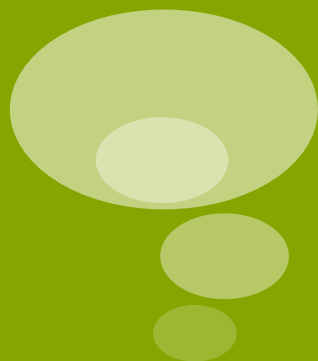
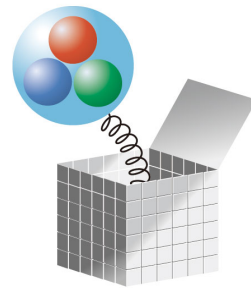




格子QCD シミュレーションとは

サマースクール「クオークから超新星
爆発まで」—基礎物理の理想への挑戦

高エネルギー加速器研究機構
橋本省二
平成23年8月4日





もくじ

1. 素粒子の標準模型
 - 量子力学から場の量子論へ
 - 量子色力学 (QCD)
2. 格子QCDシミュレーション
 - 格子QCDとはどんな理論か？
 - どうやって計算するのか？
3. どんなことがわかる？
 - 真空の様子：自発的対称性の破れ
 - 質量スペクトル
 - ...





1. 素粒子の標準模型



素粒子理論コース

■ 場の量子“論”

■ 場の量子化

- ボソン、フェルミオン、ゲージ場

■ 量子電磁気学

■ 繰り込み

■ 繰り込み群

■ 量子色力学

- 非可換ゲージ場、漸近自由性...

■ 破れた対称性



■ 素粒子“物理”

■ バリオンとレプトン

- 電荷、アイソスピン

■ 弱い力

- 弱アイソスピン

- フェルミ相互作用からW, Z粒子へ

■ 強い力

- クォーク模型

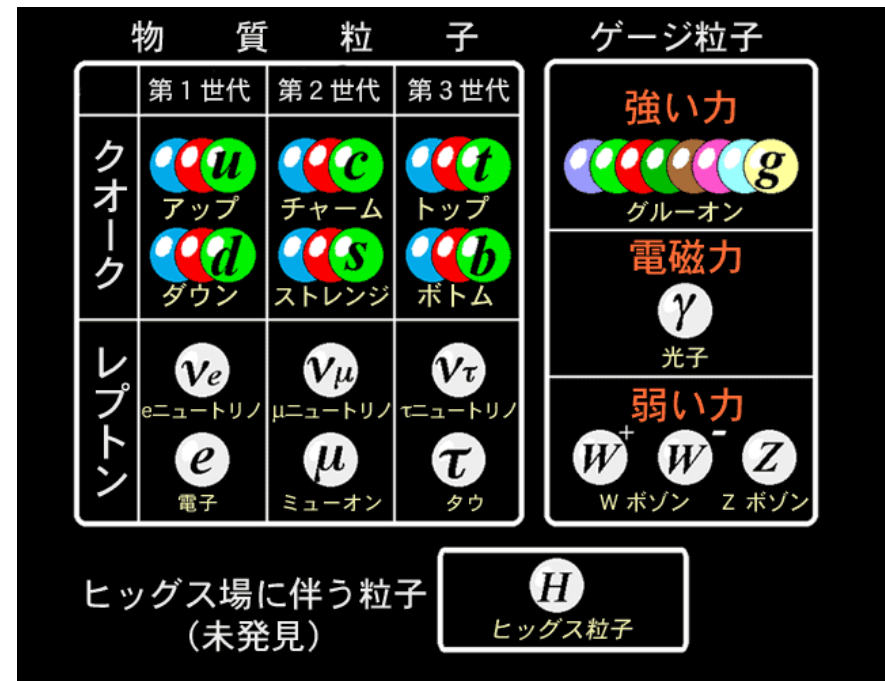
- 閉じ込め

両者を関係づけて理解するのに一苦労。
特に難物なのが強い力。



おさらい

- クォークとレプトン
 - 働く力によっていろんな種類がある。
 - 強い力が働くのがクォーク、働かないのがレプトン。
 - 弱い力はアップとダウンの組に働く。
 - 電磁気力も働かないニュートリノ。
 - 3つの世代も。
 - 通常物質は第1世代だけ。
 - なぜ3世代なのかは謎。





強い力のジレンマ

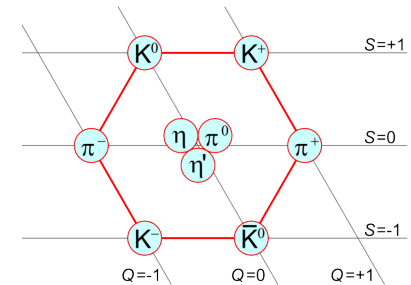
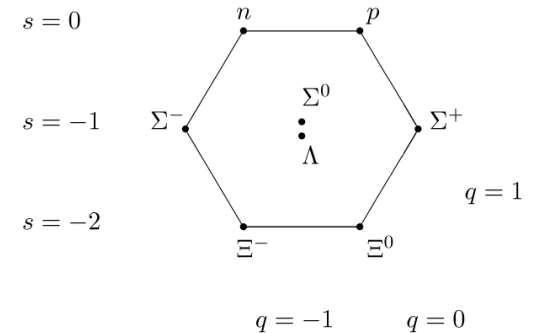
■ バリオン・メソン

- クォーク模型を使ってスペクトルを理解。なるほど、もっともらしい。
- パイ中間子は南部ゴールドストーン粒子らしい。何の？ クォークのラグランジアンを書いてみないとわからない。



■ クォーク

- $N_c=3$ はどうもそうらしい。
- 非可換ゲージ理論では漸近自由。どうもそうらしい。
- クォークの閉じ込め？ ラグランジアンを見てもわからないけど...
- カイラル対称性の破れ？ ふ～ん。



論理がつながってないじゃん。
でもまあいいか、先へ進もう。





なぜそうなのか？

- 本当に計算できないから。
 - モデル計算はいろいろあるけど、教科書にのるレベルのものではない。

それでどうするの？

- 難しいことは飛ばして（素粒子物理は）先へ進む。
 - 積み残した問題のせいで、いろんなところで困っている。LHCの解析（QCDジェットの計算）、Bファクトリーの解析（B中間子崩壊の計算）
 - 非摂動物理が出てくるとあちこちで頓挫（超弦理論も）。

