自由エネルギーが  $f_I(\mu)$ ,  $f_{II}(\mu)$  で与えられるとする (図 3.9). どちらかの状態を仮定してテイラー展開したとき, その関数は相転移点を含む領域で定義できればよく, 必ずしも相転移点と収束半径が一致する必要はない. 相転移点上で解析的であっても, 相転移点においてカusp型の非解析性をもつことが可能である. 図のように,  $f_I, f_{II}$  どちらも任意の  $\mu$  で well-defined であったとしても,  $f_I < f_{II}$  となるような  $\mu$  に対しては系は相 I にあり,  $f_I > f_{II}$  となるような  $\mu$  に対しては系は相 II にあり,  $f_I = f_{II}$  となる点で相転移が起こる. このような場合,  $f_I, f_{II}$  をそれぞれの相でテイラー展開した場合の収束半径は相転移点とは一致しない. このようなカusp型の相転移は実例があり, それが次章で説明する Roberge-Weiss 相転移である [21]. Roberge-Weiss 相転移は高温 QCD における虚数化学ポテンシャルの変化に対して起こる相転移である. QGP 相での自由エネルギーはクォーク自由ガス模型の与える (3.35) のような化学ポテンシャルの 4 次関数でよく近似できる. (3.35) 式の場合, もちろん, 収束半径は無限大である.  $r = \infty$  であるにもかかわらず, 1 次相転移は存在し, この相転移点をテイラー級数の収束半径から求めることはできない.

テイラー展開法で  $\mu$  の大きい領域を調べる事は難しいが, その代わりに, 計算方法が通常の格子 QCD シミュレーションと同じであるため, 通常の格子 QCD シミュレーションと同程度の高精度計算が可能である点が利点である. テイラー係数の初期の研究は, Allton らによってスタッガードフェルミオンに対して行われており, 文献 [22] で 4 次まで, 文献 [18, 23] では 6 次まで計算されている. Wilson フェルミオンに対する計算は, [17] で 4 次項まで, [2] では 10 次項まで行われている. [2] を除く全ての文献で, ノイズ法が用いられている. 一方, [2] では, 縮約公式を用いた厳密計算が用いられている. ノイズ法を用いた計算では格子体積を大きくすることができる代わりに高次項の計算は難しい. 一方, 縮約公式を用いた場合は高次項の計算も可能だが, 代わりに格子体積を大きくすることは難しい.

### 3.3 虚数化学ポテンシャルからの解析接続

符号問題は  $\det \Delta(\mu)$ , ( $\mu \neq 0$ ) が複素数となることによって発生する. ここで, 化学ポテンシャルを純虚数 ( $\mu = i\mu_I, \mu_I \in \mathbb{R}$ ) とすると, フェルミオン行列式は実となる. これは簡単に示すことができる,

$$\begin{aligned} \gamma_5 \Delta^\dagger(\mu = i\mu_I) \gamma_5 &= \gamma_5 (D_\nu \gamma_\nu + m + i\mu_I \gamma_4)^\dagger \gamma_5, \\ &= \gamma_5 (-D_\nu \gamma_\nu + m - i\mu_I \gamma_4) \gamma_5, \\ &= D_\nu \gamma_\nu + m + i\mu_I \gamma_4, \\ &= \Delta(\mu = i\mu_I). \end{aligned} \tag{3.40}$$

( $\det \Delta(\mu) \big)^* = \det \Delta(\mu)$  となるのでフェルミオン行列式  $\det \Delta(\mu = i\mu_I)$  は実となる. (3.40) 式は, 連続時空の場合だが, 格子理論の場合でも  $\mu$  が純虚数であればフェルミオン行列式は実となる.

格子 QCD の場合は物理的な解釈も明白である. 化学ポテンシャルはフェルミオン行列に含まれる第 4 方向のリンク変数に

$$U_{n4} \rightarrow e^{\mu a} U_{n4}, U_{n4}^\dagger \rightarrow e^{-\mu a} U_{n4}^\dagger$$

という形で導入されている. 格子上でのダイアグラムを考えると,  $e^{\mu a}$  と  $e^{-\mu a}$  の大きさの違いは, 時間方向を前方に周回するループと後方に周回するループの大きさを変え, そのためにそれらの位相の相殺が破れてしまう. 一方,  $\mu = i\mu_I$  とおくと

$$e^{-\mu a} U_{n4}^\dagger = e^{-i\mu_I a} U_{n4}^\dagger = (e^{i\mu_I a} U_{n4})^\dagger$$

となる. この場合は, 前方へ周回するループと後方へ周回するループが互いにエルミートになるため, 位相の相殺機構が回復する.

フェルミオン行列式が実であるので **reweighting** が利用可能であるが, 虚数化学ポテンシャルの場合は解析接続が利用できる. この章では虚数化学ポテンシャル相関を利用して QCD 相関を調べる方法を説明する.

#### 3.3.1 虚数化学ポテンシャル相関

虚数化学ポテンシャルからの解析接続を行うためには, 虚数化学ポテンシャル領域の相関を理解する必要がある. 熱力学量の解析性は相転移のない領域に限られるためである.

虚数化学ポテンシャル領域の相構造は定性的なレベルではほぼ解明されている. 図 3.10 は  $(\mu_I/T, T)$  平面における相関を表す. 相の様子はクォーク質量  $m$  やフレーバ数  $N_f$  に依存するが, 図 3.10 は現実的なパラメータセットあるいはそれに近い状況の相関を表す. この相関の特徴の 1 つは虚数化学ポテンシャルに関する周期性である. QCD の分配関数は化学ポテンシャルに  $(2\pi T i)/N_c$  を加える操作のもとで不変である [21],

$$Z\left(\mu + \frac{2\pi i}{N_c} T\right) = Z(\mu). \tag{3.41}$$

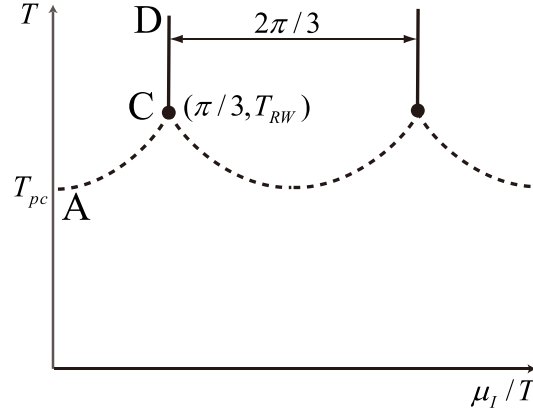


Figure 3.10:  $\frac{\mu_I}{T}$ - $T$  平面上の QCD 相図.  $\frac{\mu_I}{T}$  に関する周期  $\frac{2\pi}{3}$  の周期性があり, 同じ構造が繰り返し現れる. 半直線 CD は  $\frac{\mu_I}{T} = \frac{\pi}{3}$  上にある. AC, CD は相境界線を表し, その次数はクォーク質量やフレーバに依存する. 物理点もしくはそれに近い状況では, 線分 CD は 1 次相転移, 点 C は 2 次相転移, 曲線 AC はクロスオーバー.

これは, 温度で規格化した虚数化学ポテンシャル  $\frac{\mu_I}{T}$  に対して  $\frac{2\pi}{N_c}$  の周期性を持つことと等しい. 一般に, 化学ポテンシャルを純虚数 ( $\mu = i\mu_I$ ) とした場合, 大分配関数は

$$Z(\mu_I) = \text{tr} e^{-(\hat{H} - i\mu_I \hat{N})/T}$$

となり, かつ数演算子  $\hat{N}$  の固有値は整数値をとるから,  $\frac{\mu_I}{T}$  に関する周期  $2\pi$  の周期性は自明に存在する. この周期が  $\frac{2\pi}{N_c}$  となるのは,  $SU(N_c)$  Yang-Mills 理論がもつ中心対称性に関係している. クォークを導入すると中心対称性は陽に破れるが,  $\mu_I/T$  を  $\frac{2\pi i}{N_c}$  変化させると,  $Z_3$  の破れと化学ポテンシャルの変化分が釣り合って相殺する. クォークを導入した場合, 中心対称性は陽に破れるが, クォーク化学ポテンシャルの並進を同時に行う不変性が現れる. この周期性は発見者にちなんで, Roberge-Weiss 周期性と呼ばれる (証明は B.1 章を参照). 図 3.10 は横軸に  $\mu_I/T$  をとることで周期性を陽に示している.

$0 \leq \mu_I/T \leq 2\pi/3$  の基本領域の相構造がわかれば, 残りの領域は周期性を用いて理解できる. 図に示したように基本領域は 2 つの相境界線によって 3 つの領域に分割される.  $\mu \in \mathbb{R}$  の場合と同様, 低温にハドロン相, 高温に QGP 相があり, 曲線 AC がその相境界を表す. AC は現実あるいはそれに近いパラメータセットでは一般にクロスオーバー転移であることが知られているが, 重クォーク極限では 1 次相転移になるなど, その相転移の振る舞いは  $m$  と  $N_f$  に依存する. 一方,  $\mu_I$  の大きい領域と小さい領域は, 温度が十分高ければ, 1 次相転移線によって区切られる (線分 CD). この相転移はポリヤコフループの位相部が不連続に変化するもので, Roberge-Weiss (RW) 相転移と呼ばれる. RW 相転移は中心対称性が自発的に破れたときの 3 つの最低エネルギー状態間の状態の遷移によって発生するもので, したがって中心対称性が自発的に破れた QGP 相でのみ存在する. この相構造は Roberge と Weiss によって基本的な性質が明らかにされ [21], 格子 QCD 計算によって細部の構造も明らかにされた.

格子 QCD シミュレーションでこの相構造を調べるにはポリヤコフループを計算するのが簡単である. 図

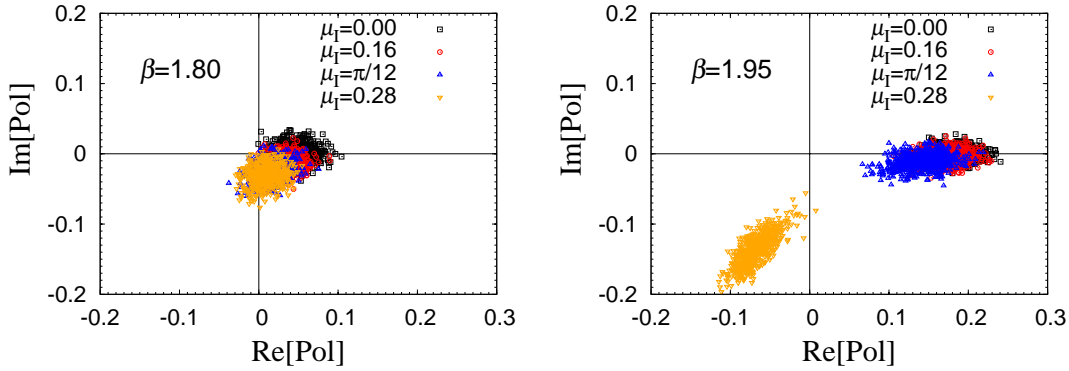


Figure 3.11: ポリヤコフープの散布図. 左図は  $\beta = 1.80$  で  $T_{pc}$  より低温, 右図  $\beta = 1.95$  は  $T_{RW}$  より高い温度に対応する. ラベルの  $\mu_I$  は格子単位の化学ポテンシャル ( $a$  が省略されており, 厳密には  $\mu_I a$ ). [24] より抜粋.

3.11 はポリヤコフープの散布図が  $\mu_I$  の変化に対してどのように変化するかを示している. 左図がハドロン相に対応しており,  $\mu_I = 0$  においてポリヤコフープは原点の近くに分布している. 動的クォークが存在するケースを考えているため, 中心対称性は陽に破れるが, この破れの効果は小さいため, ポリヤコフープはゼロではないが小さい値をとる.  $\mu_I$  を大きくしていくと, ポリヤコフープは実軸下側に回転していく. この回転は  $\mu_I$  の変化に対してなめらかであり不連続性は見られない. 一方, 右図の QGP 相では, 近似的中心対称性が自発的に破れ, ポリヤコフープの値が増加する. この場合,  $\mu_I$  を増加させても, ある程度の値まではポリヤコフープは実軸にとどまっているが,  $\mu_I = 0.28$  では第3象限にジャンプしている. RW 相転移点を起こす  $\mu_I$  は  $\frac{\mu_I}{T} = \frac{\pi}{3}$  で与えられる [21]. 図は  $8^3 \times 4$  の例なので

$$\mu_I a = \frac{\pi}{3N_t} \sim 0.26$$

である.

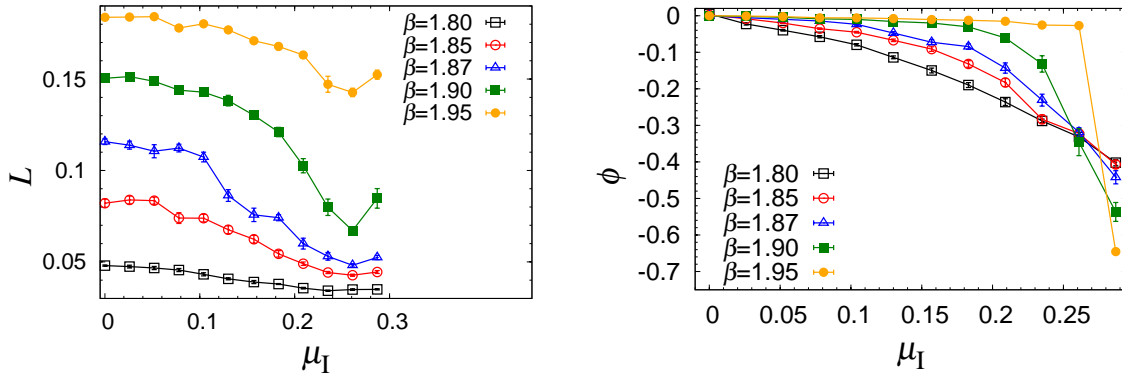


Figure 3.12: ポリヤコフープの期待値の  $\mu_I$  依存性. 左図はポリヤコフープの大きさ  $L$ , 右図は位相  $\phi$  を表す. [24] より抜粋.

ポリヤコフープの期待値をとったものが図 3.12 である. 散布図から予想されるように, 高温 ( $\beta = 1.95$ ) でポリヤコフープの位相に非解析的な振る舞いが見られ, QGP 相では  $\mu_I$  の増加に伴い 1 次相転移が発生することがわかる. これが RW 相転移で, 図の線分 CD 上での変化である. RW 相転移が QGP 相に存在しハドロン相に存在しないことから,  $\frac{\mu}{T} = \frac{\pi}{3}$  上に臨界点の存在が示唆される. これは Roberge-Weiss 相転移線の端点で, Roberge-Weiss endpoint と呼ばれる (点 C). 相境界 AC や RW endpoint については以降の章で説明する.

### 3.3.2 解析接続を用いた QCD 相図の研究-擬相転移線の決定

解析接続のアイデア

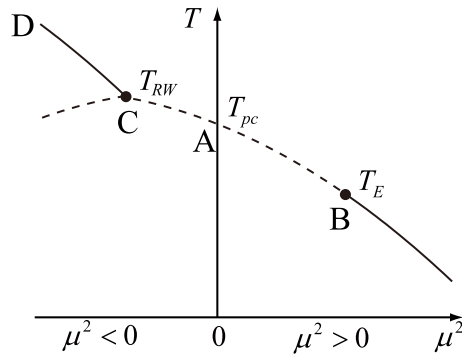


Figure 3.13:  $\mu^2 - T$  平面上での QCD 相図の概略図.  $\mu^2 > 0, \mu^2 < 0$  の領域はそれぞれ, 実化学ポテンシャル, 純虚数化学ポテンシャルに対応する.

次に, 虚数化学ポテンシャルから実化学ポテンシャルについての情報を得る方法を説明する. 基本となるアイデアは熱力学量の解析性である. 化学ポテンシャルを複素数に拡張し  $\mu \in \mathbb{R} \rightarrow \mu = \mu_R + i\mu_I \in \mathbb{C}$ , 作用や物理量を解析接続する  $S(\mu) \rightarrow S(\mu_R + i\mu_I), O(\mu) \rightarrow O(\mu_R + i\mu_I)$ . このとき, 作用, 物理量は,

$$\frac{\partial S}{\partial \bar{\mu}} = 0, \quad \frac{\partial O}{\partial \bar{\mu}} = 0,$$

を満たすので,  $\mu$  の正則関数である. 物理量の期待値  $\langle O \rangle$  は

$$\langle O \rangle = Z(\mu)^{-1} \int \mathcal{D}U O(\mu) e^{-S(\mu)}, \quad \mu = \mu_R + i\mu_I \in \mathbb{C}$$

で定義されるから,  $Z = 0$  となる点を除き, Cauchy-Riemann の関係式を満たす.  $Z = 0$  は相転移点に対応するので, 相転移点を除けば, 熱力学量は複素化学ポテンシャルの正則関数となる. 物理的セットアップもしくはそれに近いパラメータに対する QCD 相図上では, 温度軸 ( $\mu = 0$ ) 近傍には熱力学的特異性は存在しないので, この近傍では熱力学量は解析関数となる.  $\langle O \rangle$  が  $\mu$  の正則関数であるため, 無限回微分が保証され, テイラー展開できる,

$$\langle O \rangle(\mu) = \sum_n c_n(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^n, \quad \mu \in \mathbb{C} \quad (3.42)$$

係数  $c_n$  は虚数化学ポテンシャル領域において通常のモンテカルロ法を用いて決定することができる。

実化学ポテンシャル相図と虚数化学ポテンシャル相図は  $\mu = 0$  近傍の領域で解析接続できる。図 3.13 は横軸に  $\mu^2$  を取った相図で、 $\mu^2 < 0$  の領域が虚数化学ポテンシャル領域、 $\mu^2 \geq 0$  の領域が実化学ポテンシャル領域に対応し、それらが滑らかにつながっている様子を示している。前節で、相境界線 AC が  $\mu_I = 0$  (点 A) から点 C に向かって上昇する曲線を描いたが、この振舞は図 3.13 から理解できて、実化学ポテンシャル側の相境界線が延長していることの結果である。このように 2つの領域が解析的につながっていることを利用して、虚数化学ポテンシャル側から実化学ポテンシャル側へアプローチすることができる。

解析性を利用する点はテイラー展開と同じであるが、テイラー展開は展開係数を  $\mu = 0$  で求めるのに対して、虚数化学ポテンシャル法では虚数化学ポテンシャル領域で係数を決める。利用する情報が多いため、関数決定の精度向上が期待できることが利点である。Roberge-Weiss 周期性があることも特徴で、ハドロン相では周期性のために物理量の関数型をある程度絞り込むことができる。化学ポテンシャルを複素拡張する事で関数の解析性が Cauchy-Riemann の関係式で定義されるため、解析性および非解析性の定義が数学的に明瞭となる点も理論的観点における利点である。

#### 解析接続を用いた擬相転移線の決定

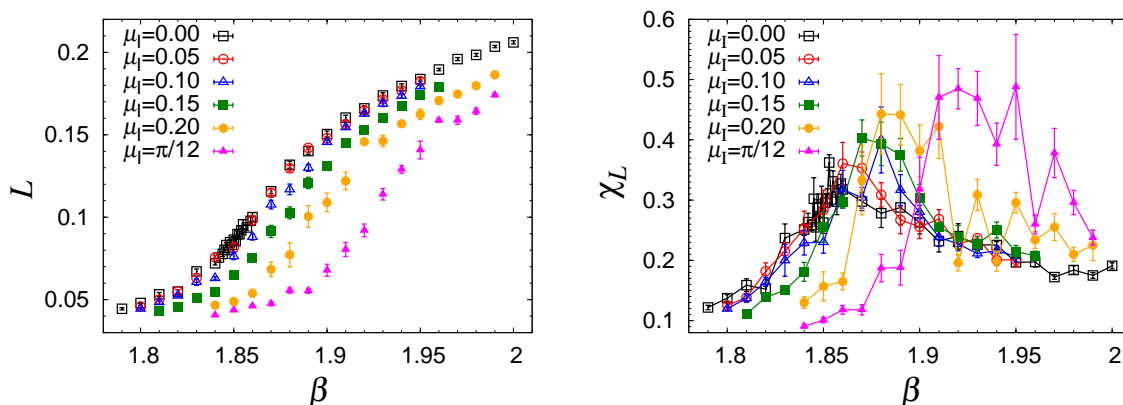


Figure 3.14: ポリヤコフループの絶対値の  $\beta$  依存性. 左は期待値, 右は感受率を表す. 図の  $\mu_I$  は格子単位での化学ポテンシャル. 左図ではある  $\beta$  で傾きの増加が見られ, その  $\beta$  において右図にピークが現れる. ポリヤコフループの大きさを閉じ込め相-非閉じ込め相の秩序変数と考えると, ピーク位置が相転移温度に対応する. 図は  $N_t = 4$  での計算結果であり,  $\mu_I = \pi/12$  は  $\mu_I/T = \pi/3$  に対応する.  $\mu_I = \pi/12$  を除いて, 図のポリヤコフループの変化は滑らかでありクロスオーバーと判断できる.  $\mu_I/T = \pi/3$  は RW 相境界線にあり, 2次の転移となる. (相転移次数を正確に判定するためには有限体積スケーリングを行う必要がある).

応用例の 1つが擬相転移線の決定で、虚数化学ポテンシャル側で線分 AC を求め、解析接続することで AB を求めることができる。

ここでは、ポリヤコフループを秩序変数として、その感受率から相転移線 (AC) を求める。ポリヤコフループは厳密には秩序変数ではないが (2.1.3 章参照)、ハドロン相で低値、QGP 相で高値を取る性質から実効的な

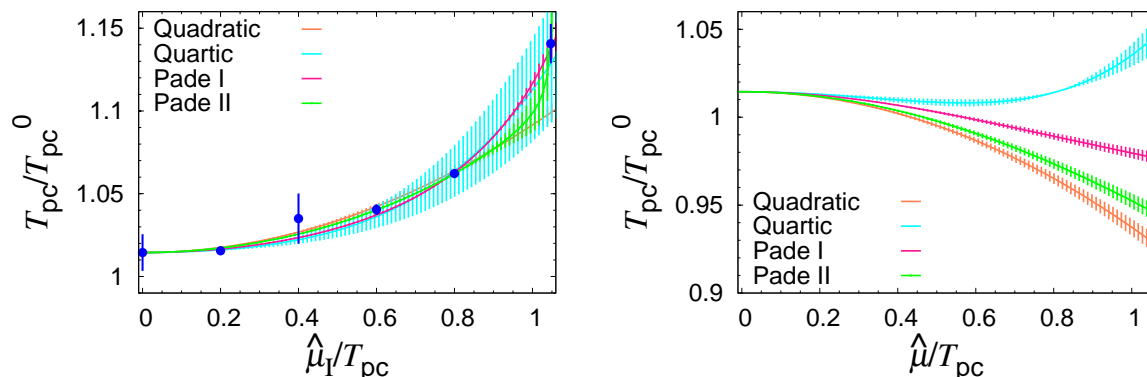


Figure 3.15: 左図: 虚数化学ポテンシャル領域での閉じこめ-非閉じこめ相境界線。データ点は図 3.14 の感受率のピーク位置に対応する  $\beta$ 。誤差はピーク位置の推定の際に発生する。実線は関数フィットの結果を表し、領域はその誤差を表す。左図で得られた関数を実化学ポテンシャル領域に解析接続したのが右図。

秩序変数としてよく利用される。図 3.14 はポリヤコフループの期待値 (左) と感受率 (右) の温度依存性を様々な  $\mu_I/T$  の値に対してプロットしている。これは、 $\mu_I/T$  を固定して温度を変化させる、つまり相図 3.10 を縦にスキャンしながらポリヤコフループの値を調べることに対応している。温度は  $\beta$  について単調に変化するので、横軸を温度のスケールを変えたものと見なしてよい (表 2.1 参照)。ポリヤコフループの絶対値は温度とともに増加する (図 3.14 左)。この感受率  $\chi_L$  を示したものが右図で、 $\chi_L$  は上に凸な振舞を示し、感受率のピーク位置は  $L$  の変化が最も急な点と一致する。ピークの位置は、 $\mu_I$  の増加とともに  $\beta$  の大きい側、すなわち高温側にシフトしている。これは  $\mu_I$  とともに転移温度が上昇していくことを意味している。図 3.10 で線分 AC が A から C にむかって高温側にカーブしているのは、この結果を表している。

次に、 $\mu_I$  の値ごとの転移点  $\beta_c$  を決める。 $\beta_c$  はポリヤコフループ感受率のピーク位置で定義され、ピーク近傍を適当な関数型  $\chi_{\text{fit}}(\beta, s)$  でフィットすることで決定する。 $s$  は関数に含まれるパラメータセットを表し、関数とデータのずれ  $\chi^2$  を最小とするように決定する。

図 3.15 左の誤差棒付きのデータ点はフィットで得られたピーク位置を表している。図の縦軸はフィットで得られた  $\beta_c$  の値を規格化された温度に変換している。次に  $\mu_I$  ごとの  $T_c$  のデータを用いて相境界線  $T_c(\mu_I)$  を決定する。関数型は未知なので、たとえば、擬相境界線を  $\mu_I$  の多項式として

$$T_c(\mu_I) = a_0 + a_2\mu_I^2 + a_4\mu_I^4 + \dots \quad (3.43)$$

とおく。QCD は CP 不変性をもつため、相境界線は  $\mu$  について偶関数である。 $\mu_I$  の定義域は  $0 \leq \mu_I \leq \pi/(3N_f) < 0.3$  なので展開の高次項は  $\mu_I^2 < 0.1$  で抑制される。そのため、級数の収束性は良いが、高次の係数を決定することは精度的に難しい。べき展開の高次項決定は精度面で難しいため、有理関数型  $P(x)/Q(x)$  を仮定した Padé 近似を使って高次項を取り込む方法も提案されている [25]。図 3.15 では 4 種類の関数型 (2 次, 4 次, および 2 種類の Padé 近似) を試している。2 次関数はデータ点とのずれが大きい、4 次と Padé 近似の I 型はデータとのフィットが良い。

次に、この結果を解析接続する  $i\mu_I \rightarrow \mu = \mu_R + i\mu_I$ . このとき、相境界線は

$$T_c(\mu) = a_0 - a_2\mu^2 + a_4\mu^4 - \dots \quad (3.44)$$

(3.44) 式が実化学ポテンシャル領域におけるハドロン相と QGP 相の境界線を与える. (3.43) 式と (3.44) 式を比べると  $\mu^2$  の奇数次の項の係数が反転している.  $\mu^2$  の係数が負となるため、 $\mu$  が小さい領域では  $T_c$  は  $\mu$  の減少関数となる. ハドロン相-QGP 相境界線のこの振る舞いは現象論的によく知られたものであるが、格子 QCD を用いた非摂動的解析でこのように確かめられる. 図 3.15 の右図は実化学ポテンシャル側での相境界を明示している.  $\mu$  が小さい領域ではフィット関数による違いはないが、 $\mu$  が大きくなるとフィット関数による違いが現れ、 $\mu_I/T \sim 0.3$  程度から 4 つの結果にずれが生じている. 虚数化学ポテンシャル領域におけるデータ点とフィット関数の一致度を比べると、4 次関数と Padé 近似 I はどちらも  $\mu_I$  領域のデータ点を再現しており、データからこれらのどちらが良いか判断することは難しい. 実化学ポテンシャル領域でフィット関数依存性が生じている領域は虚数化学ポテンシャル領域での関数決定の限界と解釈すべきである.

上記で紹介した計算結果は 2 フレーバの改良型 Wilson フェルミオンに対するものである [2]. その他の研究を紹介すると、虚数化学ポテンシャルに対する最初の格子 QCD シミュレーションは D'Elia と Lombardo, de Forcrand と Philipsen によって 4 フレーバ staggered フェルミオンに対して行われた [26, 27]. Wilson フェルミオンに対する最初の計算は Wu らによって行われている [28], ここではクローバー項を含めない標準 Wilson フェルミオンが用いられている. Padé 近似を用いた相境界線のフィットは文献 [29] で提案され、 $N_c = 2$  やアイソスピン化学ポテンシャルなどの符号問題のないケースで方法の有効性が検証された後、[30] で QCD の相境界線へ応用されている. 近年は、最低次の項、すなわち、相境界線の曲率  $\kappa$  の高精度計算が進んでいる. カイラル感受率のピークから決めた擬相転移線  $T_c(\mu_B)$  を

$$\frac{T_c(\mu_B)}{T_c(\mu=0)} = 1 - \kappa \left( \frac{\mu_B}{T_c(\mu_B)} \right)^2 + \dots, \quad (3.45)$$

と表し、 $\kappa$  を 2 次の係数として定義する. ここで、 $\mu_B$  はバリオン化学ポテンシャルを表す.  $N_f = 2 + 1$  フレーバの QCD に対しては、 $\kappa = 0.018(4)$  (HISQ/tree action discretization, 格子サイズ  $16^3 \times 6, 24^3 \times 6$ ) [31],  $\kappa = 0.0149 \pm 0.0021$  (stout 改良スタッガードフェルミオン,  $N_t = 10, 12, 16$  からの連続極限外挿) [32] という結果が報告されている. Bonati らは、 $\kappa$  を

$$\frac{T_c(\mu_B)}{T_c(\mu=0)} = 1 - \kappa \left( \frac{\mu_B}{T_c(\mu_B=0)} \right)^2 + \dots, \quad (3.46)$$

と定義し、 $\kappa = 0.0135(20)$  (stout 改良スタッガードフェルミオン,  $N_t = 6, 8, 10, 12$  を用いた連続極限外挿) [33, 34] という結果を報告している.

### その他の物理量への応用

解析接続の方法は他の物理量にも利用できる. 計算方法は擬相境界線の場合と同様、虚数化学ポテンシャル領域でのシミュレーション、結果の関数フィット、実化学ポテンシャルへの解析接続の手順で行う. 数密度など熱力学量への応用は 4 フレーバ staggered フェルミオンの場合に行われ [36, 37], その後、2 フレーバ



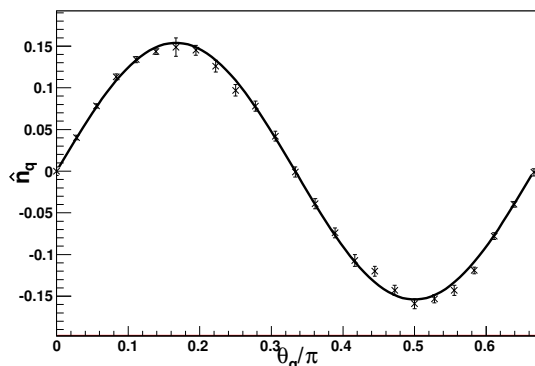


Figure 3.16: 虚数化学ポテンシャルを利用して求めたクォーク数の化学ポテンシャル依存性. 実線はハドロン共鳴ガス模型から求めたもの. 温度は  $T = 0.9T_c$ . [35] から引用.

$m_\pi \sim 280$  MeV というより改良された計算が [35] で行われた. ハドロン相では, RW 周期性があり, 物理量は  $\mu_I/T$  の周期関数として表すことができる. 特に, ハドロン共鳴ガスの双曲線関数 (cosh) の形は, 周期関数  $\cos$  の解析接続として自然に得られ,  $T \sim 0.9T_c$  程度では格子 QCD とハドロン共鳴ガスの一致が良く (図 3.16),  $T \sim 0.95T_c$  を超えるとずれが生じるという結果が得られている.

クォーク間ポテンシャルおよびデバイ遮蔽質量への応用は Takahashi らによって調べられている [38]. 解析接続を用いてハドロン共鳴ガス模型の高振動モードを抜き出し, ハドロン相の低温領域を探る試みも [39] によって行われているが, 低温ではシグナルノイズ比が低下することが報告されている. また, 虚数化学ポテンシャルを応用した  $Z_3$  厳密な対称性を持つ QCD-like theory がカイラル相転移と閉じ込め相転移の温度比較に応用されている [40].

擬相境界線では精度の問題で高次項決定が難しかったが, この問題は他の物理量に対しても発生する. 虚数化学ポテンシャル領域でデータフィットに使える領域が  $\mu_I/T \leq \pi/3 \sim 1$  に制限されるため, 解析接続によって調べることができる実化学ポテンシャル領域は  $\mu/T < 1$  程度に制限されてしまう.

### 3.3.3 Roberge-Weiss 臨界点の性質

この章の最後に, Roberge-Weiss 相転移線の端点 (Roberge-Weiss endpoint) を考察する. RW endpoint は QCD 相図上で臨界点の直接解析が可能な珍しい例であり, 格子 QCD での臨界点計算のテストとしても重要な点である. QCD 臨界点と同様に, RW endpoint の性質はクォーク質量とフレーバ数に依存する. 1つの可能性は, RW endpoint が2次の臨界点であるというもので, 図 3.10 はこの場合を図示している. もう1つの可能性は点 C が1次相転移であるというもので, その場合図 3.10 の線分 CD が曲線 CA 上に伸展する.

図 3.17 は HMC シミュレーションの各ステップ (トラジェクトリと呼ばれる) におけるポリヤコフループの位相部を表している. このような図はモンテカルロヒストリーと呼ばれ, シミュレーションにおける仮想的な経過時間に対して物理量がどのようにゆらぐかを見るのに適している.  $\beta = 1.94$  の場合, ポリヤコフループの位相  $\phi$  は 0 のまわりをゆらぐ, つまりポリヤコフループは複素平面上的の実軸の近くでゆらぐことが

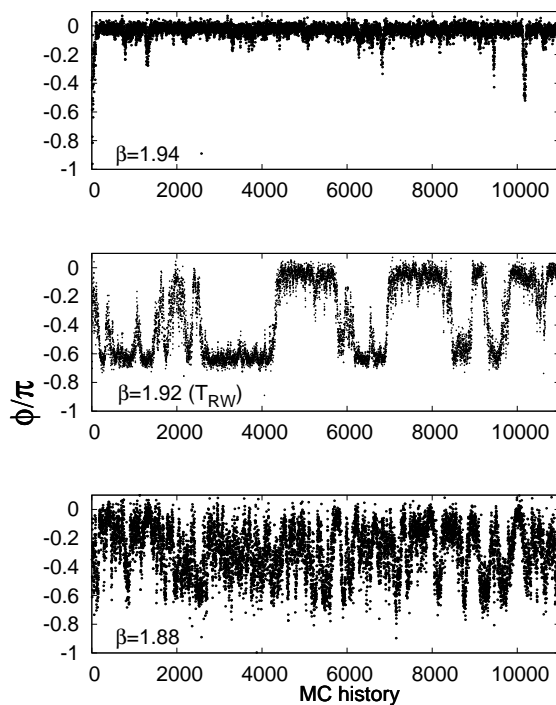


Figure 3.17: ポリヤコフープの位相  $\phi$  のモンテカルロヒストリー. いずれも虚数化学ポテンシャルは  $\mu_I/T = \pi/3$  に固定している.

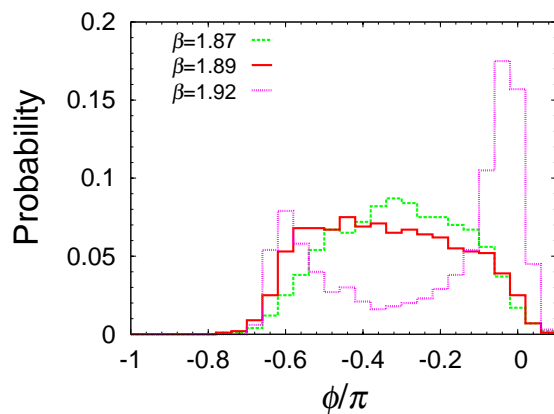


Figure 3.18: ポリヤコフープの位相  $\phi$  のヒストグラム. 虚数化学ポテンシャルは  $\mu_I/T = \pi/3$  に固定している.  $\mu_I/T = \pi/3$  線上で温度 ( $\beta$ ) を変化させると分布の様子が変化する.

わかる.  $\beta = 1.92$  では,  $\phi/\pi$  は 0 近傍でのゆらぎと  $-2/3 \sim -0.67$  近傍でのゆらぎを交互に繰り返しており, 2つの極小解の間の遷移が繰り返し起こっている. 1つの極小解にとどまる長さはポテンシャルの深さに依存する.  $\beta = 1.94$  の場合でも 2つの極小解が存在するはずであるが, 一方の極小解しか現れないのは, ポテンシャル障壁が高く, 最初に選ばれた真空から他の真空への遷移が発生しにくいからである. どちらの真空が選ばれるかはシミュレーションの初期条件によって, 確率的に決まる. 一方,  $\beta = 1.88$  では,  $\phi/\pi$  は  $0 \sim -2/3$  の広い範囲を変動している. この点は RW endpoint に近い状況を表す.

$\phi$  のモンテカルロヒストリーからヒストグラムを生成したのが図 3.18 である.  $P(\phi)$  は低温 ( $\beta = 1.87$ ) では単峰型分布, 高温 ( $\beta = 1.92$ ) では 2 峰型分布, 中間の温度 ( $\beta = 1.89$ ) では明白なピークのない平らな分布となっている. 高温におけるヒストグラムの 2 ピーク構造は, 図 3.17 の中段の図のような場合に現れるヒストグラムである.  $\mu_I/T = \pi/N_c$  は RW 相転移の直上なので, 2つの極小値における自由エネルギーは等しいはずであるが, 図では  $\pi = 0$  側のピークが高く見える. これは統計数が真空間の遷移確率に比べて短いからであると考えられる. 図 3.17 から, 片方の極小解にとどまるトラジェクトリはおよそ 1000 のオーダーであるが, 図での総トラジェクトリ数は 10000 程度であり, 十分長いとは言えない. トラジェクトリを増加させると 2つのピーク高は同じ高さになるものと思われる<sup>8</sup>. 低温における釣り鐘型の分布は相転移が存在しない場合の通常分布である. 一方, 中間温度における平らな構造は,  $\beta = 1.88$  のモンテカルロヒストリーのような場合に対応しており, 位相が広い範囲をまんべんなく揺らいでいることを表している.

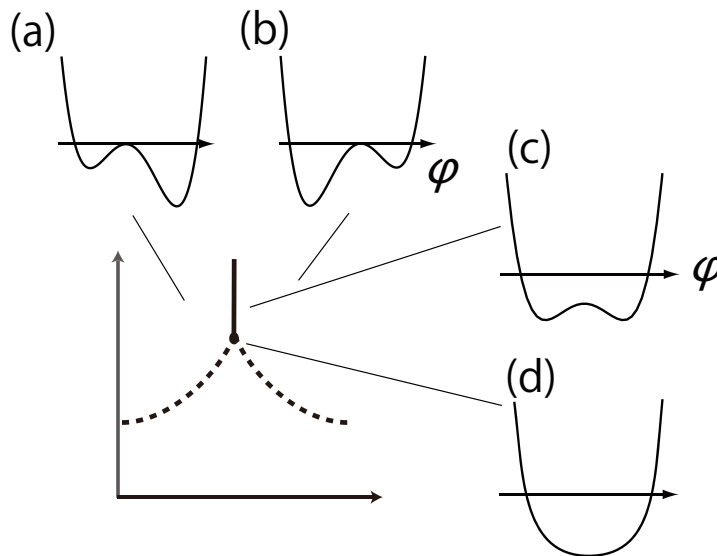


Figure 3.19: 秩序変数としてポリヤコフループの位相  $\phi$  をとったときの Landau ポテンシャル  $V(\phi)$  のイメージ図. (a) は高温で  $\mu_I/T < \pi/3$ , (b) は高温で  $\mu_I/T > \pi/3$ , (c) は  $\mu_I/T = \pi/3$  で温度が RW 臨界点より高い場合, (d) は RW 臨界点近傍.

