

原子核物理学基礎論 B

大西 明

8 有限密度格子 QCD と符号問題

QCD を非摂動的に解く第一原理計算手法であり、ハドロン質量、ハドロン間相互作用、QCD 熱力学、標準模型の行列要素等、ゼロ密度での様々な物理量の計算が行われてきた。ところが有限密度ではフェルミオン行列式が複素数となるためモンテカルロ計算の基礎となる確率解釈ができなくなる。フェルミオン行列式の位相を別に取り扱うことにより、物理量の計算は原理的に可能であるが、分母・分子ともにゼロに近づいて精度の高い計算が困難となる。この問題を「符号問題」と呼ぶ。

符号問題を乗り越えるため、ゼロ密度での微分を用いた方法、虚数化学ポテンシャルからの解析接続など、符号問題のない領域から有限密度領域の情報を得る様々な方法がこれまでに提案されている。また有限密度領域を直接取り扱う方法として、強結合領域でグルーオン積分を先に行う強結合格子 QCD、積分変数を複素数に拡張して積分経路をうまく選ぶことにより符号問題を抑える Lefschetz thimble 上での積分、複素変数での確率的方程式を解くことによって配位を採択する複素ランジュバン方程式の方法等がある。

この節では有限密度格子 QCD のいくつかの側面について紹介する。

8.1 格子 QCD

カラー $SU(N_c)$ における格子 QCD 作用を考えよう。

$$S_{\text{LQCD}} = \bar{q}Dq + S_G. \quad (8-1)$$

$d(=3)+1$ 次元のユークリッド時空において、時空は a を格子間隔として $(\tau, x, y, z) = (ai_\tau, ai_x, ai_y, ai_z)$ ($i_\mu \in \mathbb{Z}$) と離散化する (ここでは lattice unit ($a = 1$) を用いる)。グルーオンは格子点 $(x, x + \hat{\mu})$ を結ぶ $N_c \times N_c$ 行列のリンク変数 $U_\mu(x) = P \exp \left[ig \int_x^{x+\hat{\mu}} dx A_\mu(x) \right]$ で表す。リンク変数のゲージ変換は $U_\mu(x) \rightarrow V_x U_\mu(x) V_{x+\hat{\mu}}$ で与えられる。プラケット

$$U_{\mu\nu}(x) \equiv U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\mu} + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x + \hat{\nu}) = P \exp \left[ig \oint_{\square} dx A(x) \right] \quad (8-2)$$

のトレースはゲージ不変であり、作用としての候補となる。実際、 $U(1)$ ゲージの場合には周積分 $\oint dx A$ はストークスの定理から回転 $F_{\mu\nu}$ となる。 $SU(3)$ の場合でも、係数を調整すればグルーオンの作用 (Plaquette action) が得られる。

$$S_G = \frac{2N_c}{g^2} \sum_{\text{plaq.}} \left[1 - \frac{1}{N_c} \text{Re tr} U_{\mu\nu}(x) \right]. \quad (8-3)$$

クォークのゲージ変換は $q_x \rightarrow V_x q_x$, $\bar{q}_x \rightarrow \bar{q}_x V_x$, で与えられ、 $\bar{q}_x U_\mu(x) q_{x+\hat{\mu}}$ はゲージ不変である。クォークを含む作用は

$$\bar{q}Dq = \frac{1}{2} \sum_{x,\nu} \left[\bar{q}_x U_\nu(x) \Gamma_\nu e^{\mu\delta_{\nu,0}} q_{x+\hat{\nu}} - \bar{q}_{x+\hat{\nu}} U_\nu^\dagger(x) \Gamma_\nu e^{-\mu\delta_{\nu,0}} q_x \right] + m_0 \sum_x \bar{q}_x q_x \quad (8-4)$$

となる。ここで Γ_μ はユークリッド化した γ 行列であり、エルミートとする。

格子 QCD では、クォークは格子点での反可換なグラスマン数で表現する。グラスマン数の自乗はゼロなので全ての関数はそれぞれのグラスマン数の 1 次関数となり、 $\int d\chi = 0$ (全てと反可換な定数) と $\int \chi d\chi = 1$ (全てと可換な定数と規格化の定義) を与えれば汎関数積分は定まる。これらの定義から

$$\int \exp(\bar{q}Aq) d\bar{q}dq = \det A = \exp(-\log \det A) \quad (8-5)$$

である。QCD の分配関数は

$$Z_{\text{LQCD}} = \int \mathcal{D}[q, \bar{q}, U] e^{-\bar{q}Dq - S_G} = \int \mathcal{D}[U] \det D e^{-S_G}. \quad (8-6)$$