非摂動計算手法の開発が多くの場所で問題解決の鍵になる。
数値計算でも気にしない。





何がそんなに難しいのか？

- 量子色力学（強い力の基礎理論）はこれだけ。

$$S = \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} \text{Tr} F_{\mu\nu}^2 + \bar{\psi}(\not{D} + m)\psi \right\} \quad \begin{aligned} F_{\mu\nu}^a &= \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c \\ D_\mu &= \partial_\mu - ig T^a A_\mu^a \end{aligned}$$

- 見た目は量子電磁気学とそんなに変わらない。どこでそんなに苦労するのか。

理論を解くというのはどういうことだったか、おさらいしてみる。





量子力学

- 1 個の電子の“場”が従う方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

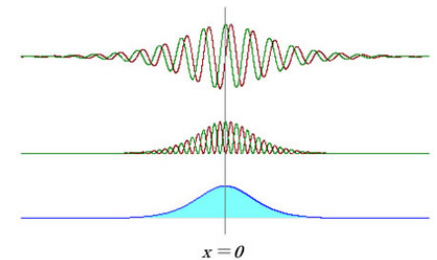
- 固有値と固有ベクトル = 1 個の電子がもつエネルギーと波動関数の候補
- 特別な場合（調和振動子、水素原子...）には特殊関数で書ける。
- そうでない場合も、基本的には大規模行列の固有値問題。
- 2 個、3 個になっても（反対称化とかあるけど）基本的な論理は同じ。



量子力学から場の量子論へ

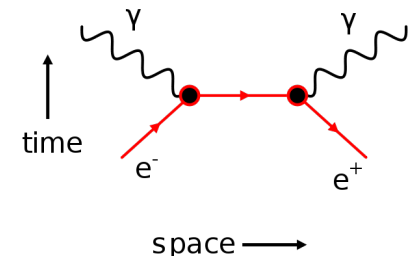
■ 量子力学の対象

- 電子の波動関数。電子 = 空間全体に広がる波。
- “場”と呼んでもよい。電磁“場”と同様。
- 電子は生まれたり消えたりしないで、常にどこかにある。粒子の生成と消滅を考えたかったら...



■ 場の量子論の対象

- 電子の波動関数全体が生まれたり消えたりできる。
- 固体物理での電子・ホールも同じこと。実際の電子は消えないけど、フェルミ面を基準に考えると電子とホールの対で生成消滅できる。





場の量子論の作り方

- 時空のすべての点に“場”の自由度がある。
- 隣の点と相互作用があって独立ではないので、フーリエ変換して運動量空間で見てみる。

$$\psi(x) = \sum_p \left[a_p e^{ipx} + a_p^\dagger e^{-ipx} \right]$$

- a_p と $a_p^\dagger$ は調和振動子と同様の交換関係を満たすことにする。

$$[a_p, a_p^\dagger] = 1$$

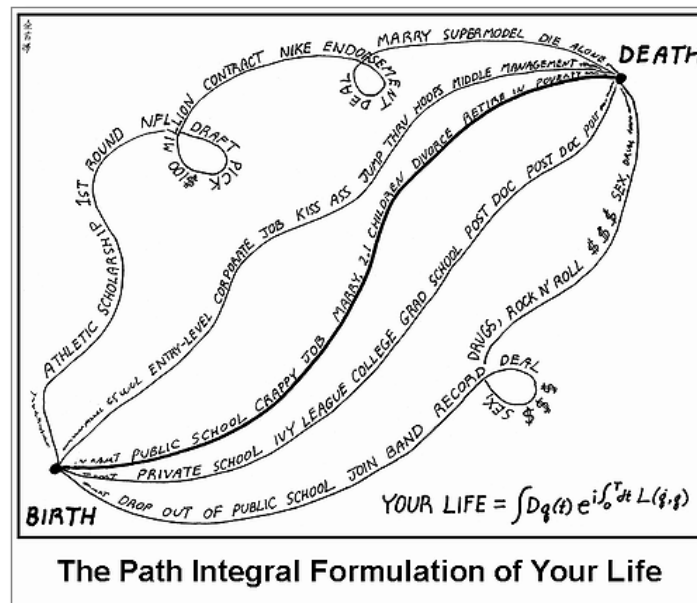
- すると、振幅 a の取る値は $1, 2, 3, \dots$ と数えられる。

= “粒子”



経路積分

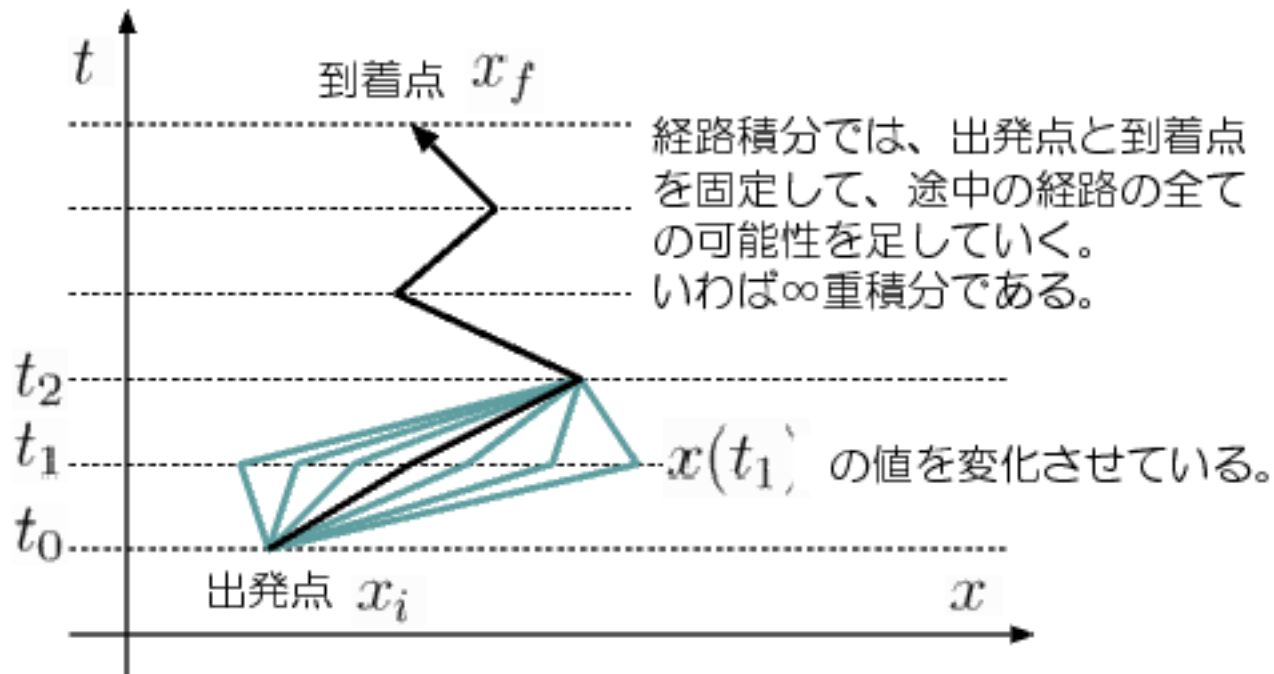
- でもね、交換関係なんて意味がわからない。
- その通り。だけど、同じことを「経路積分」の言葉で書くこともできる。そっちなら意味がわかりやすいかも。