ヒストグラムの図はポリヤコフループの位相部を秩序変数とした有効ポテンシャルと解釈することがで

<sup>8</sup> 数値解析で得られたヒストグラムには誤差が付随する. ヒストグラムの誤差推定法はいくつかあるが, 簡単な方法としてはブートストラップ法を用いて議事サンプルを構成することでヒストグラムの誤差を見積もることができる

きる. ポリヤコフープの位相を秩序変数として Landau-Ginzburg ポテンシャルの虚数化学ポテンシャル相図での変化の概要を図示したの図 3.19 である. QGP 相では有効ポテンシャルは 3 つの極小値を持つ. 図の (a), (b) はそのうち  $0, -2\pi/3$  の 2 つの真空を図示している. RW 相 (I) の相では  $\phi = 0$  側の極小値が基底状態であるが, 相 II では  $-2\pi/3$  側が基底状態となる.  $\mu_I/T = \pi/3$  において 2 つの解が縮退する. 図からこの間の相転移が 1 次相転移となることも直感的に理解できる. 一方, RW 相転移線直上では 2 つの解は縮退しているが, 温度を下げていくと図 (d) のような臨界点が出現する.

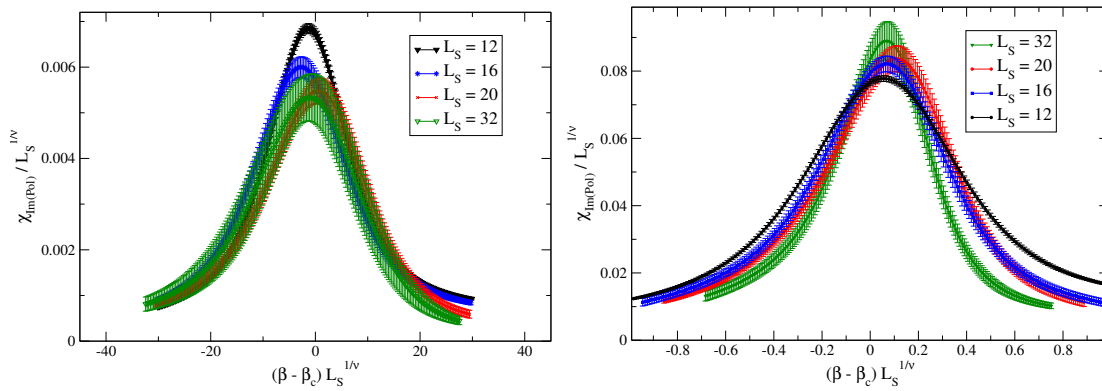


Figure 3.20: ポリヤコフープの虚部の感受率に対する有限サイズスケーリングを用いた RW endpoint の温度と次数決定. 2 フレーバの場合. 左図はクォーク質量が軽い場合で 1 次の臨界指数でスケールされている. 右図はクォーク質量が比較的重い場合 (ただしクエンチに比べると軽い) で 2 次の臨界指数でスケールされている. [41] から引用.

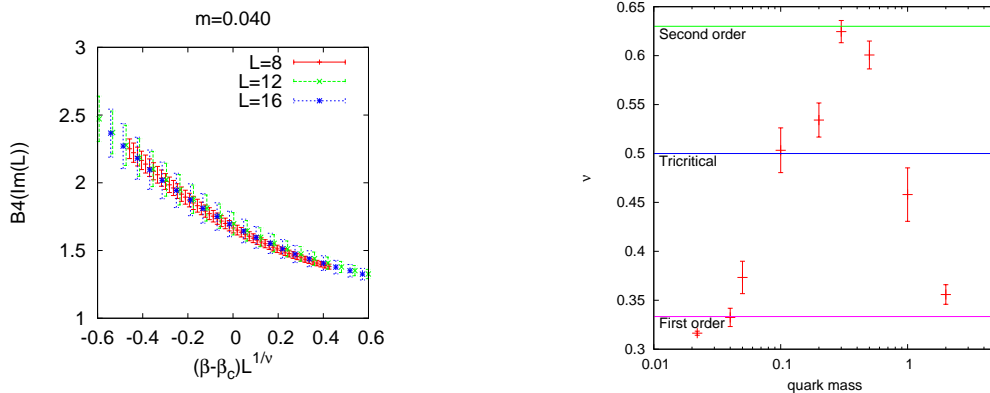


Figure 3.21: 左: Binder キュムラントの有限サイズスケーリングを用いた RW endpoint の温度と次数決定. 右: 臨界指数のクォーク質量依存性. 3 フレーバの場合. [42] から引用.

臨界温度や臨界指数の値をより正確に決定するためには, 有限サイズスケーリングを行う.

よく用いられるのは感受率の有限サイズスケーリングや, Binder キュムラント

$$B_4(X) \equiv \langle (X - \langle X \rangle)^4 \rangle / \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle^2$$

である.  $B_4$  は臨界点において系の体積に依存しない. 従って, 異なる体積に対して  $B_4$  を求め, 結果が体積によらずに一致する温度や密度を調べることで臨界点および臨界指数を同定することができる. 感受率の有限サイズスケーリングや,  $B_4$  を用いた計算によって  $N_f = 2$  の場合 [35, 43],  $N_f = 3$  の場合 [42] の研究が行われ, いずれでもクォーク質量が重い場合と軽い場合には RW endpoint は 1 次相転移, 中間質量では 2 次相転移という結果が得られている (図 3.20, 3.21). 近年, 物理点への外挿が達成され, 物理的なパラメータで様子も明らかになってきている.  $N_f = 2 + 1$  stout 改良スタッガード, ツリーレベルの Symanzik ゲージ作用を用いたシミュレーションを  $N_t = 4, 6, 8, 10$  の 4 つの場合に行い, 連続極限への外挿を行った結果は  $T_{RW} = 208(5)\text{MeV}$ ,  $T_{RW}/T_c \sim 1.34(7)$  で次数は (3d Ising universality class (2nd)) である [44]. したがって, 図 3.10 で示したような相図が物理点の QCD の虚数化学ポテンシャル領域では実現されているようである.

Wilson フェルミオンに対して格子の大規模化へ向けた研究は Philipsen と Pinke [45, 46], Wu と Meng [45, 46] によって進められている. 定性的にはスタッガードフェルミオンの場合とほぼ同様の結果が得られているが, RW endpoint の温度はスタッガードフェルミオンと異なることが報告されている. スタッガードフェルミオンの連続極限で得られた値を Wilson フェルミオンなど他の作用でも確認する必要があるが, Wilson フェルミオンに対しては  $T_c$  の連続極限外挿も達成されていないため, これは将来的な課題であろう.

1 つの未解明の課題として, RW endpoint が 1 次の場合, 1 次相転移線がクロスオーバー境界線上に伸展していくことになり, そのどこかに別の endpoint が出現するようになるが, この様子はまだ格子 QCD で確認されていない. このような点は, 符号問題回避法を通した臨界点の決定に対する良い試験場となるかもしれない.

### 3.4 カノニカル法

前章までに説明した3つの方法, reweighting 法, テイラー展開法, 虚数化学ポテンシャルからの解析接続は QCD 臨界点や1次相転移探索への応用は難しい. Reweighting による QCD 臨界点発見の報告も存在するが, 単一のグループのみの結果であり, 確立された結果とは言えない状況である.

1次相転移の判別に対する有効性が報告されているのがカノニカル法である. カノニカル法は大分配関数を分配関数で展開するという統計力学の基本的なアイデアに基づく方法であり, 格子 QCD への応用は1990年頃に提案された. 2005年頃に de Forcrand と Kratochvila がカノニカル法に Maxwell construction を組み合わせた1次相転移判別法を提案した. その後, Ejiri, Kentucky グループによって1次相転移発見が報告されている. 現在, ハドロン相-QGP 相間の1次相転移線の研究において複数グループからコンシステントな結果が報告されているのはこの方法のみである. カノニカル法は物理的にも見通しの良い方法で, 有限密度格子 QCD に関する理解を深めるのにも適している. この章では, カノニカル法のアイデア, 計算法, 計算上の困難と工夫の例, 1次相転移への応用などを紹介していく.

#### 3.4.1 カノニカル法のアイデア

化学ポテンシャルを導入した系は熱浴と粒子の交換をすることができ, 統計力学では大正準 (グランドカノニカル) 集団と呼ばれる. 一方, 粒子数を固定した系は正準 (カノニカル) 集団と呼ばれる. 大正準集団は熱浴と粒子を交換するため, 系に含まれる粒子数は時々刻々変化し, 期待値の近傍で揺らぐ. 化学ポテンシャルゼロの大正準集団では, 粒子数の期待値はゼロだが, 瞬間的には, 粒子が存在しない状態, 粒子が1つ存在する状態, 反粒子が1つ存在する状態など様々な状態が発生している. つまり, 化学ポテンシャルがゼロであっても, 系は様々な粒子数状態の重ね合わせとなっている. ゆらぎとして含まれる多粒子状態を抽出することで高密度状態を構成するのがカノニカル法の基本的なアイデアである.

まず, 理論的な枠組みを説明する. はじめに, 大正準集団が正準集団の重ね合わせとして表されることを示す. 大正準集団の分配関数は

$$Z(\mu) = \text{tr} e^{-(\hat{H} - \mu \hat{N})/T} \quad (3.47)$$

で与えられる.  $\hat{H}$ ,  $\hat{N}$  はハミルトニアンと粒子数演算子を表し,  $\hat{H}$  と  $\hat{N}$  は可換であるとする. すなわち  $\dot{\hat{N}} = [\hat{H}, \hat{N}] = 0$  を満たし,  $\hat{H}$  と  $\hat{N}$  は同時固有状態を持つ.  $\hat{H}$ ,  $\hat{N}$  の固有状態を  $|n\rangle$  とし, それぞれの固有値を

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad (3.48)$$

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (3.49)$$

とする. (3.47) のトレースを粒子数演算子の固有状態で展開すると

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= \sum_{n=-N}^N \langle n | e^{-(\hat{H}-\mu\hat{N})/T} | n \rangle, \\ &= \sum_{n=-N}^N \langle n | e^{-\hat{H}/T} | n \rangle e^{\mu n/T}, \\ &= \sum_{n=-N}^N Z_n e^{n\mu/T}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

$N$  は系の中に入りうる最大粒子数である. 連続時空では系に入りうる粒子数に上限はなく  $N \rightarrow \infty$  であるが, 格子時空では, サイトの数と 1 つのサイトに入りうる粒子数が有限なため,  $N$  は有限となる. QCD の場合  $N = (\text{空間格子体積}) \times N_c \times (\text{フレーバ}) \times (\text{スピン})$  で与えられる. 負の  $n$  は系が  $n$  個の反クォークからなる状態を表す. QCD は CP 不変性をもつため, (3.50) 式は  $n$  の符号の反転に関して対称であり,  $Z_n = Z_{-n}$  が任意の  $n$  について成り立つ. 大分配関数は Gibbs の自由エネルギー  $\Omega$  と  $Z(\mu) = e^{-\Omega/T}$  の関係にあり, 一方,  $Z_n = \langle n | e^{-\hat{H}/T} | n \rangle$  はヘルムホルツの自由エネルギー  $F_n$  を用いて  $Z_n = e^{-F_n/T}$  と表せる. (3.50) 式はクォーク数  $n$  についての展開 (quark number expansion), フガシティ  $e^{\mu/T}$  に関する展開 (fugacity expansion), あるいは格子の時間方向への巻きつき数 (2.1.2 章参照) に関する展開 (winding number expansion) と解釈できる.

$Z_n$  は温度の関数なので温度ごとに計算する必要がある. では,  $Z_n$  はどのようにして求めればよいだろうか? 1 つの方法は (3.50) をフガシティ  $e^{\mu/T}$  の多項式とみなし, その係数をもとめる方法である.  $\mu/T$  と  $Z(\mu/T)$ <sup>9</sup> のデータを係数の個数分用意し連立方程式を解けば  $Z_n$  が得られる [47].  $Z(\mu/T)$  は, 規格化定数を除き, reweighting で求めることができる. 他には, 化学ポテンシャルを純虚数に拡張し, フーリエ変換

$$Z_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\phi}{2\pi} Z(\phi) e^{-in\phi}, \quad \phi = \mu_I/T \quad (3.51)$$

を解く方法もある<sup>10</sup>. どちらの方法も形式的には正しいが,  $Z(\mu/T)$  あるいは  $Z(\phi)$  の計算精度の問題がある. 図 3.15 で, 誤差付きデータのフィッティングにおける不定性を見たが, フガシティの多項式としてフィッティングを行なった場合も同種の問題が生じる. 高次項になるほど数値的に不安定となり決定は難しい. フーリエ変換の場合も  $n$  の増加に伴って被積分関数の振動が早くなるためやはり高次項の計算は困難である.

より効率良い計算方法として (3.50) 式のようなフガシティ展開を, 分配関数ではなくフェルミオン行列式  $\det \Delta(\mu)$  に適用する方法がある. 配位平均を取る前にフガシティ展開するため, 統計誤差が発生せず, 高次項まで高精度に展開でき, 連立方程式やフーリエ変換の方法と比べて精度良く  $Z_n$  を求めることができる. カノニカル法では  $|n|$  の増加に伴う  $Z_n$  計算の精度低下が問題となるため, 精度面の改良は実用上も極めて重要である.

フェルミオン行列式のフガシティ展開は大別して, フェルミオン行列式の時間成分の  $\mu$  に対して次元縮約を行う方法<sup>11</sup>とフェルミオン行列式を時間方向のホッピング項について展開する方法がある. 前者は縮約

<sup>9</sup>(3.50) 式から化学ポテンシャルは  $\mu/T$  の形で現れるので, 大分配関数は  $\mu/T$  の関数と見なしても良い.

<sup>10</sup>ここでは積分区間を  $[-\pi, \pi]$  ととったが, QCD では Roberge-Weiss 周期性を考慮して  $[-\pi/3, \pi/3]$  ととる [21].

<sup>11</sup>フェルミオン行列は内部自由度と時空に関する多次元行列だが, それを時間に関する行列として表すことで行列式の時間積分のみを実行する.

公式 (reduction formula あるいは propagator matrix の公式) とよばれる. 縮約公式はカノニカル法への応用だけでなく, 3.5 章で議論するハドロン相有限密度領域における問題でも用いるため, 計算が多少煩雑だが, 次節を割いて導出を説明する. 縮約公式はフェルミオン行列式の化学ポテンシャル依存性を見通しよく表す公式でもあり, その構造を理解しておくことと有限密度格子 QCD 研究を進める上で助けとなるだろう.

### 3.4.2 縮約公式

#### 公式の背景

フェルミオン行列式  $\det \Delta$  は時空および内部自由度に関する多次元の行列式である. 縮約公式は, そのなかの時間成分を解析的に計算する公式で, これによりフェルミオン行列式のランクが縮小され, さらに  $\det \Delta$  が  $\mu$  に関して解析的な表示に変換される. この公式ははじめに Gibbs によってランチョス法を用いて定式化され [48], 後に, Hasenfatz と Touissaint によって異なる導出法が与えられた [49]. そのような計算が可能となる背景はフェルミオン行列の構造にある. ディラック演算子が時間一階微分の演算子であるため,  $\Delta$  を時間に関する行列として表示すると疎行列となる. この構造を利用して  $\det \Delta$  の時間成分の解析計算が可能である. 2.1.2 章で説明したように, 化学ポテンシャルはフェルミオン行列の時間方向のリンク変数に付随して現れる. そのため, フェルミオン行列式の時間方向についての計算が, 同時に, フェルミオン行列を化学ポテンシャルについて整理することになっている.

Gibbs の公式はスタaggerドフェルミオンに対するものであり, Wilson フェルミオンに対してはフェルミオン行列の構造が違うため応用できない. 具体的には Wilson フェルミオンが含む非正則な部分要素がスタaggerドフェルミオンに対する公式の応用を難しくする. この問題を交換行列 (permutation matrix) を用いて回避したのが Borici で [50], その後, 交換行列法はフガシティ展開の定式化に応用された [51, 52]. 上で述べたように, 縮約公式はフェルミオン行列の疎構造を利用した公式だが, その疎構造はディラック方程式が時間について一回微分であることに起因している. 時間方向を連続に保った場合 (つまり空間成分のみ離散化した場合) に, 時間についての微分方程式を解くことで縮約公式を導出することができる [53]. また, 異なる導出法として, フェルミオン行列式を時間方向のホッピング項に関して展開する公式が Gattringer と Danzer によって定式化されている [54–56].

#### Wilson フェルミオンに対する縮約公式

以下では [51] にしたがって, Wilson フェルミオンに対して縮約公式を導出する. KS フェルミオンに対する公式の導出は [49] にわかりやすく説明されているので, そちらを参照して欲しい.

Wilson フェルミオン行列 (2.13) に含まれる項を  $\mu$  依存性によって分類し,

$$\Delta = B - 2e^{\mu a} \kappa r_- V - 2e^{-\mu a} \kappa r_+ V^\dagger, \quad (3.52)$$

と書きかえる. ここで,  $r_\pm = (r \pm \gamma_4)/2$  とおいた. Wilson フェルミオンでは, 通常,  $r = 1$  の場合を用いることが多く, 以下でも  $r = 1$  の場合を考える. このとき,  $r_\pm$  は 4 成分スピノルから 2 成分スピノルを取り出



す射影演算子となっている. 一般に射影演算子は逆元を持たないので,  $r = 1$  の場合,  $r_{\pm}$  も逆元を持たない.  $B, V, V^{\dagger}$  は

$$B(x, x') \equiv \delta_{x, x'} - \kappa \sum_{i=1}^3 \left\{ (r - \gamma_i) U_i(x) \delta_{x', x+i} + (r + \gamma_i) U_i^{\dagger}(x') \delta_{x', x-i} \right\} - \delta_{x, x'} C_{SW} \kappa \sum_{\mu \leq \nu} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad (3.53)$$

$$V(x, x') \equiv U_4(x) \delta_{x', x+4}, \quad (3.54)$$

$$V^{\dagger}(x, x') \equiv U_4^{\dagger}(x') \delta_{x', x-4}, \quad (3.55)$$

で与えられる. (3.52) 式は化学ポテンシャルに関する分類であるのと同時にクォークの時間方向の伝搬に関する分類でもある.

$x, x'$  の第 4 成分を見ると,  $B$  が含む項は全てデルタ関数  $x_4 = x'_4$ ,  $V$  は  $x'_4 = x_4 + 1$ ,  $V^{\dagger}$  は  $x'_4 = x_4 - 1$  となっている<sup>12</sup>. フェルミオン行列を時間に関する行列として表示すると対角要素の近くを除く大半の成分が 0 (疎行列) であり, この構造を利用して行列式の時間成分を解析的に実行する. この計算の過程がスタガードフェルミオンと Wilson フェルミオンでは異なる. それは, Wilson フェルミオンのブロック成分  $1 \pm \gamma_4$  が非正則になり, その要素の逆行列が存在しないためである. この問題を解決するために, Borici は交換行列

<sup>12</sup>時間方向の行列として表示するとわかりやすい.  $B$  は

$$B = \begin{array}{c} t=1 \\ t=2 \\ t=3 \\ \cdot \\ \cdot \\ t=N_t \end{array} \begin{array}{c} t'=1 \quad \dots \quad t'=N_t \\ \left( \begin{array}{c|c|c|c|c|c} B_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \hline 0 & B_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & B_3 & \dots & & \\ \hline \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \hline & & & \dots & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & & \dots & 0 & B_{N_t-1} \\ \hline 0 & 0 & & \dots & 0 & B_{N_t} \end{array} \right), \end{array}$$

となり時間行列表示において対角行列となる. 一方,  $V$  は

$$V = \begin{array}{c} \left( \begin{array}{c|c|c|c|c|c} 0 & U_4(1) & 0 & \dots & & 0 \\ \hline 0 & 0 & U_4(2) & \dots & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \dots & & \\ \hline \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \hline & & & \dots & U_4(N_t-2) & 0 \\ \hline 0 & 0 & & \dots & 0 & U_4(N_t-1) \\ \hline -U_4(N_t) & 0 & & \dots & 0 & 0 \end{array} \right), \end{array}$$

で与えられ, 対角成分の一つ上, および角に要素がある. したがって, フェルミオン行列  $\Delta$  を時間行列表示すると, 対角成分とその上と下の成分 (および角の項) に要素の入った帯行列であることがわかる. また, 化学ポテンシャルは, 対角の上の要素に  $e^{\mu a}$ , 対角の下の要素に  $e^{-\mu a}$ , という規則的な入り方をする.

(permutation matrix)

$$P = (c_a r_- + c_b r_+ V z^{-1}), (z = e^{-\mu a}), \quad (3.56)$$

を用いた計算を開発した [50]. ここで,  $c_a$  と  $c_b$  はゼロでない定数である.  $r_{\pm}$  は非正則な行列であるが,  $P$  はその両方を含むため正則行列となり,  $P^{-1}$  が存在する.  $\det P = (c_a c_b z^{-1})^{N/2}$ , ( $N = 4N_c N_x N_y N_z N_t$ ) となることも簡単に証明できる.

フェルミオン行列に右から  $P$  をかけると

$$\Delta P = (c_a B r_- - 2c_b \kappa r_+) + (c_b B r_+ - 2c_a \kappa r_-) V z^{-1}, \quad (3.57)$$

が得られる. ここで  $r = 1$  の場合の関係式  $r_{\pm} r_{\mp} = 0$ ,  $(r_{\pm})^2 = r_{\pm}$  を用いた. 後のため, ブロック成分を

$$\alpha_i = c_a B^{ab, \mu\sigma}(\vec{x}, \vec{y}, t_i) r_{-}^{\sigma\nu} - 2c_b \kappa r_{+}^{\mu\nu} \delta^{ab} \delta(\vec{x} - \vec{y}), \quad (3.58a)$$

$$\beta_i = c_b B^{ac, \mu\sigma}(\vec{x}, \vec{y}, t_i) r_{+}^{\sigma\nu} U_4^{cb}(\vec{y}, t_i) - 2c_a \kappa r_{-}^{\mu\nu} \delta(\vec{x} - \vec{y}) U_4^{ab}(\vec{y}, t_i), \quad (3.58b)$$

と省略する<sup>13</sup>.  $\vec{x}, \vec{y}$  は空間座標を表しており,  $\alpha_i, \beta_i$  は時刻  $t_i$  における空間方向の伝搬を記述する. また,  $\alpha_i, \beta_i$  は時間については行列としての構造を持たないため, ランクが

$$N_{\text{red}} = N/N_t = 4N_x N_y N_z N_c$$

で与えられ,  $\Delta$  のランクと比較すると  $1/N_t$  になっている.

$\Delta P$  を時間に関する行列として表示すると,

$$\Delta P = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 z^{-1} & & & & \\ & \alpha_2 & \beta_2 z^{-1} & & & \\ & & \alpha_3 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \beta_{N_t-1} z^{-1} & \\ -\beta_{N_t} z^{-1} & & & & & \alpha_{N_t} \end{pmatrix}, \quad (3.61)$$

<sup>13</sup>時間行列表示において, 上の第1, 第2項はそれぞれ

$$(c_a B r_- - 2c_b \kappa r_+) = \begin{pmatrix} \alpha_1 & & & & \\ & \alpha_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \alpha_{N_t} \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

$$(c_b B r_+ - 2c_a \kappa r_-) V z^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \beta_1 z^{-1} & & & & \\ & 0 & \beta_2 z^{-1} & & & \\ & & 0 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \beta_{N_t-1} z^{-1} & \\ -\beta_{N_t} z^{-1} & & & & & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

で与えられる.

を得る. ここで  $z = e^{-\mu a}$  とおいた. ブロック成分  $\alpha_i, \beta_i$  はどちらも  $r_+$  と  $r_-$  の両方を含んでいるため逆行列を持つ. (3.61) の行列式は解析的に計算でき,

$$\det(\Delta P) = \left( \prod_{i=1}^{N_t} \det(\alpha_i) \right) \det(1 + z^{-N_t} Q), \quad (3.62)$$

を得る. ここで

$$Q = (\alpha_1^{-1} \beta_1) \cdots (\alpha_{N_t}^{-1} \beta_{N_t}), \quad (3.63)$$

は propagator matrix あるいは reduced matrix と呼ばれる.

$P$  と  $\Delta$  はともに正則行列なので, 正則行列に対する公式  $\det(AB) = (\det A)(\det B)$  が利用できて,  $\det \Delta$  は

$$\det \Delta = (c_a c_b)^{-N/2} \xi^{-N_{\text{red}}/2} \left( \prod_{i=1}^{N_t} \det(\alpha_i) \right) \det(Q + \xi), \quad (3.64)$$

となる. ここで,  $\xi = z^{N_t} = e^{-\mu a N_t}$  と書いた. 温度  $T = 1/(a N_t)$  を用いて  $\xi = e^{-\mu/T}$  となる. これはフガシティである.

(3.64) 式はランク  $N$  の行列  $\Delta$  に対する行列式をランク  $N/N_t$  の行列  $Q + \xi$  の行列式に変換した公式である. 行列式計算に必要なメモリと計算量はそれぞれ  $(\text{rank})^2, (\text{rank})^3$  で増加するため, (3.64) 式の左辺を直接計算するのに比べて右辺の計算量はかなり削減されている. さらに, 計算量の削減だけでなく, 化学ポテンシャルを含む項  $\xi$  とリンク変数を含む  $Q$  および  $\alpha_i$  が分離されており, フェルミオン行列式の化学ポテンシャル依存性が解析的に与えられている.

カノニカル法へ応用するためにさらに変形する.  $Q$  の固有値  $\lambda_n, (n = 1, 2, \dots, N_{\text{red}})$  を用いると<sup>14</sup>,  $\det \Delta$  を次の式で表すことができる

$$\det \Delta = C_0 \xi^{-N_{\text{red}}/2} \prod_{n=1}^{N_{\text{red}}} (\xi + \lambda_n). \quad (3.65)$$

ここで,  $C_0 = (c_a c_b)^{-N/2} \left( \prod_{i=1}^{N_t} \det(\alpha_i) \right)$ . 乗積部分  $(\xi + \lambda_1)(\xi + \lambda_2) \cdots$  を  $\xi$  のべきで展開すると

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \sum_{n=-N_{\text{red}}/2}^{N_{\text{red}}/2} c_n (e^{\mu/T})^n, \quad (3.66)$$

を得る. (3.66) 式は大分配関数の展開 (3.50) 式と同じ形をしており,  $c_n$  がフェルミオン行列式の  $n$  クォーク状態を抜き出したものに対応することがわかる. 和の上限值  $N_{\text{red}}/2$  は

$$N_{\text{red}}/2 = 2N_c N_x N_y N_z = (\text{スピン}) \times (\text{カラー}) \times (\text{体積})$$

となる.

<sup>14</sup>  $\det \Delta$  の計算では  $\Delta$  の  $LU$  分解か  $Q$  の固有値計算が利用できる.  $LU$  分解の場合, reweighting 因子 1 回の計算時間は短い,  $\mu$  の値を変えると再計算が必要となる. このような計算は [6] などで用いられている. 固有値の場合, 1 回の計算時間は長い, 一旦固有値を求めれば  $\mu$  の任意の値に対して reweighting 因子の値がただちにもとまる. 一長一短あるので, 計算の内容や計算機の性能等に依って使い分けるとよい.

## 縮約公式の物理的解釈

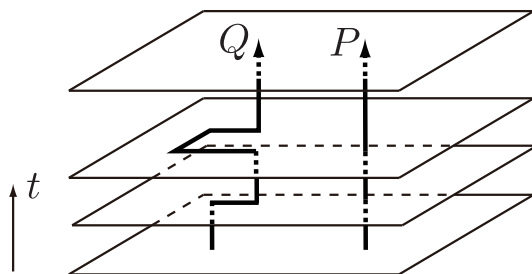


Figure 3.22: 縮約行列  $Q$  の表すダイアグラムの例.  $Q$  は初期時刻から終時刻まで伝搬するクォークラインを表しており, 直線で表されるポリヤコフライン  $P$  と類似した物理的プロセスを表している.

ここで  $Q$  のダイアグラムの意味を考えてみる.  $\alpha_1$  は格子の時間 (第 4 方向) 座標を  $x_4 = t = 1$  に固定した平面上でのクォークの運動を記述する. また  $\alpha^{-1}$  は形式的に  $B$  のべきで展開できるが, これは空間方向へのホップの回数の展開に相当する.  $\beta_1$  は  $\alpha_1$  と似た構造を持っているが, リンク変数  $U_4$  を含む点異なる.  $U_4(\vec{x}, t_1)$  は座標  $(\vec{x}, t_1)$  から  $(\vec{x}, t_2)$  への伝搬を表すので,  $\beta_1$  は  $t_1$ -平面上から  $t_2$ -平面への移動を表す. したがって  $\alpha_1^{-1}\beta_1$  は  $t = 1$  平面上で運動した後,  $t = 2$  へ移動するダイアグラムを記述する.  $Q$  は, このダイアグラムを  $t_1$  から  $t_{N_t}$  まで繰り返したものであるため, クォークが時間方向に伝搬するダイアグラムを記述することがわかる.

$(\alpha_i)^{-1}\beta_i$  はクォークの時間発展を表しており, 時間発展演算子であるハミルトニアンを用いて  $(\alpha_i)^{-1}\beta_i \propto e^{-H(t_{i+1}-t_i)}$  とかける. これは格子モデルにおいて転送行列 (transfer matrix) と呼ばれるものである.  $Q$  はそれらの積であり,  $Q \propto e^{-H(t_{N_t}-t_1)} = e^{-HaN_t} = e^{-H/T}$  と書ける. この解釈の裏付けとして, 重クォーク極限  $\kappa \rightarrow 0$  において,  $Q$  がポリヤコフラインを与えることが示せる. 極限  $\kappa \rightarrow 0$  をとると,  $Q$  は

$$Q = \begin{pmatrix} (2\kappa)^{N_t} & 0 \\ 0 & (2\kappa)^{-N_t} \end{pmatrix} U_4(t_1)U_4(t_2)\cdots U_4(t_{N_t}), \quad (3.67)$$

となる. 前半の行列はスピノル成分に作用する項である. 後半の  $U_4(t_1)U_4(t_2)\cdots U_4(t_{N_t})$  はポリヤコフライン (2.15) 式である. 重クォーク極限 ( $m \rightarrow \infty$ ) におけるクォークの自由エネルギーを  $F_{m \rightarrow \infty}$  とすると, ポリヤコフループの期待値は  $\langle \text{tr} P \rangle \propto e^{-F_{m \rightarrow \infty}/T}$  となる.  $P = \prod U_4(t_i)$  は重クォーク極限におけるハミルトニアン  $H(m \rightarrow \infty)$  に対して  $P \propto e^{-Ht}$  と書くことができる. ポリヤコフループは重クォーク極限で定義されており, クォークの空間方向の運動を含まないのに対して,  $Q$  は一般のクォーク質量に対して定義されており, そのため空間方向の運動も含んでいる. この意味で,  $Q$  はポリヤコフラインの一般化であり, 一般の (重クォーク極限を取らない場合の) クォークの自由エネルギーを  $F$  として  $\langle \text{tr} Q \rangle \propto e^{-F/T}$  と対応することがわかる. (3.5) 章においてハドロン相低温領域の問題を議論するが, ここでは  $Q$  の物理的解釈がゼロ温度極限の導出や化学ポテンシャルと  $\pi$  中間子質量の関連付けにおいて重要な役割を果たす. ちなみに,  $Q$  は転送行列の積をとったものであり, その類似から propagator matrix と呼ばれる. 文字通りクォークの伝搬を表しているが, クォークプロパゲーター  $\Delta^{-1}$  とは記述するダイアグラムが異なるので注意が必要である.

### 3.4.3 カノニカル分配関数の計算

縮約公式のカノニカル分配関数への応用を考える [49, 57].  $\det \Delta$  に (3.66) 式を代入すると,  $Z(\mu)$  は

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= \int \mathcal{D}UC_0 \sum_{n=-N_{\text{red}}/2}^{N_{\text{red}}/2} c_n e^{n\mu/T} e^{-S_g}, \\ &= \sum_{n=-N_{\text{red}}/2}^{N_{\text{red}}/2} \left( \int \mathcal{D}UC_0 c_n e^{-S_g} \right) e^{n\mu/T}, \end{aligned} \quad (3.68)$$

となる. ここでは簡単のために  $N_f = 1$  の場合を考えたが,  $N_f$  フレーバーの場合は (3.65) 式において  $N_f$  乗を取った後にべき展開すればよい. そのとき, (3.68) 式における  $N_{\text{red}}$  が  $N_f$  倍される以外には計算過程に違いは生じない.  $Z(\mu)$  に対する 2 つの表示 (3.50) と (3.68) が任意の  $\mu$  で一致するから, カノニカル分配関数は

$$Z_n = \int \mathcal{D}UC_0 c_n e^{-S_g}. \quad (3.69)$$

ここで, 係数  $c_n$  は複素数であり,  $c_n e^{-S_g}$  を重みとした重点サンプリングはできず, 符号問題が再び現れてしまう. この問題を回避するために, reweighting 法を用いると

$$\begin{aligned} Z_n &= \int \mathcal{D}UC_0 c_n e^{-S_g}, \\ &= \int \mathcal{D}U \frac{C_0 c_n}{\det \Delta(0)} \det \Delta(0) e^{-S_g}, \\ &= Z_0 \left\langle \frac{C_0 c_n}{\det \Delta(0)} \right\rangle_0. \end{aligned} \quad (3.70)$$

$\mu = 0$  においてゲージ配位を生成し,  $C_0 c_n / \det \Delta(0)$  の期待値を求めれば,  $n$  クォーク系に対するカノニカル分配関数となる. 全体にかかる  $Z_0$  は決めることができないため,  $Z_n$  の大きさには不定性が存在する. ただし,  $Z_0$  は  $n$  には依存しないので,  $Z_n$  の  $n$  依存性を議論する際には  $Z_0$  の不定性は特に問題を引き起こさない. 一方,  $Z_0$  は温度に依存するので,  $Z_n$  の温度依存性を議論する際には  $Z_0$  依存性を除去する工夫が必要となる. Reweighting には配位生成が可能な理論であれば  $\mu = 0$  に限らず, 他の理論を用いても良い. しかし, 用いる理論に依らず, reweighting を利用すれば, オーバラップ問題と位相揺らぎの問題が発生する. この点については後に, 格子 QCD でのデータと合わせて考えていくことにする.

## Triality

フェルミオン行列式のパシティ展開は  $c_1, c_2$  などクォーク数が 3 の倍数でない寄与を含んでいる. これらの寄与は, 個々のゲージ配位に対してはゼロとならないが, 配位平均を取った後の  $Z_1, Z_2$  はゼロとなることが示せる [21]. すなわち, 大分配関数はバリオン数が整数となる寄与の重ね合わせで記述することが出来る. このような性質をトライアリティ (triality) と呼んでいる. Triality はクォーク物質に対しても大域的にカラー中性性が成り立つことを示唆していると考えられている.

3.3.1 章で述べたように, QCD の大分配関数は化学ポテンシャルの虚数部を

$$\frac{\mu_I}{T} \rightarrow \frac{\mu_I}{T} + \frac{2\pi}{N_c}$$

とシフトする操作の下で不変である. ここから得られるのが, RW 周期性

$$Z(\mu) = Z\left(\mu + \frac{2\pi T i}{N_c}\right)$$

であった. この両辺をフガシティ展開すると,

$$\sum_n Z_n e^{n\mu/T} = \sum_n Z_n e^{n\mu/T} e^{i2n\pi/3},$$

となる.  $n$  が 3 の倍数 ( $n \equiv 0 \pmod{3}$ ) の場合,  $e^{i2n\pi/3} = 1$  となり, 両辺の寄与は相殺する. 残る項をまとめると,

$$\sum_{n \in \{n | n \not\equiv 0 \pmod{3}\}} Z_n e^{n\mu/T} (1 - e^{i2n\pi/3}) = 0$$

この式が任意の  $\mu$  について成り立つためには

$$Z_n = 0, \quad n \not\equiv 0 \pmod{3}, \quad (3.71)$$

が成り立たなければならない. したがって,  $n$  が 3 の倍数でないときカノニカル分配関数は 0 となり, 大分配関数は  $n$  が 3 の倍数のセクタのみから構成される.

ちなみに,  $c_1$  や  $c_2$  など, バリオン数が有理数となる寄与が, 個々のゲージ配位に対して 0 でないことは, ハドロンが境界上に存在し, 系の内部にハドロンの一部のみが入っているような状況を考えれば不自然ではない. 上の公式は, このような状態は個々のゲージ配位に対して出現しても平均を取ることで相殺することを示している. しかしながら, 後にみるように, 実際のデータでは  $Z_1$  などが 0 から有意にずれていることがある. これは, モンテカルロシミュレーションの時間が有限であるために, 相殺を引き起こすために必要な準安定状態を取り込めないことが原因と考えられるが, 統計数が無限大の極限でこのような寄与が 0 になることを示した計算は筆者の知る限りは存在しない.

(3.71) 式を使うと, (3.50) 式をクォーク数についての級数からバリオン数  $n_B = n/3$  の級数として

$$Z(\mu) = \sum_{n \not\equiv 0 \pmod{3}} Z_n \xi^n = \sum_{n_B} Z_{n_B} \xi_B^n, \quad \xi_B = e^{3\mu/T} = \xi^3 \quad (3.72)$$

と書く事が出来る.

上記の議論は分配関数だけでなく他の物理量  $\mathcal{O}$  にも応用できるが, 物理量  $\mathcal{O}$  の  $Z_3$  変換性で状況が変わる.  $Z_3$  不変な物理量の場合, 上記の議論をそのまま拡張できて, 物理量の期待値に寄与するのは  $n$  が 3 の倍数のセクタのみとなる. 一方,  $\mathcal{O}$  が  $Z_3$  不変でない場合は, フェルミオン行列式において  $n$  が 3 の倍数でないセクタが物理量に寄与する [58].

### QCD のカノニカル分配関数

では, QCD のカノニカル分配関数を求めてみよう. ここでは,  $Z_n$  に対する格子 QCD を用いた非摂動計算および, 高温極限における解析計算を紹介する.