フェルミオン行列 D は γ_5 エルミート性

$$[\gamma_5 D(\mu) \gamma_5]^\dagger = D(-\mu^*), \quad [\det D(\mu)]^* = \det [D(-\mu^*)]. \quad (8-7)$$

を持つので、行列式は $\mu = 0$ において実数であり、 N_f が偶数の場合には $\det D$ は正の実数となる。このとき分配関数の被積分関数 $\det D \exp(-S_G)$ はリンク変数 U の配位についての統計重率とみなせるため、モンテカルロ積分が可能となる。

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[q, \bar{q}, U] O e^{-S} = \frac{\int \mathcal{D}[U] \det D O(U) e^{-S_G}}{\int \mathcal{D}[U] \det D e^{-S_G}} = \frac{1}{N_{\text{sample}}} \sum_i O(U_i). \quad (8-8)$$

ここで N_{sample} はモンテカルロ計算のサンプル数、 U_i は $\det D e^{-S_G}$ の確率で発生させるグルーオンの配位、 $O(U)$ はリンク変数 U で表現した観測量である。

有限密度 (有限クォーク化学ポテンシャル $\mu \neq 0$) においては $\det D$ は一般には複素数となり、通常のモンテカルロ積分はできなくなる。 $\det D = |\det D| \exp(i\theta)$ と絶対値と位相を分けて考えると、位相を無視して生成した配位を用いて計算した平均位相因子 (average phase factor) $\langle e^{i\theta} \rangle$ を用いて

$$\langle O \rangle = \frac{\langle O e^{i\theta} \rangle_{\text{pq}}}{\langle e^{i\theta} \rangle_{\text{pq}}}, \quad \langle X \rangle_{\text{pq}} = \frac{\int \mathcal{D}[U] |\det D| X(U) e^{-S_G}}{\int \mathcal{D}[U] |\det D| e^{-S_G}}, \quad (8-9)$$

と観測量が求められる。ただし符号問題が厳しい場合には大きな体積で平均位相因子が 0 となり、観測量が正確に求められなくなる。これが「符号問題」と呼ばれる問題である。

符号問題を避ける方法の一つは、符号問題のない $\mu = 0$ において μ 微分を計算し、テイラー展開で物理量を推定する方法である。また符号問題のない虚数化学ポテンシャル $\mu = i\mu_I$ ($\mu_I \in \mathbb{R}$) においてモンテカルロ計算を行い、解析接続を行う、あるいは粒子数の定まった状態での期待値を求める方法 (カノニカル分布) 等が提案されている。低密度領域 $|\mu/T| < 1$ においては様々な手法の結果が一致しているが、テイラー展開が破綻すべき臨界点、あるいは 1 次相転移が期待される領域での結果は得られていない。

8.2 Strong-coupling lattice QCD

大きな化学ポテンシャルの領域で有用な方法の一つが強結合格子 QCD である。強結合格子 QCD は分配関数の $1/g^2$ 展開に基づく手法であり、長い歴史をもつ。式 (8-1) においてブラケット項は $1/g^2$ に比例しており、(強結合領域では $1/g^2$ について) 摂動論的に扱えるとしよう。特に強結合極限ではグルーオン作用を無視することができ、リンク変数をそれぞれのリンクで独立に積分可能である。それぞれのリンクにおける積分公式 (One link integral) は、

$$\int dU U_{ab} = 0, \quad \int dU U_{ab} U_{cd}^\dagger = \frac{1}{N_c} \delta_{ad} \delta_{bc}, \quad \int dU U_{ab} U_{cd} U_{ef} = \frac{1}{N_c!} \epsilon_{ace} \epsilon_{bdf}, \quad \dots \quad (8-10)$$