経路積分

- この操作で、シュレーディンガー方程式と同じ解が得られる（量子力学）。

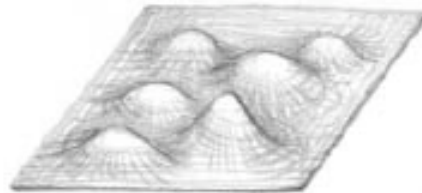
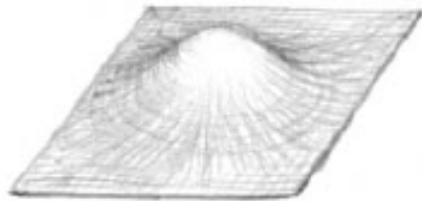
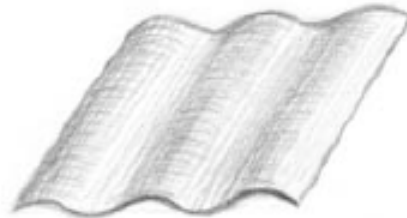
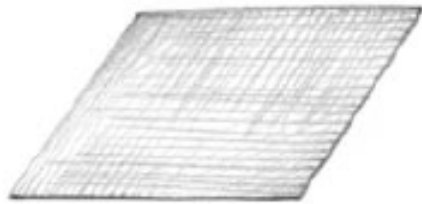


$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}S(x_i, x_f)\right)$$



場の理論での“経路積分”

- 経路ではなく場の配位に関する積分
 - あれもこれも全部。



$$Z = \int [d\phi] e^{iS}; \quad S = \int d^4x \mathcal{L}$$

- あとはラグランジアンを指定して計算する。





ちょっと待った

では、なぜQEDは簡単でQCDは難しい？

- そもそも、普通は経路積分なんて計算できない。

- 超多重積分：

$$Z = \int [d\phi] e^{iS}; \quad S = \int d^4x \mathcal{L}$$

- 唯一、まともに何かできるのはガウス積分に帰着できるとき。

- 自由場の理論：

$$S \sim \phi^2$$

- 相互作用があるときは、自由場の理論をもとにした展開を考える。

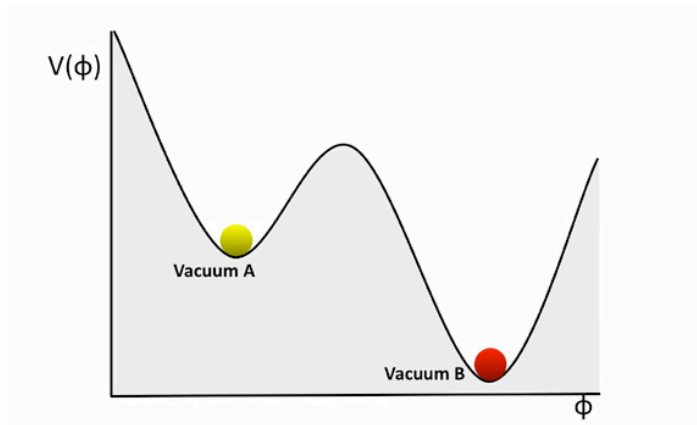
= 摂動論

- 展開のベースが現実に近いければ、これがよい近似になる。

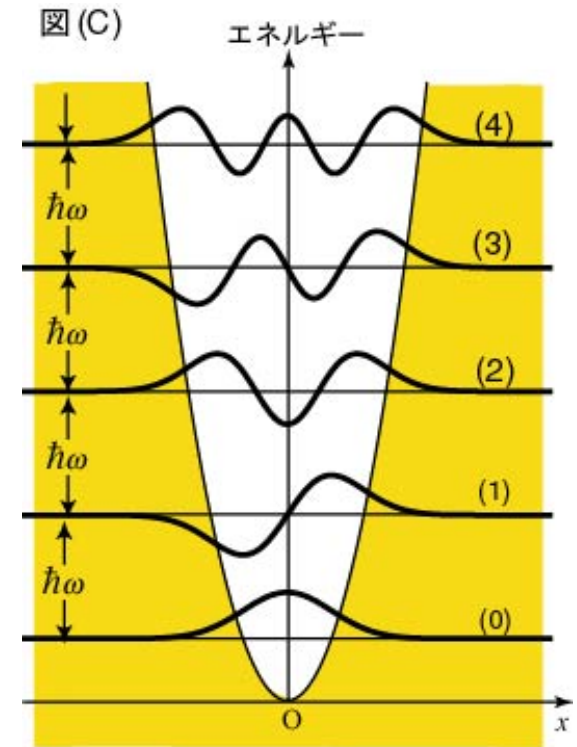


摂動展開 = 調和振動子 + ...