はじめに, 高温極限におけるカノニカル分配関数を解析的に導出する. Gibbs エネルギーを  $F$  とすると, 大分配関数は  $Z = e^{-F/T}$  で与えられる. (3.35) 式の  $f(\mu)$  を用いると,  $F(\mu) = Vf(\mu)$  である. ( $V$  は空間体積).  $Z(\mu) = e^{-Vf(\mu)/T}$  を (3.51) 式に代入してフーリエ積分を行うと,

$$Z_n = \frac{3}{2\pi} \int_{-\pi/3}^{\pi/3} d\theta e^{T^3 V g(\theta) + in\theta}, \quad (n \equiv 0 \pmod{3}), (\theta = \mu_I/T), \quad (3.73)$$

である. ここで,  $g(\mu) = f(\mu)/T^4$  と定義した. したがって  $g(\theta) = c_0 - c_2\theta^2 + c_4\theta^4$ .  $g(\theta)$  は  $\theta = 0$  に 1 つの極大点, また  $\theta = \pm\sqrt{c_2/(2c_4)}$  に 2 つの極小点をもつ. 図 3.6 で説明したように, 高温領域では  $c_2 > c_4$  である. SB 極限では,  $\sqrt{c_2/(2c_4)} = \sqrt{2}\pi$  [14] であり, 格子データでも  $\sqrt{c_2/(2c_4)} \sim \sqrt{5}$  [2, 17, 18, 59] で, 2 つの極小点は積分区間の外にあると考えて良い. したがって,  $g(\theta)$  は区間  $\theta \in [-\pi/3, \pi/3]$  において上に凸な関数であり,  $\theta = 0$  において極大値を持つ. 指数部が体積に比例するため, 体積が増加するとピークが鋭くなり,  $\theta = 0$  が積分に支配的になる. そのため鞍点近似が利用できて,  $Z_n$  は

$$Z_n = C e^{-n^2/(4T^3 V c_2)}, \quad (3.74)$$

となる. ここで  $C = \frac{3}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{T^3 V c_2}} e^{T^3 V c_0}$ . 計算の詳細を Appendix B.3 に示した. 高温であれば, (3.74) 式を用いる事で, フェルミオン行列式などの煩雑な計算を行うことなくカノニカル分配関数を求めることができる.

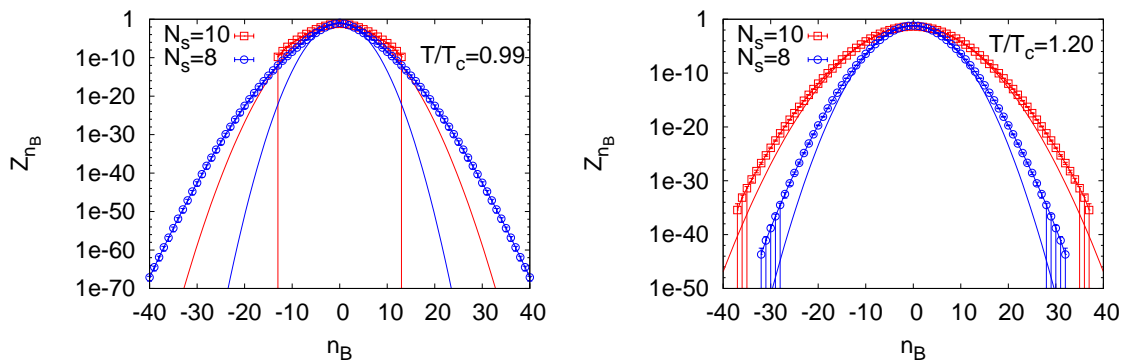


Figure 3.23: カノニカル分配関数のバリオン数  $n_B$  依存性. 左:  $T/T_c = 0.99$ , 右:  $1.20$ . データ点はカノニカル法での計算結果.  $N_s$  は空間方向の格子点数で,  $N_x = N_y = N_z = N_s$ . 実線は鞍点近似の結果で,  $c_2$  には格子 QCD の計算結果を用いている. データ点は  $Z_n$  の実部が正となる領域のみ表示しており, データが存在しない箇所は符号問題が激しく  $Z_n$  の実部が負となったことを意味している.

$Z_n$  の計算は数値的にも工夫が必要である. 基本的な流れは以下のとおりである;

1.  $\mu = 0$  でゲージ配位を生成する

2. (3.63) 式の  $Q$  の固有値を求める
3. (3.65) 式を展開して  $c_n$  を求める
4. (3.70) 式を求める

ステップ 3 の乗積の展開は単純な演算だが、符号やオーダーの異なる数の和と差を含むため桁落ちや丸め誤差が発生しやすく、また項数が増えると倍精度変数の上限を超える数の問題、すなわちオーバーフロー/アンダーフローが発生する。前者の問題は、再帰計算を用いると項数が増加しても精度を保てる [51]。一方、Vandermonde 行列式を用いる方法はランクが 100 を超えたあたりから精度の低下が起こるようである。後者の問題については倍精度を超える変数を用いた計算が必須となる。よく用いられるライブラリとしては、GNU のライブラリや Smith の作成した FMLIB がある [60]。[51] では独自の倍精度計算ライブラリを作成して対応している。このような工夫が必要であるものの、 $\lambda_n$  や  $c_n$  が求まれば、カノニカル法や reweighting などに応用でき便利である。

図 3.23 はカノニカル分配関数をバリオン数の関数として表したもので、左図が  $T \sim T_c$ 、右図が  $T > T_c$  の結果に対応する。エラーバー付きのデータ点が格子 QCD の結果、実線は鞍点近似から得られるガウス分布 (3.74) 式である。ガウス分布における  $c_2$  は図 3.6 で示した格子 QCD の計算結果を用いている。

3.4.1 章で述べたように  $Z_n$  は  $n$  の符号の入れ替えに対して対称であるが、データはこの性質を正しく再現している。 $Z_n$  は  $|n|$  の増加とともに指数的に減少する。これは  $Z_n = e^{-F_n/T}$  の関係から明らかで、 $n$  粒子系のヘルムホルツ自由エネルギー  $F_n$  が粒子数とともに増加することを表している。 $Z_n$  あるいは  $F_n$  の  $n$  依存性は系のダイナミクスに依存しており、クォーク質量、格子結合定数、温度などに依存して変わる。 $n$  依存性を詳しく見てみると、高温と低温で振る舞いが異なっている。高温 ( $T/T_c = 1.20$ ) では、 $Z_{n_B}$  は  $n_B$  がある程度小さい領域でガウス分布とよく一致し、格子サイズが大きくなると一致がより良いことがわかる。 $n_B$  が増加するとガウス近似からずれてくるが、これはフーリエ積分における振動部  $e^{in\theta}$  の寄与のためである。一方、低温 ( $T/T_c = 0.99$ ) では、格子計算の結果はガウス分布とは一致しない。これはガウス型の分布を導出する際の条件が  $T_c$  近傍で満たされないためである。この、高温と低温における  $Z_n$  の  $n$  依存性の違いは物理的にも重要な役割を担う。2 つの典型的な状況、 $Z_n \propto e^{-an^2}$  と  $Z_n \propto e^{-a|n|}$  の場合を考えて見る。 $Z_n$  がガウス分布の場合、フガシティー級数  $\sum e^{-an^2} e^{-n\mu/T}$  は任意の  $\mu$  に対して収束する。収束半径は無限大となり、 $\mu$  に関する不連続性は存在しない。一方、 $Z_n$  の指数部が  $|n|$  に比例する場合、フガシティー級数  $\sum e^{-a|n|} e^{-n\mu/T}$  の収束半径は  $\mu = Ta$  となる<sup>15</sup> 後者の例として、粒子間に相互作用がない場合が考えられる。この場合、 $a$  は粒子の質量  $m$  と一致し、化学ポテンシャルが粒子の質量を超えると、一斉に系に粒子が流入する。体積 ( $N_s$ ) 依存性を見ると、 $N_s$  の増加によって  $Z_n$  は増大する。これは、系の体積が大きいほど系の粒子数を増加させ易いことを表している。

次に、カノニカル法で実現されている密度を考察してみよう。バリオン密度  $\rho_B$  は、バリオン数  $n_B$ 、格子体積  $(N_s a)^3$  を用いて、 $\rho_B = n_B / (N_s a)^3$  で定義される。格子間隔  $a$  は格子結合定数  $\beta$  の関数で、その値は物理量をインプットして決める必要があるが、ここでは  $a$  を 0.2 fm と仮定してバリオン密度を概算してみ

<sup>15</sup>ただし、格子サイズが有限の場合、大分配関数は有限の多項式となり、任意の  $\mu$  の値に対して収束する。



る.  $N_s = 10$  のケースを考えると, 空間方向の一辺の長さは  $N_s a \sim 2 \text{ fm}$ , 体積は  $(N_s a)^3 \sim 8 \text{ fm}^3$ ,  $\rho_B \sim \frac{1}{8} n_B \text{ fm}^{-3}$ .  $n_B = 2$  のとき  $\rho_B \sim 0.25 \text{ fm}^{-3}$ ,  $n_B = 8$  のとき  $\rho_B \sim 1.0 \text{ fm}^{-3}$  となり, 標準核密度  $0.17 \text{ fm}^{-3}$  と同程度か高い密度が実現されている. 核子の排他体積とも比較してみると, 核子の荷電半径は  $0.87 \text{ fm}$  なので, 核子体積は  $4\pi(0.87)^3/3 \sim 2.7 \text{ fm}^3$  となる. 核子が 3 個存在すると核子の占める排他体積が格子体積と同程度になり, したがって核子の波動関数が重なり始める. 今の計算ではクォーク質量が物理的な値よりも大きく, また紫外切断が小さいためクォーク間相互作用も強く評価しており, したがって核子半径は物理的な値より小さいと考えられる. このパラメータセットに対する核子の荷電半径が  $0.5 \text{ fm}$  程度と仮定すると, 核子の体積は  $0.5 \text{ fm}^3$  となり, 20 個程度の核子があると核子の波動関数が重なりを持つ. これらは概算であるので数字の意味を深読みしすぎることには注意すべきだが, この系に 10 ~ 20 個のバリオンが存在する状況がかなり密度の高い状況であることは期待できる. 密度が十分高ければハドロン相から QGP 相への相転移をみる事が出来るかもしれない. 相転移点の決定法については次節で説明する.

本節の最後に, カノニカル法の注意点を 2 つ述べる. 1 つ目は  $n$  の増加に伴う  $Z_n$  の精度低下である. フガシティ展開係数  $c_n$  の絶対値は  $n$  の増加とともに小さくなる [51]. また,  $c_n$  は複素数なので,  $Z_n$  の統計誤差が大きくなる. そのため相対誤差が非常に大きくなる. 図 3.23 で大きい  $n$  のセクタでデータが存在しないのは,  $Z_n$  の位相揺らぎが激しく, 実部が負となるためである. カノニカル分配関数は実正であるので, 負の  $Z_n$  は符号問題に伴う非物理的な結果である. この問題はハドロン相で特に厳しく, 比較的小さい  $n$  でも生じる. 1 次相転移線を研究する為にはハドロン相に相当する温度で密度を増加させていく必要があるが, その際にこの位相ゆらぎをどの程度コントロールできるかが問題となる. この問題に対しては統計数を増やすのが基本的な対策であるが, 複数のアンサンブルを用いる方法 [11], 2 段階のアクセプト/リジェクトを行う方法 [61] も提案されている.

2 つ目の注意点は, 計算量の体積依存性である. カノニカル法では縮約行列の固有値計算が必要である.  $Q$  のランクは空間体積に依存するため, 格子体積の増加とともに計算量は急激に増加する. 3.1.6 節で説明したように, 行列式計算の計算量はランクとともに急激に増加するため, カノニカル法の大規模格子への応用は現在のところ難しい. [62] では鞍点法を用いた方法が提案され, 空間格子点数  $N_s = 16$  の比較的格子サイズが大きい場合での計算が実現されている.

### 3.4.4 カノニカル法を用いた相転移の研究

本節では相転移点判別法として美しい数学構造を持つ Lee-Yang ゼロ点定理, 実用性の高い Maxwell construction の方法, Beam Energy Scan 実験とも関連する高次ゆらぎの 3 つの方法を解説する.

#### Lee-Yang ゼロ点定理

大分配関数のフガシティ展開 (3.50) は  $e^{\mu/T}$  の多項式とみなすことができる. 有限格子サイズの場合, フガシティ多項式 (3.50) は有限和にすぎないため, 任意の化学ポテンシャルに対して一様収束し, 熱力学的特異性は発生しない. フガシティ多項式の根の熱力学極限における振る舞いと相転移の関係を明らかにしたのが

Lee-Yang ゼロ点定理 [63, 64] である. (3.50) 式を  $e^{\mu/T}$  の多項式とみなせば, 次数と同数の根が存在する. 係数  $Z_n$  が実正であることから, 根は実正とはならず, 複素平面上の正の実軸を除く領域に分布する. このような  $Z(\mu) = 0$  を満たすような複素平面上における点を Lee-Yang ゼロ点と呼ぶ. Lee と Yang はゼロ点が, 熱力学極限において正の実軸に漸近することで熱力学量の非解析が生じることを指摘した (Lee-Yang ゼロ点定理の詳細は B.2 章で解説する).

Lee-Yang ゼロ点定理はもともと大分配関数のフガシティ展開を用いて定式化されているのでカノニカル法は Lee-Yang ゼロ点定理との親和性が高い. カノニカル法を用いた QCD の Lee-Yang ゼロ点計算は Barbour ら Glasgow グループによって 1990 年代に行われた [65–68]. Glasgow グループはゼロ温度における有限密度相転移を探索する中で,  $\mu = m_\pi/2$  で相転移がおこるという結果を報告している. これは非物理的な結果であるのだが, カノニカル法固有の問題ではなく低温有限密度領域の解析における難問であることがわかっている. この点については 3.5 章で詳しく説明する.

Fodor と Katz は multi-parameter reweighting において, 温度を複素平面に拡張することで Lee-Yang ゼロ点 (厳密には Fisher ゼロ点 [69]) を計算し, QCD 臨界点の位置を求めた [7]. Fodor と Katz の計算は格子 QCD で QCD 臨界点をもとめた最初の例でありインパクトが強かったが, Ejiri によって熱力学極限において誤差が増大する問題が指摘されている. 他のグループによる再現報告も今の所なく, MPR 法での Lee-Yang ゼロ点計算の妥当性については意見がわかれている.

### 高温極限における Lee-Yang 零点の解

以下では, 計算の信頼度が高い高温 QCD を例に Lee-Yang ゼロ点計算を紹介する, またその際に高温における近似解も導出し, 数値計算の信頼度を検証する [10].

高温 QCD に対する  $Z_n$  の近似解 (3.74) 式を用いると,  $Z(\mu)$  は

$$Z(\mu) = C \sum_{n_B=-\infty}^{\infty} e^{-9n_B^2/(4T^3Vc_2)+3n_B\mu/T}, \quad (3.75)$$

となる. (3.75) 式はテータ関数 (theta function)

$$\vartheta(z, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{\pi i n^2 \tau + 2\pi i n z}$$

を用いて,

$$Z(\mu) \propto \vartheta(z, \tau), \quad (3.76)$$

と表せる. ここで  $z$  と  $\tau$  は

$$2\pi i z = 3\frac{\mu}{T}, \quad \pi i \tau = -\frac{9}{4T^3Vc_2}. \quad (3.77)$$

テータ関数  $\vartheta(z, \tau)$  の零点は以下の式で与えられる

$$z = \frac{2k+1}{2} + \frac{2l+1}{2}\tau.$$

ここで,  $k, \ell \in \mathbb{Z}$  (テータ関数の擬2重周期性). (3.75) 式の零点は

$$\frac{\mu}{T} = \frac{(2k+1)\pi i}{3} - \frac{3(2\ell+1)}{4T^3 V c_2}, \quad (3.78)$$

となる.

複素  $\xi$  平面上で, (3.78) 式は偏角  $\arg \xi = \text{Im}(\mu/T) = \pi/3, \pi, \text{ and } 5\pi/3$  をもつ3つの動径方向の線分上に分布する. RW 相転移点  $(\text{Re}(\mu/T), \text{Im}(\mu/T)) = (0, (2k+1)\pi/3)$  近傍での Lee-Yang 零点は

$$\frac{\mu}{T} = \frac{(2k+1)\pi i}{3} \pm \frac{3}{4T^3 V c_2}, \quad (3.79)$$

与えられる. これらは RW 相転移点にむかって  $1/V$  で漸近していく. これは RW 相転移が1次相転移である事を示唆している.

次に  $Z(\mu) = 0$  となる Lee-Yang ゼロ点の数値解法を考える. (3.72) 式は負べき項を含むが,  $\xi_B = 0$  は明らかに  $Z(\mu) = 0$  を満たさない. したがって, 最も強い負のべきをくくりだし, 正のべきにしても根の計算には影響しない.

$$Z(\mu) = Z_{-N} \xi^{-N} (\xi^{2N} + c_1 \xi^{2N-1} + \dots + 1)$$

の根を求めることと同値である. ここで,  $\xi_B$  を  $\xi$  と略した.  $c_i$  はカノニカル分配関数を先頭項の係数が1になるよう規格化したものである. 対称性から最大次の係数と最低次の係数は等しい. 根を  $\alpha_i$  とおくと,

$$Z(\mu) = Z_{-N} \xi^{-N} \prod_i (\xi - \alpha_i).$$

ここで,  $Z(\mu)$  が根  $\alpha$  を持つならば,  $1/\alpha$  も根となる<sup>16</sup>. 従って, 複素  $\xi$  平面上の単位円内部か外部の根を求めれば, 残りは対称性から求まる. なお, 複素  $\xi$  平面上の単位円上ではフェルミオン行列式は実正であるので, Lee-Yang ゼロ点は存在しない. 多項式の根を求める最も素朴な方法は根の探索と因数分解を繰り返す逐次計算である. この方法は低次方程式ではある程度の精度が保てるが, 次数が高くなるにつれて因数分解で生じる数値誤差が蓄積し精度が低下する. 求めた根から多項式の係数を再度計算し, 元の係数と比較することで根の計算の妥当性を検証できる.

高精度な方法として留数定理と分割統治法を組み合わせた (cut Baumkuchen 法: cBK 法) がある [70]. 大分配関数  $Z$  の対数微分をとると

$$\frac{Z'}{Z} = \sum_i \frac{1}{\xi - \alpha_i}.$$

さらに, 複素平面上で  $\alpha_i$  を囲む閉曲線  $C$  に沿った線積分を考えると, 留数定理より

$$\frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{1}{\xi - \alpha_i} = 1$$

となる. cBK 法は全留数を含む経路からはじめて, 領域分割と留数の計算を繰り返し, 留数の存在する領域を絞り込む方法である. 領域分割の回数を可変にすることで, 留数の存在する領域を任意の精度で特定できる.

<sup>16</sup> クォークと反クォークの入れ替えに関する不変性 (CP 不変性) より  $Z(\mu) = Z(-\mu)$  が成り立つ.  $\xi = e^{-\mu/T} = \alpha$  が  $Z$  の根であれば,  $1/\xi = e^{\mu/T} = 1/\alpha$  も根である.

Lee-Yang ゼロ点計算においても一つ考慮しなければならない点は  $Z_n$  の統計誤差である. 因数分解にせよ, cBK 法にせよ  $Z_n$  の値が単一に定まることを仮定しているが, 実際には  $Z_n$  には誤差があり, したがってゼロ点にも誤差があるはずである. Lee-Yang ゼロ点定理を用いた相転移点の判別には熱力学極限においてゼロ点が複素平面上の正の実軸に近づくかどうかを調べる必要がある. しかし, 体積の増加は  $Z_n$  の誤差の増加をもたらす, これがゼロ点の振る舞いの判別を困難にする可能性がある [5].

[10] では Bootstrap 法を用いたゼロ点の誤差付き計算法が提案されている.  $N$  個のゲージ配位から重複を許して無作為に  $N$  個を抜き出し, それに対して  $Z_n$  を計算する. 得られた  $Z_n$  の期待値に対して cBK 法を用いてゼロ点を計算する. 再び重複を許して無作為に  $N$  個の配位を抜き出し,  $Z_n$  をもとめゼロ点を計算する. これを多数回繰り返して, 最後にゼロ点の平均値をとるとゼロ点が誤差付きで得られる. cBK+Bootstrap 法は  $Z_n$  および Lee-Yang ゼロ点の計算を多数回繰り返すため計算量が多いが, あらかじめフェルミオン行列式のフガシティ係数  $c_n$  を求めておけば効率良く計算ができる.

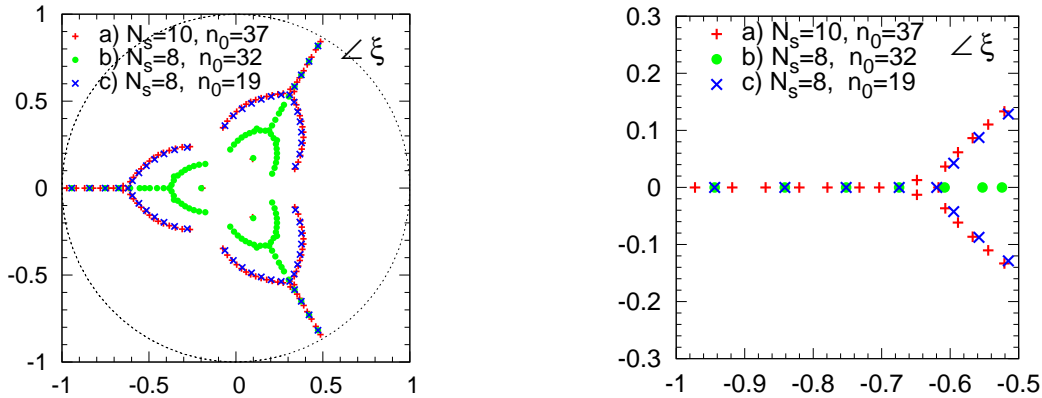


Figure 3.24: 高温 ( $\beta = 1.95, T/T_c = 1.20$ ) における Lee-Yang 零点の複素フガシティ平面上的分布. 1 つの Bootstrap サンプルに対する結果. 左: 単位円内部の Lee-Yang 零点の図. 右: 負の実軸近傍の拡大図. 赤, 緑, 青のデータは (a)  $(n_0, N_s) = (37, 10)$ , (b)  $(32, 8)$ , (c)  $(19, 8)$  の結果. 単位円の外部にも対称性  $\xi \leftrightarrow 1/\xi$  に従って Lee-Yang 零点が存在する.

cBK+Bootstrap 法を用いて求めた QCD の Lee-Yang ゼロ点が図 3.24 である. 係数  $Z_n$  は  $n$  が増加するにつれて位相揺らぎが厳しくなり, やがて  $Z_n$  の実部が負となるような項が出現する.  $Z_n$  は実正なので, 負の  $Z_n$  は符号問題の影響である. そのような項を足すと, 熱力学的な無関係な特異性が出現しうるため, 除去しなければならない. 図の  $n_0$  は  $\{Z_{n_B} > 0 \mid \forall |n_B| < n_0\}$  が成り立つ最大のバリオン数であり, この値を超える項は無視する. フガシティ多項式の収束性および格子体積依存性をみるために, 3 つの場合 (a)  $(n_0, N_s) = (37, 10)$ , (b)  $(32, 8)$ , (c)  $(19, 8)$  の場合に Lee-Yang 零点を求めている.  $N_s = 10$  に対しては, 可能な最大値  $n_0 = 37$  (図 3.23 参照)  $N_s = 8$  に対しては (b) 可能な最大値  $n_0 = 32$ , (c)  $N_s = 10$  の場合と比べて単位格子内の最大バリオン数を揃えて  $n_0 = 19 \simeq 37 \times (8/10)^3$  とする.

図 3.24 で, 単位円に近い領域では, (3.78) 式から予想されるように, 零点は偏角  $\arg \xi = \pi/3, \pi$ , and  $5\pi/3$  の 3 つの直線上に並んでいる. 原点に近づく, 零点の分布は直線から 2 つの曲線に分岐している. 同様の

振舞は Barbour らの最初の Lee-Yang 零点分布の計算でも報告されている [67]<sup>17</sup>.  $N_s = 8$  で  $n_0$  を 19 から 32 に増加させても単位円近傍 ( $0.6 < |\xi| < 1$ ) の零点は動いていないから, この領域ではフガシティ多項式が収束していると判断しても良さそうである. 原点に近い領域ではゼロ点は  $n_0$  とともに動いており, フガシティ級数が収束しているとは判断できない. これは原点に近いほど  $n$  の大きい状態への依存性が強く, フガシティ多項式を打ち切った影響が強く現れるためである.

図 3.24 は一つの Bootstrap サンプルに対する Lee-Yang ゼロ点を表している. 同様の計算を複数の Bootstrap サンプルに対して行い, 得られたゼロ点の平均値をとることでゼロ点が誤差付きで求まる. 高温 QCD の場合, 負の実軸上に分布するゼロ点は Bootstrap サンプルを変えてもほぼ変化がないが, 2 つに分岐した領域のゼロ点は Bootstrap サンプルに依存して位置が変動することが報告されている [10]. 位置が安定しているゼロ点に対する結果と解析解を図 3.25 に示す. 図では単位円近傍の零点に対して  $|\operatorname{Re}\xi|$  と  $|\operatorname{Re}\xi|^{VT^3}$  をプロットしており, 格子 QCD の結果と解析解がほぼコンシステントな結果を示している. Lee-Yang ゼロ点が  $1/V$  のスケール則を満たすことから, Roberge-Weiss 相転移が 1 次相転移であることがわかる.

図 3.26 の結果は Lee-Yang 零点に対する興味深い結果を含んでいる. Lee と Yang は Ising 模型に対して Lee-Yang 零点が単位円上に分布する事を示した (図 3.26 の左図参照). 後に Asano によってスピン 3/2 に対して同様の結果が得られている [71]. 一方, (3.78) で示したようにカノニカル分配関数がガウス分布に従う場合は, 零点は単位円と直交する線分上に並ぶ. ガウス型のカノニカル分配関数は自由エネルギーの自由ガス近似の結果なので ((3.74) 式参照), この結果は自由フェルミ気体に対する Lee-Yang ゼロ点の近似解とみなすことができる (図 3.26 の中央図と左図参照). QCD の Lee-Yang 零点分布は Ising 模型とは異なるのである. ちなみに, 純虚数化学ポテンシャルに対してフェルミオン行列式は実となるため, フレーバ数が偶数の場合は QCD の作用は実となり, したがって単位円上に零点が存在しないことは自明に示すことができる.

ハドロン相に対する Lee-Yang ゼロ点分布の計算は [70] で行われているが, ゼロ点の誤差までは計算されていない. ハドロン相では位相ゆらぎが激しく,  $n$  の大きい領域で  $Z_n$  の計算が難しく, 高精度の Lee-Yang ゼロ点計算は今後の課題である.

### Maxwell-construction の利用

ハドロン相-QGP 相境界線に関する研究で現在最も成果をあげているのは, Maxwell の等面積則 (Maxwell construction) の方法であろう [11, 12, 72]. Maxwell construction は, van der Waals の状態方程式から気液相転移点を判別する方法としてよく知られている. この方法がカノニカル法に応用できる.

化学ポテンシャルは系に粒子を一つ追加するための自由エネルギーであるから, カノニカル分配関数を用いて

$$\begin{aligned}\mu &= F_{n+1} - F_n, \\ &= -T(\ln Z_{n+1} - \ln Z_n)\end{aligned}\tag{3.80}$$

<sup>17</sup>Barbour らは零点を  $e^\mu$  平面上でプロットしており,  $N_t$  乗すれば  $e^{\mu/T}$  平面上での分布が得られる.

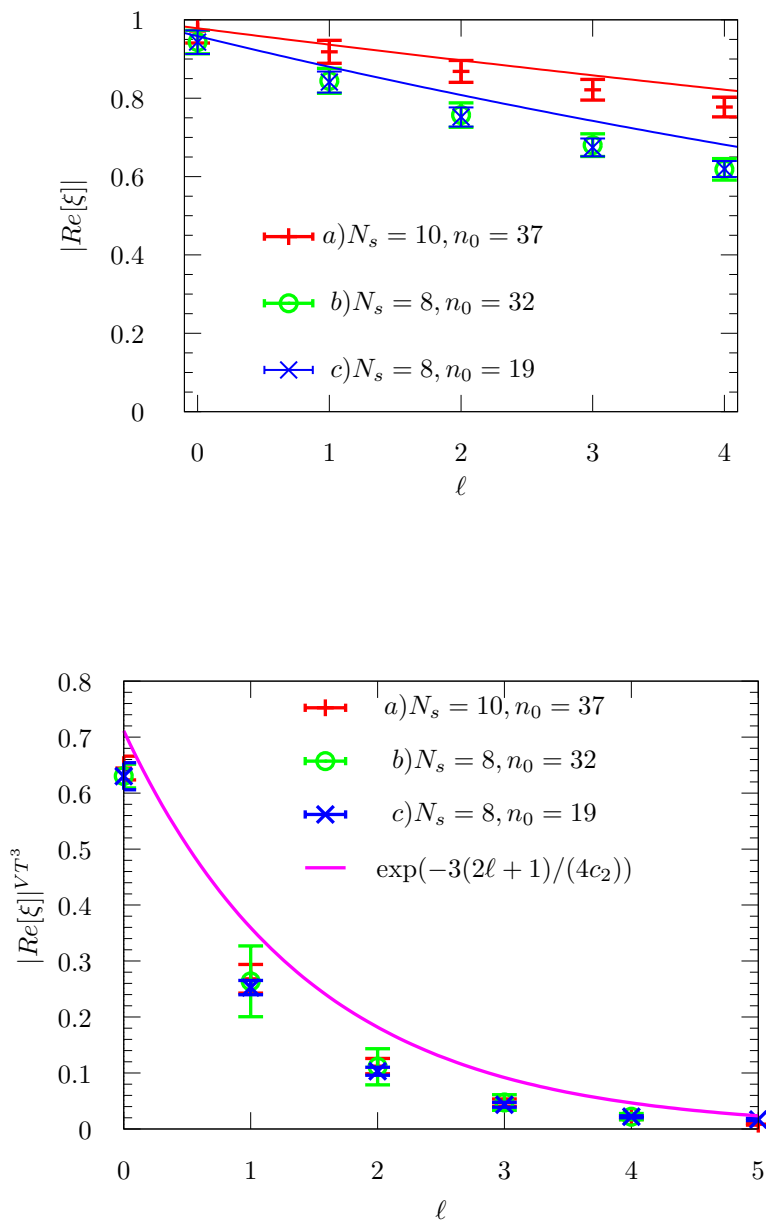


Figure 3.25: 上: 複素フガシティ平面の負の実軸上に存在する Lee-Yang ゼロ点の実部  $|\text{Re}[\xi]|$ . 下: 実部を  $|\text{Re}[\xi]|^{VT^3}$  とスケールしたもの. 曲線はテータ関数による近似解. 誤差は 1000 個のブートストラップサンプルを用いて求めた. ここで, 数値解との識別を容易にするために解析解は実線で表示したが,  $\ell \in \mathbb{Z}$  に注意.

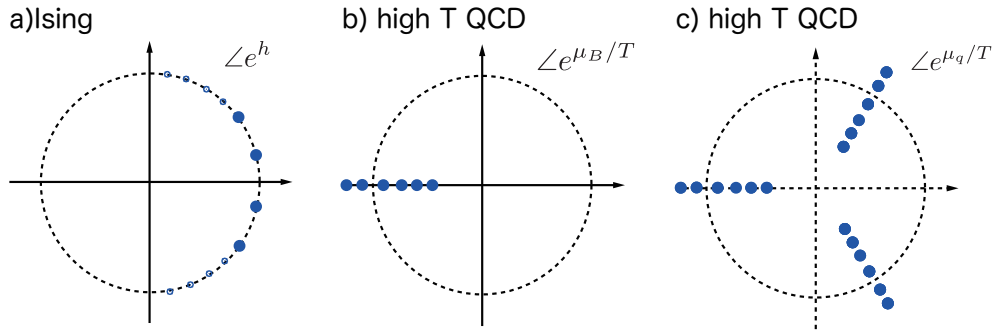


Figure 3.26: Lee-Yang ゼロ点分布の様子の概略図. (a) Ising 模型における複素  $e^h$  平面上の Lee-Yang ゼロ点.  $h$  は外部磁場, (b) 複素バリオン数密度平面上での Lee-Yang ゼロ点, (c) 複素クォーク数密度平面上での Lee-Yang ゼロ点. (b) の結果は自由フェルミオンに拡張できる.

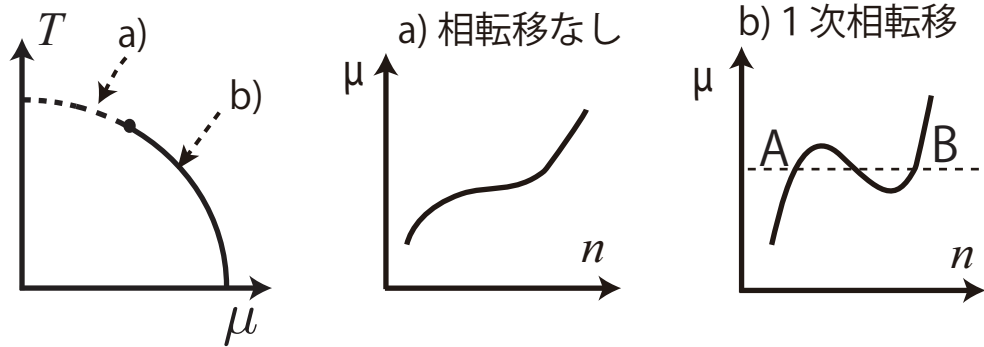


Figure 3.27:  $\mu$ - $n$  曲線と Maxwell construction の図. 左は QCD 相図. a) はクロスオーバー領域もしくは QGP 相での振舞, b) は 1 次相転移が存在するような場合. b) では, 点線と実線の囲む 2 つの領域の面積が等しくなるときの, A と B の自由エネルギーも等しくなり, これが 1 次相転移点となる. このような相転移点の判別法を Maxwell の等面積則 (Maxwell construction) と呼ぶ.

と表すことができる. 1 つの相内部では, 系の熱力学的な安定性から,  $\partial\mu/\partial n > 0$  でなければならず,  $n$  が増加すれば  $\mu$  は増加する (図 3.27 中央). 一方, 1 次相転移が有る場合には図 3.27 右のような振舞になる. 右図では,  $\mu$  は  $n$  の関数として, 増加, 減少, 増加という S 字カーブのような振舞を示している. 1 つ目の増加はガス相における粒子数の増加に伴う化学ポテンシャルの増加, 2 つ目の増加は液相における粒子数の増加に伴う化学ポテンシャルの増加を表す. 中間の  $\partial\mu/\partial n < 0$  の領域は熱力学的に不安定な状態を表す. 物理的には気相と液相の共存状態を経由した 1 次相転移を表す. この 1 次相転移点は気相と液相の自由エネルギーが等しくなると発生する. このときの化学ポテンシャルは図の点線と曲線がつくる 2 つの領域の面積が等しくなるよう決める. これを Maxwell の等面積則と呼び, これが相転移点  $\mu_c$  に対応する.

de Forcrand と Kratochvila はカノニカル法を用いて  $\mu - n$  曲線を描き, Maxwell construction を用いてハドロン相と QGP 相の間の 1 次相転移線を求めた [11, 12, 72](図 3.27). ここでの計算は  $N_f = 4$  のスタッガードフェルミオンに対する計算で,  $N_f = 2$  のスタッガードフェルミオンへの応用は [62] で行われている. カノニカル分配関数  $Z_n$  の計算は reweighting 法を用いるため, オーバラップ問題の発生が避けられない.  $Z_n$  の

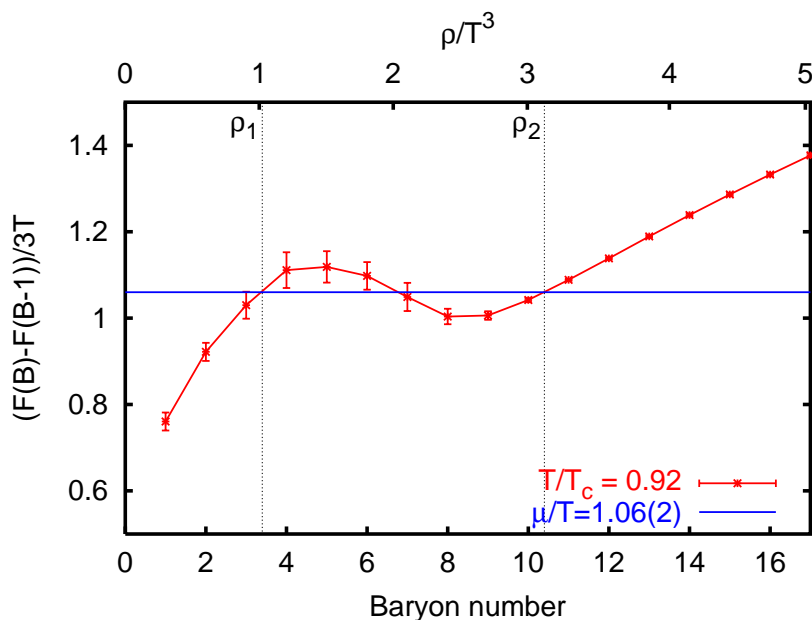


Figure 3.28: カノニカル法と Maxwell construction で 1 次の有限密度相転移計算に成功した最初の例. [11] より引用.

精度の問題はハドロン相で厳しくなるため、QCD 臨界点の同定のためには、ハドロン相で  $n$  が大きい領域で  $Z_n$  を精度よく求めることが必要となる。Kentucky グループはこの問題に対して、ゲージ配位のアクセプト/リジェクトを 2 段階で行う方法を提案している。Kentucky グループは  $N_f = 2, 3, 2+1, 4$  の Wilson フェルミオンに対してカノニカル法を応用し [61, 73–76],  $N_f = 3, 2+1, 4$  の場合に、QCD 臨界点と 1 次相転移線を得ている。一方、2 フレーバでは 1 次相転移線は  $0.9T_c$  程度まで見つかっていない。

現在のところ、複数グループによって QCD 臨界点発見の報告がなされたのはカノニカル法+Maxwell construction の方法のみと思われる。この方法が他の方法と比べて相転移判別に適している主要因は、おそらく、この方法はカノニカル分配関数の特定のセクタのみで相転移を判別できることにある。たとえば、multi-parameter reweighting 法は大分配関数を用いて相転移を判別するが、それはカノニカル分配関数の全ての項の和をとった計算に相当する。一方、Maxwell construction ではフガシティ級数の和を取る必要がないため、誤差が抑制できる。

### バリオン数ゆらぎ

相対論的重イオン衝突実験において重要な量にバリオン数などの保存量の高次ゆらぎがある。高次揺らぎは QCD 臨界点近傍で特徴的な振る舞いを示すため [77–80], BES 実験における臨界点のシグナルとして注目されている。相対論的重イオン衝突実験で生成される粒子数のデータは温度と化学ポテンシャルをパラメータに持つ簡単な統計模型とよく適合することがわかっている [81]。重イオン衝突後に測定される粒子数は、



重イオン衝突によって生成された火の玉物質内の粒子生成反応が終了した時点、つまり化学凍結 (chemical freezeout) の時点における温度と化学ポテンシャルを表すと考えられている。過去のデータ解析から、化学凍結における温度と化学ポテンシャルはそれぞれ、衝突エネルギーの増加関数、減少関数となることがわかっており、衝突エネルギーを変えることで生成される火の玉物質の温度と密度をある程度変化させることができる。この性質を利用して QCD 相図を探索するというのが BES 実験のアイデアである。

$n$  を粒子数演算子、 $\delta n = n - \langle n \rangle$  として、高次のモーメントは  $\langle (\delta n)^m \rangle$  で定義される。特に、分散 (variance:  $\sigma$ )、歪度 (skewness:  $S$ )、および尖度 (kurtosis:  $\kappa$ ) は

$$\sigma^2 = \langle (\delta n)^2 \rangle, \quad (3.81a)$$

$$S = \frac{\langle (\delta n)^3 \rangle}{\sigma^3}, \quad (3.81b)$$

$$\kappa = \frac{\langle (\delta n)^4 \rangle}{\sigma^4} - 3, \quad (3.81c)$$

で定義される。これらのモーメントは分布の形状に関係しており、2 次のモーメントはよく知られているように分布の広がりを表す。3 次のモーメントは分布が期待値を中心とした対称性を持つ場合に 0 となるので、左右非対称度を表す。4 次のモーメントは分布の尖り具合を表し、上の定義の (3 を引いている) 場合、ガウス分布に対して  $\kappa = 0$  となる。高次ゆらぎは CEP 近傍に敏感に変化する [79, 80, 82].