と与えられる。1974 年に Wilson は格子 QCD を提案し、強結合極限において Wilson loop が面積則に従うことを示した [1]。

$$\langle W(C = L \times N_\tau) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[U] W(C) e^{-S_G} \rightarrow N_c \left(\frac{1}{g^2 N_c} \right)^{LN_\tau} \quad (g^2 \rightarrow \infty). \quad (8-11)$$

ここで LN_τ は Wilson loop の面積である (Fig. 1 左)。1つのリンク変数の期待値はゼロであるから、Wilson loop の期待値に有限な寄与を持つには少なくとも LN_τ の plaquettes が必要である。それぞれの plaquette が $1/N_c g^2$ の因子を与えて「面積則」が現れることが分かる。Wilson loop $W(C) = \text{tr} P \exp(i \oint_C A_\mu dx_\mu)$ は重いクォーク間のポテンシャル $\langle W(C) \rangle = \exp(-V(L)N_\tau)$ を与えるので、面積則は距離に比例した閉じ込めポテンシャル $V(L) = L \log(g^2 N_c)$ が強結合極限で現れることを示す。この閉じ込めの性質は、Creutz による最初の格子 QCD モンテカルロ・シミュレーションによって確かめられた [2]。モンテカルロ・シミュレーションの結果は、強結合領域から摂動論的領域までがスムーズにつながっていることを示しており、カラーの閉じ込めが数値的に証明された。高次項を含む強結合展開は Münster [3] によって行われ、モンテカルロ計算の結果がうまく再現できている。

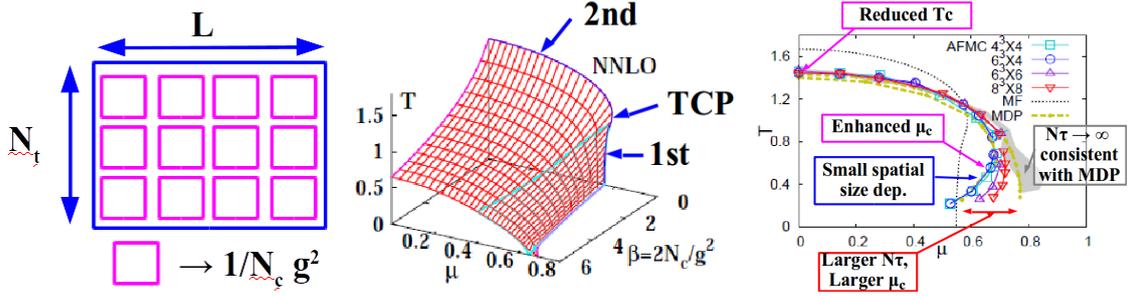


Figure 1: (左) ウィルソンプ、(中) QCD 相図の結合定数 ($\beta_g = 2N_c/g^2$) 依存性 (平均場近似) [13]、(右) モンテカルロ計算による強結合極限の QCD 相図 [7]。

クォークを含む強結合格子 QCD は河本・Smit らにより提案された [5]。クォークとしてスピノール構造のない一種類のスタガードフェルミオン (one species of unrooted staggered fermion) を採用すると、クォークを含む作用は

$$\bar{\chi} D \chi = S_F^{(t)} + \frac{1}{2} \sum_{x,j} \eta_j(x) \left[\bar{\chi}_x U_j(x) e^\mu \chi_{x+\hat{j}} - \bar{\chi}_{x+\hat{j}} U_j^\dagger(x) e^{-\mu} \chi_x \right] + m_0 \sum_x \bar{\chi}_x \chi_x, \quad (8-12)$$

$$S_F^{(t)} = \frac{1}{2} \sum_x \left[\bar{\chi}_x U_0(x) e^\mu \chi_{x+\hat{0}} - \bar{\chi}_{x+\hat{0}} U_0^\dagger(x) e^{-\mu} \chi_x \right] \quad (8-13)$$

と表される。ここでスタガード因子 $\eta_j(x) = (-1)^{x_0 + \dots + x_{j-1}}$ は γ を表す。空間方向のリンク変数について One link integral を用いると、クォークと時間方向のリンク変数についての有効作用が得られる。

$$S_{\text{eff}}^{(\text{SCL})} = S_F^{(t)} - \frac{1}{4N_c} \sum_{x,j} M_x M_{x+\hat{j}} + m_0 \sum_x M_x \quad (M_x = \bar{\chi}_x \chi_x), \quad (8-14)$$