- テイラー展開
 - たいていの系はある極限でこうなる。



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$$



太い実曲線が波動関数
 (0) : 基底状態
 (1) (2) (3) ... : 励起状態

ならなかったら？



真空とはどんなものか？

結局はそういう問題。

■ QED

- 場の値がゼロになるときが真空。
- そこからの励起が“粒子”に相当する。

■ QCD

- 自由エネルギー（場の理論の言葉では有効作用）が最低になるところでは量子ゆらぎが勝ってランダムに近い。でも完全にランダムでもない。

- 場の量子論 $Z = \int [d\phi] e^{iS}; S = \int d^4x \mathcal{L}$

- 統計モデル $Z = \int [d\phi] e^{-H/T}; H \sim \int d^3x \mathcal{L}$

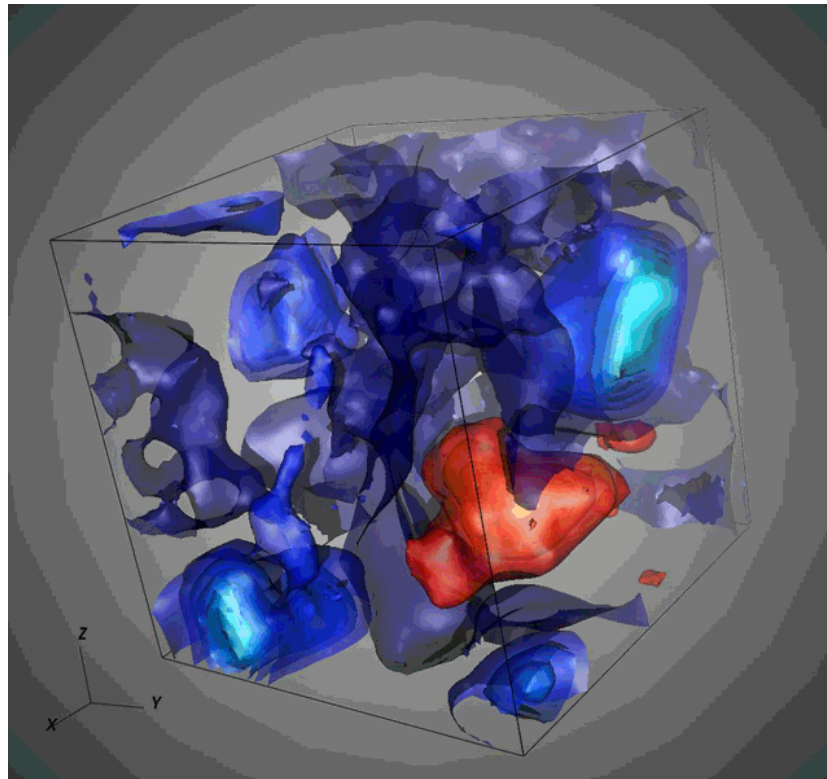
- そこからの励起が“粒子”に相当する。それに興味がある。基本的な励起（例えばパイ中間子）だけを取り出した“有効理論”を作ることにはできる。でもそれではQCDを解いたことにはならない。





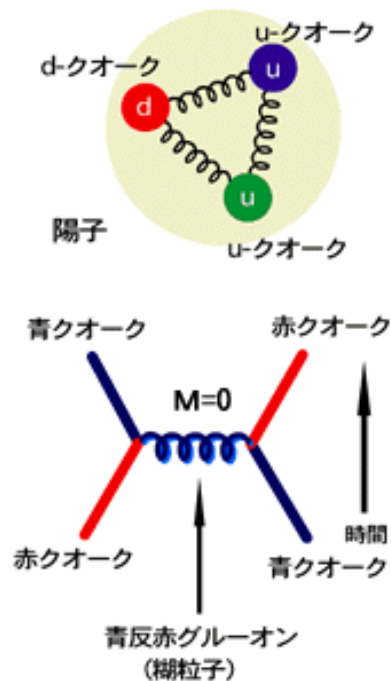
量子色力学の真空

■ こんな感じ



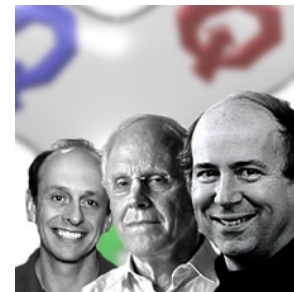
2. 格子QCDシミュレーション

強い力



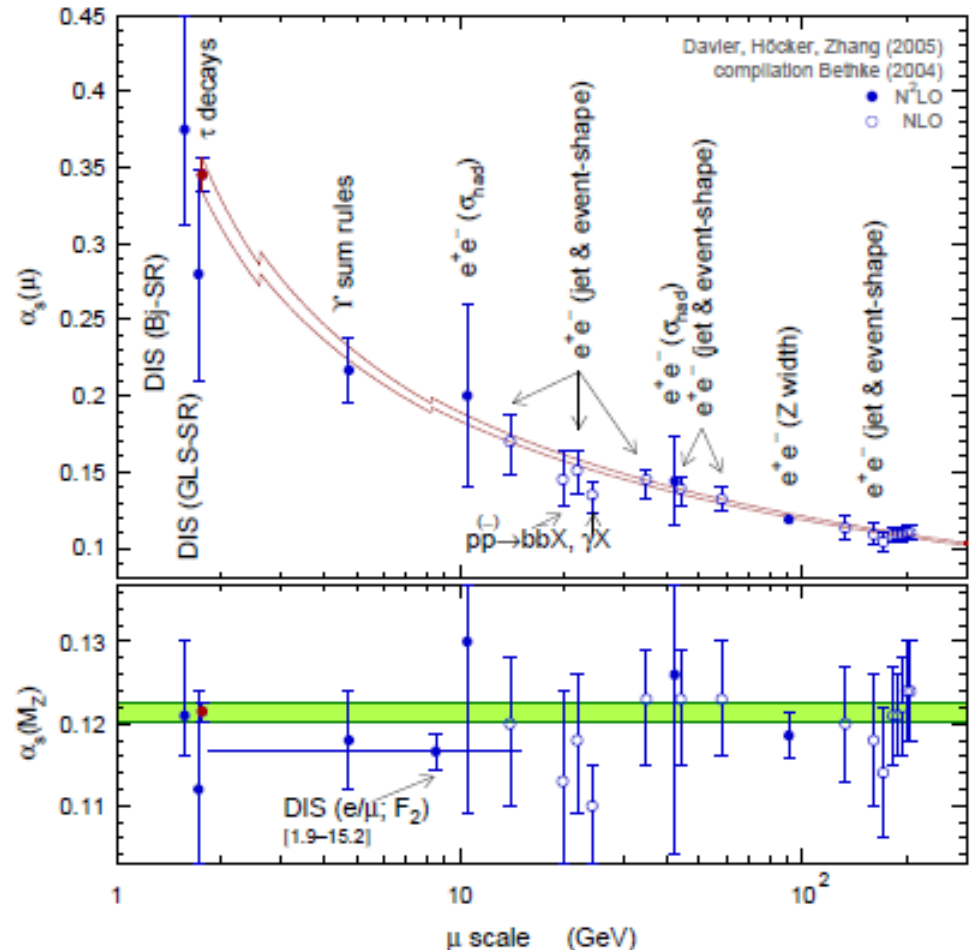
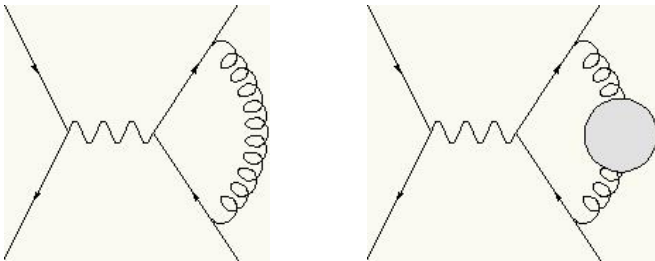
■ 量子色力学(QCD)