高次ゆらぎの変化をカノニカル分配関数を用いて考察する。図 3.29 は  $Z_n e^{n\mu/T} / \sum Z_n e^{n\mu/T}$  の分布を 3 つの異なる温度に対してプロットしたものである。高温 ( $T/T_c = 1.08$ ) では  $\mu$  が変化しても分布の形状はほぼ変化しない。すでに述べたように、高温において  $Z_n$  はガウス分布で近似できる。  $Z_n \propto e^{-an^2}$  とかくと、

$$Z_n e^{n\mu/T} \propto e^{-a(n - \frac{1}{2a}\mu/T)^2}$$

となる。従って、 $\mu/T$  を変化させても分布はガウス分布のまま、分布のピーク位置のみが変化する。このとき、高次ゆらぎは変化しない。これが、 $Z_n$  がガウス分布で近似できる高温の特徴である。一方、ハドロン相に対応する温度においては  $\mu$  の変化にともない分布の形状も変化する。 $\mu_B = 0$  の場合、分布は  $n = 0$  を中心として左右対称に分布する。 $\mu_B$  を増加させると、分布の裾が  $n$  の大きい側 (図の右側) に伸びる。 $\mu_B/T = 2.1$  でピークのない平らな構造が現れ、 $\mu_B/T = 2.7$  で分布の裾は左側に伸びる。この裾の左右は分布の歪度 (3.81b) 式に現れ、平らな構造は負の尖度 (3.81c) 式として現れる。高次のキュムラントを図 3.30 に示す。このように低温ではカノニカル分配関数がガウス分布からずれ、それが高次のキュムラントに影響してくる。

ここで、図 3.29 の各プロットにおいて、異なる  $\mu$  に対する分布が同じ  $Z_n$  のデータから得られている点は注目に値する。例えば、 $T/T_c = 0.93$  の場合の  $\mu_B/T = 0.6 \sim 2.7$  の 5 つのプロットで用いている  $Z_{N_B}$  は同じであり、違うのはそれにかかるフガシティ因子  $\exp(n_B \mu_B/T)$  のみである。本章冒頭で述べた、 $\mu = 0$  でゲージ配位を生成し、ゆらぎで含まれる高密度状態を再構成する、というのはこの事を意味している。

カノニカル法は統計力学の一般的な関係なので原理的には実験データにも応用可能である。系に含まれる粒子数を測定し、 $n$  粒子状態が観測される確率をもとめれば、それは規格化された  $Z_n$  となる。アボガドロ数ほどの粒子を含むような理想的な統計力学系に対してはこのような計算は現実には不可能であるが、相対

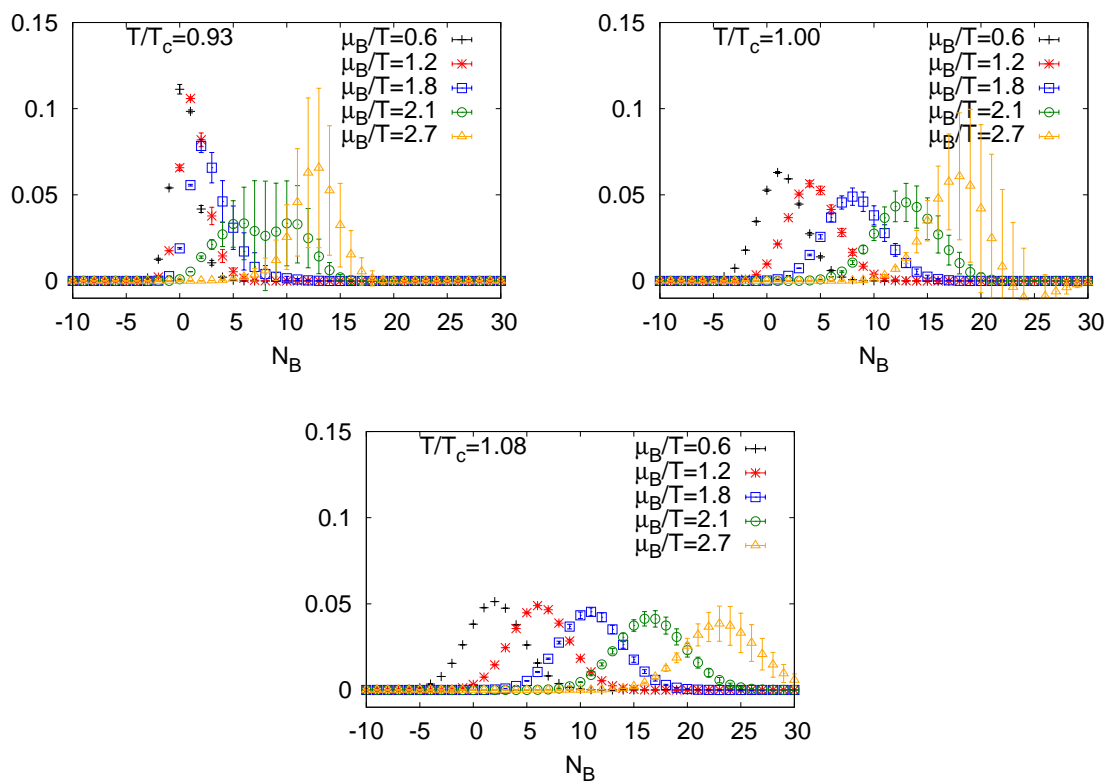


Figure 3.29:  $T/T_c = 0.93, 1.0, 1.08$  における  $\frac{Z_n e^{n\mu/T}}{\sum Z_n e^{n\mu/T}}$  のバリオン数依存性と化学ポテンシャルによる変化.

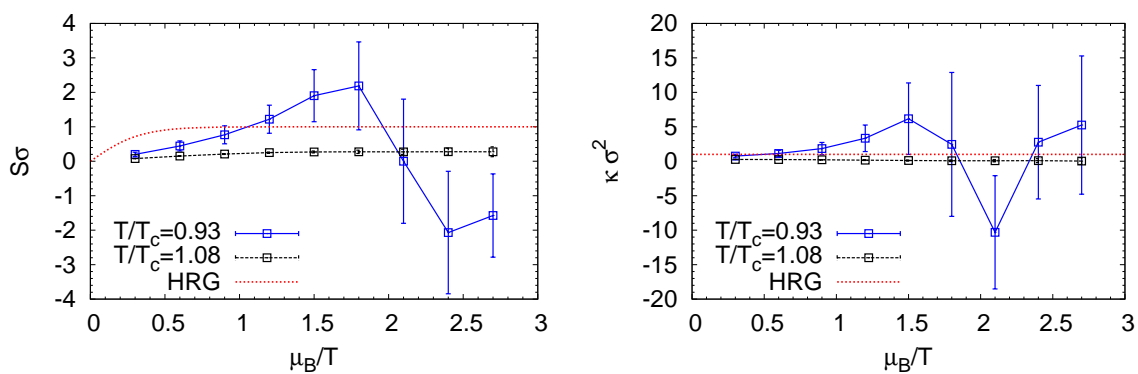


Figure 3.30: 高次モーメントの化学ポテンシャル依存性.

論的重イオン衝突実験で発生する粒子数は 1000 個のオーダーであり, 実際に測定器に入った粒子がカウントされ, 粒子数分布が得られている [83]. 文献 [70] では, 実際に RHIC 実験データへのカノニカル法の応用が行われている. 重イオン衝突実験で得られる粒子数分布を  $\{Z_n e^{n\mu/T}\}$  とすると, CP 不変性を課すことで,  $\mu/T$  および  $Z_n$  を同時に決定することができ, このようにして求めた  $\mu/T$  の値が化学凍結における値と一致することが報告されている [70]. また, ハドロン相における  $Z_{N_B}$  から核子質量を除けば, 原子核の束縛エネルギー  $\Delta E(N_B)$

$$\Delta E(N_B) = -T \ln Z_{N_B} - N_B m_N(\mu_B), (T \rightarrow 0)$$

を求めることもできる. このような応用は大きい格子サイズでの計算が必要なためまだ難しい課題だが, 計算資源の問題がクリアできれば Bethe-Weizsäcker 公式の格子 QCD での導出なども将来的には期待できる.

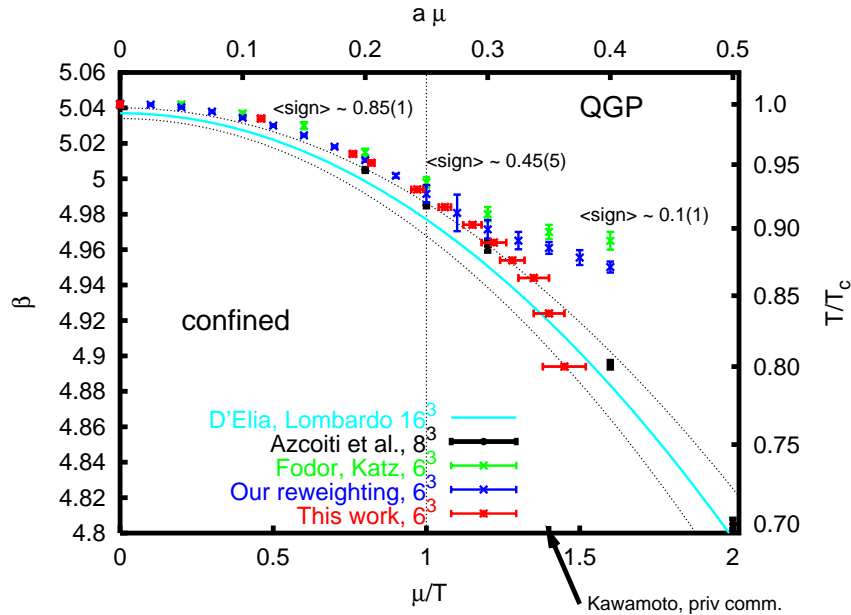


Figure 3.31: 相境界線に対する結果の方法比較.  $\mu/T$  が小さい領域では複数の方法がコンシステントな結果を与える.  $\mu/T$  が大きくなると方法間の際が発生する. [11] より引用.

ここまでで紹介した reweighting 法, Taylor 展開, 虚数化学ポテンシャルからの解析接続, カノニカル法は  $T_c$  近傍かつ低密度領域ではある程度一貫した結果を与えており [11, 84](図 3.31), その温度密度領域では妥当と考えてよさそうである. 格子間隔, 格子体積, クォーク質量などのパラメータをより現実的にしていくことや, 精度を向上させるなどの課題が残っているものの, 今後, 時間の経過とともに少しずつ進展していくと思われる.

### 3.5 ハドロン相高密度領域への課題

前章までで重点サンプリングにもとづく回避法が高温低密度で有効であることを見たが、これに対してそれらの方法が通用せず、研究が難しいのがハドロン相有限密度領域である。低温領域の難しさの背後には、ゼロ温度でクォーク化学ポテンシャルが  $m_\pi/2$  ( $m_\pi$  は中間子質量) となったときに激しい位相揺らぎが発生する問題がある。この問題は Gibbs が propagator matrix の導出の際に発見し、その後 Glasgow グループによる格子 QCD シミュレーションで報告され、early onset 問題と呼ばれる。この問題のために、 $\mu < m_\pi/2$  の領域で得られたゲージ配位では  $\mu = m_\pi/2$  を超えることが困難であることがわかっている。従って、ここまで説明してきた方法やその派生法では、原子核や中性子星に相当するようなハドロン相有限密度領域を調べることができない。これは 3 章で説明した符号問題回避法の限界を提示し、高密度領域を調べるためには新たな方法の開発が必要であることを示唆している。この章では、ハドロン相有限密度領域研究で発生する問題を詳しく説明する。

#### 3.5.1 Early onset 問題とは

体積  $V$  の真空 ( $T = 0, \mu = 0$ ) を考える。ここに質量  $m$  を持つフェルミオンを一個追加すると系の自由エネルギーは  $m$  上昇する。化学ポテンシャルは系に粒子を一つ追加するために必要な自由エネルギーなので、 $\mu = m$  である。 $T = 0$  では、 $\mu$  が  $m$  より小さい場合、系に粒子を追加することはできないから、粒子数の変化は起こらない。すなわち、

$$\langle n \rangle = 0 \text{ for } \mu < m, T = 0.$$

ハドロン相でバリオン数  $\langle n_B \rangle$  を上昇させるために必要な最小のエネルギーは基底状態である核子質量  $m_N$  に等しいからバリオン化学ポテンシャル  $\mu_B$  に対して

$$\langle n_B \rangle = 0 \text{ for } \mu_B < m_N \text{ at } T = 0,$$

あるいは、クォーク化学ポテンシャルに対して

$$\langle n_q \rangle = 0 \text{ for } \mu < \frac{1}{3}m_N \text{ at } T = 0,$$

となる。つまり、ゼロ温度で  $\mu$  を増加させたとき、クォーク数の増加は  $\mu = m_N/3$  から始まる。これが現象論的に自然な予想である。

1980 年代中頃の有限密度格子 QCD 研究の最初期に、クエンチ近似を用いた計算が行われ、クォーク密度上昇が  $\mu = m_\pi/2$  から始まるという予想と異なる結果が報告された [85]。これは経験的な理解と異なっており、計算方法のどこかに間違いがあるはずである。Glasgow グループはこの問題を、クォーク数上昇の始まる  $\mu$  のしきい値が現象論的予想よりも小さいことから、early onset 問題と呼び、80 年代から 90 年代にかけて問題解決に取り組んだ。格子 QCD 計算の弱点の 1 つは計算結果に問題があったとき、原因を特定することの困難にある。どのような方法にも同様の困難はあるが、格子 QCD の場合、計算資源の観点から様々な数値計算上の工夫が行われており、問題があった場合、その 1 つ 1 つを確認していく必要がある。有限密度格子 QCD

で発生しうるバイアスには、離散化誤差、有限格子サイズ効果、重いクォーク質量などのパラメータの現実的な値からのずれや、統計数の不足や数値誤差などのシミュレーションに伴う一般的な誤差、さらに、符号問題回避法が正しく機能していない可能性がある。Glasgow グループは  $\mu = m_\pi/2$  で発生するクォーク数上昇を回避するために様々な試みを行ったが、問題は解決せず、原因の特定にも至らなかった。Glasgow グループの研究は文献 [65] にまとめられている。

Early onset 問題は当初は単なる計算ミス程度と認識されていたようだが、実はその発生に格子 QCD のフェルミオン作用の性質が関係していることが、1980 年代から最近までのいくつかの研究で明らかになってきた [48, 86–90]。Gibbs は、Glasgow グループがクエンチ計算によって early onset 問題に行き当たったのとはほぼ同時期の 1986 年に、propagator matrix のスペクトルとハドロン質量の関係を考察することで、クォーク数の増加が  $\mu = m_\pi/2$  で発生することを指摘している [48]。1990 年代後半になると、Stephanov がカイラルランダム行列理論にレプリカ法を用いて、クエンチ近似において  $\mu > 0$  でカイラル対称性が回復することを指摘している (カイラル極限において  $m_\pi = 0$ ) [86]。2003 年には、Cohen はラグランジアンに化学ポテンシャルを導入したにもかかわらずその影響が現れない振舞をシャーロックホームズのエピソードになぞらえて “Silver Blaze” と呼び、finite isospin QCD (アイソスピン化学ポテンシャルを持つ QCD) における Silver Blaze 現象と QCD のハミルトニアンとの関係性を調べた [87]。その中で、QCD における Silver Blaze 現象 (baryon Silver Blaze) が起こるために位相の相殺が必要となることを予想している。Stephanov や Cohen の研究は理論的なものであり、early onset 問題の原因が離散化誤差や有限体積効果のような格子セットアップに伴うものや、数値計算に用いる方法の不備などではないことがわかる。格子 QCD にバリオン化学ポテンシャルを導入した場合に対しては、筆者と共同研究者が格子 QCD のフェルミオン行列式のゼロ温度極限を導出し、フェルミオン行列式が  $\mu < m_\pi/2$  において化学ポテンシャル依存性を持たないことを示した [88–90]。上記の研究はいずれも、フェルミオン行列式の位相ゆらぎが early onset 問題と関係することを示唆している。近年、複素ランジュバン法やレフシェツシンプル法などの新しい経路積分法が進展しているが、それらの方法でも  $\mu = m_\pi/2$  において、複素ランジュバン法では誤収束の問題が、レフシェツシンプル法では複数シンプルの重ね合わせの問題が発生することが指摘されている [91]。これらの原因も同じフェルミオン行列式にある。次節以降で、early onset 問題を引き起こす低温有限密度領域でのフェルミオン行列式の性質を説明し、そしてこの章で説明してきた方法の応用限界について述べる。

### 3.5.2 フェルミオン行列式のゼロ温度極限

#### 縮約行列の性質

Early onset 問題を見るために、縮約行列  $Q$  を用いてフェルミオン行列式のゼロ温度極限を導出する。

$Q$  の固有値を  $\lambda = |\lambda|e^{i\theta}$ 、複素平面上的固有値密度を  $\rho(|\lambda|, \theta)$  と書く。動径方向の密度  $\rho(|\lambda|)$  は

$$\rho(|\lambda|) = \int d\theta \rho(|\lambda|, \theta)$$

で与えられる。図 3.32 は  $\rho(|\lambda|)$  を示している。一方、図 3.33 は固有値の大きさ  $|\lambda_n|$  を大きさ順に図示したも

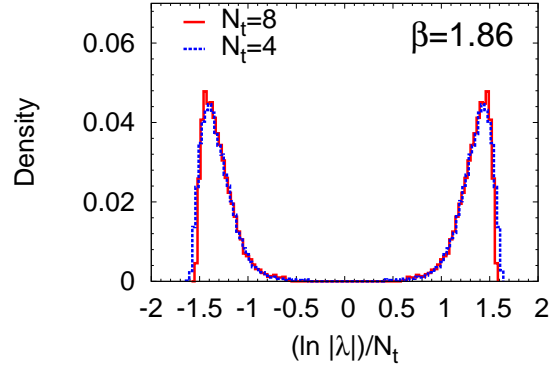


Figure 3.32: 横軸に  $\ln |\lambda|/N_t$  をとったときの  $Q$  の固有値密度.  $\lambda$  の角度成分は積分している. 2つの結果は,  $N_t = 4$  (青),  $N_t = 8$  (赤) に対応する.  $N_t$  以外のパラメータは同一に揃えてある.  $m_\pi/m_\rho = 0.8$  の場合の結果で, ギャップの広さは  $m_\pi$  に依存する. データは文献 [88] より抜粋.

のである. 図を用いて, 縮約行列  $Q$  の3つの重要な性質;

- (i) 対称性  $\lambda$  が  $Q$  の固有値のとき,  $1/\lambda^*$  もまた  $Q$  の固有値となる.
- (ii) ギャップ  $Q$  の固有値分布は  $|\lambda| \sim 1$  の近傍でギャップを持つ, ( $\rho(|\lambda| \sim 1) = 0$ ).
- (iii)  $N_t$  スケーリング  $|\lambda|^{1/N_t}$  は  $N_t$  に依存しない. つまり,  $\lambda$  の大きさは  $N_t$  のスケーリング則に従う.

を説明する.

まず, 性質 (i) はフェルミオン行列の  $\gamma_5$  エルミート性に伴う厳密な性質であり, 簡単に証明できる<sup>18</sup>. 図 3.32 は  $\ln |\lambda| = 0$ , (*i.e.*,  $|\lambda| = 1$ ) に関して対称に2つのピークを持つのは, この対称性の結果である. この対称性は複素  $\lambda$  平面上において単位円の内部と外部の対称性となっている. 単位円内部の固有値を  $\mathcal{S} = \{\lambda_n | |\lambda_n| < 1, n = 1, 2, \dots, N_{\text{red}}/2\}$ , 外部の固有値を  $\mathcal{L} = \{\lambda_n | |\lambda_n| > 1, n = 1, 2, \dots, N_{\text{red}}/2\}$  と書くと,  $\mathcal{S}$  と  $\mathcal{L}$  の固有値が対を組むのである.

性質 (ii) は, 図 3.32 で  $-0.5 \lesssim |\lambda_n|/N_t \lesssim 0.5$  の領域で  $\rho = 0$  となっている領域のことを意味している. ギャップのサイズを単位円に最も近い固有値  $\max_{\lambda_n \in \mathcal{S}} |\lambda_n|$  で特徴付けると, ギャップサイズは  $\pi$  中間子質量と関係する. これは後に説明する.

性質 (iii) は, 図 3.32 で固有値を  $\ln |\lambda|/N_t$  とスケールしたとき,  $N_t = 4$  と  $N_t = 8$  の固有値分布が一致することから  $\rho(|\lambda|^{1/N_t})$  が  $N_t$  に依存しないことがわかる. 固有値スペクトル図 3.33 はこれをより直接的に表している. このスケーリングを用いると,  $\lambda_n \in \mathcal{S}$  は  $N_t$  に依存しない量  $\epsilon_n$  を用いて  $\lambda_n = \exp(-\epsilon_n a N_t + i\theta_n(N_t))$  と書くことができ, その対となる固有値は  $\lambda_n \in \mathcal{L}$  は  $\lambda_n = \exp(\epsilon_n a N_t + i\theta_n(N_t))$  と書くことができる. さらに,  $T = (aN_t)^{-1}$  を用いると,  $\lambda_n = \exp(\pm \epsilon_n/T + i\theta_n(N_t))$  となり,  $N_t$  に関するスケーリング則は温度に関

<sup>18</sup>(2.31)式から,  $\det \Delta(\mu) = 0$  であれば,  $\det \Delta^\dagger(-\mu) = 0$  も成り立つ. 縮約公式から  $\det(Q + e^{-\mu/T}) = 0$  なら,  $\det(Q^\dagger + e^{\mu^*/T}) = 0$  も成り立つ. したがって,  $Q$  がある固有値  $\lambda$  を持てば,  $1/\lambda^*$  もまた  $Q$  の固有値となる. 異なる証明も与えられている [52, 92].

するスケーリング則と解釈できる.<sup>19</sup>

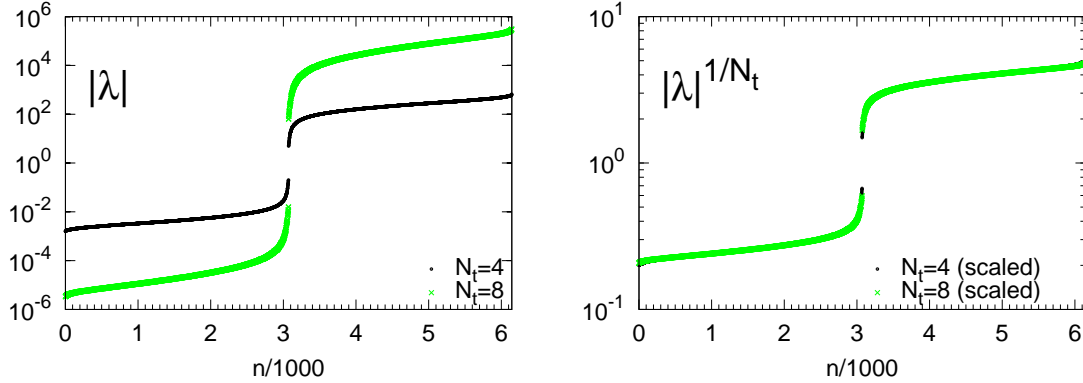


Figure 3.33:  $Q$  のスペクトル.  $N_{\text{red}} = 8^3 \times 12 = 6144$  個の固有値の大きさが昇順にプロットされている. 左の図は  $|\lambda_n|$  を表し、一方、右図は  $|\lambda_n|^{1/N_t}$  を表す.

上記の3つの性質は、3.4.2章で説明した縮約行列  $Q$  の性質から自然に理解できる.  $Q$  はクォークの時間発展を記述しており、 $Q = e^{-H/T}$  の関係が成り立つ. まず、 $\lambda_n = e^{\pm\epsilon_n/T + i\theta_n(N_t)}$  と  $Q = e^{-H/T}$  を比べると、 $\pm\epsilon_n + i\theta_n(N_t)T$  はハミルトニアン固有値に対応することがわかる. ただし、 $Q$  はゲージ配位の関数であり、 $H, \lambda$  もゲージ配位に依存する. すなわち、 $\lambda_n$  はあるゲージ配位に対して定義されるハミルトニアンに対する固有値である.  $S$  に属する固有値と  $\mathcal{L}$  に属する固有値は、実部が  $\pm\epsilon_n$  であり、大きさが等しく符号が反転している.  $\lambda_n$  をハミルトニアンの固有値と解釈すると、これは正エネルギー状態と負エネルギー状態の対称性、すなわちクォークと反クォークの対称性と理解できる. ギャップの存在は、エネルギー固有値  $\epsilon_n$  に最小の値が存在することを意味している. また、 $Q = e^{-H/T}$  の関係は  $N_t$  スケーリング則そのものである.

#### ゼロ温度におけるフェルミオン行列式の $\mu$ 独立性

縮約行列の固有値の性質を利用して、フェルミオン行列式のゼロ温度極限  $N_t \rightarrow \infty$  を導出する<sup>20</sup>.

<sup>19</sup> 本来はさらに大きい  $N_t$  でも検証されるべきであるが、数値精度の限界があり難しい. 縮約行列  $Q$  は転送行列の  $N_t$  乗となっており、転送行列の最大固有値を  $a$ 、最小固有値を  $b$  と書くと、縮約行列の固有値解法の条件数は

$$\frac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|} = \left(\frac{a}{b}\right)^{N_t}$$

で与えられる.  $N_t$  が増加すると条件数は悪化し、固有値計算が難しくなる. また、 $Q$  は密行列であるため、CG法などの反復解法の収束も悪い. このような行列の扱いは数値的にも難しく、より大きい  $N_t$  までスケーリング則を非摂動的に検証することは数値的に挑戦的な課題である. これまでのところ、 $Q$  の固有値解法として近似を用いた改良法が [92]、留数定理の応用が [93] で提案されている.

<sup>20</sup> 以下では時間が離散化された場合を扱う. 連続時間の場合は [53, 94]、連続理論の場合は [87] で議論されている.

まず、フェルミオン行列式を縮約行列の固有値を用いて表すと

$$\begin{aligned}\det \Delta(\mu) &= C_0 \xi^{-N_{\text{red}}/2} \det(Q + \xi), \\ &= C_0 \xi^{-N_{\text{red}}/2} \prod_{i=1}^{N_{\text{red}}} (\lambda_n + \xi), \\ &= C_0 \xi^{-N_{\text{red}}/2} \prod_{\lambda_n \in \mathcal{S}} (\lambda_n + \xi) \prod_{\lambda_n \in \mathcal{L}} (\lambda_n + \xi).\end{aligned}$$

ここで、固有値の対称性を利用して、 $\mathcal{L}$  に属する固有値を  $\mathcal{S}$  に属する固有値で表す。  $\lambda_n \rightarrow 1/\lambda_n^*$  と置き換えて

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \xi^{-N_{\text{red}}/2} \prod_{\lambda_n \in \mathcal{S}} (\lambda_n + \xi)(1/\lambda_n^* + \xi).$$

$n$  についての乗積は単位円内部の固有値  $\lambda_n \in \mathcal{S}$  について取ることに注意。式を変形すると、

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \prod_{n=1}^{N_{\text{red}}/2} (\lambda_n^*)^{-1} (1 + \lambda_n \xi^{-1})(1 + \lambda_n^* \xi). \quad (3.82)$$

$N_t$  スケール則  $\lambda_n = \exp(-\epsilon_n/T + i\theta_n)$  および  $\xi = e^{-\mu/T}$  を代入すると、

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \prod_{n=1}^{N_{\text{red}}/2} (\lambda_n^*)^{-1} (1 + e^{-(\epsilon_n - \mu)/T + i\theta_n})(1 + e^{-(\epsilon_n + \mu)/T - i\theta_n}), \quad (3.83)$$

を得る。

次に、格子間隔  $a$ , 空間格子点の数  $N_s^3$  を固定し、ゼロ温度極限  $N_t \rightarrow \infty$  をとる<sup>21</sup>。また、以下では  $\mu > 0$  を仮定する。(3.83) 式は  $\mathcal{S}$  に属する固有値のみで表されているため、 $\epsilon_n (= -T \ln |\lambda_n|)$  は全ての  $n$  に対して正であり、 $N_t \rightarrow \infty$  の極限で  $e^{-(\epsilon_n + \mu)/T} \rightarrow 0$  を得る；

$$\lim_{N_t \rightarrow \infty} \det \Delta(\mu) \rightarrow C_0 \prod_{n=1}^{N_{\text{red}}/2} (\lambda_n^*)^{-1} (1 + e^{-(\epsilon_n - \mu)/T + i\theta_n}).$$

$1 + e^{-(\epsilon_n - \mu)/T}$  の  $T \rightarrow 0$  極限は指数部の正負に依存しており、ある  $\mu$  の値が与えられたとき、 $\epsilon_n$  が  $\mu$  より大きければ  $(1 + e^{-(\epsilon_n - \mu)/T + i\theta_n})$  は 1 に収束、小さければ  $e^{-(\epsilon_n - \mu)/T + i\theta_n}$  に収束する。したがって、 $T \rightarrow 0$  におけるフェルミオン行列式の  $\mu$  依存性は、 $\mu$  より小さい  $\epsilon_n$  を持つ項から生じる。 $\mu$  が  $\epsilon_n$  の最小値  $\epsilon_{\min} = -T \max_{\lambda_n \in \mathcal{S}} |\lambda_n|$  より小さい場合、すべての  $n$  に対して  $1 + e^{-(\epsilon_n - \mu)/T}$  は 1 に収束する。したがって、

$$\lim_{N_t \rightarrow \infty} \det \Delta(\mu) \rightarrow C_0 \prod_{n=1}^{N_{\text{red}}/2} (\lambda_n^*)^{-1}, (\mu < \epsilon_{\min}). \quad (3.84)$$

(3.84) 式には  $\mu$  が含まれていない。 $T = 0$  で  $\mu < \epsilon_{\min}$  の場合、フェルミオン行列式は化学ポテンシャル依存性を持たない。

<sup>21</sup>以下の議論は極限操作の順序に依存する可能性がある。格子体積依存性や連続極限に必要な、縮約行列の固有値の  $a \rightarrow 0, V \rightarrow 0$  依存性が不明なため、現在はこの検証は難しい



この  $\mu$  依存性が消失する性質は、フェルミ分布の性質と同じものである。このことを陽に示すために、クォーク数演算子も考えてみる、

$$\hat{n} = \frac{T}{V_s} (\det \Delta(\mu))^{-1} \frac{\partial \det \Delta(\mu)}{\partial \mu}, (V_s = N_s^3). \quad (3.85)$$

$\lambda_n = e^{-\epsilon_n/T+i\theta_n}$  と  $\xi = e^{-\mu/T}$  を代入すると、

$$\hat{n} = \frac{1}{V_s} \sum_{n=1}^{N_{\text{red}}/2} \left( \frac{1}{1 + e^{(\epsilon_n - \mu)/T - i\theta_n}} - \frac{1}{1 + e^{(\epsilon_n + \mu)/T + i\theta_n}} \right). \quad (3.86)$$

これはフェルミ分布と同じ構造をしている。2項目の係数が負となっていることはこれが反クォーク状態に対応しているためである。

ゼロ温度極限をとると、一項目は  $\mu < \epsilon_n$  の場合はゼロとなり、粒子数に寄与せず、 $\mu > \epsilon_n$  の場合、非ゼロとなり粒子数に寄与する。これは、化学ポテンシャルより小さいエネルギー準位  $\epsilon_n$  がクォークに占有されたと解釈できる。 $\epsilon_{\min}$  は最小のエネルギーであり、 $\mu$  がそれより小さいと、いかなる準位も占有できない。

ここまでの議論は、演算子に対するものであることに注意して欲しい。 $Q$  はゲージ配位の関数なので、 $\lambda_n$  もゲージ配位に依存する。上で説明した  $Q$  の3つの性質のうち、固有値の対称性は  $\gamma_5$  エルミート性、 $N_t$  スケーリングは  $Q$  が時間方向の伝搬を表すこと、に起因しており、どちらもゲージ配位によらずに成り立つ。一方、上の議論では  $\epsilon_{\min}$  の値に言及しなかったが、この値はゲージ配位に依存しており、したがって  $\mu$  依存性が消失するしきい値はゲージ配位によって変わりうる。

では、 $\epsilon_{\min}$  の値は具体的にはどの程度だろうか？ 現象論的には  $\epsilon_{\min} = m_N/3$  が期待されるが、これが  $\mu = m_\pi/2$  となるのである。本章の冒頭で説明したように、最初の指摘は Gibbs であり、propagator matrix の公式の導出の際に、

$$am_\pi = -\frac{1}{N_t} \max_{\lambda_n \in S} \ln |\lambda_n|^2, \quad (3.87)$$

となることを予言した [48]。この関係式は、Fodor, Szabó and Tóth によって数値計算に応用されている [92]。一方、フェルミオン行列式のゼロ温度極限を直接取ったのが筆者らの研究である。

### しきい値とハドロン質量の関係

$\epsilon_{\min}$  と  $m_\pi$  の関係は、クォークの時間方向の伝搬がパイ中間子の伝搬関数とクォーク数演算子の両方に関係することから生じる。

$Q$  はクォークが時刻0から  $N_t$  まで伝搬するダイアグラムを表しているので、 $q(t)$  を時刻  $t$  におけるクォーク場として、 $Q \propto q(N_t)\Gamma q^\dagger(0)$  と表せる。 $\Gamma$  はリンク変数の関数である。 $Q^\dagger$  は逆方向の伝搬を記述しており、 $Q^\dagger \propto q(0)\Gamma q^\dagger(N_t)$  である。したがって、 $QQ^\dagger$  は中間子の伝搬関数を表すことがわかる。時間方向の格子長  $N_t$  を大きくとると最低エネルギー状態、すなわち、 $\pi$  中間子の寄与が支配的になり、

$$\langle \text{tr} QQ^\dagger \rangle \stackrel{N_t \rightarrow \infty}{\simeq} C e^{-m_\pi a N_t}, \quad (3.88)$$

となる。(3.88)式では指数的に減衰するモードのみを考慮したので、 $Q$ の固有値として $\lambda_n \in \mathcal{S}$ のみ考慮すればよい。あるいは、(3.88)式に指数的に増加する項を加えて、 $\lambda_n \in \mathcal{L}$ を考慮してもよい。指数的減衰に寄与する項のみ考えると、 $\lambda_n \in \mathcal{S}$ のみ考慮すればよいから、

$$\langle \text{tr} Q Q^\dagger \rangle = \left\langle \sum_{\lambda_n \in \mathcal{S}} |\lambda_n|^2 \right\rangle \quad (3.89)$$

が得られる。さらに、 $N_t$ スケール則 $\lambda_n = e^{-\epsilon_n a N_t + i\theta_n}$ を代入すると、

$$\langle \text{tr} Q Q^\dagger \rangle = \left\langle \sum_{\lambda_n \in \mathcal{S}} e^{-2\epsilon_n a N_t} \right\rangle. \quad (3.90)$$

ここで、 $N_t \rightarrow \infty$ を取ると、 $\epsilon_{\min}$ に対応する固有値が支配的になるので、

$$\lim_{N_t \rightarrow \infty} \langle \text{tr} Q Q^\dagger \rangle = \langle e^{-2\epsilon_{\min} a N_t} \rangle. \quad (3.91)$$

したがって、 $N_t \rightarrow \infty$ において

$$\langle e^{-2\epsilon_{\min} a N_t} \rangle = C e^{-m_\pi a N_t}, \quad (3.92)$$

の関係が成り立つことがわかる。 $\epsilon_{\min}$ はゲージ配位によって異なる値を取るが、ゼロ温度極限ではその中で最小値を与える寄与が残り、したがって、

$$\epsilon_{\min} = \frac{1}{2} m_\pi \quad (3.93)$$

が得られる。(3.84)と合わせると、 $\mu$ が $m_\pi/2$ より小さい場合、クォーク数演算子は任意のゲージ配位に対して0となる、ということが示された。

同様の計算を核子に適用すると、 $\epsilon_{\min}$ と核子質量の関係を導くことができそうだが、これは成り立たない。バリオンはクォーク3つの伝搬であるので、演算子としては $Q^3$ に対応し、

$$\langle \text{tr} Q^3 \rangle = C e^{-m a N_t} \quad (3.94)$$

である。右辺において、 $N_t \rightarrow \infty$ の極限をとると基底状態の核子が残る、すなわち $m \rightarrow m_N$ 。固有値を用いて左辺を書き直すと、

$$\langle \text{tr} Q^3 \rangle = \left\langle \sum_{\lambda_n \in \mathcal{S}} e^{-3\epsilon_n a N_t + 3i\theta_n N_t} \right\rangle. \quad (3.95)$$

ゼロ温度極限をとって絶対値の大きいものを残すと、 $\langle \text{tr} Q^3 \rangle = \langle e^{3(-\epsilon_{\min}/T + i\theta_n)} \rangle = \langle e^{-3(\epsilon_{\min}/T)} \cos 3\theta_n \rangle$ を得る。中間子の場合 $Q$ と $Q^\dagger$ で位相が相殺したが、バリオンの場合固有値の位相が相殺せず残るため、 $M_N$ と $3\epsilon_{\min}$ は一致しない。厳密に言うと、位相ゆらぎがあるため、固有値の和の中から $\lambda$ の絶対値の大きいものを残す計算自体が正当化されない。いずれにせよ、 $\epsilon_{\min} = M_N/3$ の関係式は成り立たない。

### 3.5.3 $\mu > m_\pi/2$ での予想と重点サンプリングに基づく方法の限界

ここまでの議論から、 $T = 0$  で  $\mu < m_\pi/2$  であれば、演算子レベルにおいて、フェルミオン行列式は化学ポテンシャル依存性を持たず、クォーク数密度も 0 となる。  $\mu$  が  $m_\pi/2$  を越えると、クォーク数は演算子レベルではゼロでない値を持つことになる。しかし、物理的には  $\mu$  が  $M_N/3$  を越えるまではクォーク数上昇は起こらないはずである。

これらの 2 つの事柄を整合させるための鍵となるのが、 $\mu \neq 0$  においてクォーク数演算子が複素数であるという点である。各ゲージ配位に対してゼロでない値を持ったとしても、位相ゆらぎによる相殺が起これば、期待値をゼロとすることが可能である。つまり、クォーク数の期待値  $\langle \hat{n} \rangle$  を 0 にする機構は  $\mu$  が  $m_\pi/2$  より小さい場合と大きい場合で異なる；

- $\mu < m_\pi/2$ : 個々のゲージ配位に対して、 $\hat{n} = 0$
- $m_\pi/2 < \mu < m_N/3$ : 個々のゲージ配位に対しては  $\hat{n} \neq 0$  であるが、期待値を取ると  $\langle \hat{n} \rangle = 0$

もちろん、後者は予想にすぎず、これがどのように実現するのかわかっていない。 Ipsen と Splittorff は相殺機構が起きる簡単な模型を考案しているが [95], QCD において  $\mu = m_\pi/2$  において位相がどのように分布し、クォーク数の期待値が 0 となるかは解明されていない。

$\mu = m_\pi/2$  で激しい位相ゆらぎが発生するということが、reweighting 法がこの点で破綻することとほぼ等価である。Reweighting において配位生成に用いる実正の重みを  $w$  とすると、reweighting 因子は

$$R = \frac{(\det \Delta(\mu))^{N_f}}{w}$$

で与えられる。このとき、ハドロン相  $\mu = m_\pi/2$  で分子の位相が激しくゆらぐが、分母  $w$  は、どのような重みを用いたとしても、配位生成に用いるためには必ず実正となる。したがって、reweighting 法では、 $\mu = m_\pi/2$  において

$$\langle R \rangle = 0$$

となり、reweighting は破綻してしまう。Taylor 展開や虚数化学ポテンシャルからの解析接続に関しては、 $\mu = m_\pi/2$  には物理的な非解析性はなく、熱力学的な解析性は保証されているので、 $\mu = m_\pi/2$  を超えることができる可能性がある。ただし、低温ではシグナルノイズ比が低下して精度的な困難があり、実際には数値計算的にかなり難しい課題である。有限密度格子 QCD 研究の初期に Glasgow グループによって発見された early onset 問題の背景にはこのような問題があり、したがって、reweighting 法の枠内では、どのような改良を施しても解決できなかったと考えられる。

$T = 0$  の場合を考えたが、early onset 問題はハドロン相 ( $0 < T < T_c$ ) の有限密度領域でも発生する可能性が高い。ハドロン相で  $T \neq 0$  の場合、上記の議論は、化学ポテンシャル依存性が階段関数型からなめらかな変化に変わる点を除けば、ほぼ同じように適用できる。フェルミオン行列式の性質が変わる点はパイオン凝縮の発生する領域と一致し、図 3.34 の境界線がこの章で説明してきた方法の応用限界となる。

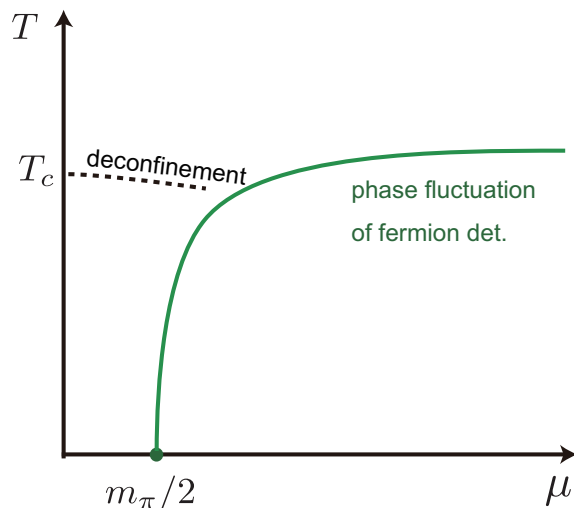


Figure 3.34: QCD 相図上で early onset 問題の発生する領域. この領域は, 横軸をアイソスピン化学ポテンシャルにとったときのパイオン凝縮相境界線と一致することから, このような相図を描くことが出来る. 図の曲線で激しい位相揺らぎが発生し, 曲線上で  $\langle R \rangle_0 = 0$  となる. このため曲線の左の領域で生成された配位を用いて曲線の右側の領域を調べる事は難しい.