第 2 項は最近接 site クォーク間の 4-Fermi 相互作用を表す。¹

強結合展開では $1/g^2$ の次数を決めてリンク変数を先に積分することにより、符号問題が抑制される。有効作用 Eq. (8-14) において相互作用項をボソン化して得られるフェルミ行列の行列式は解析的に得ることができ [5, 6]、平均場近似のもとでは符号問題は現れない。ボソン化で導入した補助場を積分する場合には符号問題は現れるが、小さな格子の場合にはモンテカルロ計算が可能である [7, 8]。

強結合極限においてカイラル対称性が自発的に破れることがゼロ温度 [5, 10]、有限温度・有限密度 [6, 11, 12, 13, 8, 9, 7, 15, 14] において示されている。強結合極限では QCD 相図も平均場近似 [11, 12]、モンテカルロ計算 [9, 7] において議論されている。相図への強結合展開の高次項の影響は [13, 15, 14] で調べられた。

¹空間リンク変数の積分を完全に行うと $1/d$ 展開 (d は空間次元) の高次項である 6-Fermi (baryon hopping term)、8-Fermi (meson-meson interaction) などの相互作用も現れる [4]。次元数が大きい場合に 4-Fermi 相互作用項が有限に残るとすると、クォーク場は $\chi \propto d^{-1/4}$ とスケールする。このとき、6-Fermi, 8-Fermi 項は $N_c = 3$ において $\mathcal{O}(d^{-1/2})$, $\mathcal{O}(d^{-1})$ と振る舞う。

8.3 Complex Langevin method

符号問題はフェルミオンを含む理論において広く見られる問題である。近年、Lefschetz thimble method (LTM) [16]、Complex Langevin method (CLM) [17, 18]、generalized Lefschetz thimble method (GLTM) [19]、などの変数を複素化する手法が注目されている。ここでは主として Ref. [17] に基づいて、Complex Langevin 法について解説する。

まず準備段階として、揺動散逸を含む確率分布の方程式である Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \partial_x [\{N\partial_x - K(x)\}P(x,t)] , \quad (8-15)$$

と、ゆらぎ (white noise) を含む運動方程式である Langevin 方程式

$$\frac{dx}{dt} = K(x) + \sqrt{N}\xi(t) , \quad \langle \xi(t) \rangle = 0 , \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\delta(t-t') , \quad (8-16)$$

($K(x)$ は x の関数、 N は定数) が同等であることを示そう。2 階微分可能な x の関数 $f(x)$ について、まず Langevin 方程式を用いて

$$\langle f(x(t+\Delta t)) - f(x(t)) \rangle = \left\langle K \frac{\partial f}{\partial x} + N \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right\rangle \Delta t + \mathcal{O}((\Delta t)^2) , \quad (8-17)$$

となる。ここで $\langle \dots \rangle$ は white noise ξ についての平均である。次に Fokker-Planck 方程式に従う x の分布関数 $P(x,t)$ を用いると $f(x)$ の期待値の時間発展が

$$\frac{d\langle f \rangle}{dt} = \frac{d}{dt} \int dx f(x)P(x,t) = \int dx \left[K \frac{\partial f}{\partial x} + N \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right] P(x,t) , \quad (8-18)$$

と求まる。ただし大きな $|x|$ において $P(x,t)$ は十分速くゼロになるとする。2 つの式の比較から、 $f(x)$ 期待値の時間発展が等しいことが分かり、Langevin 方程式と Fokker-Planck 方程式の等価性が示せたこととなる。また $K = -N\partial_x S$ とおけば、平衡分布は $P \propto \exp(-S)$ となる。

さて Complex Langevin 方程式 (CLE) に議論を進めよう。CLE は実変数 x を複素数に拡張した $z = x + iy$ を基本変数とした Langevin 方程式、

$$\frac{dz}{dt} = -\frac{\partial S}{\partial z} + \sqrt{N_R}\xi_R(t) + i\sqrt{N_I}\xi_I(t) \quad (8-19)$$