- 量子電気力学(QED)と似ている。ただし、
- $U(1) \rightarrow SU(3)$: クォークがもつ3色の色荷 (南部の発案) に力が働く。
- 光子の代わりにグルーオンをやりとり。
- グルーオンも色をもつ。
- 漸近自由性 = 近距離では力が弱くなる (Gross, Wilczek, Politzer, 1973; 2004年ノーベル賞)



漸近自由性

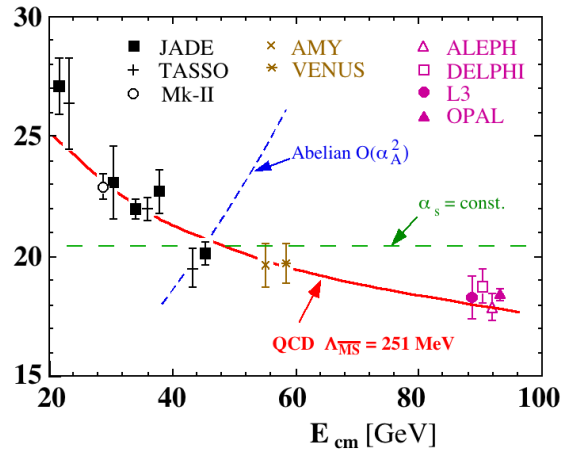
- 結合定数のスケール依存性
 - 摂動の高次項のおかげで、あたかも結合定数がエネルギースケールに依存するように見える。





実験的にもテストずみ

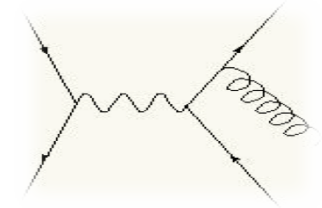
$R_3(y_{\text{cut}} = 0.08) [\%]$



ただし摂動的には。

■ e^+e^- 散乱での3ジェットイベント

$$R_3 = \frac{\sigma(e^+e^- \rightarrow 3\text{-jets})}{\sigma(e^+e^- \rightarrow \text{hadrons})} = C_1 \alpha_s(\mu^2) + \dots$$

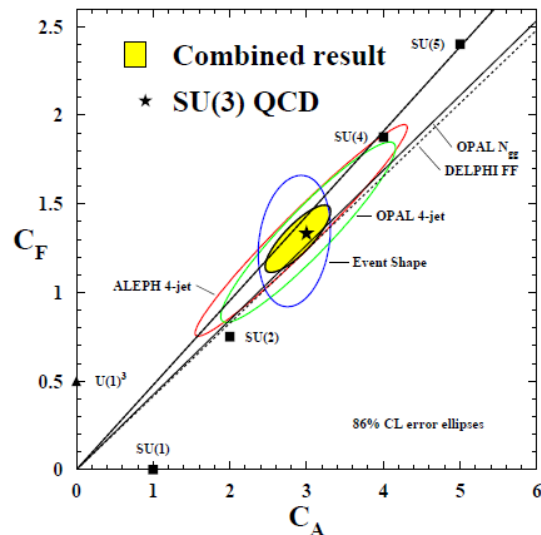
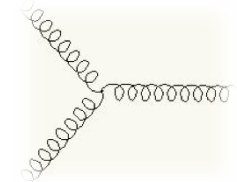


■ α_s のスケール依存性が見える。

■ 4 ジェット

■ 3 グルーオン結合が見える。

■ SU(3)構造のテスト



$$C_A = N = 3, C_F = \frac{N^2 - 1}{2N} = \frac{4}{3}$$

Plots from Bethke, Prog Part Nucl Phys 58 (2007) 351.

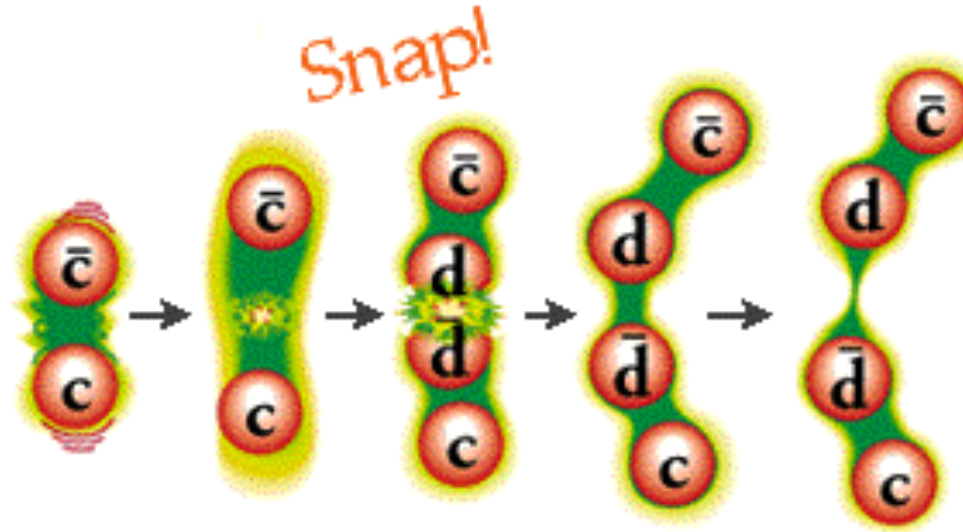




とっても強い力

摂動的にわかるところはよい。
でも低エネルギーでは...