ここまではフェルミオン行列を次元縮約した縮約行列を用いて議論したが, フェルミオン行列そのものを用いた解析についても言及しておく.  $\mu = 0$  において, フェルミオン行列  $\Delta = D + m$  は  $D$  の反エルミート性から固有値  $m \pm i\lambda$ , ( $\lambda \in \mathbb{R}$ ) を持つ.

これは複素平面において実部  $m$ , 虚部  $\pm\lambda$  の直線上に分布する. 化学ポテンシャルはディラック演算子の反エルミート性を破るため, 固有値  $\lambda$  は複素数となり,  $m \pm i\lambda$  も複素平面上に 2 次元的に分布する.  $\mu$  が増加すると, 分布は広がり, やがて,  $m \pm \lambda = 0$  となるような固有値が出現する. このような固有値の発生する  $\mu$  が,  $\mu = m_\pi/2$  となる [85, 96]. ハドロン相では Banks-Casher 定理よりディラック演算子のゼロ固有値密度  $\rho(0)$  について  $\rho(0) \neq 0$  が成り立つために, ハドロン相であれば  $T = 0$  でなくても同じ問題が発生する. QGP 相では, カイラル対称性が回復するためディラックスペクトルにギャップが開き,  $\Delta$  のゼロ固有値の出現が回避される. ちなみに, 格子 QCD のゲージ配位生成では逆行列  $\Delta^{-1}$  を計算する必要があり, 通常は反復解法である共役勾配法 (CG 法) が用いられる. CG 法の反復回数は行列の最大固有値と最小固有値の比に依存しており, ゼロ固有値が出現すると CG 法は破綻する. 位相クエンチシミュレーションを行う場合, 図 3.34 の実線に近づくほど計算時間が大きくなることに注意が必要である.

Early onset 問題の起こる領域の中には標準核密度や中性子星に相当するような領域が含まれている. また, Hidaka と Yamamoto は非連結ダイアグラムを無視する仮定のもと QCD 不等式を導き, QCD 臨界点がこの領域の内部に存在する可能性を指摘している [97].

符号問題回避法の議論に戻ると, すでに述べたように, ハドロン相でクォーク化学ポテンシャルが  $\pi$  中間子質量の半分より大きくなると, 激しい位相揺らぎが発生し,  $\mu = 0$  で生成したゲージ配位を用いた符号問題回避法は (ほぼ) 確実に破綻する. ゲージ配位生成法として, クエンチ近似や有限アイソスピン化学ポテン

シャル, 位相クエンチ, 虚数化学ポテンシャルなど他にも方法があるが, いずれの方法を用いたとしてもフェルミオン行列式やクォーク数演算子の位相揺らぎが発生する領域ではおそらく破綻してしまう。もちろん, reweighting やテイラー展開などは原理的には正しい方法であるので, 厳密に言うと,  $\mu = m_\pi/2$  を越えるために必要な計算量が膨大となって計算が破綻する, というのが正確であろう。2.2.3 章で符号問題とは計算量の問題であると述べたが, まさに QCD ではこの問題が発生する。

本稿の冒頭において QCD 相図に関する科学的疑問を述べたが, 重点サンプリングの枠内で符号問題を回避する試みではこれらの問題を解決する事は極めて難しい, というのが本章での議論の結論である。したがって, バリオン物質に関する未解決課題を解決するためには, 新しい符号問題解法が必要とされる。

## 参考文献

- [1] A. Ferrenberg and R. Swendsen, *New Monte Carlo Technique for Studying Phase Transitions*, Phys.Rev.Lett. **61** (1988) 2635–2638.
- [2] K. Nagata and A. Nakamura, *EoS of finite density QCD with Wilson fermions by Multi-Parameter Reweighting and Taylor expansion*, [arXiv:1201.2765](https://arxiv.org/abs/1201.2765).
- [3] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Optimized Monte Carlo analysis*, Phys.Rev.Lett. **63** (1989) 1195–1198.
- [4] Z. Fodor and S. Katz, *A New method to study lattice QCD at finite temperature and chemical potential*, Phys.Lett. **B534** (2002) 87–92, [[hep-lat/0104001](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0104001)].
- [5] S. Ejiri, *Remarks on the multiparameter reweighting method for the study of lattice QCD at nonzero temperature and density*, Phys.Rev. **D69** (2004) 094506, [[hep-lat/0401012](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0401012)].
- [6] F. Csikor, G. Egri, Z. Fodor, S. Katz, K. Szabo, et. al., *Equation of state at finite temperature and chemical potential, lattice QCD results*, JHEP **0405** (2004) 046, [[hep-lat/0401016](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0401016)].
- [7] Z. Fodor and S. Katz, *Lattice determination of the critical point of QCD at finite T and mu*, JHEP **0203** (2002) 014, [[hep-lat/0106002](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0106002)].
- [8] Z. Fodor and S. Katz, *Critical point of QCD at finite T and mu, lattice results for physical quark masses*, JHEP **0404** (2004) 050, [[hep-lat/0402006](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0402006)].
- [9] S. Ejiri, *Lee-Yang zero analysis for the study of QCD phase structure*, Phys.Rev. **D73** (2006) 054502, [[hep-lat/0506023](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0506023)].
- [10] K. Nagata, K. Kashiwa, A. Nakamura, and S. M. Nishigaki, *Lee-Yang zero distribution of high temperature QCD and the Roberge-Weiss phase transition*, Phys. Rev. **D91** (2015), no. 9 094507, [[arXiv:1410.0783](https://arxiv.org/abs/1410.0783)].

- [11] S. Kratochvila and P. de Forcrand, *The canonical approach to finite density QCD*, PoS LAT2005 (2006) 167, [[hep-lat/0509143](#)].
- [12] P. de Forcrand and S. Kratochvila, *Finite density QCD with a canonical approach*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **153** (2006) 62–67, [[hep-lat/0602024](#)].
- [13] **WHOT-QCD collaboration** Collaboration, Y. Nakagawa *et. al.*, *Histogram method in finite density QCD with phase quenched simulations*, [arXiv:1111.2116](#).
- [14] Kapsuta, Thermal Field Theory. Springer, 2006.
- [15] F. Karsch, K. Redlich, and A. Tawfik, *Hadron resonance mass spectrum and lattice QCD thermodynamics*, Eur. Phys. J. **C29** (2003) 549–556, [[hep-ph/0303108](#)].
- [16] F. Karsch, K. Redlich, and A. Tawfik, *Thermodynamics at nonzero baryon number density: A Comparison of lattice and hadron resonance gas model calculations*, Phys. Lett. **B571** (2003) 67–74, [[hep-ph/0306208](#)].
- [17] **WHOT-QCD Collaboration** Collaboration, S. Ejiri *et. al.*, *Equation of State and Heavy-Quark Free Energy at Finite Temperature and Density in Two Flavor Lattice QCD with Wilson Quark Action*, Phys.Rev. **D82** (2010) 014508, [[arXiv:0909.2121](#)].
- [18] C. Allton, M. Doring, S. Ejiri, S. Hands, O. Kaczmarek, *et. al.*, *Thermodynamics of two flavor QCD to sixth order in quark chemical potential*, Phys.Rev. **D71** (2005) 054508, [[hep-lat/0501030](#)].
- [19] C. Schmidt, *Lattice QCD at finite density*, PoS LAT2006 (2006) 021, [[hep-lat/0610116](#)].
- [20] B.-J. Schaefer, M. Wagner, and J. Wambach, *QCD thermodynamics with effective models*, PoS CPOD2009 (2009) 017, [[arXiv:0909.0289](#)].
- [21] A. Roberge and N. Weiss, *GAUGE THEORIES WITH IMAGINARY CHEMICAL POTENTIAL AND THE PHASES OF QCD*, Nucl. Phys. **B275** (1986) 734.
- [22] C. Allton, S. Ejiri, S. Hands, O. Kaczmarek, F. Karsch, *et. al.*, *The QCD thermal phase transition in the presence of a small chemical potential*, Phys.Rev. **D66** (2002) 074507, [[hep-lat/0204010](#)].
- [23] C. Allton, S. Ejiri, S. Hands, O. Kaczmarek, F. Karsch, *et. al.*, *The Equation of state for two flavor QCD at nonzero chemical potential*, Phys.Rev. **D68** (2003) 014507, [[hep-lat/0305007](#)].
- [24] K. Nagata and A. Nakamura, *Imaginary Chemical Potential Approach for the Pseudo-Critical Line in the QCD Phase Diagram with Clover-Improved Wilson Fermions*, Phys.Rev. **D83** (2011) 114507, [[arXiv:1104.2142](#)].

- [25] P. Cea, L. Cosmai, M. D'Elia, and A. Papa, *The Critical line from imaginary to real baryonic chemical potentials in two-color QCD*, Phys.Rev. **D77** (2008) 051501, [[arXiv:0712.3755](#)].
- [26] P. de Forcrand and O. Philipsen, *The QCD phase diagram for small densities from imaginary chemical potential*, Nucl. Phys. **B642** (2002) 290–306, [[hep-lat/0205016](#)].
- [27] M. D'Elia and M.-P. Lombardo, *Finite density QCD via imaginary chemical potential*, Phys.Rev. **D67** (2003) 014505, [[hep-lat/0209146](#)].
- [28] L.-K. Wu, X.-Q. Luo, and H.-S. Chen, *Phase structure of lattice QCD with two flavors of Wilson quarks at finite temperature and chemical potential*, Phys. Rev. **D76** (2007) 034505, [[hep-lat/0611035](#)].
- [29] P. Cea, L. Cosmai, M. D'Elia, C. Manneschi, and A. Papa, *Analytic continuation of the critical line: Suggestions for QCD*, Phys.Rev. **D80** (2009) 034501, [[arXiv:0905.1292](#)].
- [30] P. Cea, L. Cosmai, M. D'Elia, and A. Papa, *The phase diagram of QCD with four degenerate quarks*, Phys.Rev. **D81** (2010) 094502, [[arXiv:1004.0184](#)].
- [31] P. Cea, L. Cosmai, and A. Papa, *Critical line of 2+1 flavor QCD*, Phys. Rev. **D89** (2014), no. 7 074512, [[arXiv:1403.0821](#)].
- [32] R. Bellwied, S. Borsanyi, Z. Fodor, J. Günther, S. D. Katz, C. Ratti, and K. K. Szabo, *The QCD phase diagram from analytic continuation*, Phys. Lett. **B751** (2015) 559–564, [[arXiv:1507.0751](#)].
- [33] C. Bonati, M. D'Elia, M. Mariti, M. Mesiti, F. Negro, and F. Sanfilippo, *Curvature of the chiral pseudocritical line in QCD*, Phys. Rev. **D90** (2014), no. 11 114025, [[arXiv:1410.5758](#)].
- [34] C. Bonati, M. D'Elia, M. Mariti, M. Mesiti, F. Negro, and F. Sanfilippo, *Curvature of the chiral pseudocritical line in QCD: Continuum extrapolated results*, Phys. Rev. **D92** (2015), no. 5 054503, [[arXiv:1507.0357](#)].
- [35] M. D'Elia and F. Sanfilippo, *Thermodynamics of two flavor QCD from imaginary chemical potentials*, Phys.Rev. **D80** (2009) 014502, [[arXiv:0904.1400](#)].
- [36] M. D'Elia and M. P. Lombardo, *QCD thermodynamics from an imaginary  $\mu(B)$ : Results on the four flavor lattice model*, Phys.Rev. **D70** (2004) 074509, [[hep-lat/0406012](#)].
- [37] M. D'Elia, F. Di Renzo, and M. P. Lombardo, *The Strongly interacting quark gluon plasma, and the critical behaviour of QCD at imaginary  $\mu$* , Phys.Rev. **D76** (2007) 114509, [[arXiv:0705.3814](#)].
- [38] J. Takahashi, K. Nagata, T. Saito, A. Nakamura, T. Sasaki, H. Kouno, and M. Yahiro, *Color screening potential at finite density in two-flavor lattice QCD with Wilson fermions*, Phys. Rev. **D88** (2013) 114504, [[arXiv:1308.2489](#)].

- [39] S. Motoki, K. Nagata, and A. Nakamura, *Study of the low temperature and high density states by using lattice QCD simulations*, PoS LATTICE2012 (2012) 266.
- [40] T. Iritani, E. Itou, and T. Misumi, *Lattice study on QCD-like theory with exact center symmetry*, JHEP **11** (2015) 159, [[arXiv:1508.0713](#)].
- [41] M. D’Elia and F. Sanfilippo, *The order of the Roberge-Weiss endpoint (finite size transition) in QCD*, Phys. Rev. **D80** (2009) 111501, [[arXiv:0909.0254](#)].
- [42] P. de Forcrand and O. Philipsen, *Constraining the QCD phase diagram by tricritical lines at imaginary chemical potential*, Phys.Rev.Lett. **105** (2010) 152001, [[arXiv:1004.3144](#)].
- [43] C. Bonati, G. Cossu, M. D’Elia, and F. Sanfilippo, *The Roberge-Weiss endpoint in  $N_f = 2$  QCD*, Phys. Rev. **D83** (2011) 054505, [[arXiv:1011.4515](#)].
- [44] C. Bonati, M. D’Elia, M. Mariti, M. Mesiti, F. Negro, and F. Sanfilippo, *Roberge-Weiss endpoint at the physical point of  $N_f = 2+1$  QCD*, Phys. Rev. **D93** (2016), no. 7 074504, [[arXiv:1602.0142](#)].
- [45] O. Philipsen and C. Pinke, *Nature of the Roberge-Weiss transition in  $N_f = 2$  QCD with Wilson fermions*, Phys. Rev. **D89** (2014), no. 9 094504, [[arXiv:1402.0838](#)].
- [46] O. Philipsen and C. Pinke, *The  $N_f = 2$  QCD chiral phase transition with Wilson fermions at zero and imaginary chemical potential*, Phys. Rev. **D93** (2016), no. 11 114507, [[arXiv:1602.0612](#)].
- [47] I. M. Barbour, C. T. H. Davies, and Z. Sabeur, *LATTICE QCD AT FINITE DENSITY*, Phys. Lett. **B215** (1988) 567–572.
- [48] P. E. Gibbs, *THE FERMION PROPAGATOR MATRIX IN LATTICE QCD*, Phys. Lett. **B172** (1986) 53.
- [49] A. Hasenfratz and D. Toussaint, *Canonical ensembles and nonzero density quantum chromodynamics*, Nucl. Phys. **B371** (1992) 539–549.
- [50] A. Borici, *Reweighting with stochastic determinants*, Prog. Theor. Phys. Suppl. **153** (2004) 335–339.
- [51] K. Nagata and A. Nakamura, *Wilson Fermion Determinant in Lattice QCD*, Phys.Rev. **D82** (2010) 094027, [[arXiv:1009.2149](#)].
- [52] A. Alexandru and U. Wenger, *QCD at non-zero density and canonical partition functions with Wilson fermions*, Phys.Rev. **D83** (2011) 034502, [[arXiv:1009.2197](#)].
- [53] D. H. Adams, *A Simplified test of universality in lattice QCD*, Phys.Rev.Lett. **92** (2004) 162002, [[hep-lat/0312025](#)].



- [54] J. Danzer, C. Gattringer, and L. Liptak, *Properties of canonical fermion determinants with a fixed quark number*, PoS LAT2009 (2009) 185, [[arXiv:0910.3541](#)].
- [55] C. Gattringer and L. Liptak, *Canonical fermion determinants in lattice QCD - Numerical evaluation and properties*, [arXiv:0906.1088](#).
- [56] J. Danzer and C. Gattringer, *Winding expansion techniques for lattice QCD with chemical potential*, Phys. Rev. **D78** (2008) 114506, [[arXiv:0809.2736](#)].
- [57] I. M. Barbour and Z. A. Sabeur, *Simulations with lattice QCD at finite density*, Nucl. Phys. **B342** (1990) 269–278.
- [58] S. Kratochvila and P. de Forcrand, *QCD at zero baryon density and the Polyakov loop paradox*, Phys. Rev. **D73** (2006) 114512, [[hep-lat/0602005](#)].
- [59] **RBC-Bielefeld** Collaboration, C. Miao and C. Schmidt, *Non-zero density QCD by the Taylor expansion method: The Isentropic equation of state, hadronic fluctuations and more*, PoS LATTICE2008 (2008) 172, [[arXiv:0810.0375](#)].
- [60] <http://myweb.lmu.edu/dmsmith/fmlib.html>.
- [61] A. Li, X. Meng, A. Alexandru, and K.-F. Liu, *Finite Density Simulations with Canonical Ensemble*, PoS LATTICE2008 (2008) 178, [[arXiv:0810.2349](#)].
- [62] S. Ejiri, *Canonical partition function and finite density phase transition in lattice QCD*, Phys. Rev. **D78** (2008) 074507, [[arXiv:0804.3227](#)].
- [63] C.-N. Yang and T. Lee, *Statistical theory of equations of state and phase transitions. 1. Theory of condensation*, Phys.Rev. **87** (1952) 404–409.
- [64] T. Lee and C.-N. Yang, *Statistical theory of equations of state and phase transitions. 2. Lattice gas and Ising model*, Phys.Rev. **87** (1952) 410–419.
- [65] I. M. Barbour, S. E. Morrison, E. G. Klepfish, J. B. Kogut, and M.-P. Lombardo, *Results on finite density QCD*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **60A** (1998) 220–234, [[hep-lat/9705042](#)].
- [66] I. M. Barbour, S. E. Morrison, E. G. Klepfish, J. B. Kogut, and M.-P. Lombardo, *The critical points of strongly coupled lattice QCD at nonzero chemical potential*, Phys. Rev. **D56** (1997) 7063–7072, [[hep-lat/9705038](#)].
- [67] I. M. Barbour and A. J. Bell, *Complex zeros of the partition function for lattice QCD*, Nucl. Phys. **B372** (1992) 385–402.

- [68] I. Barbour, S. Hands, J. B. Kogut, M.-P. Lombardo, and S. Morrison, *Chiral symmetry restoration and realisation of the Goldstone mechanism in the  $U(1)$  Gross-Neveu model at non- zero chemical potential*, Nucl. Phys. **B557** (1999) 327–351, [[hep-lat/9902033](#)].
- [69] M. E. Fisher., , in Lectures in Theoretical Physics 7c, **W. E. Brittin (eds.) (University of Colorado Press, Boulder)** (1965) 1.
- [70] A. Nakamura and K. Nagata, *Probing QCD Phase Structure by Baryon Multiplicity Distribution*, [arXiv:1305.0760](#).
- [71] T. Asano, *Generalized Lee-Yang's Theorem*, Jour. Phys. Soc. J. **25** (1968) 1220.
- [72] S. Kratochvila and P. de Forcrand, *QCD at small baryon number*, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **140** (2005) 514–516, [[hep-lat/0409072](#)].
- [73] A. Li, A. Alexandru, and K.-F. Liu, *New results using the canonical approach to finite density QCD*, PoS LAT2007 (2007) 203, [[arXiv:0711.2692](#)].
- [74] A. Li, A. Alexandru, and K.-F. Liu, *Critical point of  $N_f = 3$  QCD from lattice simulations in the canonical ensemble*, Phys.Rev. **D84** (2011) 071503, [[arXiv:1103.3045](#)].
- [75] A. Alexandru, M. Faber, I. Horvath, and K.-F. Liu, *Lattice QCD at finite density via a new canonical approach*, Phys. Rev. **D72** (2005) 114513, [[hep-lat/0507020](#)].
- [76] X.-f. Meng, A. Li, A. Alexandru, and K.-F. Liu, *Winding number expansion for the canonical approach to finite density simulations*, PoS LATTICE2008 (2008) 032, [[arXiv:0811.2112](#)].
- [77] M. A. Stephanov, K. Rajagopal, and E. V. Shuryak, *Signatures of the tricritical point in QCD*, Phys.Rev.Lett. **81** (1998) 4816–4819, [[hep-ph/9806219](#)].
- [78] Y. Hatta and M. A. Stephanov, *Proton number fluctuation as a signal of the QCD critical endpoint*, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 102003, [[hep-ph/0302002](#)]. [Erratum: Phys. Rev. Lett.91,129901(2003)].
- [79] M. Stephanov, *Non-Gaussian fluctuations near the QCD critical point*, Phys.Rev.Lett. **102** (2009) 032301, [[arXiv:0809.3450](#)].
- [80] M. Stephanov, *On the sign of kurtosis near the QCD critical point*, Phys.Rev.Lett. **107** (2011) 052301, [[arXiv:1104.1627](#)].
- [81] J. Cleymans, H. Oeschler, K. Redlich, and S. Wheaton, *Comparison of chemical freeze-out criteria in heavy-ion collisions*, Phys. Rev. **C73** (2006) 034905, [[hep-ph/0511094](#)].

- [82] M. Asakawa, S. Ejiri, and M. Kitazawa, *Third moments of conserved charges as probes of QCD phase structure*, Phys.Rev.Lett. **103** (2009) 262301, [[arXiv:0904.2089](#)].
- [83] **STAR Collaboration** Collaboration, M. Aggarwal et. al., *Higher Moments of Net-proton Multiplicity Distributions at RHIC*, Phys.Rev.Lett. **105** (2010) 022302, [[arXiv:1004.4959](#)].
- [84] P. de Forcrand, *Simulating QCD at finite density*, PoS LAT2009 (2009) 010, [[arXiv:1005.0539](#)].
- [85] I. Barbour, N.-E. Behilil, E. Dagotto, F. Karsch, A. Moreo, M. Stone, and H. W. Wyld, *Problems with Finite Density Simulations of Lattice QCD*, Nucl. Phys. **B275** (1986) 296–318.
- [86] M. A. Stephanov, *Random matrix model of QCD at finite density and the nature of the quenched limit*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 4472–4475, [[hep-lat/9604003](#)].
- [87] T. D. Cohen, *Functional integrals for QCD at nonzero chemical potential and zero density*, Phys.Rev.Lett. **91** (2003) 222001, [[hep-ph/0307089](#)].
- [88] **XQCD-J Collaboration** Collaboration, K. Nagata, S. Motoki, Y. Nakagawa, A. Nakamura, and T. Saito, *Towards extremely dense matter on the lattice*, PTEP **2012** (2012) 01A103, [[arXiv:1204.1412](#)].
- [89] K. Nagata, *On early onset of quark number density at zero temperature*, [arXiv:1204.6480](#).
- [90] K. Nagata, A. Nakamura, and S. Motoki, *Low temperature limit of lattice QCD*, PoS LATTICE2012 (2012) 094, [[arXiv:1212.0072](#)].
- [91] Y. Tanizaki, Y. Hidaka, and T. Hayata, *Lefschetz-thimble analysis of the sign problem in one-site fermion model*, New J. Phys. **18** (2016), no. 3 033002, [[arXiv:1509.0714](#)].
- [92] Z. Fodor, K. Szabo, and B. Toth, *Hadron spectroscopy from canonical partition functions*, JHEP **0708** (2007) 092, [[arXiv:0704.2382](#)].
- [93] Y. Futamura, S. Hashimoto, A. Imakura, K. Nagata, and T. Sakurai, *A filtering technique for the temporally reduced matrix of the Wilson fermion determinant*, PoS LATTICE2014 (2014) 049, [[arXiv:1411.4262](#)].
- [94] D. H. Adams, *A Dimensionally reduced expression for the QCD fermion determinant at finite temperature and chemical potential*, Phys.Rev. **D70** (2004) 045002, [[hep-th/0401132](#)].
- [95] J. R. Ipsen and K. Splittorff, *Baryon Number Dirac Spectrum in QCD*, Phys. Rev. **D86** (2012) 014508, [[arXiv:1205.3093](#)].
- [96] C. T. H. Davies and E. G. Klepfish, *Quenched QCD at finite density*, Phys. Lett. **B256** (1991) 68–74.
- [97] Y. Hidaka and N. Yamamoto, *No-Go Theorem for Critical Phenomena in Large-Nc QCD*, Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 121601, [[arXiv:1110.3044](#)].



## Chapter 4

# 符号問題解法 2-複素作用でも利用可能な配位生成法

前章では重点サンプリングに基づく符号問題回避法の化学ポテンシャルが小さい領域への有用性と、大きい領域での限界を述べた。

近年、複素ランジュバン法、レフシェッツシンブル法、テンソルネットワーク、双対変数法など、複素作用でも利用可能な経路積分法の開発が進展している。符号問題の難易度は理論によって異なるが、理論によっては新しい方法の有効性が報告されている。同時に、近年の新しい方法をもってしても難しい領域があることも明らかになってきている。QCD ハドロン相は未だ難しい問題である。

この章では、近年の新しい方法として QCD への応用が実現されている唯一の方法である複素ランジュバン法に焦点をあてて、その性質、応用例、および今後に向けた課題を説明する。

### 4.1 複素ランジュバン法

複素作用を持つ経路積分法の候補の 1 つが複素ランジュバン (Complex Langevin method: CLM) である。ランジュバン法は、もともと、ランジュバン方程式を用いた経路積分の解法として Parisi と Wu によって考案された [1]。確率過程の一種であるランジュバン方程式を用いた経路積分量子化であることから、確率過程量子化法 (stochastic quantization) とも呼ばれる。モンテカルロ法が位相空間内の点のランダム生成および  $e^{-S}$  を重みとしたメトロポリスステップ (アクセプト/リジェクト判定) に基づく方法であるのに対して、確率過程量子化法は確率微分方程式に従った位相空間内の運動を利用した配位生成法である。ちなみにモンテカルロ法の改良であるハイブリットモンテカルロ (HMC) は分子動力学とメトロポリスステップを組み合わせたものである。ランジュバン法は HMC を簡略化し、メトロポリスステップを省いたものに等しい。

ランジュバン法を複素作用系に応用する試みが、Parisi と Klauder によって 1980 年代初頭に提案された複素ランジュバン法である [2, 3]。ランジュバン法は  $e^{-S}$  を確率と解釈するメトロポリスステップを含まな

いたため複素作用系への応用が可能となる. 提案のすぐ後に, 作用が複素数の場合に, ランジュバン方程式の平衡解が非物理的な解に誤収束 (wrong convergence) する例が見つかり, 最近まで実用性に乏しい方法と考えられてきた. 2009 年に Aarts, Seiler, Stamatescu によって誤収束の発生原因の解明 [4], 誤収束問題への対処法の開発が行われたことで再び注目を集め, 2013 年に有限密度格子 QCD の QGP 相高密度領域への応用が実現された [5]. ハドロン相高密度領域への応用が期待されたが, ハドロン相高密度領域はこの方法をもってしても難しく, 現在その解法が検討されている.

この章では, 複素ランジュバン法について詳しく説明する. まず, 次節で実ランジュバン法について説明し, 複素ランジュバン法の定式化, 正当化条件, 近年の発展であるゲージクーリング法などについて詳しく説明していく. 確率過程量子化法に興味のある読者は [6] などのレビュー記事を参照して欲しい.

### 4.1.1 実ランジュバン法

まず, 実作用に対するランジュバン法 [1] を説明する. 実変数  $x_i \in \mathbb{R}$ , ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), 作用  $S = S(x) (\in \mathbb{R})$  を持つ系に対する経路積分

$$Z = \int \prod_i dx_i e^{-S(x)}, \quad (4.1)$$

を考える. 新しいパラメータ  $t$  を導入し, 力学変数  $x_i$  が  $t$  の関数として, ランジュバン方程式

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = -\frac{\partial S}{\partial x_i} + \eta(t), \quad (4.2)$$

に従うとする. パラメータ  $t$  は単なる仮想パラメータであるが, ランジュバン方程式における時間の役割を担っているため, 仮想時間 (fictitious time) あるいはランジュバン時間 (Langevin time) と呼ばれる.  $\eta$  は各時刻毎にガウス分布に従う乱数で, 確率変数と呼ばれる.  $\eta$  は時刻毎にガウス分布に従うから, ある時刻  $t$  における測定量のノイズ平均は

$$\langle O(t) \rangle_\eta = \frac{\int \mathcal{D}\eta O(t) e^{-\frac{1}{4} \int_0^t d\tau \eta(\tau)^2}}{\int \mathcal{D}\eta e^{-\frac{1}{4} \int_0^t d\tau \eta(\tau)^2}}, \quad (4.3)$$

で与えられる. ノイズ平均から以下の性質が得られる

$$\langle \eta(t) \rangle_\eta = 0, \quad (4.4a)$$

$$\langle \eta(t_1) \eta(t_2) \rangle_\eta = 2\delta(t_1 - t_2). \quad (4.4b)$$

(4.2) 式は位相空間内におけるランジュバン方程式に従う運動を記述する. 確率変数を含めない場合, ランジュバン方程式の解は作用が最小となる古典解に収束する. 確率変数はそこに量子揺らぎを発生させ, 配位は古典解の近傍でゆらぐ.

数値計算ではランジュバン時間を離散化する必要がある.  $t$  を  $\epsilon$  刻みで離散化した場合, ランジュバン方

程式および確率変数の分布は

$$x(t + \epsilon) = x(t) - \frac{\partial S}{\partial x} \epsilon + \eta(t) \epsilon, \quad (4.5)$$

$$\int \mathcal{D}\eta e^{-\frac{1}{4} \int_0^t d\tau \eta(\tau)^2} = \int \prod_i d\eta(t_i) e^{-\frac{1}{4} \epsilon \sum_i \eta(t_i)^2}, \quad (4.6)$$

で与えられる。<sup>1</sup>

ここまで述べたのはランジュバン方程式を用いた配位生成法である。生成された配位が理論の正しい配位となっているかどうか、得られた解が経路積分の解となっているかどうかは、この段階ではわからない。以下ではランジュバン方程式が経路積分の正しい解法であること、具体的に言うと、ランジュバン法で得られる物理量の期待値

$$\langle O \rangle_{\text{LM}} = \langle O \rangle_{\eta}$$

と経路積分で定義される物理量の期待値

$$\langle O \rangle_{\text{phys}} = Z^{-1} \int \mathcal{D}U O e^{-S}$$

の等価性を証明しよう。説明が長くなるため証明のいくつかのステップは Appendix C で行うことにして、以下では証明の要点に重点を置くことにする。

まず、力学変数の従う確率分布と、確率分布の時間発展を記述する Fokker-Planck 方程式を導入する。ランジュバン方程式を解いて得られる力学変数を  $x^{(\eta)}$  とかき、位相空間内の座標を  $x$  と書くことにする。あるランジュバン時刻における物理量の値を  $O(x^{(\eta)})$  と書くと、これを

$$O(x^{(\eta(t))}) = \int dx O(x) \delta(x - x^{(\eta(t))}) \quad (4.7)$$

と表すことができる。ここで、時刻  $t$  における変数  $x^{(\eta)}$  はそれより前の時刻  $t'$  (連続のランジュバン方程式の場合は  $t' < t$ , 離散化されている場合は  $t' \leq t - \epsilon$ ) におけるノイズ  $\eta(t')$  に陽に依存する。物理量  $O$  の期待値 (4.3) 式に (4.7) 式を代入する。このとき、(4.7) 式右辺の  $x$  は単なる積分変数であり、 $O(x)$  は  $\eta$  に依存しないので、 $O(x)$  をノイズ積分の外側に出すことができ、 $O$  のノイズ平均を

$$\left\langle O \left( x^{(\eta)}(t) \right) \right\rangle_{\eta} = \int dx O(x) P(x; t), \quad (4.8)$$

<sup>1</sup>文献では  $\eta' = \sqrt{\epsilon} \eta$  とおきかえた表記もしばしば用いられる。その際には、確率変数の従う分布は  $e^{-\eta'^2/4}$  になり、分散が異なるので注意が必要である。

と書き換えることができる。<sup>2</sup>ここで  $P(x; t)$  を

$$P(x; t) = \left\langle \delta \left( x - x^{(\eta)}(t) \right) \right\rangle_{\eta} \quad (4.9)$$

で定義した.  $P(x; t)$  は時刻  $t$  における  $x$  の従う確率分布を表している. ランジユバン方程式に従い位相空間内を運動する点が, ランジユバン時刻  $t$  において位相空間内の点  $x$  の近傍に入る確率は  $P(x; t)$  で与えられる.

$x^{(\eta)}$  はランジュバン時刻  $t$  とともに変化するので, それに応じて確率分布  $P(x; t)$  も  $t$  とともに変化する. その時間依存性は Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial x} \right) P, \quad (4.10)$$

によって与えられる. 導出の詳細は C.1 章を参照.  $P(x; t)$  は  $t$  とともに変化するが,  $t$  が十分大きく, 停留点  $\partial S / \partial x = 0$  が存在すれば, 確率分布は停留点近傍の平衡解に収束する. その平衡解が

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(x; t) \rightarrow \frac{1}{Z} e^{-S} \quad (4.11)$$

となることを以下で示す. そのために, Fokker-Planck ハミルトニアン  $H_{\text{FP}}$  およびその波動関数  $\psi(x; t)$  を

$$\psi(x; t) = P(x; t) e^{\frac{1}{2} S(x)}, \quad (4.12a)$$

$$H_{\text{FP}} = - \left( \partial_x - \frac{1}{2} S' \right) \left( \partial_x + \frac{1}{2} S' \right), \quad (4.12b)$$

で定義する. このとき, これらは

$$-\partial_t \psi = H_{\text{FP}} \psi \quad (4.13)$$

を満たす.  $\psi(x; t) = e^{-\frac{1}{2} S}$  を代入すると, これが  $H_{\text{FP}}$  の零固有値を持つ固有状態であることがただちにわかる. また,  $H_{\text{FP}}$  がエルミート演算子となることが証明できる (C.2 章参照). さらに,  $H_{\text{FP}}$  は半正定値行列であり, その固有値は非負である<sup>3</sup>. FP ハミルトニアンの線形性から  $\psi$  は  $H_{\text{FP}}$  の固有状態の重ね合わせで表すことができ, さらに  $t \rightarrow \infty$  でゼロモード解のみが残る, すなわち

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \psi(x; t) \rightarrow e^{-\frac{1}{2} S}.$$

<sup>2</sup> 簡単のため, ノイズの従う確率分布を  $\omega(\eta)$ , ノイズ積分の規格化因子を  $Z$  と省略する. このとき,

$$\begin{aligned} \langle O(x^\eta) \rangle &= Z^{-1} \int d\eta O(x^\eta) \omega(\eta), \\ &= Z^{-1} \int d\eta \left( \int dx O(x) \delta(x - x^\eta) \right) \omega(\eta), \\ &= Z^{-1} \int dx O(x) \left( \int d\eta \delta(x - x^\eta) \omega(\eta) \right), \\ &= \int dx O(x) P(x). \end{aligned}$$

したがって, (4.8) 式が得られた.