である。ここで $\langle \xi_R(t)\xi_R(t') \rangle = 2\delta(t-t')$ 、 $\langle \xi_I(t)\xi_I(t') \rangle = 2\delta(t-t')$ であり、 $N_I = N_R - 1 \geq 0$ とする。このとき、物理量 $f(x,y)$ の期待値は次の方程式に従う。

$$\frac{d\langle f(x(t),y(t)) \rangle}{dt} = \langle Lf(x(t),y(t)) \rangle , \quad L = (N_R\nabla_x + K_x)\nabla_x + (N_I\nabla_y + K_y)\nabla_y . \quad (8-20)$$

($K_x = -\text{Re}\nabla_x S$, $K_y = -\text{Im}\nabla_x S$) (x,y) の確率分布が $P(x,y;t)$ で与えられるとすると、 P は Fokker-Planck 方程式に従う。

$$\frac{\partial P(x,y;t)}{\partial t} = L^T P(x,y;t) , \quad (8-21)$$

$f(x,y;t)$, $P(x,y;t)$ は形式的に次のように求まる。

$$f(x,y;t) = \exp(tL)f(x,y;0) , \quad P(x,y;t) = \exp(tL^T)P(x,y;0) . \quad (8-22)$$

このとき、次の関数 $F(t, \tau)$ は τ に依存しないことが分かる。

$$F(t, \tau) = \int P(x, y; t - \tau) f(x, y; \tau) dx dy, \quad (8-23)$$

$$\frac{\partial F(t, \tau)}{\partial \tau} = - \int dx dy (L^T P(x, y; t - \tau)) f(x, y; \tau) + \int dx dy P(x, y; t - \tau) (L f(x, y; \tau)) = 0. \quad (8-24)$$

解析関数に作用する場合には $\nabla_y = i\nabla_x$ が成り立つので、 L を

$$\tilde{L} = [\nabla_z - (\nabla_z S(z))] \nabla_z, \quad L_0 = [\nabla_x - (\nabla_x S(x))] \nabla_x, \quad (8-25)$$

に置き換えて良い (y_0 は任意の実数)。時刻 $t = 0$ において P が $y = 0$ のみにおいて値を持つ [$P(x, y; 0) = \rho(x; 0) \delta(y)$] としよう。このとき $F(t, t)$ は

$$\begin{aligned} F(t, t) &= \int dx dy P(x, y; 0) \exp(tL) f(x, y; 0) = \int dx \rho(x; 0) \exp(tL_0) f(x, 0; 0) \\ &= \int dx f(x, 0; 0) \exp(tL_0^T) \rho(x; 0) = \int dx f(x, 0; 0) \rho(x; t) = \langle f \rangle_\rho. \end{aligned} \quad (8-26)$$

最後の行で $\rho(x; t)$ は Fokker-Planck 方程式 $\partial \rho / \partial t = L_0^T \rho$ に従う複素密度分布関数であることを用いた。 $F(t, t) = \langle f \rangle_P$ であることを合わせて考えると、

$$\langle f \rangle_P = \langle f \rangle_\rho, \quad (8-27)$$

が示されたこととなる。 $\rho(x; t)$ は

$$\frac{\partial \rho(x; t)}{\partial t} = L_0^T \rho(x; t) \quad (8-28)$$

に従い、平衡状態では $\rho(x; \infty) \propto \exp(-S)$ に従う。よって複素分布関数 $\exp(-S)$ での期待値と、2変数分布関数 $P(x, y; t)$ による期待値が等しいことが示された。

ただし、部分積分が無限回可能であることを用いているため、成立には多少厳しい条件、ドリフト項 (K_x, K_y) の分布が $|K|$ の大きな領域で指数関数またはそれ以上に速くゼロとなる、が必要となる [18]。また部分積分では表面項 (境界項) が消えることも暗に要請するが、厳密に解ける場合で境界項が残る例があることも最近指摘されている。