■ クォークの閉じ込め



■ カイラル対称性の破れ：真空の問題





ラグランジアン

$$Z = \int [dA_\mu][d\psi][d\bar{\psi}] e^{iS}; S = \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} \text{Tr} F_{\mu\nu}^2 + \bar{\psi}(\not{D} + m)\psi \right\}$$

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

$$D_\mu = \partial_\mu - ig T^a A_\mu^a$$

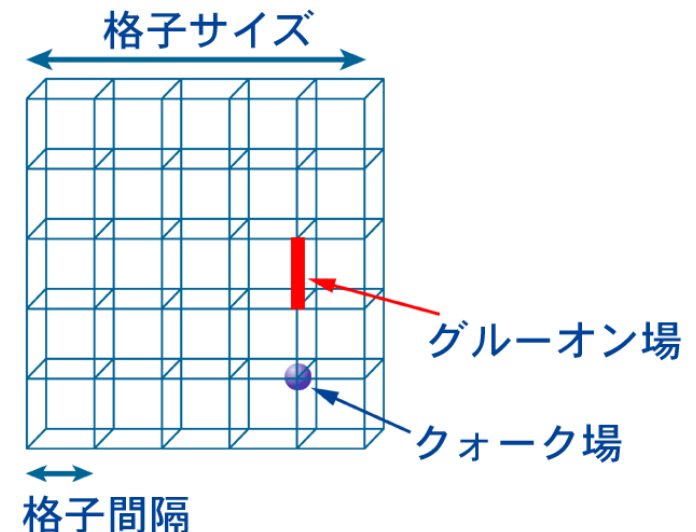
- 当面、理解する必要はない。覚えておくべきこと：
 - 3成分のクォーク場
 - 3 x 3 行列のゲージ場
 - 作用は、 A^2 だけでなく、 A^3 , A^4 も含む。単純な調和振動子にはならない。



格子上の理論

- 4次元立方格子
 - 場の変数は格子点上のみに定義する。
 - 格子間隔をゼロにする極限（連続極限）に行けば、望みのQCDになる。
 - 場の理論というのは、そもそもそういうもの。発散するので規格化しておかないと定義できない。あとで紫外切断を無限大にする。それと同じ。

- 摂動計算に依存しない定義
 - 普通の次元正則化は摂動計算することを前提とした定義。格子は非摂動領域も含めて使える完全な“定義”



単に計算の便宜上持ち出したものではなく、場の理論の正しい定式化。





格子上的理論

- 鍵はゲージ対称性
 - 空間の任意の点で別々のSU(3)回転を考える。
 - ラグランジアンが不変になるようにつじつま合わせの場を導入（ゲージ場）。

$\bar{\psi}(x)$ $\psi(x + \hat{\mu})$

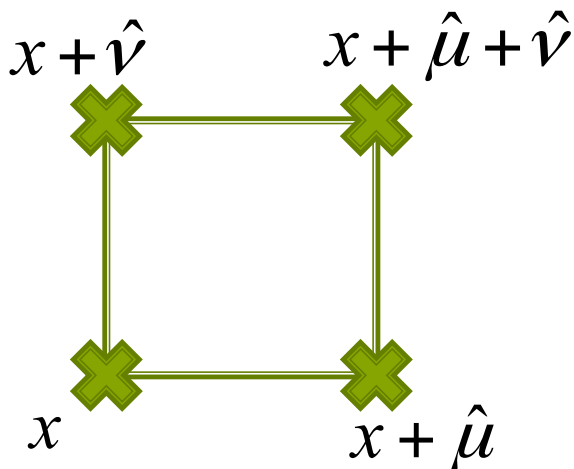
$\bar{\psi}(x)V^\dagger(x) \quad V(x)U_\mu(x)V^\dagger(x + \hat{\mu}) \quad V(x + \hat{\mu})\psi(x + \hat{\mu})$

$$U_\mu(x) = \exp \left[i g a A_\mu(x) \right] = 1 + i g a A_\mu(x) + \dots$$

$$A_\mu(x) \rightarrow V(x) \left[A_\mu(x) + \frac{i}{g} \partial_\mu \right] V^\dagger(x)$$

ゲージ場

- ゲージリンク $U_\mu(x)$
 - ユニタリー行列 $SU(3)$
 - つなげておくとゲージ不変になる。



$$\begin{aligned}
 & \text{Tr} \left[U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) \right] \\
 & \approx \text{Tr} \left[e^{igaA_\mu} e^{iga(A_\nu + a\partial_\mu A_\nu)} e^{-iga(A_\mu + a\partial_\nu A_\mu)} e^{-igaA_\nu} \right] \\
 & \approx \text{Tr} \left[e^{iga^2(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu) - g^2 a^2 [A_\mu, A_\nu]} \right] = \text{Tr} \left[e^{iga^2 F_{\mu\nu}} \right] \\
 & = \text{Tr}[1] - \frac{1}{2} g^2 a^4 \text{Tr} [F_{\mu\nu}^2] + \dots
 \end{aligned}$$



ゲージ理論のラグランジアン



ゲージ作用

- 連続極限 $a \rightarrow 0$ では通常のものに戻る。

$$\begin{aligned} S &= \frac{6}{g^2} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \left[1 - \frac{1}{3} \text{Re Tr} \left[U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) \right] \right] \\ &\rightarrow a^4 \sum_x \sum_{\mu < \nu} \text{Re Tr} \left[F_{\mu\nu}^2 \right] \\ &= \int d^4x \frac{1}{4} \left(F_{\mu\nu}^a \right)^2 \end{aligned}$$

- 唯一ではない。より速く連続極限に近づくもの考えてもよい。
- 結合定数: $\beta = 6/g^2$
 - 統計モデルでは $1/kT$ に相当。 $\beta=0$ は高温極限。