<sup>3</sup> (証明)  $A = \partial_x + \frac{1}{2} S'$  とおくと,  $H_{\text{FP}} = A^\dagger A$  と表せる. 任意の複素ベクトル  $v$  に対して,

$$\begin{aligned} v^\dagger H_{\text{FP}} v &= v^\dagger A^\dagger A v \\ &= \|Av\|^2 \geq 0. \end{aligned} \quad (4.14)$$



このとき、確率分布  $P(x; t)$  に対して (4.11) 式が成り立つ。

(4.8) 式の  $t \rightarrow \infty$  の極限を取り、(4.11) 式を用いると

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \langle O(x^{(\eta)}(t)) \rangle_{\eta} &= \int dx O(x) \lim_{t \rightarrow \infty} P(x; t), \\ &\rightarrow \frac{1}{Z} \int dx O(x) e^{-S} \end{aligned} \quad (4.15)$$

となる。右辺は経路積分で定義される物理量の期待値である。このように、ランジュバン法で生成された配位は、ランジュバン時間が十分長い極限で、確率分布  $e^{-S}$  に従い、ランジュバン法で求めた物理量の期待値  $\langle O(x^{(\eta)}(t)) \rangle_{\eta}$  は経路積分における期待値と等価となることが保証される。

ノイズ積分 (4.3) 式は、ある時刻において多くの配位をランダムに生成し、その期待値を取ることで物理量の値を求める式である。これはある時刻に物理量を独立に複数回測定することと等しい。一方、ある時刻に一回測定を行うことを、ランジュバン時間発展とともに多数回行っても物理量の期待値が得られる。つまり、ランジュバン方程式を解き、各時刻で一回乱数生成と物理量の計算を行い、それを十分長いランジュバン時間に対する平均として物理量を求める方法もある。これらの2種類の方法はエルゴード仮説の下で等価であるので、ランジュバン法における物理量の期待値を

$$\langle O \rangle = \frac{1}{T - t_0} \int_{t_0}^T dt O(t) \quad (4.16)$$

と表すことができる。 $t_0$  は系が平衡に達するのに十分な大きさのランジュバン時刻である。エルゴード仮説から (4.16) 式は  $O$  のノイズ平均と等価であり、したがって経路積分で定義される物理量の期待値に  $T \rightarrow \infty$  の極限で収束する。

### 4.1.2 複素ランジュバン法

次に、(4.2) 式で、 $x \in \mathbb{R}$ ,  $S(x) \in \mathbb{C}$  の場合を考える。力学変数が複素数の場合は、それを実部と虚部に分解し、それぞれを実の力学変数と見なせばよい。作用が複素数なのでドリフト項 ( $\partial S / \partial x$ ) も複素数となり、ランジュバン時間発展によって実変数  $x$  が虚部を獲得してしまう。この問題は実変数をあらかじめ複素変数に拡張することで回避できて、ランジュバン法の複素作用系への応用が実現できる。これが、Parisi と Klauder によって開発された複素ランジュバン法である [2, 3]。

$v$  として  $H_{\text{FP}}$  のある固有ベクトルをとり、その固有値を  $\lambda$  とする。このとき、

$$\begin{aligned} v^\dagger H_{\text{FP}} v &= \lambda v^\dagger v \\ &= \lambda \|v\|^2. \end{aligned}$$

(4.14) より、左辺は非負であり、また、 $\|v\|^2 \geq 0$  であるから

$$\lambda \geq 0.$$

(4.14) は任意の複素ベクトルについて成り立つから  $H_{\text{FP}}$  の全ての固有値は非負である。

## 理論の複素化

変数を  $x_i \in \mathbb{R} \mapsto z_i \in \mathbb{C}$  と複素平面に拡張し, また, 作用を複素平面に解析接続する  $S(x) \mapsto S(z)$ . このとき,  $\partial S(z)/\partial \bar{z} = 0$  が成り立つから  $S(z)$  は Cauchy-Riemann 関係式を満たし,  $z$  の解析関数である. 複素化に伴い, ランジュバン方程式も

$$\frac{dz_i}{dt} = -\frac{\partial S(z)}{\partial z_i} + \eta(t) \quad (4.17)$$

と拡張される. 確率変数  $\eta$  も複素にとることができる,

$$\frac{\partial z}{\partial t} = -\frac{\partial S}{\partial z} + c_R \eta_R + i c_I \eta_I. \quad (4.18)$$

$\eta_{R,I}$  はそれぞれが実の確率変数,  $c_R, c_I$  は対応する実パラメータであり,  $c_R^2 - c_I^2 = 1$  を満たす必要がある.

(4.18) 式の実部および虚部をとると,

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\text{Re} \left[ \frac{\partial S}{\partial z} \right] + c_R \eta_R = K_x + c_R \eta_R, \quad (4.19a)$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -\text{Im} \left[ \frac{\partial S}{\partial z} \right] + c_I \eta_I = K_y + c_I \eta_I. \quad (4.19b)$$

確率変数はガウス分布

$$P(\eta) = N_\eta^{-1} e^{-\frac{1}{4} \int d\tau (\eta_R^2 + \eta_I^2)}, \quad (4.20)$$

に従う.  $N_\eta$  は規格化因子

$$N_\eta = \int \mathcal{D}\eta e^{-\frac{1}{4} \int d\tau (\eta_R^2 + \eta_I^2)} \quad (4.21)$$

である. 物理量  $f$  の期待値は

$$\langle f \rangle_\eta = N_\eta^{-1} \int \mathcal{D}\eta f e^{-\frac{1}{4} \int d\tau (\eta_R^2 + \eta_I^2)}, \quad (4.22)$$

で与えられる.

複素化によって位相空間が拡張されるため, 力学変数は拡張された位相空間内を複素ランジュバン方程式に従って運動する. ランジュバン時刻  $t$  に力学変数が位相空間内の点  $(x, y)$  に存在する確率を  $P(x, y; t)$  とすると,  $P(x, y; t)$  は

$$P(x, y; t) = \left\langle \delta(x - x^{(\eta)}(t)) \delta(y - y^{(\eta)}(t)) \right\rangle_\eta \quad (4.23)$$

で与えられる. これを用いて  $f$  の期待値を

$$\langle f \rangle_\eta = \int dx dy P(x, y; t) f, \quad (4.24)$$

と書く事ができる. ここで,  $P$  は確率分布として定義されているため実正であり,  $z$  に関して正則関数ではないことに注意が必要である<sup>4</sup>. このため,  $P(z; t)$  と表すことはできず,  $P(z, \bar{z}; t)$  もしくは  $P(x, y; t)$  と表さなければならない.

<sup>4</sup>実関数は Cauchy-Riemann 関係式を満たすことができない.

## 誤収束の問題

理論の複素化によってランジュバン法を複素作用へ拡張できたが、次に、複素ランジュバン法の正当性を証明しなければならない。しかしながら、実作用の場合と異なり、複素作用の場合  $P(x, y; t)$  が  $e^{-S}$  に収束することが必ずしも保証されない。実ランジュバン法の場合、Fokker-Planck ハミルトニアン  $H_{FP}$  のエルミート性とゼロモード解の存在に基づいて正しい解への収束が保証されることはすでに述べた。複素ランジュバン法の場合、 $H_{FP}$  のエルミート性が複素化の影響で壊れてしまい、このためにゼロモード解への収束が保証されなくなる。この問題のために、複素ランジュバン法は正しい解に収束することもあれば、間違っただけに収束することもある。

複素ランジュバン法の収束の問題は実際のシミュレーションにおいては2つの形で現れる。1つはそもそも収束しないケース (runaway), もう1つは物理的な平衡解と異なる解に収束しているケース (誤収束 (wrong convergence)) である。1つ目の runaway の問題は実ランジュバン法においても理論の安定性が保証されない場合には発生しうる。もちろん、通常は物理的要請から理論は安定 ( $V(x) \rightarrow \infty$  for  $|x| \rightarrow \infty$ ) であり、このような問題は発生しない。しかしながら、理論を複素化した場合、複素化された方向の安定性が保証されないことがあり、その場合 runaway の問題が起こる可能性がある。Runaway への対処法としては、ランジュバン時間のステップ  $\epsilon$  を十分小さくとることが有効と言われている。その際、常に  $\epsilon$  を小さくとってもよいが、ドリフト項が大きい場合のみ  $\epsilon$  を小さくするような方法も提案されている [7]。このような方法は adaptive stepsize とよばれる。

Runaway は物理量の発散を引き起こすため検知が容易だが、wrong convergence の場合、収束した解が物理的かどうかの判別は難しい。近年、Aarts, Seiler, Stamatescu は複素ランジュバン法の正当化条件、すなわち複素ランジュバン法で得られる物理量の期待値と経路積分における期待値が等価となる条件を考察し、2つの条件が満たされた場合に等価性が成り立つことを示した [4]。これにより、正しい収束のための条件を満たすかどうかで誤収束が起きているかどうかの判別が可能になった。これを契機に複素ランジュバン法の研究が大きく進展した。次節で、Aarts らの議論とその2つの条件について説明する。

## 4.1.3 複素ランジュバン法の正当性条件

## Fokker-Planck like 方程式

はじめに、物理量  $f$  の時間発展方程式を導出する。連続のランジュバン方程式を用いる方法と離散化されたランジュバン方程式を用いる方法があるが、ここでは前者を用いて説明する (離散化された場合は Appendix C 参照)。 $\langle f \rangle_\eta$  の時間微分を考える

$$\frac{d}{dt} \langle f \rangle_\eta = \left\langle \frac{\partial x}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial t} \frac{\partial f}{\partial y} \right\rangle_\eta. \quad (4.25)$$

(4.19) 式を (4.25) 式に代入すると

$$\frac{d}{dt} \langle f \rangle_\eta = \left\langle (K_x + c_R \eta_R) \frac{\partial f}{\partial x} + (K_y + c_I \eta_I) \frac{\partial f}{\partial y} \right\rangle_\eta, \quad (4.26)$$

を得る. (4.22) 式より,  $\eta = \eta_R, \eta_I$  に対して

$$\langle g\eta \rangle_\eta = \frac{2}{\epsilon} \left\langle \frac{\delta g(x)}{\delta \eta(t)} \right\rangle_\eta, \quad (4.27)$$

が成り立つ [6].  $x$  成分に対しては,

$$\langle \eta^{(R)} g \rangle_\eta = \frac{2}{\epsilon} \left\langle \frac{\delta g}{\delta \eta^{(R)}(t)} \right\rangle_\eta. \quad (4.28)$$

ここで

$$\begin{aligned} \frac{\delta g}{\delta \eta^{(R)}(t)} &= \frac{\delta x}{\delta \eta^{(R)}(t)} \frac{\delta g}{\delta x}, \\ &= \frac{\epsilon c_R}{2} \frac{\delta g}{\delta x}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

が成り立つので,

$$\left\langle (K_x + c_R \eta_R) \frac{\partial f}{\partial x} \right\rangle_\eta = \left\langle \left( K_x + c_R^2 \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\partial f}{\partial x} \right\rangle_\eta. \quad (4.30)$$

$y$  成分に対しても同様に計算できて,  $f(x, y)$  の時間発展は

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t} \right\rangle_\eta = \langle Lf \rangle_\eta, \quad (4.31a)$$

$$L = [(K_x + c_R^2 \partial_x) \partial_x + (K_y + c_I^2 \partial_y) \partial_y], \quad (4.31b)$$

で与えられる.  $f$  の時間発展は形式的に

$$f(x, y; t) = e^{tL} f(x, y; 0), \quad (4.32)$$

で与えられる.

ここまででの議論では  $f$  の性質については特に仮定を置いていない. 次に物理量が holomorphic な場合を考える. このとき,  $f$  は  $z$  の関数として  $f(z) = f(x + iy)$  と表すことができ,

$$\frac{\partial f}{\partial \bar{z}} = 0 \quad (4.33)$$

を満たす.  $x, y$  に対する微分を  $z, \bar{z}$  の微分に置き換え<sup>5</sup>, (4.33) を用いると,  $L$  の第一項目は

$$\begin{aligned} (c_R^2 \partial_x + K_x) \partial_x f &= \left( c_R^2 \frac{\partial z}{\partial x} \partial_z + c_R^2 \frac{\partial \bar{z}}{\partial x} \partial_{\bar{z}} + K_x \right) \left( \frac{\partial z}{\partial x} \partial_z + \frac{\partial \bar{z}}{\partial x} \partial_{\bar{z}} \right) f, \\ &= (c_R^2 \partial_z + K_x) (\partial_z) f, \\ &= (c_R^2 \partial_z^2 + K_x \partial_z) f. \end{aligned} \quad (4.34)$$

5

$$\begin{cases} z = x + iy, \\ \bar{z} = x - iy \end{cases} \quad \text{より, } \begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial \bar{z}}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} = \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \bar{z}}, \\ \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial z}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial \bar{z}}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} = i \frac{\partial}{\partial z} - i \frac{\partial}{\partial \bar{z}}. \end{cases}$$

$y$  成分も同様に計算できる

$$\begin{aligned} (c_I^2 \partial_y + K_y) \partial_y f &= (c_I^2 i \partial_z + K_y) (i \partial_z) f, \\ &= (-c_I^2 \partial_z^2 + i K_y \partial_z) f. \end{aligned} \quad (4.35)$$

$x, y$  成分を足しあげると

$$\begin{aligned} [(c_R^2 \partial_x + K_x) \partial_x + (c_I^2 \partial_y + K_y) \partial_y] f &= (c_R^2 \partial_x^2 + K_x \partial_x) f + (-c_I^2 \partial_z^2 + i K_y \partial_z) f \\ &= \left[ (c_R^2 - c_I^2) \partial_z + (K_x + i K_y) \right] \partial_z f \\ &= [\partial_z + K] \partial_z f. \end{aligned} \quad (4.36)$$

ここで  $K_x + i K_y = K (= -\partial_z S)$ , および  $c_R^2 - c_I^2 = 1$  を用いた. したがって, holomorphic な物理量に対しては

$$L f = \tilde{L} f, \quad (4.37)$$

$$\tilde{L} = [\partial_z^2 + K_z \partial_z], \quad (4.38)$$

が成り立つ.

次に,  $f$  の時間発展を用いて確率分布  $P$  の時間発展を導出する. 任意の物理量に対する結果を求めるために, holomorphy を仮定しない式 (4.31b) からスタートする.

$$\langle L f \rangle_\eta = \int dx dy \left[ \left( (K_x + c_R^2 \partial_x) \partial_x + (K_y + c_I^2 \partial_y) \partial_y \right) f \right] P(x, y; t) \quad (4.39)$$

実ランジュバンの場合と同様に,  $f$  にかかる微分を部分積分を用いて  $P$  の微分に置換していく. その際,  $y$  方向の表面項が必ずしも消えないことに注意する. もし,  $y$  方向で確率分布が十分速く減少すれば,

$$\langle L f \rangle_\eta = \int dx dy f \left( \partial_x (-K_x + c_R^2 \partial_x) + \partial_y (-K_y + c_I^2 \partial_y) \right) P(x, y; t) \quad (4.40)$$

この際, 一回微分の部分積分でマイナスが現れることに注意する.

したがって, 確率分布の時間発展は

$$\frac{\partial P}{\partial t} = L^T P, \quad (4.41)$$

$$L^T = [\partial_x (c_R^2 \partial_x - K_x) + \partial_y (c_I^2 \partial_y - K_y)], \quad (4.42)$$

で記述される. これを Fokker-Planck like 方程式と呼ぶ.

#### 複素ランジュバン法の正当性条件

Fokker-Planck like 方程式は Fokker-Planck 方程式と異なりエルミートでないため, (4.42) 式の平衡解は必ずしも  $e^{-S}$  と一致しない. しかしながら, いくつかの条件を満たせば, 複素ランジュバン法での物理量の期待値

が経路積分で定義される期待値と等価になることが示せる [4]. 準備は済んだので, 複素ランジュバン法の正当化条件の導出を行う. 新しいパラメータ  $\tau$  ( $0 \leq \tau \leq t$ ) を導入し,

$$F(t, \tau) \equiv \int P(x, y; t - \tau) \mathcal{O}(x, y; \tau) dx dy, \quad (4.43)$$

を定義する. ここで,  $\mathcal{O}(x, y; \tau)$  は時間発展する観測量を表す.  $F(t, 0)$  は

$$F(t, 0) = \int P(x, y; t) \mathcal{O}(x, y; 0) dx dy, \quad (4.44)$$

であり, これはランジュバン法で得られる物理量の期待値を表す. また,  $F(t, t)$  は

$$F(t, t) = \int P(x, y; 0) \mathcal{O}(x, y; t) dx dy, \quad (4.45)$$

である. Aarts らの証明 [4] は,

(a)  $F(t, t)$  が, Fokker-Planck 方程式に従う  $\rho(x; t)$  を用いて,

$$F(t, t) = \int \rho(x; t) \mathcal{O}(x; 0) dx, \quad (4.46)$$

と表せる.

(b)  $F(t, \tau)$  が  $\tau$  に依存せず, したがって  $F(t, t) = F(t, 0)$  が成り立つ.

の2つのステップからなり, これから複素ランジュバン法で求めた期待値と経路積分で定義される期待値の等価性が保証される.

まず, (a) の証明から説明する.  $t = 0$  において確率分布が  $y = 0$  に局在することを仮定する;

$$P(x, y; 0) = \rho(x; 0) \delta(y). \quad (4.47)$$

これは複素化された成分を 0 とするような初期条件を選べば自動的に満たされる.

(4.47) 式を (4.45) を代入すると

$$F(t, t) = \int \rho(x; 0) \delta(y) \mathcal{O}(x, y; t) dx dy. \quad (4.48)$$

$\mathcal{O}$  が holomorphic な場合  $\mathcal{O}(x + iy)$ , その時間発展は (4.38) 式で記述される. 形式解  $\mathcal{O}(z; t) = e^{t\tilde{L}} \mathcal{O}(z; 0)$  を代入すると

$$F(t, t) = \int \rho(x; 0) \delta(y) e^{t\tilde{L}} \mathcal{O}(x + iy; 0) dx dy. \quad (4.49)$$

また,  $\mathcal{O}$  は  $z$  の解析関数であるのでべき展開できて,  $\mathcal{O}(x + iy; 0) = \sum_n a_n z^n$ . このとき

$$\begin{aligned} \int \rho(x; 0) \delta(y) \tilde{L} \mathcal{O}(x + iy; 0) dx dy &= \int \rho(x; 0) \delta(y) \left[ (\partial_z + K_z) \partial_z \sum_n a_n z^n \right] dx dy, \\ &= \int \rho(x; 0) \delta(y) \sum_n a_n n ((n-1)z^{n-2} + K_z z^{n-1}) dx dy \end{aligned} \quad (4.50)$$

となる. 被積分関数が  $\delta(y)$  を含むため  $y$  積分が実行できて,

$$\int \rho(x; 0) \delta(y) \tilde{L} \mathcal{O}(x + iy; 0) dx dy = \int \rho(x; 0) \sum_n a_n n ((n-1)x^{n-2} + K_x x^{n-1}) dx. \quad (4.51)$$

$K_x = K_z|_{y \rightarrow 0}$  とかく際に, 作用も holomorphic であることを仮定した.  $x$  に関する微分演算子  $L_0 = [\partial_x + K_x] \partial_x$  を用いて, (4.51) の右辺を変形すると,

$$\int \rho(x; 0) \delta(y) \tilde{L} \mathcal{O}(x + iy; 0) dx dy = \int \rho(x; 0) L_0 \mathcal{O}(x) dx, \quad (4.52)$$

を得る. したがって,

$$F(t, t) = \int \rho(x; 0) e^{tL_0} \mathcal{O}(x; 0) dx. \quad (4.53)$$

を得る.  $y = 0$  での理論の  $x$  方向の安定性から,  $x$  に関する部分積分において表面項は 0 となるから,

$$F(t, t) = \int e^{tL_0^T} \rho(x; 0) \mathcal{O}(x; 0) dx, \quad (4.54)$$

を得る. ここで  $L_0^T$  は  $L_0$  の形式的な転置を表し,

$$L_0^T = \partial_x [\partial_x + (\partial_x S(x))], \quad (4.55)$$

で与えられる.  $e^{tL_0^T} \rho(x; 0)$  は時刻  $t$  における分布を表す, これを

$$\rho(x; t) = e^{tL_0^T} \rho(x; 0). \quad (4.56)$$

と書くと,  $F(t, t)$  は

$$F(t, t) = \int \rho(x; t) \mathcal{O}(x; 0) dx. \quad (4.57)$$

と変形される. ここで,  $\rho(x; t)$  は

$$\frac{\partial \rho(x; t)}{\partial t} = L_0^T \rho(x; t), \quad (4.58)$$

を満たす. これは Fokker-Planck 方程式 (4.10) であるので,  $t \rightarrow \infty$  において  $\rho(x; t) \rightarrow e^{-S}$  が証明できる. したがって  $F(t, t)$  は  $t \rightarrow \infty$  において, 経路積分で定義される期待値

$$F(t, t) = \int dx \mathcal{O} e^{-S}, \quad (4.59)$$

に収束する.

つぎに, (b) を証明する.  $F$  の  $\tau$  微分は

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} F(t, \tau) &= \int \frac{\partial}{\partial \tau} P(x, y, t - \tau) \mathcal{O}(x + iy, \tau) dx dy + \int P(x, y, t - \tau) \frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{O}(x + iy, \tau) dx dy, \\ &= - \int L^T P(x, y, t - \tau) \mathcal{O}(x + iy, \tau) dx dy + \int P(x, y, t - \tau) L \mathcal{O}(x + iy, \tau) dx dy, \end{aligned} \quad (4.60)$$

部分積分ができれば, 2つの項は相殺して,

$$\frac{\partial}{\partial \tau} F(t, \tau) = 0, \quad (4.61)$$

が成り立つ.  $F(t, \tau)$  は  $\tau$  に依存しないため,  $F(t, 0) = F(t, t)$  が成り立つ.

(a), (b) が成り立てば, 複素ランジュバン法における物理量の期待値と, 経路積分で定義される物理量の期待値の等価性が成り立つ. そのためには2つの条件が必要である. 条件の1つは,  $y$  に関する部分積分において表面項が消失することで, 確率分布  $P(x, y; t)$  が  $|x| \rightarrow \infty$  だけでなく,  $|y| \rightarrow \infty$  においても  $P \rightarrow 0$  となる必要がある. もう1つは, 物理量および作用が holomorphic であること, つまり複素化された力学変数に対して Cauchy-Riemann 関係式を満たす必要がある.

正しい解を与える条件が導出され, 複素ランジュバン法で得られた解が正しいものであるかどうかの判定が可能となった. ただし, 実際のシミュレーションにおいて (a), (b) が満たされるかどうかを判断することはそれほど容易ではない. 特に, 多変数の理論では位相空間も高次元となり,  $P$  を図示し, それが遠方で収束するかどうかを判断することはそれほど容易ではない. これに対しては, Aarts らの正当化条件を異なる形で定式化したものが [8] で議論されており, ドリフト項の確率分布を用いた実効的な正当性判定条件が導入されている.

正当化条件が導出されたことの重要な意義は, 複素ランジュバン法の改良の方向性を明示したことにある. つまり, (a), (b) の条件を破る可能性を極力排除するような改良を施せば良いのである. 正当性条件を破る要因は2つあり, 1つは  $P(x, y; t)$  の  $y$  方向の広がりの問題で変位運動問題 (excursion problem)[9] と呼ばれる. もう1つは作用の holomorphicity の破れで特異ドリフト問題 (singular drift problem) と呼ばれる. Excursion problem は複素化の影響で理論の複素化された方向が不安定化するという問題で様々な理論で発生する. 特異ドリフト問題もフェルミオン行列式を含む理論で頻繁に発生する. それはフェルミオン行列式がゼロとなる点,  $\det \Delta = 0$  でフェルミオンの有効作用  $S \propto \log \det \Delta$  の解析性が壊れるためである. 複素ランジュバン法を格子 QCD に応用した場合も上の問題が発生するのだが, その際に発生する変位運動問題を克服するために導入されたのがゲージクーリング (gauge cooling) 法であり, これにより QGP 相高密度領域のシミュレーションが実現された. 次節では QCD への応用に進み, そこで発生する問題とその対処法である gauge cooling について説明する.

#### 4.1.4 格子 QCD への応用

##### 実作用の場合

まず, 作用が実の場合の QCD に対してランジュバン法を応用する. 前章と同様にランジュバン時間を  $t$ , 離散化されたランジュバン時間間隔を  $\epsilon$ , QCD 作用を  $S$  と書く. リンク変数をランジュバン時間の関数と見なし, その時間発展に対するランジュバン方程式

$$U_{x\mu}(t + \epsilon) = e^{iX} U_{x\mu}(t), \quad (4.62)$$



を考える (C.4 章参照). ここでドリフト項は

$$X = \sum_a \lambda_a \left[ \left( -D_{ax\mu} S \right) \epsilon + \sqrt{2\epsilon} \eta_{ax\mu} \right], \quad (4.63)$$

で与えられ,  $\eta$  は確率変数,  $\lambda_a$  はゲルマン行列を表す.  $D_{ax\mu}$  は微分演算子

$$D_{ax\mu} f(U_\mu(x)) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{f(e^{i\delta\lambda_a} U_\mu(x)) - f(U_\mu(x))}{\delta} \quad (4.64)$$

で定義される.  $\delta$  は無限小パラメータである. ドリフト項を具体的に書くと, フェルミオン作用  $S_f = -\frac{N_f}{4} \ln \det \Delta$  に対しては,

$$X_f = \frac{N_f}{4} \sum_{a=1}^{N_c^2-1} \text{tr} [\Delta^{-1} D_a \Delta] \lambda_a \epsilon \quad (4.65)$$

を得る. 理論的枠組を議論するだけであれば上の定義で十分だが, (4.65) 式の計算は時間がかかるため, bilinear noise method (双 1 次ノイズ法) [10] を用いる. 新しいガウス型ノイズ  $\eta$  を導入し, トレースを

$$\begin{aligned} \text{tr} [\Delta^{-1} D_{ax\mu} \Delta] &= \eta^\dagger \Delta^{-1} D_{ax\mu} \Delta \eta, \\ &= \psi^\dagger D_{ax\mu} \Delta \eta, \end{aligned} \quad (4.66)$$

と変形する.  $\psi$  は  $\psi^\dagger = \eta^\dagger \Delta^{-1}$  で定義され, CG 法を用いて求める. (4.65) 式を解くためには, フェルミオン行列のランクと同数回 CG 法を解く必要があるのに対して, bilinear ノイズ法では一回 CG 法を計算すればよいので, 計算時間を大幅に短縮することができる.

#### 複素作用の場合

次に作用が複素数の場合を考える. 力学変数が実スカラー  $x$  の場合,  $x \rightarrow z = x + iy$  と複素化し, 作用と物理量も複素平面に解析接続することで複素ランジュバン法を定義した. 変数が複素スカラーの場合は, 実部と虚部それぞれを複素化することで複素ランジュバン法を定義する. 格子 QCD の力学変数であるリンク変数は  $8 (= N_c^2 - 1)$  個の実変数で記述できる. 例えば, 単位元近傍の元  $U = e^{i\omega_a \lambda_a}$  では  $\omega_a$  ( $a = 1, 2, \dots, 8$ ) が実パラメータである. これらの実パラメータを複素化すればリンク変数が複素化される. 複素化 ( $\omega \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ ) するとリンク変数は  $SU(3)$  から  $SU(3, \mathbb{C})$  に拡張される. リンク変数が複素拡張されたことを念頭に置いて, (4.62) 式を QCD に対する複素ランジュバン方程式と見なしてもよいが, 複素化されたことを強調するために, 複素化されたリンク変数をもとのリンク変数と区別して

$$U_{x\mu} \in SU(3) \rightarrow \mathcal{U}_{x\mu} \in SU(3, \mathbb{C}) \quad (4.67)$$

と表すことにする [11]. 複素化されたリンク変数  $\mathcal{U}_{x\mu}$  はユニタリ行列ではなく,  $(\mathcal{U}_{x\mu})^\dagger = (\mathcal{U}_{x\mu})^{-1}$  は成り立たない. さらに,  $\omega_a$  の虚部の変域は  $(-\infty, \infty)$  であるので, リンク変数はこの方向にノンコンパクトとなる.

次に, 作用  $S$  や物理量  $O$  を解析接続する. これは  $S$  や  $O$  における  $U^\dagger$  をあらかじめ  $U^{-1}$  と表しておき,  $U$  を  $\mathcal{U}$  に置き換えれば良い. たとえば, プラケットは

$$U_{\mu\nu}(n) = U_{n,\mu} U_{n+\hat{\mu},\nu} U_{n+\hat{\nu},\mu}^\dagger U_{n,\nu}^\dagger \rightarrow \mathcal{U}_{\mu\nu}(n) = \mathcal{U}_{n,\mu} \mathcal{U}_{n+\hat{\mu},\nu} \mathcal{U}_{n+\hat{\nu},\mu}^{-1} \mathcal{U}_{n,\nu}^{-1}. \quad (4.68)$$

となる. フェルミオン行列式や物理量についても同様の複素化を行う.

(4.62) 式の  $U$  を  $\mathcal{U}$  に置き換えたものが複素ランジュバン方程式となる;

$$\mathcal{U}_{x\mu}(t+\epsilon) = e^{iX}\mathcal{U}_{x\mu}(t). \quad (4.69)$$

表面的には (4.69) 式は (4.62) 式は同じだが, 複素化によるユニタリ性の破れのために, リンク変数の含む独立な成分の個数が増えている. (4.69) 式は増えた成分に対するランジュバン方程式も含んでおり, それが複素化によって導入された成分 (スカラー場のケースにおける  $y$  に対するランジュバン方程式) を記述する.

### 4.1.5 ゲージクーリング法

複素化によってリンク変数はノンコンパクトとなる. 格子 QCD に対する複素ランジュバンシミュレーションでは, このノンコンパクトな方向へのフローが発生することがある. これはスカラー変数の場合における  $y$  方向の広がりに対応し, 広がりが大きくなると正当化条件,  $|y| \rightarrow \infty$  において  $P(x, y; t) \rightarrow 0$ , を破ってしまう. この問題を克服するために開発されたのが, 複素化されたゲージ変換を利用したゲージクーリング法である [12].

格子 QCD 作用はゲージ変換

$$U_{n\mu} \rightarrow g_n U_{n\mu} g_{n+\hat{\mu}}^\dagger, \quad g_n \in \text{SU}(3) \quad (4.70)$$

のもとで不変である. 一方, 複素化した QCD 作用は拡張されたゲージ変換

$$\mathcal{U}_{n\mu} \rightarrow g_n \mathcal{U}_{n\mu} g_{n+\hat{\mu}}^{-1}, \quad g_n \in \text{SL}(3, \mathbb{C}) \quad (4.71)$$

の下で不変である. 複素化に伴ってゲージ群が拡大されている.

複素ランジュバン法の正当化条件として作用の解析性, 確率分布が複素化された方向に広がらないことの2つの条件があることは既に述べた. 格子ゲージ理論の複素化において複素化された方向に対応するのがリンク変数の  $\text{SL}(3, \mathbb{C})$  成分である. リンク変数の  $\text{SU}(3)$  からのずれを表すユニタリティノルム [12] を

$$\mathcal{N}_u = \frac{1}{4V} \sum_{n,\mu} \text{tr} [\mathcal{U}_{n\mu} \mathcal{U}_{n,\mu}^\dagger + (\mathcal{U}_{n,\mu} \mathcal{U}_{n,\mu}^\dagger)^{-1} - 2 \times \mathbf{1}] \quad (4.72)$$

で定義する. エルミート共役は複素化の後のリンク変数  $\mathcal{U}$  に対して取る.  $\mathcal{U} \in \text{SU}(3)$  の場合,

$$\mathcal{U}^\dagger = \mathcal{U}^{-1}$$

であるから,  $\mathcal{N}_u = 0$  である. 一方,  $\mathcal{U} \notin \text{SU}(3)$  の場合,  $\mathcal{U}^\dagger \neq \mathcal{U}$  なので  $\mathcal{N}_u \neq 0$  である. つまり, ユニタリティノルムは複素化された方向への距離を与えている. これを複素化されたゲージ変換で抑制するのが複素ランジュバン法のアイデアである.

ユニタリティノルムは  $\text{SU}(3)$  不変であるが,  $\text{SL}(3, \mathbb{C})$  不変性は持たないので, 複素化されたゲージ変換  $g_n \in \text{SL}(3, \mathbb{C})$  によって値を変えることが可能である. このとき, 行列  $g_n$  を適切に選ぶことでユニタリティ

ノルムが必ず減少するようなゲージ変換を構成することができる。まず、ある格子点上での変換行列  $g_n$  を考える。このゲージ変換は格子点  $n$  にリンクするすべてのリンク変数に作用する。ユニタリティノルムの中で格子点  $n$  に結合する項のみ抜き出すと

$$\mathcal{N}_u(n) = \sum_{\mu} \left[ \mathcal{U}_{n,\mu} \mathcal{U}_{n,\mu}^{\dagger} + (\mathcal{U}_{n,\mu} \mathcal{U}_{n,\mu}^{\dagger})^{-1} + \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu} \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu}^{\dagger} + (\mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu} \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu}^{\dagger})^{-1} \right] \quad (4.73)$$

格子点  $n$  に結合するリンク変数のゲージ変換は

$$\mathcal{U}_{n,\mu} \rightarrow \mathcal{U}'_{n,\mu} = g_n \mathcal{U}_{n,\mu}, \quad (4.74)$$

$$\mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu} \rightarrow \mathcal{U}'_{n-\hat{\mu},\mu} = \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu} g_n^{-1}, \quad (4.75)$$

で与えられる。ユニタリティノルムを抑制するためには、ノンコンパクトな方向のゲージ変換を考えればよいから、エルミート行列  $G (G^{\dagger} = G)$  および実パラメータ  $\alpha$  を導入して、 $g_n$  を

$$g_n = e^{\alpha G} \quad (4.76)$$

と定義する。最急降下法と同様に、微小変換  $g_n \sim 1 + \alpha G$  を考えると、ユニタリティノルムの変化分は

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{N}_u(n) = \sum_{\mu} \left[ \mathcal{U}_{n,\mu} \delta \mathcal{U}_{n,\mu}^{\dagger} + (\delta \mathcal{U}_{n,\mu}) \mathcal{U}_{n,\mu}^{\dagger} + (\mathcal{U}_{n,\mu} \delta \mathcal{U}_{n,\mu}^{\dagger})^{-1} + ((\delta \mathcal{U}_{n,\mu}) \mathcal{U}_{n,\mu}^{\dagger})^{-1} \right. \\ \left. + \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu} \delta \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu}^{\dagger} + (\delta \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu}) \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu}^{\dagger} + (\mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu} \delta \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu}^{\dagger})^{-1} + ((\delta \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu}) \mathcal{U}_{n-\hat{\mu},\mu}^{\dagger})^{-1} \right] \quad (4.77) \end{aligned}$$

で与えられる。 $G_n$  を

$$G_n = - \left\{ \sum_{\nu} \left[ \mathcal{U}_{n\nu} \mathcal{U}_{n\nu}^{\dagger} - (\mathcal{U}_{n\nu}^{\dagger})^{-1} \mathcal{U}_{n\nu}^{-1} - \mathcal{U}_{n-\hat{\nu}}^{\dagger} \mathcal{U}_{n-\hat{\nu}} + \mathcal{U}_{n-\hat{\nu}}^{-1} (\mathcal{U}_{n-\hat{\nu}}^{\dagger})^{-1} \right] \right\}, \quad (4.78)$$

を選べば  $\delta \mathcal{N}_u \leq 0$  となり、ゲージ変換のもとでノルムは減少する。

ユニタリティノルムを減少させるようなゲージ変換が定義できた。ランジュバン方程式によるリンク変数のアップデート後に、ゲージクーリングによってユニタリティノルムを減少させるのがゲージクーリング法のアイデアである。ゲージクーリングは複数回行ってもよいので、1回のランジュバンアップデートに対するゲージクーリングの回数に任意性がある。シミュレーションでは、ゲージクーリングの回数やその際のパラメータ  $\alpha$  はユニタリティノルムを最も小さくするようなものを選べば良い。

ゲージクーリング法は発見法的に導入されたため、当初その理論的正当性に対する批判があったが、ゲージ不変な物理量に対しては正しい方法であることが証明されている [4]。また、ゲージクーリング法はもともとゲージ不変性に対する方法として導入されたが、後に、対称性の生成子の数が大きければどのような理論に対しても応用出来る事が指摘され、実際にランダム行列模型への応用が実現されている [13, 14]。

ゲージクーリング法は [12] で導入され、通常の複素ランジュバンシミュレーションが破綻する場合でも、ゲージクーリング法を行うことでランジュバンシミュレーションが安定化することが示された。その後、heavy dense QCD や、QGP 相高密度 QCD に対するシミュレーションが達成された [5, 15, 16]。Sixty らの研究では、

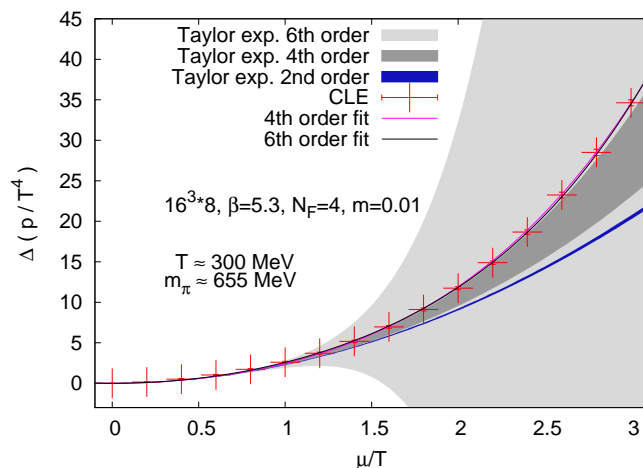


Figure 4.1: 複素ランジュバン法とゲージクーリングで求めた QCD の圧力.[15] から引用.  $\mu/T < 1$  では CLE とテイラー展開がよく一致している.  $\mu/T$  が大きくなるとテイラー展開では誤差が広がるのに対して, CLE ではそのような問題なく  $\mu/T$  を増加させることができる.

化学ポテンシャルが  $\mu/T = 5 \sim 10$  程度までのシミュレーションが実現されている. [16] では, 複素ランジュバン法の結果が位相クエンチシミュレーションに reweighting を組み合わせた結果と比較され, 結果が一致することが示されている. 最近では, QGP 相高密度領域における状態方程式も計算されている [15], そこでは  $\mu/T = 3 \sim 4$  まで状態方程式が計算されており, これは前章で紹介した方法の限界を大きく超えている (図 4.1). また, ゲージ作用が改良されており, より連続極限に近づいた計算になっている. 正当化条件はある程度満たされているようである.

ここで, 重点サンプリング法に基づく符号問題回避法に対して複素ランジュバン法がどのような利点があるのかをまとめておく.

化学ポテンシャルの増加  $\mu = 0$  での配位を用いた reweighting, カノニカル法, テイラー展開や, 虚数化学ポテンシャルからの解析接続は化学ポテンシャルに関する外挿法となっており, 化学ポテンシャルの増加とともに計算の妥当性が低下する問題があった. 複素ランジュバン法では調べたいパラメータ値での直接シミュレーションが可能のため, 外挿に起因した問題は発生しない.

**計算量の体積依存性** 重点サンプリングに基づく方法は化学ポテンシャルに関する外挿であるため, フェルミオン行列式の計算が必要であり, それが計算量の格子体積に対する強い依存性をもたらした. 複素ランジュバン法は調べたいパラメータ点での直接シミュレーションであるため, フェルミオン行列式計算が不要であり, 計算量の体積依存性が大幅に削減できる. 重点サンプリングに基づく方法では,  $\mu = 0$  近傍を除けば, 大きい格子体積の研究が難しかったが, CLM では大規模格子での計算が可能となっており, 将来的に高密度領域においても連続極限外挿まで達成できる可能性がある.