References

- [1] K. G. Wilson, *Phys. Rev. D* **10** (1974) 2445.
- [2] M. Creutz, *Phys. Rev. D* **21** (1980) 2308.
- [3] G. Munster, *Nucl. Phys. B* **180** (1981) 23.
- [4] H. Kluberg-Stern, A. Morel, B. Petersson, *Nucl. Phys. B* **215** [FS7] (1983) 527.
- [5] N. Kawamoto, *Nucl. Phys. B* **190** [FS3] (1981) 617; N. Kawamoto, J. Smit, *Nucl. Phys. B* **192** (1981) 100.
- [6] G. Faldt, B. Petersson, *Nucl. Phys. B* **265** (1986) 197.
- [7] T. Ichihara, A. Ohnishi, T. Z. Nakano, *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2014** (2014) 123D02.
- [8] F. Karsch, K. H. Mutter, *Nucl. Phys. B* **313** (1989) 541.
- [9] P. de Forcrand, M. Fromm, *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010) 112005.
- [10] S. Aoki, *Phys. Rev. D* **30** (1984) 2653.

- [11] P. H. Damgaard, N. Kawamoto, K. Shigemoto, *Phys. Lett. B* **114** (1984)152;
- [12] E. M. Ilgenfritz, J. Kripfganz, *Z. Phys. C***29** (1985) 79; N. Bilic, F. Karsch, K. Redlich, *Phys. Rev. D***45** (1992) 3228; K. Fukushima, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **153** (2004) 204; Y. Nishida, *Phys. Rev. D* **69** (2004) 094501; N. Kawamoto, K. Miura, A. Ohnishi, T. Ohnuma, *Phys. Rev. D***75** (2007) 014502.
- [13] K. Miura, T. Z. Nakano, A. Ohnishi, *Prog. Theor. Phys.* **122** (2009) 1045; K. Miura, T. Z. Nakano, A. Ohnishi, N. Kawamoto, *Phys. Rev. D* **80** (2009) 074034; T. Z. Nakano, K. Miura, A. Ohnishi, *Prog. Theor. Phys.* **123** (2010) 825; T. Z. Nakano, K. Miura, A. Ohnishi, *Phys. Rev. D* **83** (2011) 016014; A. Ohnishi, K. Miura, T. Z. Nakano, N. Kawamoto, *PoS LATTICE 2009* (2009) 160.
- [14] T. Ichihara, A. Ohnishi, *PoS LATTICE2014* (2014) 188.
- [15] P. de Forcrand P, J. Langelage, O. Philipsen, W. Unger, *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014) 152002.
- [16] E. Witten, AMS/IP Stud. Adv. Math. **50** (2011) 347; M. Cristoforetti, F. Di Renzo, L. Scorzato (Aurora-Science Collab.), *Phys. Rev. D* **86** (2012) 074506; H. Fujii, D. Honda, M. Kato, Y. Kikukawa, S. Komatsu and T. Sano, *JHEP* **1310** (2013) 147.
- [17] G. Aarts, E. Seiler, I.-O. Stamatescu, *Phys. Rev. D* **81** (2010) 054508;
- [18] K. Nagata, J. Nishimura and S. Shimasaki, *Phys. Rev. D* **94** (2016) no.11, 114515
- [19] A. Alexandru, G. Basar and P. Bedaque, *Phys. Rev. D* **93** (2016) no.1, 014504; A. Alexandru, G. Basar, P. F. Bedaque, G. W. Ridgway and N. C. Warrington, *JHEP* **1605** (2016) 053.

レポート(4)(原子核物理学基礎論 B, 2018 年度後期・大西担当分)

全部で 5-7 問程度出します。3 問程度以上レポートを出してください。

[Rep.5] Langevin 方程式

$$\frac{dx}{dt} = K(x) + \sqrt{N}\xi(t), \quad \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\delta(t-t'),$$

($K(x)$ は x の関数、 N は定数) に従う x の分布関数 $P(x,t)$ は、Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \partial_x [N\partial_x - K(x)]P(x,t),$$

に従うことを示せ。

余裕があれば、次のランジュバン方程式

$$\dot{p} = -\gamma p + g\xi(t), \quad \langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\delta(t-t'),$$

を解いて、

$$\langle p^2 \rangle_t = \frac{g^2}{\gamma}(1 - e^{-2\gamma t}) + e^{-2\gamma t} \langle p^2 \rangle_{t=0}$$

となることを示せ。

(これから $t \rightarrow \infty$ での運動エネルギー期待値と等分配則から、揺動散逸定理 (Einstein 関係式, $g^2 = m\gamma T$) が得られる。)