経路積分

作用（ラグランジアン）が決まったら、あとは経路積分。

- A を U で置き換え。

$$\begin{aligned} Z &= \int [dU_\mu][d\psi][d\bar{\psi}] e^{-S_g - \int d^4x \bar{\psi}(D[U]+m)\psi} \\ &= \int [dU_\mu] \det(D[U]+m) e^{-S_g} \end{aligned}$$

- $U = \exp(iagA) \sim 1 + iagA + \dots$
 - $a \sim 0$ か $g \sim 0$ では連続理論に戻る。
- フェルミオン部分はグラスマン積分。積分すると行列式を与える。

こういう多重積分が出てきたらモンテカルロ法の出番。
もっとも重要そうな配位だけを取り出して代表させる。





問題はフェルミオン

- 理論定式化としても面倒
 - カイラル対称性、ダブリング、...： 全部割愛。
- 計算上もとても大変。
 - 大規模行列の行列式。全固有値を求めるのと同様。

$$\det(D[U] + m) = \prod_k (m + i\lambda_k[U])$$

1. 背景ゲージ場 U の上でディラック演算子の固有値を求める。
2. 固有値の積によって経路積分での重みが決まる。
3. モンテカルロ法の原理にしたがって背景ゲージ場を少し変えてみる。
4. また固有値を計算。この繰り返し。





クォークを含むシミュレーション

- 実際には固有値計算はあまりに大変。補助場を使って書き換える。

$$\begin{aligned} Z &= \int [dU] \det(D[U] + m)^2 e^{-S_g} \\ &= \int [dU][d\phi] e^{-S_g - \phi^\dagger (D[U] + m)^{-2} \phi} = \int [dU][d\phi] e^{-S_g - |(D[U] + m)^{-1} \phi|^2} \end{aligned}$$

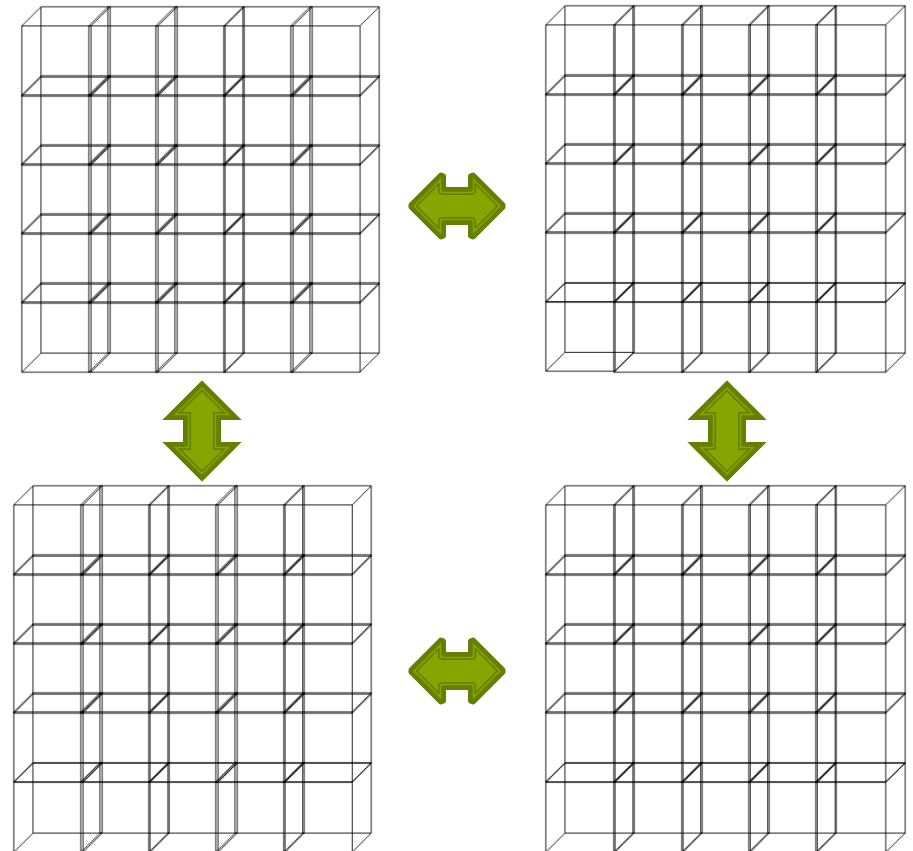
- 固有値問題を逆行列の問題に帰着。これでも大変だけどだいぶまし。

ここから先は詳細になるので割愛。
物理量計算も別途。



大規模計算

- 要はディラック演算子のかけ算。
 - 微分を差分に置き換えたものなので、基本は最近接相互作用。
 - 隣の格子点の場の値をもってきて差をとる。
- 並列化は自然
 - 各ノードの担当部分を決めて、
 - 必要に応じて端の部分のデータを通信



3. どんなことがわかる？

真空の様子

- フェルミオンの固有モードとはどんなものか？

$$\det(D[U] + m) = \prod_k (m + i\lambda_k[U])$$

- 真空中の“典型的な”クォーク・反クォーク対の様子。
- 固有値分布スペクトルが、真空中のカイラル凝縮の情報を与える。

$$\rho(\lambda) = \frac{1}{V} \sum_k \langle \delta(\lambda - \lambda_k) \rangle,$$

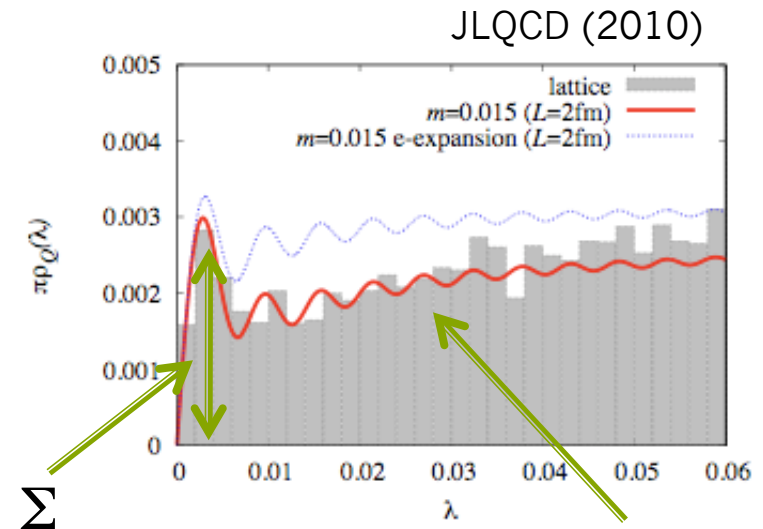
$$\Sigma \equiv -\langle \bar{q}q \rangle = \frac{1}{V} \sum_k \left\langle \frac{1}{m + i\lambda_k} \right\rangle$$