計算科学的な観点においては, CLM のシミュレーションで用いるアルゴリズムは通常の格子 QCD シミュレーションで用いるアルゴリズムと基本的に同じであり, これまでに蓄積された様々な計算の改

良法が利用できることも大きな利点である。

位相ゆらぎ Reweighting 法に代表されるように、重点サンプリングに基づく方法は位相ゆらぎが激しいと破綻する。一方、複素ランジュバン法は、reweighting 法における関係式 (3.22) を含まないため、reweighting 因子の位相ゆらぎは破綻原因とはならず、平均位相因子が 0 となるような場合でも利用できる。

正当性の判定 もう 1 つの重要な利点は、複素ランジュバン法の正当性判定条件が与えられている点である。Reweighting 法にはオーバーラップ問題、Taylor 展開には高次項の打ち切りなどの系統誤差があるが、これらの影響を定量的に評価することは難しく、結果の妥当性の判断が実際には難しかった。一方、複素ランジュバン法の正当性条件はある程度定量的に定義されるため、シミュレーションから結果の妥当性判定までを自己完結的に行うことが可能となった。

実際、複素ランジュバン法では従来の方法の限界 ( $\mu/T \sim 1$ ) を大きく越えるシミュレーションが実現されており、上記の利点がどれだけ有効であったかが伺い知れる。

このように CLM は有用な方法であるが、いくつかの課題も見つかっている。まず、ハドロン相有限密度領域への応用は、正当性条件の 1 つである解析性が破れる問題があるため難しい課題となっている。この問題は次節で詳しく説明する。

2 つ目の課題として、複素ランジュバン法の格子 QCD への応用は格子結合定数  $\beta$  が小さい場合に不安定になることが指摘されている [16]。この問題の原因は完全にはわかっていないが、最近、フェルミオン行列の逆行列計算にあることが指摘されている [17]。また、 $\beta$  の減少に伴いユニタリティノルムが増加することも報告されている [18]。

ランジュバン法の自己相関など、数値シミュレーションとしての妥当性に必要な情報の集積がまだ不十分であり、今後の研究が必要な状況である。経験的には、複素ランジュバン法における自己相関長はハイブリッドモンテカルロ法のそれと比べてかなり長いようである。

#### 4.1.6 低温への応用-特異ドリフト問題

##### ハドロン相における特異ドリフト問題

ゲージクーリングを用いることで高温高密度 QCD への応用が実現され、更なる応用として低温領域の研究も期待されるが、ハドロン相では作用の非解析性の問題が発生することがわかってきた。また、その問題が前章で説明した  $\mu = m_\pi/2$  と同じフェルミオン行列式のゼロから発生することもわかってきており、この問題の難しさが改めて認識されている。ここでは、低温 QCD に対する複素ランジュバン法の破綻がどのように生じるのかを説明し、近年の取り組みを紹介する。

この問題を最初に報告したのは、おそらく Mollgaard と Splittorff である。Mollgaard と Splittorff はゼロ温度有限密度のカイラルランダム行列理論 (ChRMT) に複素ランジュバン法を応用し、結果が位相クエンチ解に収束することを報告した [19]。位相クエンチ解は本来の解とは異なるものであり、この結果は誤収束が起きていることを示唆している。Greensite はポリヤコフループを用いた有効モデルでも CLM が破綻することを

指摘した [20]. その後, Mollgaard と Splittorff は力学変数の表示 (座標系) を利用する解法を考案し, ChRMT に対して正しい解が得られる事を示した [21]. その際に, 正しい解を再現するケースとしないケースでフェルミオン行列の固有値分布を比較し, 誤収束がある場合固有値がゼロに近い値をとることを指摘した.

当初, この問題は, 有効フェルミオン作用  $S_f \propto \log \det \Delta$  の対数切断が解析性を破ることが原因であると考えられたが, Nishimura と Shimasaki は積分

$$Z = \int dx w(x)$$

に対して, ドリフト項を

$$v(x) = w(x)^{-1} \frac{\partial w(x)}{\partial x} \quad (4.79)$$

と表すことで, 有効作用を導入せずにランジュバン方程式を書き下せることを示し, 問題が  $w = 0$  を与えるような確率分布にあることを指摘した [22].

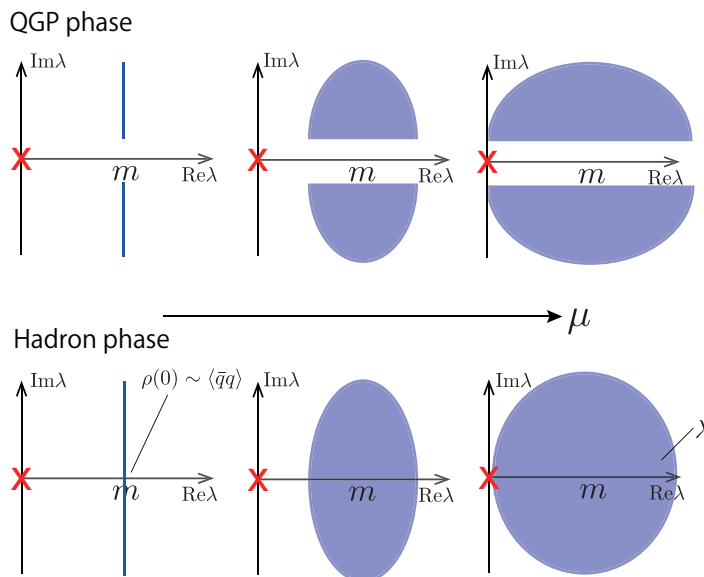


Figure 4.2: フェルミオン行列の固有値の化学ポテンシャルに伴う変化. ハドロン相と QGP 相で振舞が異なることを示している.  $x$  で示した図の原点で, フェルミオン行列式はゼロとなり, 作用の解析性が壊れる.

ChRMT で起きた CLM の破綻は, フェルミオン行列  $\Delta = D + m$  が零固有値を持つことで作用の解析性が破れ, 複素ランジュバン法の正当性条件を破ってしまうことで発生する. ChRMT の Dirac 演算子と QCD の Dirac 演算子は反エルミート性, Banks-Casher 関係式などの性質が同じであるため, ChRMT で発生した問題は QCD でも発生する. このことを理解するためにフェルミオン行列  $\Delta = D + m$  および, ディラック演算子  $D$  について考えてみよう.

$\mu = 0$  のときディラック演算子  $D$  の固有値は純虚数の対を組むから, フェルミオン行列  $D + m$  の固有値は  $\pm i\lambda + m$ , ( $\lambda \in \mathbb{R}$ ) となる. すなわち, 複素平面上で実部が  $m$  の線に 1 次元的に分布する.  $D$  の固有値分

布を  $\rho(\lambda)$  と書くと, Banks-Casher 関係式から, 零固有値の密度  $\rho(0)$  とカイラル凝縮の間に

$$\Sigma = \frac{\pi}{V} \rho(0) \quad (4.80)$$

の関係が成り立つ [23]. したがって, カイラル対称性が破れたハドロン相では  $\rho(0) \propto \Sigma \neq 0$ , QGP 相では  $\rho(0) \propto \Sigma = 0$  となる. つまり, QGP 相でのみギャップが存在する.

ディラック演算子に化学ポテンシャルを導入すると, ディラック固有値は複素数となり,  $\Delta$  の固有値は実部が  $m$  の線上から外れ, 2 次的に分布する. その分布の広がりも化学ポテンシャルの増加とともに広がる. QGP 相では固有値分布がギャップを持つため, 化学ポテンシャルが増加してもフェルミオン行列の固有値はゼロとはならない. 一方, ハドロン相ではギャップがないために, フェルミオン行列の固有値がゼロとなりうる. どちらの相でも QCD に対するランジュバン方程式自体は極を持っているが, QGP 相ではカイラル対称性が回復した真空にあるため, 作用が極を持つような配位は出現しない. 一方, ハドロン相では極が発生するような配位が出現することになり, これが正当性条件を破り, CLM が破綻する.

$\mu = m_\pi/2$  においてフェルミオン行列式の零点が問題を引き起こすことから, この問題は early onset 問題と関連していることが示唆される. 符号問題に対する対処法がうまく機能しない場合に, 得られる解が位相クエンチに近いという振舞も early onset 問題と共通である.

#### 特異ドリフト問題に対する研究

QCD 相図解明に向けて残る課題がハドロン相有限密度領域の問題である. この章の最後にこの問題に対する近年の研究の取り組みを紹介する.

Mollgaard と Splittorff は, カイラルランダム行列における特異ドリフト問題に対して, 理論の複素変数  $z$  をデカルト座標ではなく極座標  $z = re^{i\theta}$  で表すことで, 特異ドリフト問題が解決することを示した [21]<sup>6</sup>. ハドロン相, 低密度領域で期待されるのは化学ポテンシャル依存性が発生しない振舞である. 極座標  $z = re^{i\theta}$  を採用し, さらに作用の化学ポテンシャル依存性が  $ze^\mu$  という形の場合, 複素化を行うことで  $\theta$  が複素数となり,  $\theta$  の虚部と化学ポテンシャル  $e^\mu$  の相殺が起こることで化学ポテンシャル依存性が発生しない Silver Blaze 的な振舞が得られる. これは, 特異ドリフト問題解決の実例を示した重要な例である. 極座標の方法は化学ポテンシャルと  $\theta$  の虚部を相殺させる方法であるが, この方法は  $\theta$  が  $U(1)$  位相でなければならない. QCD は  $SU(3)$  なので, この相殺機構を満たすことが出来ない.

極座標の方法より一般的に利用できるのが, ゲージクーリングを拡張した方法である [13, 14]. ゲージクーリング法はもともとゲージ群に応用されたが, ゲージ不変性に限られたものではなく, 生成子の個数が系の力学変数と同程度存在するような理論であれば利用できる. ゲージクーリングに用いるノルムもユニタリティノルムに限られておらず, 問題に関係したノルムを定義すればよい. [13, 14] では, カイラルランダム行列理論の  $U(N) \times U(N)$  対称性, ノルムとして特異ドリフト問題に関係した反エルミートノルム

$$\mathcal{N}_{\text{a.h.}} = \text{ctr}(D + D^\dagger)(D + D^\dagger)^\dagger \quad (4.81)$$

<sup>6</sup>ここで, 理論の複素変数とはカイラルランダム行列理論に含まれるももとの複素変数であり, 実変数を複素化したものではないことに注意.

を用いる方法が提案された. この拡張されたゲージクーリング方法によってカイラルランダム行列理論において正しい解が得られることが報告されている.

極座標表示および拡張されたゲージクーリング法はどちらも, ディラック固有値分布を変化させることでフェルミオンドリフトの極の発生を回避し, それによって複素ランジュバン法の正当化条件を保持する方法となっている. では, ディラック固有値分布を変化させることは問題ないのであろうか? この点に関して筆者は2つの質問を受けることが多かった. 1つ目はゲージ不変なディラック固有値分布がそもそもゲージ変換で変わるのか, 2つ目はディラック固有値分布が変わるような振舞が複素ランジュバン法で正当化されるのか, である. 1つ目の問いについては, ディラック固有値はゲージクーリングの前後で不変であるが, ゲージクーリングの前後でゲージ配位が異なり, 次のランジュバンステップにおけるディラック固有値分布が変わる. 2つ目の問いについては, ディラック固有値分布が複素ランジュバン法で正当化されるかどうかという事が関係しており, 固有値分布全域と, ゼロモード密度を分けて考える必要がある. まず, ディラック固有値分布は holomorphic な物理量でないため, 複素ランジュバン法では正当化されない. これは, ディラック固有値密度が実正の関数で, 実正の関数は Cauchy-Riemann 関係式をみたさないことからわかる. 複素ランジュバン法の正当化条件には物理量の正則性があり, 従って, non-holomorphic なディラック固有値分布は複素ランジュバン法で求めることができない. 言い換えると, 複素ランジュバン法で求めるディラック固有値分布は物理的な固有値分布とは異なる. ゲージクーリング法や座標系の選択で変化するのは複素ランジュバン法で得られる非物理的なディラック固有値分布であり, 理論における物理的なディラック固有値分布を変化させているわけではないのである. したがって, 複素ランジュバン法においてディラック固有値分布を変化させることは問題がない. ここで1つ注意すべき点がある. ディラック行列の零固有値密度は Banks-Casher 関係式を通して holomorphic な物理量であるカイラル凝縮と関係しており, 複素ランジュバン法が正しく機能していれば, カイラル凝縮もディラック零固有値密度もゲージクーリングで変えることはできない. これは, ハドロンの相で  $m$  が小さくなるとフェルミオン行列式が0となるようなゲージ配位の出現は避けられないことを意味する.

上記の議論をまとめると, ディラック固有値分布は非正則なので複素ランジュバン法においては物理的な量ではなく, ゲージクーリングで変わっても良い. これはゲージクーリング等による固有値分布の修正を可能にする利点となっている. 零固有値密度がカイラル凝縮と関係する点は, 複素ランジュバン法でカイラル凝縮を計算可能にする利点であるが, 同時に, CLM でゲージクーリングを行ってもカイラル凝縮がゼロとなるような配位の出現は避けられないと言う CLM の限界を意味する.

現在, 格子 QCD のハドロンの相で発生する特異ドリフト問題に対する研究が進められている. 反エルミートノルムの方法は, [24] において QCD への応用が議論されている. QCD の場合, 反エルミートノルムはユニタリティノルムと類似した式となることがわかっている. 反エルミートノルムの方法はランダム行列では上手く機能するが, QCD ハドロンの相への応用ではユニタリティノルム, 反エルミートノルムどちらの抑制も難しいことが示唆されている. これは, QCD とカイラルランダム行列理論ではボソン作用に違いがあるためと考えられる. ランダム行列理論はボソン部の作用がガウス型となっており, これが系を安定化させるため, excursion 問題が発生せず, 特異ドリフト問題の対処に力点を置ける. 一方, QCD ではノンコンパクトな方向



に理論が不安定であり, excursion 問題が起きやすい. 反エルミートノルムを考慮すると, ユニタリティの抑制がうまくいかず, シミュレーションの安定化が難しくなる. QCD ハドロン相では, 特異ドリフト問題とユニタリティの破れの両方が問題となるのである.

特異ドリフト問題から話が逸れるが, 複素ランジュバン法に関する新しい発展として, ドリフト項の確率分布を用いた複素ランジュバン法の正当化条件が導出された [8]. それ以前にも, 物理量の確率分布など分布の振舞が複素ランジュバン法の正当化条件に関係することはわかっていたが, [8]において, 正当性条件がドリフト項の分布の楕円の振舞として定量的に定義された. 条件の定量化に加えて, ドリフト項は全ての理論に対して利用可能な一般的な尺度であること, ランジュバンシミュレーションでは必ず計算される量であること, からより実用的な判定条件となっている.

特異ドリフト問題に対する解法として, 理論の変形 (deformation) と外挿を組み合わせた方法が [25, 26] で提案されている.  $\det \Delta$  に対するシミュレーションが  $\Delta$  の零固有値の存在のためにうまくいかない場合に, フェルミオン行列を  $\Delta \rightarrow \Delta + \alpha \Gamma$  とする.  $\Gamma$  は適当な行列,  $\alpha$  はこの項の大きさをコントロールするパラメータである. 特異点の問題がおきない  $\alpha \neq 0$  の領域でシミュレーションを行い,  $\alpha \rightarrow 0$  に外挿するという方法である.  $\alpha \neq 0$  から  $\alpha = 0$  への外挿の際に, どの程度の  $\alpha$  までの情報を使うかの判断が難しいが, それをドリフト項の確率分布 [8] を用いて判断し, 正しい解を与えるような  $\alpha$  のみを用いて  $\alpha \rightarrow 0$  外挿をとる. これにより, SO(10) 行列模型に対して正しい解が得られることが示されている. 最近では, deformation の技法が QCD のハドロン相にも応用されている [27].

また, Hayata, Tanizaki, Hidaka らは one-site Hubbard 模型を用いて, 複素ランジュバン法とレフシェツシンブル法を比較し, 低温有限密度において, 複数の鞍点が特異点をはさみこむ形で存在し, それらの寄与が重要となる場合には複素ランジュバン法が破綻することを指摘し, reweighting 法と組み合わせることでその問題をある程度回避できる可能性を報告している [28]. ここでの結果は理論のフロー構造に依存しており, QCD と one-site Hubbard 模型のフロー構造はおそらく異なることから<sup>7</sup>結果がどの程度 QCD に一般化できるかはわからない. 他にも, レフシェツシンブル法と組み合わせる方法 [29] や, reweighting と組み合わせる方法 [30, 31] など, 新しい試みが続いている.

さまざまな方法が提案されているが, いずれの方法も一長一短あり, QCD ハドロン相有限密度領域に対する決定的な方法は確立されていない. 現在も方法の改良の試みが続けられている.

## 参考文献

- [1] G. Parisi and Y.-s. Wu, *Perturbation Theory Without Gauge Fixing*, Sci. Sin. **24** (1981) 483.  
 [2] G. Parisi, *ON COMPLEX PROBABILITIES*, Phys. Lett. **B131** (1983) 393–395.

<sup>7</sup>One-site Hubbard 模型における鞍点の周期構造は, 転送行列の指数部が力学変数となっていることに関係していると考えられる. QCD では転送行列そのものが力学変数となるため, 同種の周期構造が生じるかどうかはわからない.

- [3] J. R. Klauder, *Coherent State Langevin Equations for Canonical Quantum Systems With Applications to the Quantized Hall Effect*, Phys. Rev. **A29** (1984) 2036–2047.
- [4] G. Aarts, E. Seiler, and I.-O. Stamatescu, *The Complex Langevin method: When can it be trusted?*, Phys. Rev. **D81** (2010) 054508, [[arXiv:0912.3360](#)].
- [5] D. Sexty, *Simulating full QCD at nonzero density using the complex Langevin equation*, Phys.Lett. **B729** (2014) 108–111, [[arXiv:1307.7748](#)].
- [6] P. H. Damgaard and H. Huffel, *Stochastic Quantization*, Phys. Rept. **152** (1987) 227.
- [7] G. Aarts, F. A. James, E. Seiler, and I.-O. Stamatescu, *Adaptive stepsize and instabilities in complex Langevin dynamics*, Phys. Lett. **B687** (2010) 154–159, [[arXiv:0912.0617](#)].
- [8] K. Nagata, J. Nishimura, and S. Shimasaki, *The argument for justification of the complex Langevin method and the condition for correct convergence*, [arXiv:1606.0762](#).
- [9] G. Aarts, F. A. James, E. Seiler, and I.-O. Stamatescu, *Complex Langevin: Etiology and Diagnostics of its Main Problem*, Eur. Phys. J. **C71** (2011) 1756, [[arXiv:1101.3270](#)].
- [10] G. G. Batrouni, G. R. Katz, A. S. Kronfeld, G. P. Lepage, B. Svetitsky, and K. G. Wilson, *Langevin Simulations of Lattice Field Theories*, Phys. Rev. **D32** (1985) 2736.
- [11] K. Nagata, J. Nishimura, and S. Shimasaki, *Justification of the complex Langevin method with the gauge cooling procedure*, [arXiv:1508.0237](#).
- [12] E. Seiler, D. Sexty, and I.-O. Stamatescu, *Gauge cooling in complex Langevin for QCD with heavy quarks*, Phys.Lett. **B723** (2013) 213–216, [[arXiv:1211.3709](#)].
- [13] K. Nagata, J. Nishimura, and S. Shimasaki, *Testing a generalized cooling procedure in the complex Langevin simulation of chiral Random Matrix Theory*, PoS LATTICE2015 (2016) 156, [[arXiv:1511.0858](#)].
- [14] K. Nagata, J. Nishimura, and S. Shimasaki, *Gauge cooling for the singular-drift problem in the complex Langevin method - a test in Random Matrix Theory for finite density QCD*, JHEP **07** (2016) 073, [[arXiv:1604.0771](#)].
- [15] D. Sexty, *Calculating the EoS of the dense quark-gluon plasma using the Complex Langevin equation*, [arXiv:1907.0871](#).
- [16] Z. Fodor, S. D. Katz, D. Sexty, and C. Torok, *Complex Langevin dynamics for dynamical QCD at nonzero chemical potential: a comparison with multi-parameter reweighting*, [arXiv:1508.0526](#).

- [17] J. Bloch and O. Schenk, *Selected inversion as key to a stable Langevin evolution across the QCD phase boundary*, in 35th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2017) Granada, Spain, June 18-24, 2017, 2017. [arXiv:1707.0887](#).
- [18] J. B. Kogut and D. K. Sinclair, *Applying Complex Langevin Simulations to Lattice QCD at Finite Density*, [arXiv:1903.0262](#).
- [19] A. Mollgaard and K. Splittorff, *Complex Langevin Dynamics for chiral Random Matrix Theory*, Phys.Rev. D88 (2013), no. 11 116007, [[arXiv:1309.4335](#)].
- [20] J. Greensite, *Comparison of complex Langevin and mean field methods applied to effective Polyakov line models*, Phys. Rev. D90 (2014), no. 11 114507, [[arXiv:1406.4558](#)].
- [21] A. Mollgaard and K. Splittorff, *Full simulation of chiral random matrix theory at nonzero chemical potential by complex Langevin*, Phys.Rev. D91 (2015), no. 3 036007, [[arXiv:1412.2729](#)].
- [22] J. Nishimura and S. Shimasaki, *New insights into the problem with a singular drift term in the complex Langevin method*, Phys. Rev. D92 (2015), no. 1 011501, [[arXiv:1504.0835](#)].
- [23] T. Banks and A. Casher, *Chiral Symmetry Breaking in Confining Theories*, Nucl. Phys. B169 (1980) 103.
- [24] K. Nagata, H. Matsufuru, J. Nishimura, and S. Shimasaki, *Gauge cooling for the singular-drift problem in the complex Langevin method — an application to finite density QCD*, in Proceedings, 34th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2016): Southampton, UK, July 24-30, 2016, 2016. [arXiv:1611.0807](#).
- [25] Y. Ito and J. Nishimura, *The complex Langevin analysis of spontaneous symmetry breaking induced by complex fermion determinant*, JHEP 12 (2016) 009, [[arXiv:1609.0450](#)].
- [26] Y. Ito and J. Nishimura, *Spontaneous symmetry breaking induced by complex fermion determinant — yet another success of the complex Langevin method*, PoS LATTICE2016 (2016) 065, [[arXiv:1612.0059](#)].
- [27] K. Nagata, J. Nishimura, and S. Shimasaki, *Complex Langevin calculations in finite density QCD at large  $\mu/T$  with the deformation technique*, Phys. Rev. D98 (2018), no. 11 114513, [[arXiv:1805.0396](#)].
- [28] T. Hayata, Y. Hidaka, and Y. Tanizaki, *Complex saddle points and the sign problem in complex Langevin simulation*, Nucl. Phys. B911 (2016) 94–105, [[arXiv:1511.0243](#)].
- [29] S. Tsutsui and T. M. Doi, *An improvement in complex Langevin dynamics from a view point of Lefschetz thimbles*, [arXiv:1508.0423](#).

- [30] J. Bloch, J. Meisinger, and S. Schmalzbauer, *Rewighted complex Langevin and its application to two-dimensional QCD*, PoS LATTICE2016 (2017) 046, [[arXiv:1701.0129](#)].
- [31] J. Bloch, *Reweighting complex Langevin trajectories*, Phys. Rev. **D95** (2017), no. 5 054509, [[arXiv:1701.0098](#)].

## Chapter 5

### おわりに

有限密度格子 QCD および符号問題解法の研究に関する初期から近年までの歴史を振り返った。Reweighting 法, テイラー展開, 虚数化学ポテンシャル, カノニカル法などの重点サンプリングに基づく符号問題回避法, および複素作用でも配位生成が可能な複素ランジュバン法を題材として, アイデア, 応用例, 注意点および適用限界について説明した。符号問題解法は微修正も含めれば多岐にわたるため, 本稿で扱えなかったテーマもたくさんあるが, ここで説明した内容はその他の方法の理解にも役立つものと思う。本稿で扱えなかった中で主要な方法として, 位相クエンチシミュレーション, 状態密度法, レフシェツシムブル法, テンソルネットワークなどがある。本稿で議論すべきものであるが, 筆者に研究経験がなく理解が不十分なため割愛した。

QCD 相図に対する有限密度格子 QCD 研究の現状と今後の課題を簡潔にまとめる。

**高温** ( $T > T_c$ ) 符号問題は比較的マイルドで, 状態方程式が化学ポテンシャルの低次の関数であるため, 計算が比較的容易。符号問題回避法では  $\mu/T \sim 1$  程度まで計算可能。テイラー展開と虚数化学ポテンシャルでは連続極限が実現されている。Reweighting とカノニカル法には格子体積の課題がある。複素ランジュバン法では  $\mu/T \sim 4, 5$  程度までの計算が実現されており, 現在は計算の高精度化が進んでいる。

**$T_c$  近傍** 位相ゆらぎが激しく, 状態方程式は化学ポテンシャルの高次関数となる。テイラー級数の収束は遅いため, テイラー展開や虚数化学ポテンシャルは  $\mu$  の低次近似が有効な範囲でのみ妥当であり, QCD 臨界点探索への有用性には疑問がある。MPR と Lee-Yang ゼロ点を用いた臨界点発見の報告があるが, ゼロ点の誤差についての課題が指摘されている。複素ランジュバン法には特異点の問題及び小さい  $\beta$  における不安定性の問題があり, この領域への応用は進んでいない。現時点で最も成果を上げているのはおそらくカノニカル法で, QCD 臨界点が複数グループで報告されている。ただし計算は小さい格子で行われており, 格子サイズを大きくすることが今後の課題。

**低温**  $\mu < m_\pi/2$  までは  $\mu$  依存性がなく,  $\mu = m_\pi/2$  で激しい位相揺らぎが発生するため, 重点サンプリング

に基づく符号問題回避法の応用は難しい. 複素ランジュバン法では特異点の問題を解決できるかがポイントとなる. 理論の変形を用いたアプローチなどが現在研究されている.

もちろん, これはあくまで筆者の現時点での理解に基づいており, 今後の研究によって現時点で不可能な領域が研究できるようになる可能性もある. 逆に現時点で正しいと思われていた計算の問題点が見つかる可能性もある. いずれにせよ, QCD 相図解明には複数の研究者による精力的な研究が必要とされる.

符号問題の解法とは, 経路積分を解くための計算量をどこまで低減できるか, という問題であり, より効率の良い解法を開発する問題である. 符号問題は数値積分の問題であるので, おそらく一般的な解法は存在せず, 被積分関数の性質によって適切な方法を選ぶ必要があるだろう.

符号問題は計算量の問題と述べたが, では経路積分の解法に必要な計算量に最小値はあるのだろうか, またあったとするとそれはどの程度であろうか? この問題は計算科学における計算複雑性に関する「 $P = NP$  問題」に関係している [1]. 問題サイズ  $x$  のある問題が与えられたとき,  $x^N$  の多項式 (Polynomial) 程度の時間で解けるクラスを  $P$ , 多項式時間では解けないが, 解が得られたときにその解が正しいかどうかを多項式時間で判定することが出来る問題がクラス  $NP$  である. 多項式時間で解ければ同様の時間で解が正しい事が判定できるので, クラス  $P$  がクラス  $NP$  の部分集合であることは明らかであるが, その逆は成り立つかどうかは一般的にはわかっていない.  $P = NP$  問題は, 端的に言えば, 問題のスケール  $N$  を増加させたとき, その問題を解く時間は  $N$  のべきで増えるのか,  $N$  の指数で増加するのかという問題である. 有名な例として「素数の判定」がある.  $P = NP$  問題は未だ解かれていないが, 等号が成り立たない, つまり, クラス  $NP$  の中には  $P$  に属さない問題が存在する, と予想されている. それは, 多項式時間では解けない問題が存在するという事を意味している. 経路積分を解くための計算量についても, 最小限の計算量がどの程度かはわからないが, 符号問題が厳しい場合に指数的となるケースがあるかもしれない. その場合どれだけ良い方法を開発しても多項式時間では解けないという事になる.

計算量の指標として期待されるのが量子もつれ (quantum entanglement) である. 符号問題解法として期待されるテンソルネットワーク法に必要な計算量が系の量子もつれに依存することが知られている. 量子もつれは量子的真空中における有効自由度を与える量であり, これが数値積分解法に必要な計算量の尺度となっていることは自然でありかつ深淵な示唆であるように筆者には思われる. 量子もつれの計算はそれ自体大変なので, 格子ゲージ理論に対する量子もつれの研究はまだ始まったばかりであるが [2-6], このような新しい観点からも符号問題の解法が進展して行くかもしれない.

## 参考文献

- [1] G. ベネンティ, G. カザーティ, and G. ストゥリーニ (訳廣岡一), 量子計算と量子情報の原理. シュプリンガー・ジャパン株式会社, 2012.
- [2] P. V. Buividovich and M. I. Polikarpov, *Numerical study of entanglement entropy in  $SU(2)$  lattice gauge theory*, Nucl. Phys. **B802** (2008) 458–474, [[arXiv:0802.4247](https://arxiv.org/abs/0802.4247)].

- [3] Y. Nakagawa, A. Nakamura, S. Motoki, and V. I. Zakharov, *Entanglement entropy of  $SU(3)$  Yang-Mills theory*, PoS LAT2009 (2009) 188, [[arXiv:0911.2596](#)].
- [4] Y. Nakagawa, A. Nakamura, S. Motoki, and V. I. Zakharov, *Quantum entanglement in  $SU(3)$  lattice Yang-Mills theory at zero and finite temperatures*, PoS LATTICE2010 (2010) 281, [[arXiv:1104.1011](#)].
- [5] E. Itou, K. Nagata, Y. Nakagawa, A. Nakamura, and V. I. Zakharov, *Entanglement in Four-Dimensional  $SU(3)$  Gauge Theory*, PTEP **2016** (2016), no. 6 061B01, [[arXiv:1512.0133](#)].
- [6] S. Aoki, E. Itou, and K. Nagata, *Entanglement entropy for pure gauge theories in  $1 + 1$  dimensions using the lattice regularization*, Int. J. Mod. Phys. **A31** (2016), no. 35 1650192, [[arXiv:1608.0872](#)].





# Appendix A

## 2章の補足

### A.1 格子ゲージ理論の構成

この章では、付録として、格子ゲージ作用の構成を簡単に紹介する。格子ゲージ理論については、すでに良い専門書が存在するので、より詳しい内容に興味のある読者はそちらを参照していただきたい。

#### A.1.1 連続ミンコフスキー時空における QCD

まず、連続ミンコフスキー時空におけるゲージ理論のラグランジアンを確認する。QED のゲージ場  $A_\mu$ , ( $\mu = 0, 1, 2, 3$ ) とフェルミ場  $\psi$  に対するラグランジアンは次の式で与えられる

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\not{D} - m)\psi. \quad (\text{A.1})$$

$D_\mu$  は共変微分  $D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu$ ,  $g$  はゲージ結合定数を表す。

QCD のゲージ場であるグルーオン場を  $A_\mu^a$ , ( $a = 1, 2, \dots, 8$ ) と表すことにする。  $A_\mu^a$  の各成分が光子場と同じくゲージラグランジアンに従う

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}\sum_{a=1}^8 F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a} + \bar{\psi}(i\not{D} - m)\psi. \quad (\text{A.2})$$

共変微分と場の強さは

$$D_\mu = (\partial_\mu + igA_\mu^a t^a), \quad (\text{A.3})$$

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc}A_\mu^b A_\nu^c. \quad (\text{A.4})$$

$t^a$  は SU(3) の生成子である。  $t^a$  を用いると場の強さは

$$F_{\mu\nu} = \sum_a F_{\mu\nu}^a t_a, \quad (\text{A.5})$$

となり, これは以下のように表すこともできる

$$F_{\mu\nu} = \frac{1}{ig}[D_\mu, D_\nu] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig[A_\mu, A_\nu]. \quad (\text{A.6})$$

生成子に関する公式  $\text{tr} t^a t^b = \frac{1}{2}\delta_{ab}$  を用いると

$$\begin{aligned} \text{tr}[F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}] &= \sum_{a,b} F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu b} \text{tr}[t^a t^b], \\ &= \frac{1}{2} \sum_{a=1}^8 F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

となるから, QCD ラグランジアンは

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}\text{tr} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \bar{\psi}(i\mathcal{D} - m)\psi. \quad (\text{A.8})$$

次にユークリッド化を行う. 時間  $t$  を  $t \rightarrow -ix_4, (x_4 \in \mathbb{R})$  と解析接続する.  $\partial_t \rightarrow i\partial_4$  となる. ユークリッド作用を

$$S_E = \int d^4 x_E \left( \frac{1}{2}\text{tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \bar{\psi}(\mathcal{D} + m)\psi \right) \quad (\text{A.9})$$

とかくと,

$$e^{iS} \rightarrow e^{-S_E}, \quad (\text{A.10})$$

となる.

### A.1.2 格子 QCD

プラケット作用 (2.10) 式の連続極限が正しいゲージ作用を与える事を示す. 格子点  $n$  から  $\mu, \nu$  方向につくるプラケット  $U_{\mu\nu}(n)$  は  $a \ll 1$  において

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}(n) &= e^{iga^2 F_{\mu\nu}}, \\ &= \mathbf{1} + iga^2 F_{\mu\nu} + \frac{1}{2}(iga^2)^2 F_{\mu\nu}^2 + \dots \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

と展開できる.  $U_{\mu\nu}(n)$  と  $F_{\mu\nu}$  はこの単位正方格子に対して与えられる  $3 \times 3$  行列である. 上の式から単位行列成分を取り除くと

$$\mathbf{1} - U_{\mu\nu}(n) = -iga^2 F_{\mu\nu} + \frac{1}{2}g^2 a^4 F_{\mu\nu}^2 - \dots \quad (\text{A.12})$$

リンク変数はユニタリ行列  $U^{-1} = U^\dagger$  であり, また  $F_{\mu\nu}$  はエルミート行列  $F^\dagger = F$  である. エルミート行列の固有値は実であるから, その対角和も実である. (A.12) 式のトレースをとった後, 実部をとると, 右辺の奇数項は消えて

$$\text{Retr}[\mathbf{1} - U_{\mu\nu}(n)] = \frac{1}{2}g^2 a^4 \text{tr} F_{\mu\nu}^2 + O(a^6) \quad (\text{A.13})$$

$\mu, \nu$  に関する和と  $n$  に関する和をとると,

$$\sum_n \sum_{\mu, \nu} 2\text{Re tr}[1 - U_{\mu\nu}(n)] = g^2 \sum_n \sum_{\mu, \nu} a^4 \text{tr} F_{\mu\nu}^2 (1 + O(a^2)). \quad (\text{A.14})$$

さらに,

$$a^4 \sum_n = \int d^4x \quad (\text{A.15})$$

を用いると

$$\sum_n \sum_{\langle \mu, \nu \rangle} 2\text{Re tr}[1 - U_{\mu\nu}(n)] = g^2 \int d^4x \text{tr} F_{\mu\nu}^2 (1 + O(a^2)). \quad (\text{A.16})$$

右辺では,  $\mu, \nu$  についてアインシュタインの既約を取るものとする. 従って格子ゲージ作用は

$$S = \int d^4x \left( \frac{1}{2} \text{tr} F_{\mu\nu}^2 \right) = \frac{1}{g^2} \sum_n \sum_{\mu, \nu} \text{Re tr}[1 - U_{\mu\nu}(n)]. \quad (\text{A.17})$$

で与えられる.

右辺の第一項は体積に比例した定数項を表す. この項は, 物理量の期待値を考える際に分子と分母で相殺するため, しばしばこの項を無視してゲージ作用を

$$S = -\frac{1}{g^2} \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} \text{Re tr}[U_{\mu\nu}(n)], \quad (\text{A.18})$$

$$= -\frac{1}{2g^2} \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} \text{tr}[U_{\mu\nu}(n) + U_{\mu\nu}(n)^\dagger]. \quad (\text{A.19})$$

と表す. また, 格子結合定数を  $\beta = 2N_c/g^2$  として導入する.

### A.1.3 Staggered fermion の反エルミート関係式

スタaggerドフェルミオン (2.11) 式の 2 項目を  $D_{xy}$  と書くと,  $D$  は格子上でのディラック演算子に対応している. 連続理論におけるディラック演算子は反エルミート性  $D^\dagger = -D$  を持つが, 格子上でのスタaggerド型ディラック演算子も反エルミート性  $D_{yx}^\dagger = -D_{xy}$  を持つ事を示す.

$D_{xy}$  のエルミート共役を考えると

$$D_{yx}^\dagger = \sum_\nu \frac{\eta_\nu(y)}{2a} [e^{\mu\delta_{4\nu}} U_\nu(y)^\dagger \delta_{y+\hat{\nu}, x} - e^{-\mu\delta_{4\nu}} U_\nu(y - \hat{\nu}) \delta_{y-\hat{\nu}, x}] \quad (\text{A.20})$$

ここで  $\delta_{y+\hat{\nu}, x} = \delta_{y, x-\hat{\nu}}$  であるから, 第一項目は  $U_\nu^\dagger(y) = U_\nu^\dagger(x - \hat{\nu})$  と置き換えてもよい. 同様に 2 項目も  $U_\nu(y - \hat{\nu}) = U_\nu(x)$  と書いてよい. また, 1 項目と 2 項目の位置を入れ替えて,

$$D_{yx}^\dagger = \sum_\nu \frac{\eta_\nu(y)}{2a} [-e^{-\mu\delta_{4\nu}} U_\nu(x) \delta_{y, x+\hat{\nu}} + e^{\mu\delta_{4\nu}} U_\nu(x - \hat{\nu})^\dagger \delta_{y, x-\hat{\nu}}] \quad (\text{A.21})$$

$\eta_\nu(x + \hat{\nu}) = \eta_\nu(x)$ ,  $\eta_\nu(x - \hat{\nu}) = \eta_\nu(x)$  であるから

$$D_{yx}^\dagger = \sum_\nu \frac{\eta_\nu(x)}{2a} [-e^{-\mu\delta_{4\nu}} U_\nu(x) \delta_{y,x+\hat{\nu}} + e^{\mu\delta_{4\nu}} U_\nu(x - \hat{\nu})^\dagger \delta_{y,x-\hat{\nu}}]. \quad (\text{A.22})$$

$\mu = 0$  のとき, 反エルミート性

$$D_{yx}^\dagger = -D_{xy} \quad (\text{A.23})$$

が得られる. また,  $\mu \neq 0$  の場合, 反エルミート性が破れることもわかる. 上の式を拡張すれば, 虚数化学ポテンシャルの場合にエルミート性が成り立つことも自明にわかる.

#### A.1.4 Haar 積分測度

群上の積分について簡単にまとめる<sup>1</sup>. コンパクト Lie 群  $G$  の元  $U$  は生成子の数と同数の実パラメータ  $\omega^{(k)}$  で表すことが出来る.  $U = U(\omega)$  に対する Haar 測度は

$$dU = c \sqrt{\det[g(\omega)]} \prod_k d\omega^{(k)} \quad (\text{A.24})$$

と定義される.  $c$  は規格化条件  $\int dU = 1$  から決まる定数を表す. ここで,  $g$  は計量テンソルであり

$$g(\omega) = \text{tr} \left[ \frac{\partial U(\omega)}{\partial \omega^{(n)}} U(\omega)^{-1} \left( \frac{\partial U(\omega)}{\partial \omega^{(m)}} U(\omega)^{-1} \right)^{-1} \right] \quad (\text{A.25})$$

で与えられる. ユニタリ群  $U^\dagger = U^{-1}$  の場合,

$$g(\omega) = \text{tr} \left[ \frac{\partial U(\omega)}{\partial \omega^{(n)}} \frac{\partial U(\omega)^\dagger}{\partial \omega^{(m)}} \right] \quad (\text{A.26})$$

例として,  $U(1)$  の場合の Haar 測度を具体的に書き下してみる.  $U = e^{i\omega}$  とかくと  $\partial_\omega U = iU$  であるから, ただちに,  $g(\omega) = 1$  を得る. したがって,

$$dU = cd\omega. \quad (\text{A.27})$$

規格化  $\int dU = 1$  より,  $c = 1/2\pi$ .  $U(1)$  の場合の Haar 積分測度は,

$$dU = \frac{d\omega}{2\pi}. \quad (\text{A.28})$$

#### A.1.5 ディラック演算子の性質と複素化の影響

ゲージ場の複素化がディラック演算子に与える影響を調べる. まず, 複素化前の通常の理論から考える. ディラック演算子を

$$\Delta = \gamma_\mu D_\mu + \mu\gamma_4, \quad (\text{A.29})$$

<sup>1</sup>[1] の 3.1.2 章参照.

と定義する. ここで  $D_\mu$  は共変微分であり,  $D_\mu^\dagger = -D_\mu$  を満たす. ユークリッド時空において  $\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu$  であるから,

$$\begin{aligned}\Delta^\dagger(\mu) &= -\gamma_\mu D_\mu + \mu\gamma_4, \\ &= -(\gamma_\mu D_\mu - \mu\gamma_4), \\ &= -\Delta(-\mu)\end{aligned}\tag{A.30}$$

次に,

$$\begin{aligned}\gamma_5 \Delta^\dagger(\mu) \gamma_5 &= \gamma_\mu D_\mu - \mu\gamma_4, \\ &= \Delta(-\mu)\end{aligned}\tag{A.31}$$

となる.

一方で, (A.29) 式から

$$\{D, \gamma_5\} = 0\tag{A.32}$$

が  $\mu$  に依らずに成り立つことがわかる. この反交換関係は  $\Delta$  が  $\gamma_\mu$  の 1 次のみ含む事の帰結である.

では, 次にゲージ場が複素化された状況を考える. この場合, 共変微分の反エルミート性は失われ,  $D_\nu^\dagger \neq -D_\nu$  である. このため,

$$\begin{aligned}\Delta^\dagger(\mu) &= -(\gamma_\mu D_\mu^\dagger - \mu\gamma_4), \\ &\neq -\Delta(-\mu),\end{aligned}\tag{A.33}$$

$$\begin{aligned}\gamma_5 \Delta^\dagger(\mu) \gamma_5 &= (\gamma_\mu D_\mu^\dagger - \mu\gamma_4), \\ &\neq \Delta(-\mu)\end{aligned}\tag{A.34}$$

一方で,  $\Delta$  は  $\gamma$  行列の 1 次のみを含むため,

$$\{\Delta(\mu), \gamma_5\} = 0\tag{A.35}$$

は理論が複素化された後でも成り立つ. まとめると, ディラック演算子は 3 つの重要な性質を持ち, それぞれは, 表 A.1 のような状況で成立する: 次に, 反エルミート性,  $\gamma_5$  エルミート性, 反交換関係から導かれる固有値の対称性を調べる.

反エルミート性

$D|u\rangle = \lambda|u\rangle$  が成り立つとする. このとき,

$$\langle u|D|u\rangle = \lambda\tag{A.36}$$

この式のエルミート共役をとると

$$(\langle u|D|u\rangle)^\dagger = \langle u|D^\dagger|u\rangle\tag{A.37}$$

Table A.1: フェルミオン行列に対する関係式と条件ごとの成立状況.

関係式	複素化前 ( $\mu = 0$ )	複素化前 ( $\mu \neq 0$ )	複素化後
$\Delta^\dagger = -\Delta$	成立	不成立	不成立
$\Delta^\dagger(\mu) = -\Delta(-\mu)$	成立	成立	不成立
$\gamma_5 \Delta^\dagger \gamma_5 = \Delta$	成立	不成立	不成立
$\gamma_5 \Delta^\dagger(\mu) \gamma_5 = \Delta(-\mu)$	成立	成立	不成立
$\{\Delta, \gamma_5\} = 0$	成立	成立	成立

左辺および右辺は

$$(l.h.s) = (\lambda)^\dagger = \lambda^*, \quad (\text{A.38})$$

$$(r.h.s) = \langle u | (-D) | u \rangle = -\lambda \quad (\text{A.39})$$

したがって,  $\lambda^* = -\lambda$  となり,  $\lambda$  は純虚数となる.

$\gamma_5$  エルミート性

$$\det(\Delta - \lambda I) = 0, \quad (\text{A.40})$$

$$\rightarrow \det(\Delta^\dagger - \lambda^* I) = 0, \quad (\text{A.41})$$

$$\rightarrow \det(\Delta - \lambda^* I) = 0 \quad (\text{A.42})$$

となる. したがって, 固有値は複素数の対  $(\lambda, \lambda^*)$  として現れる. これは実軸対称な分布を表す.

反交換関係

$\gamma_5 \Delta \gamma_5 = -\Delta$  より

$$\Delta |v_n\rangle = \lambda_n |v_n\rangle, \quad (\text{A.43})$$

$$\rightarrow \gamma_5 \Delta \gamma_5 |v_n\rangle = \lambda_n \gamma_5 |v_n\rangle, \quad (\text{A.44})$$

$$\rightarrow \Delta |u_n\rangle = -\lambda_n |u_n\rangle \quad (\text{A.45})$$

したがって, 固有値は  $(\lambda_n, -\lambda_n)$  の対を組み, それらの固有値の間には  $|u_n\rangle = \gamma_5 |v_n\rangle$  が成り立つ.

Wilson フェルミオンの対称性

Wilson フェルミオンは

$$\Delta_W = \Delta_0 + a D_\mu D_\mu \quad (\text{A.46})$$

で与えられる. Wilson フェルミオン演算子は第 2 項目が存在するために, 反エルミート性を持たない. このため, Wilson ディラック演算子の固有値は複素数となる.

一方で,

$$\begin{aligned}\gamma_5 \Delta_W(\mu)^\dagger \gamma_5 &= \gamma_5 \Delta(\mu)^\dagger \gamma_5 + a \gamma_5 D_\mu D_\mu \gamma_5, \\ &= \Delta(-\mu) + a D_\mu D_\mu, \\ &= \Delta_W(-\mu)\end{aligned}\tag{A.47}$$

となり, すなわち  $\gamma_5$  エルミート性は通常どおり満たされている.





## Appendix B

### 3章の補足

#### B.1 $Z_3$ 変換と Roberge-Weiss 周期性

$Z_3$  変換は, ある時間  $\exists t_i, (i = 1, \dots, N_t)$  における  $\mu = 4$  方向の全てのリンク変数  $U_{n4}, n = (\forall \vec{x}, t_i)$  を

$$U_{n\mu} \rightarrow U'_{n\mu} = \omega U_{n\mu}, (\omega \in Z_3, \mu = 4)$$

と変換する操作である. ゲージ作用 (2.7) は  $U_{n\mu}$  と  $U_{n\mu}^\dagger$  を含むため, 明らかに  $Z_3$  不変である.

一方フェルミオン作用はこの対称性を陽に破る. この変換の下でのフェルミオン行列の変換性を縮約公式を用いて導く. (3.63) 式の中で  $Z_3$  変換の影響を受けるのは,  $\beta_i$  の部分のみで,  $\beta_i \rightarrow \omega\beta_i$  となる. したがって,  $Q$  は

$$Q \rightarrow \omega Q$$

と変換する. フェルミオン行列式の変換性は

$$\det \Delta(\mu) \rightarrow \det \Delta(\mu) = C_0 \xi^{-N_{\text{red}}/2} \det(\omega Q + \xi)$$

となり, したがって,  $\det \Delta$  は不変でない. すなわち, フェルミオン行列式が存在すると  $Z_3$  不変性は陽に破れてしまう.

ここで,  $\xi = e^{-\mu/T}$  を  $\omega\xi$  と変換すると

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \xi^{-N_{\text{red}}/2} \det \omega(Q + \xi)$$

となる. フェルミオン行列式のランクは  $N_c$  に比例するため,  $\omega^{N_c} = 1$  となり, フェルミオン行列式が不変となる.  $\omega\xi = e^{2\pi k/3i + \mu/T}, k \in \mathbb{Z}$  なのでこれは Roberge-Weiss 周期性の格子上での証明となっている.

## B.2 Lee-Yang 零点定理

Lee-Yang ゼロ点定理は Lee と Yang によって 1950 年頃に考案された。当時、特異性を持たない理論から相転移における熱力学的特異性がどのように発生するかが議論となっていたようで、この問題に答えを与えたのが Lee と Yang による Lee-Yang ゼロ点定理である<sup>1</sup>。

大分配関数 (3.50) を考える

$$Z(\mu) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=-N}^N Z_n \xi^n. \quad (\text{B.1})$$

$Z_n$  は任意の  $n$  に対して実かつ正であり、また粒子反粒子の対称性から  $Z_n = Z_{-n}$  を満たす。 $N$  は系に入りうる最大の粒子数を表し、格子上では有限値であるが、熱力学極限で無限大となる。 $Z_n$  と  $n$  粒子系の自由エネルギー、すなわち、ヘルムホルツの自由エネルギー  $f(n)$  の間には  $Z_n = \exp(-Vf(n)/T)$  の関係がある。(B.1) 式の  $Z_n$  は温度の関数であり、温度を固定したとき (B.1) 式は一つの級数を与える。

$N$  が有限の場合、(B.1) 式は正の量の有限和なので一様収束し、非解析性を持たない。Lee と Yang は、フガシティ多項式から非解析性、すなわち相転移、がどのように発生するかを考察し、複素平面上に分布する分配関数の零点が熱力学極限において非解析性をもたらすことを発見した。

(B.1) 式は  $\xi$  の  $2N$  次多項式と見なせるので、 $N$  が有限であれば、代数学の基本定理より  $2N$  個の根を持つ。その根を  $\xi_i$  と書くと  $Z(\mu)$  は因数分解により

$$Z(\mu) = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_{-N} \xi^{-N} \prod_{i=1}^{2N} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_i}\right). \quad (\text{B.2})$$

と表される。この根  $\{\xi_i\}$  は Lee-Yang 零点と呼ばれる。(B.1) は実正の  $\xi$  に対してゼロとなることはないため、 $\xi_i$  は正の実数にはなり得ない。また、対称性  $Z_n = Z_{-n}$  から、単位円内部の零点  $\xi_i$  は外部に  $1/\xi_i$  となるような対を持っている。つまり、Lee-Yang 零点は  $\xi$  に対する複素平面上の正の実軸を除く領域に分布し、それは単位円の内部と外部に対照な形で分布している。

物理的には化学ポテンシャルは実数であるから、 $\xi$  は正の実数であり、複素  $\xi$  平面上の正の実軸が物理的な領域に対応する。複素  $\xi$  平面上の正の実軸において、自由エネルギー  $f(\mu)$  が非解析的な性質を持たば相転移が発生する。 $N$  が有限な場合、 $Z(\mu)$  は任意の  $\mu$  に対して一様収束するため、相転移点は存在することができない。しかしながら、 $N \rightarrow \infty$  の極限をとると、複素平面に分布する Lee-Yang 零点が正の実軸に漸近することで自由エネルギーの非解析性が発生することができる。これが Lee-Yang ゼロ点定理である。

Lee-Yang 零点と特異性の関係は静電ポテンシャル問題との対応 (electrostatic analogy) から直感的に理解できる [3]。フガシティを複素数に拡張し  $\xi \in \mathbb{C}$ 、自由エネルギー  $f$  を  $\xi$  の関数に解析接続する。 $f$  の実部

<sup>1</sup> Lee-Yang ゼロ点定理に関する原論文 [2, 3] は読みやすく、定理の内容だけでなく科学論文としても非常に勉強になるので一読する価値がある。また、Lee-Yang ゼロ点定理に関する Blythe と Evans による論文 [4] の説明が比較的わかりやすく、入門に適しているかもしれない。なお、この文献では Lee-Yang ゼロ点定理の非平衡系への応用も議論されており、興味深い。

Table B.1: 熱力学 vs 静電ポテンシャル

$\phi$	静電ポテンシャル
$\nabla\phi$	電場
$\xi_i$	電荷の位置

$\phi \equiv \text{Re } f$  は

$$\phi(\xi) = -\frac{T}{V} \sum_{i=1}^{2N} \ln |\xi - \xi_i| - \frac{T}{V} \ln Z_N + \frac{NT}{V} \ln |\xi|. \quad (\text{B.3})$$

$\phi$  を  $\xi$  で微分すると,

$$\nabla_{\xi}^2 \phi(\xi) = -2\pi \frac{T}{V} \sum_{i=1}^{2N} \delta^{(2)}(\xi - \xi_i), \quad (\text{B.4})$$

を得る. ここで  $\nabla_{\xi} \equiv (\partial/(\partial \text{Re } \xi), \partial/(\partial \text{Im } \xi))$ . また

$$\nabla^2 \ln |z| = \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \ln |x + iy| = 2\pi \delta(x) \delta(y). \quad (\text{B.5})$$

を使った. (B.4) 式は 2 次元静電ポテンシャル問題におけるポアソン方程式である. 自由エネルギーの実部  $\phi$  は静電ポテンシャルに, その微分  $\nabla\phi$  は電場に, Lee-Yang 零点  $\xi_i$  は電荷の位置に, (B.4) 式はガウスの法則に, それぞれ対応することがわかる (表 B.1).

2 次元平面におけるある線上に電荷が離散的に分布している状況を考える. 電荷の間の領域ではポテンシャルおよび電場は解析関数である. 線上の単位長さあたりの電荷の個数を増やしていくと, 電荷密度が大きくなり, やがて分布は連続な分布となる. 線上に電荷が連続に分布している状況でこの線を垂直に横切ると, ポテンシャルは連続であるが, ポテンシャルの微係数である電場は不連続になる. これはコンデンサーの両側で電場の向きが逆になるという現象を 2 次元で述べたものにすぎない.

Lee-Yang ゼロ点の静電対応は, 熱力学的特異性と静電ポテンシャル問題における特異性が数学的に同構造であることを述べており, Lee-Yang 零点分布が稠密になると, 「電場」に対応する  $\nabla_{\xi}\phi$  がその線を横切って不連続に変化する. このような Lee-Yang ゼロ点の集積が複素フガシティ平面上の正の実軸で発生すると相転移が発生する.

Lee と Yang は原論文において, スピン  $\frac{1}{2}$  を持つ Ising 模型の Lee-Yang ゼロ点が複素  $e^h$  平面上の単位円上だけに分布することを示している [3]<sup>2</sup>. 他にスピン 3/2 のスピン模型 [5], Blume-Capel model, Potts model [6], 高温 QCD [7] などのゼロ点分布が知られている. また, Lee-Yang ゼロ点で温度を複素数に拡張する方法は Fisher によって提案されており, Fisher ゼロ点と呼ばれる.

相転移の次数は零点がどのように集積するかに応じて替わり,  $1/V$  で漸近する場合は 1 次相転移となる. 2 次の臨界点の場合は, 集積の仕方が臨界指数に依存する [4, 8, 9].

<sup>2</sup>Lee-Yang 零点定理は, 零点と相転移を関係付ける一般的な定式化と, Ising 模型における零点の単位円上の分布の証明という 2 つの内容がある. 特に区別する場合は後者を Lee-Yang 零円定理 (Lee-Yang zero circle theorem) と呼ぶこともある.

### B.3 Fourier Integral

(3.74) 式の導出を説明する。まず、フーリエ積分で  $e^{in\theta} = \cos n\theta$  とおいてよい。sin の項は対称性から積分に寄与しない。cos  $n\theta$  をべき展開すると

$$Z_n \propto \int_{-\pi/3}^{\pi/3} d\theta e^{-a\theta^2} \cos n\theta = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k n^{2k}}{(2k)!} I_k. \quad (\text{B.6})$$

を得る。ここで  $a = VT^3 c_2$  とおいた。  $I_k$  は

$$I_k = \int_{-\pi/3}^{\pi/3} d\theta e^{-a\theta^2} \theta^{2k}, \quad (\text{B.7})$$

で定義される。ガンマ関数  $\Gamma(z)$  および不完全ガンマ関数  $\Gamma(z, p)$  を用いると、  $I_k$  は

$$I_k = \frac{1}{a^{k+1/2}} \left( \Gamma(k+1/2) - \Gamma(k+1/2, a\pi^2/9) \right). \quad (\text{B.8})$$

不完全ガンマ関数  $\Gamma(z, p) = \int_p^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt$  は  $p \propto V \rightarrow \infty$  においてゼロに近づくため、  $I_k$  はガンマ関数のみで表すことができる。ガンマ関数に関する恒等式

$$\frac{\Gamma(k+1/2)}{(2k)!} = \frac{\sqrt{\pi}}{4^k k!}, \quad (\text{B.9})$$

を用いて (B.6) 式について和を取ると、(3.74) 式が得られる。

## Appendix C

### 4章の補足

#### C.1 Fokker-Planck 方程式の導出-離散化の場合

確率分布  $P(x; t)$  の時間変化を記述する Fokker-Planck 方程式を導出する. この導出はランジュバン時刻を連続にした場合と離散化した場合で異なる. ここでは, 離散化されたランジュバン方程式を考える. 連続の場合の証明は [10] などを参照.

離散化されたランジュバン方程式は<sup>1</sup>

$$x(t + \epsilon) = x(t) + \left( -\frac{\partial S}{\partial x} + \eta(t) \right) \epsilon. \quad (\text{C.2})$$

このときの  $x$  の変分を  $\delta x$  として, ランジュバン時刻が  $t$  から  $t + \epsilon$  に進んだときの, 物理量  $\mathcal{O}$  の期待値の差を  $\delta x$  について展開すると

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}(x(t + \epsilon)) \rangle_\eta - \langle \mathcal{O}(x(t)) \rangle_\eta &= \left\langle \partial_x \mathcal{O}(x(t)) \delta x(t) + \frac{1}{2} \partial_x^2 \mathcal{O}(x(t)) (\delta x(t))^2 \right\rangle_\eta, \\ &= \left\langle \partial_x \mathcal{O}(x(t)) (-\partial_x S + \eta(t)) \epsilon + \frac{1}{2} \partial_x^2 \mathcal{O}(x(t)) (-\partial_x S + \eta)^2 \epsilon^2 \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

一行目は  $\delta x$  の 2 次まで展開した式で, そこにランジュバン方程式を代入したのが 2 行目である. (C.3) 式は  $\eta$  の 1 次と 2 次の項を含んでいる. (4.6) 式から  $\eta^2$  の積分は

$$\begin{aligned} \langle \eta(t)^2 \rangle_\eta &= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\eta(t) \eta(t)^2 e^{-\frac{\epsilon}{4} \eta(t)^2}}{\int_{-\infty}^{\infty} d\eta(t) e^{-\frac{\epsilon}{4} \eta(t)^2}} \\ &= \frac{2}{\epsilon}, \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

<sup>1</sup> 離散化されたランジュバン方程式において  $\tilde{\eta} = \sqrt{\epsilon} \eta$  と再規格化することがある. その場合, ランジュバン方程式は

$$x(t + \epsilon) = x(t) - \frac{\partial S}{\partial x} \epsilon + \sqrt{\epsilon} \tilde{\eta}(t). \quad (\text{C.1})$$

となり, ノイズ積分は  $\langle \tilde{\eta}(t_1) \tilde{\eta}(t_2) \rangle_\eta = 2\delta(t_1 - t_2)$  となる. 勿論, ノイズ積分の規格化まで含めて無矛盾に決めれば規格化は適当によつてよい.

で与えられ,  $\eta$  の奇数べきの項は  $\langle \eta(t)^n \rangle_\eta = 0, \{n = 2m - 1, m \in \mathbb{Z}\}$  となりゼロとなる. これらを用いて確率変数  $\eta$  に対する積分を実行すると (C.3) 式は

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}(x(t+\epsilon)) \rangle_\eta - \langle \mathcal{O}(x(t)) \rangle_\eta &= \left\langle \partial_x \mathcal{O}(x(t)) (-\partial_x S) \epsilon + \frac{1}{2} \partial_x^2 \mathcal{O}(x(t)) \left( (\partial_x S)^2 \epsilon^2 + \tilde{\eta}^2 \epsilon^2 \right) \right\rangle_\eta, \\ &= \epsilon \left\langle -\frac{\partial \mathcal{O}(x(t))}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial x} + \frac{\partial^2 \mathcal{O}(x(t))}{\partial x^2} \right\rangle_\eta + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

となる.<sup>2</sup> 以下では, 省略のために,  $\partial_x = \partial/\partial x$  と書く事にする.

確率分布  $P(x; t)$  を用いて (C.5) 式の  $\eta$  積分を  $x$  積分に置き換えると, (C.5) 式の第一項目は

$$\begin{aligned} \langle (\partial_x \mathcal{O}) \partial_x S \rangle_\eta &= \int dx (\partial_x \mathcal{O}) (\partial_x S) P, \\ &= \int dx \left( \partial_x (\mathcal{O}(\partial_x S) P) - \mathcal{O} \partial_x ((\partial_x S) P) \right), \\ &= \left[ \mathcal{O}(\partial_x S) P \right]_{x \in d\Omega} + \int dx \mathcal{O} \left( -\partial_x (P \partial_x S) \right). \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

となる. ここで  $d\Omega$  は表面項を表す. 遠方において確率分布が十分小さければ一項目は無視してよい. (C.5) 式の2項目は

$$\begin{aligned} \langle \partial_x^2 \mathcal{O} \rangle_\eta &= \int dx (\partial_x^2 \mathcal{O}) P, \\ &= \int dx \left[ \partial_x \left( (\partial_x \mathcal{O}) P \right) - (\partial_x \mathcal{O}) (\partial_x P) \right], \\ &= \left[ (\partial_x \mathcal{O}) P \right]_{x \in d\Omega} - \int dx (\partial_x \mathcal{O}) (\partial_x P), \\ &= - \int dx \left[ \partial_x (\mathcal{O}(\partial_x P)) - \mathcal{O}(\partial_x^2 P) \right], \\ &= - \left[ \mathcal{O}(\partial_x P) \right]_{x \in d\Omega} + \int dx \mathcal{O}(\partial_x^2 P), \\ &= \int dx \mathcal{O}(\partial_x^2 P), \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

となる. ここで  $P$  の微分も無限遠方で十分小さいことを仮定した. 以上から,  $P$  の時間発展を表す Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial S}{\partial x} \right) P \quad (\text{C.9})$$

が導出できた.

<sup>2</sup> この際に,  $x(t)$  は  $\tau < t$  における  $\eta(\tau)$  には依存するが, ランジュバン時刻  $t$  における  $\eta(t)$  には依存しないことに注意. このため,

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{O}(x(t))}{\partial x} \eta(t) \right\rangle = 0 \quad (\text{C.6})$$

は  $\eta(t)$  の1次となりゼロとなる.

## C.2 Fokker-Planck ハミルトニアンとその平衡解

Fokker-Planck ハミルトニアン  $H_{\text{FP}}$  の構成,  $H_{\text{FP}}$  のエルミート性の証明を行う.

まず, ある関数

$$\psi(x; t) = P(x; t)e^{\frac{1}{2}S(x)} \quad (\text{C.10})$$

を考える. その時間微分は

$$\begin{aligned} \partial_t \psi &= (\partial_t P)e^{\frac{1}{2}S}, \\ &= [\partial_x(S' + \partial_x)P]e^{\frac{1}{2}S}, \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

で与えられる. 任意の微分可能な関数  $A$  に対して

$$(\partial_x A)e^{1/2S} = \left(\partial_x - \frac{1}{2}S'\right) \left(Ae^{\frac{1}{2}S}\right), \quad (\text{C.12})$$

が成り立つ. ここで  $\partial_x A = A'$  と省略した. この公式を用いると

$$\begin{aligned} -\partial_t \psi &= -\left(\partial_x - \frac{1}{2}S'\right) \left(\partial_x + \frac{1}{2}S'\right) \psi, \\ &= H_{\text{FP}} \psi \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

が得られる. この  $H_{\text{FP}}$  を Fokker-Planck ハミルトニアンと呼ぶ.

FP ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{\text{FP}}^\dagger &= -\left(\left(\partial_x - \frac{1}{2}S'\right)\left(\partial_x + \frac{1}{2}S'\right)\right)^\dagger, \\ &= -\left(\partial_x + \frac{1}{2}S'\right)^\dagger \left(\partial_x - \frac{1}{2}S'\right)^\dagger, \\ &= -\left(-\partial_x + \frac{1}{2}S'\right)\left(-\partial_x - \frac{1}{2}S'\right), \\ &= H_{\text{FP}} \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

を満たすので, エルミート演算子である.

FP ハミルトニアンはエルミート演算子である事を示す. そのためには,  $\int dx (H_{\text{FP}}\phi)^*\phi$  を考え,

$$\int dx (H_{\text{FP}}\phi)^*\phi = \int dx \phi^* H_{\text{FP}}\phi \quad (\text{C.15})$$

を示せば良い.  $H_{\text{FP}}$  を陽に書くと,

$$\int dx (H_{\text{FP}}\phi^*)\phi = -\int dx \left[ \left( \partial_x^2 + \frac{1}{2}\partial_x S' - \frac{1}{2}S'\partial_x - \frac{1}{4}S'^2 \right) \phi \right]^* \phi. \quad (\text{C.16})$$

$S \in \mathbb{R}$  であるので,

$$\int dx (H_{\text{FP}}\phi^*)\phi = -\int dx \left[ \left( \partial_x^2 + \frac{1}{2}\partial_x S' - \frac{1}{2}S'\partial_x - \frac{1}{4}S'^2 \right) \phi^* \right] \phi. \quad (\text{C.17})$$

各項を部分積分を用いて変形する,

$$\int dx (\partial_x^2 \phi^*) \phi = \int dx \phi^* \partial_x^2 \phi + (\text{s. t.}),$$

$$\int dx [\partial_x (S' \phi^*)] \phi = - \int dx \phi^* (S' \partial_x) \phi + (\text{s. t.}), \quad (\text{C.18})$$

$$\int dx S' (\partial_x \phi^*) \phi = - \int dx \phi^* (\partial_x S' \phi) + (\text{s. t.}), \quad (\text{C.19})$$

$$\int dx (S'^2 \phi^*) \phi = \int dx \phi^* S'^2 \phi + (\text{s. t.}). \quad (\text{C.20})$$

ここで (s. t.) は表面項  $x \in d\Omega$  を表す. これらを (C.17) 式に代入すると,

$$\begin{aligned} \int dx (H_{\text{FP}} \phi^*) \phi &= - \int dx \phi^* \left( \partial_x^2 - \frac{1}{2} S' \partial_x + \frac{1}{2} \partial_x S' - \frac{1}{4} S'^2 \right) \phi, \\ &= \int dx \phi^* H_{\text{FP}} \phi. \end{aligned} \quad (\text{C.21})$$

したがって,  $H_{\text{FP}}^\dagger = H_{\text{FP}}$ .

### C.3 第2量子化の例

FP ハミルトニアン の性質を理解する例題として, 簡単なポテンシャル

$$S = \frac{1}{2} k x^2 \quad (\text{C.22})$$

に対して, 第2量子化を実行してみる. 作用を代入すると  $H_{\text{FP}}$  は

$$H_{\text{FP}} = -\frac{1}{2} \partial_x^2 + \frac{1}{8} k^2 x^2 - \frac{1}{4} k \quad (\text{C.23})$$

となる. 生成消滅演算子  $a^\dagger, a$  を導入する;

$$a = \sqrt{\frac{1}{2\omega}} (\partial_x + \omega x), \quad (\text{C.24})$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{1}{2\omega}} (-\partial_x + \omega x). \quad (\text{C.25})$$

ここで  $\omega = k/2$ .  $x, \partial_x$  について解くと

$$\omega x = \sqrt{\frac{\omega}{2}} (a + a^\dagger), \quad (\text{C.26})$$

$$\partial_x = \sqrt{\frac{\omega}{2}} (a - a^\dagger). \quad (\text{C.27})$$

したがって, FP ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{\text{FP}} &= \frac{\omega}{2} (a a^\dagger + a^\dagger a) - \frac{1}{4} k, \\ &= \frac{\omega}{2} (a a^\dagger + a^\dagger a) - \frac{1}{2} \omega, \\ &= \omega a^\dagger a \end{aligned} \quad (\text{C.28})$$



となる. 零点振動項が除去されていることがわかる.

$n$  粒子状態  $|n\rangle$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \quad (\text{C.29})$$

を考える. これは

$$H_{\text{FP}}|n\rangle = \omega a^\dagger a|n\rangle = \omega n|n\rangle \quad (\text{C.30})$$

を満たすので, エネルギー  $\omega n$  を持つ  $H_{\text{FP}}$  の固有状態である.  $H_{\text{FP}}$  の固有状態は  $|n\rangle$  の重ね合わせで表すことができるから

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n|n\rangle. \quad (\text{C.31})$$

FP ハミルトニアンに代入すると,

$$(l.h.s) = -\frac{\partial}{\partial \tau}\psi = -\sum_{n=0}^{\infty} \dot{a}_n|n\rangle, \quad (\text{C.32})$$

$$(r.h.s) = H_{\text{FP}}\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \omega n|n\rangle. \quad (\text{C.33})$$

で与えられる.  $|n\rangle$  の直交性を用いると

$$\dot{a}_n = -\omega n \quad (\text{C.34})$$

となる. これを解けば

$$a_n = a_n^{(0)} e^{-\omega n \tau} \quad (\text{C.35})$$

となる.

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n^{(0)} e^{-\omega n \tau}|n\rangle. \quad (\text{C.36})$$

$\tau \rightarrow \infty$  においてゼロモード解のみが残り, 残りの解は全てゼロに漸近する. 確率分布  $P$  は

$$\begin{aligned} P(x, t) &= e^{-\frac{1}{2}S(x)}\psi(x, t), \\ &= e^{-\frac{1}{2}S(x)}a_0^{(0)}|0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

## C.4 格子 QCD に対するランジュバン法

格子ゲージ理論に対するランジュバン方程式を導出する. 分配関数は経路積分を用いて

$$Z = \int \mathcal{D}U e^{-S(U)}. \quad (\text{C.38})$$

で与えられる. ここで  $DU$  はハール積分測度である. リンク変数は

$$U_{x\mu} = e^{i\lambda_a \omega_{ax\mu}} \quad (\text{C.39})$$

力学変数として  $\omega$  を取る事にすれば, ランジュバン方程式は

$$\dot{\omega}_{ax\mu} = -\frac{\partial S}{\partial \omega_{ax\mu}} + \eta_{ax\mu}, \quad (\text{C.40})$$

で与えられる. ここで  $\eta_{ax\mu}$  はガウスノイズである.

ランジュバン方程式によるリンク変数の発展方程式を導く. 離散化されたランジュバン方程式は

$$\omega_{ax\mu}(t+\epsilon) = \omega_{ax\mu}(t) + \left( -\frac{\partial S}{\partial \omega_{ax\mu}} + \eta_{ax\mu} \right) \epsilon. \quad (\text{C.41})$$

ゲルマン行列  $\lambda_a$  をかけて,  $a$  についての和を取ると

$$\sum_a \lambda_a \omega_{ax\mu}(t+\epsilon) = \sum_a \lambda_a \left[ \omega_{ax\mu}(t) + \left( -\frac{\partial S}{\partial \omega_{ax\mu}} + \eta_{ax\mu} \right) \epsilon \right]. \quad (\text{C.42})$$

をえる. ここで  $\lambda_a$  は  $SU(N_c)$  の generator である. また, ガウスノイズは分布  $\exp(-\epsilon\eta^2/4)$  に従う.

ここで, ボックスミュラー法で乱数を生成するので, その際に便利な形に変形する. ボックスミュラー法では  $\exp(-x^2/2)$  に従う乱数を生成する. そこで  $\epsilon\eta^2/4 = \eta'^2/2$  となるような  $\eta'$  を定義する.  $\eta = \sqrt{2/\epsilon} \eta'$ .  $\eta'$  をあらためて  $\eta$  と書くと,

$$\sum_a \lambda_a \omega_{ax\mu}(t+\epsilon) = \sum_a \lambda_a \left[ \omega_{ax\mu}(t) + \left( -\frac{\partial S}{\partial \omega_{ax\mu}} \right) \epsilon + \sqrt{2\epsilon} \eta_{ax\mu} \right], \quad (\text{C.43})$$

以下, 数学的な厳密性は考えず, 直感的な議論を進める. まず, (C.39) 式より,  $\sum_a \omega_a \lambda_a = -i \ln U$  であるから, (C.42) 式は

$$\ln U_{x\mu}(t+\epsilon) = \ln U_{x\mu}(t) + iX, \quad (\text{C.44})$$

$$X = \sum_a \lambda_a \left[ \left( -\frac{\partial S}{\partial \omega_{ax\mu}} \right) \epsilon + \sqrt{2\epsilon} \eta_{ax\mu} \right] \quad (\text{C.45})$$

を得る. したがって, 無限小の  $\epsilon$  に対しては

$$U_{x\mu}(t+\epsilon) = e^{iX} U_{x\mu}(t), \quad (\text{C.46})$$

となる. これがランジュバン方程式の時間発展を与える.

格子 QCD では, 実際には, ゲージ場そのものではなく, リンク変数を力学変数として扱う. その場合の微分は

$$D_{ax\mu} f(U_\mu(x)) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{f(e^{i\delta \lambda_a} U_\mu(x)) - f(U_\mu(x))}{\delta} \quad (\text{C.47})$$

で与えられる. ここで  $\delta$  は無限小パラメータである.

ゲージドリフト項

ブラケット作用に対する具体的な表式を書き下してみる. あるリンク  $U$  を含むブラケットを

$$S = c \operatorname{tr} [UA + A^{-1}U^{-1}], \quad (c = -\frac{\beta}{6}), \quad (\text{C.48})$$

と書く. ここで, 次の複素ランジュバン法に備えて  $U^\dagger$  を  $U^{-1}$  と書いた. 通常の  $SU(N)$  ゲージ理論に対しては  $U^\dagger = U^{-1}$  が成り立つ.

(4.64) を用いると

$$S(U) \rightarrow S(e^{i\lambda_a\delta}U) = c \operatorname{tr} [e^{i\lambda_a\delta}UA + A^{-1}U^{-1}(e^{i\lambda_a\delta})^{-1}]. \quad (\text{C.49})$$

ここで,  $e^{i\lambda_a\delta}$  はユニタリ行列であるから,  $(e^{i\lambda_a\delta})^{-1} = (e^{i\lambda_a\delta})^\dagger = e^{-i\lambda_a\delta}$  である. ここで,  $\lambda_a$  がエルミート行列であることに注意.  $\delta$  の 1 次まで考慮すると,

$$S(e^{i\lambda_a\delta}U) = S(U) + (ic\delta) \operatorname{tr} [\lambda_a UA - A^{-1}U^{-1}\lambda_a] \quad (\text{C.50})$$

したがって,

$$D_a S = ic \operatorname{tr} \lambda_a (UA - A^{-1}U^{-1}) \quad (\text{C.51})$$

を得る. ここで, トレースの巡回対称性を用いた.

(4.63) に代入して,

$$\begin{aligned} X &= \sum_{a=1}^{N^2-1} (-D_{ax\mu} S + \eta_{ax\mu}) \lambda_a, \\ &= \sum_{a=1}^{N^2-1} \lambda_a (-ic \operatorname{tr} [\lambda_a (UA - A^{-1}U^{-1})] + \eta_{ax\mu}), \\ &= \sum_{a=1}^{N^2-1} \lambda_a (\operatorname{tr} [\lambda_a B] + \eta_{ax\mu}), \end{aligned} \quad (\text{C.52})$$

ここで  $B = -ic(UA - A^{-1}U^{-1}) = i(\beta/6)(UA - A^{-1}U^{-1})$  とおいた.

ここで Gell-Mann 行列の性質

$$\sum_{a=1}^{N_c^2-1} (\lambda^a)_{\alpha\beta} (\lambda^a)_{\gamma\delta} = 2 \left( \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{1}{N_c} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right) \quad (\text{C.53})$$

を用いると

$$X = 2 \left( B - \frac{1}{N_c} (\operatorname{tr} B) \mathbf{1} \right) + \sum_{a=1}^{N^2-1} \lambda_a \eta_{ax\mu}, \quad (\text{C.54})$$

を得る.

フェルミオンドリフト項フェルミオン作用は

$$S_f = -\frac{N_f}{4} \ln \det M \quad (\text{C.55})$$

で与えられる。まず,

$$D_a S_f = -\frac{N_f}{4} \text{tr} [M^{-1} D_a M]. \quad (\text{C.56})$$

したがって,  $X$  へのフェルミオンパートは

$$\begin{aligned} X_f &= -\sum_{a=1}^{N_c^2-1} (D_a S_f) \lambda_a \epsilon, \\ &= \frac{N_f}{4} \sum_{a=1}^{N_c^2-1} \text{tr} [M^{-1} D_a M] \lambda_a \epsilon, \end{aligned}$$

で与えられる。

## 参考文献

- [1] C. Gattringer, C. Lange, Quantum Chromodynamics on the Lattice - An Introductory Presentation, Springer, 2006.
- [2] C.-N. Yang and T. Lee, *Statistical theory of equations of state and phase transitions. 1. Theory of condensation*, Phys.Rev. **87** (1952) 404–409.
- [3] T. Lee and C.-N. Yang, *Statistical theory of equations of state and phase transitions. 2. Lattice gas and Ising model*, Phys.Rev. **87** (1952) 410–419.
- [4] R. A. Blythe and M. R. Evans, *The Lee-Yang Theory of Equilibrium and Nonequilibrium Phase Transitions*, Braz. J. of Phys. **33** (2003) 464.
- [5] T. Asano, *Generalized Lee-Yang's Theorem*, Jour. Phys. Soc. J. **25** (1968) 1220.
- [6] M. Biskup, C. Borgs, J. T. Chayes, L. J. Kleinwaks, and R. Kotecký, *General Theory of Lee-Yang Zeros in Models with First-Order Phase Transitions*, Physical Review Letters **84** (May, 2000) 4794–4797, [[math-ph/0004003](#)].
- [7] K. Nagata, K. Kashiwa, A. Nakamura, and S. M. Nishigaki, *Lee-Yang zero distribution of high temperature QCD and the Roberge-Weiss phase transition*, Phys. Rev. **D91** (2015), no. 9 094507, [[arXiv:1410.0783](#)].
- [8] C. Itzykson, R. B. Pearson, and J. B. Zuber, *Distribution of Zeros in Ising and Gauge Models*, Nucl. Phys. **B220** (1983) 415–433.
- [9] M. Stephanov, *QCD critical point and complex chemical potential singularities*, Phys.Rev. **D73** (2006) 094508, [[hep-lat/0603014](#)].
- [10] P. H. Damgaard and H. Huffel, *Stochastic Quantization*, Phys. Rept. **152** (1987) 227.