Banks-Casher (1980)

$$\lim_{m \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \rho(\lambda = 0) = \frac{\Sigma}{\pi}$$

有限のカイラル凝縮 =
自発的カイラル対称性の破れの直接計算。



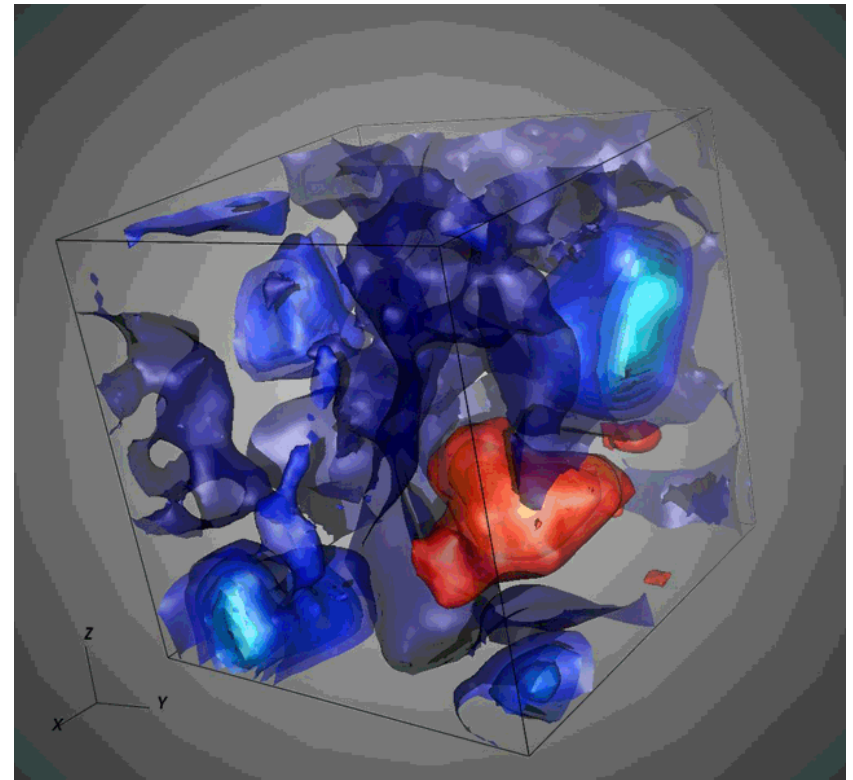
Fit with NLO χ PT



固有モードがこれ

- 低エネルギーモード
 - カイラル（右or左）
 - 局在している
- インスタントン液体模型の描像に近い。
 1. ゲージ場作用の古典解はトポロジカルで局在（インスタントン）
 2. トポロジカルなモードにはフェルミオンのゼロモードが付随（指数定理）。
 3. 真空中にはそういうのがいっぱい。

JLQCD (2011)





カイラル対称性の破れ = 質量生成



講談社ブルーバックスから
絶賛発売中。

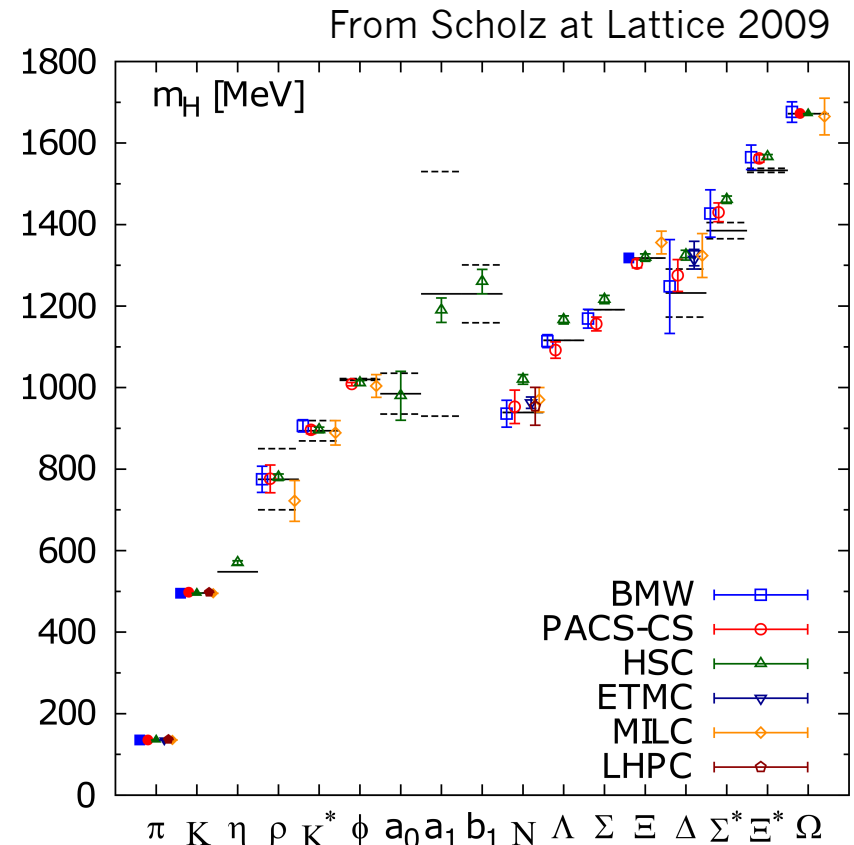
素粒子物理入門から
自発的対称性の破れ、
格子QCDとスパコン、
ヒッグス粒子まで



真空上の励起 = 素粒子スペクトル

- 中間子と重粒子のスペクトル
 - 格子計算へのインプットは
 1. 全体のスケール（あるいは結合定数）
 2. 個々のクォーク質量
 これだけ。他はすべて予言。
- ほぼ正確に現実の値を再現できる
ところまできた。

格子QCD計算は一つの到達点を
迎えた。
次はさまざまな物理へ展開。



Typically, 3 inputs: π , K , Ω
for 3 parameters: m_{ud} , m_s , Λ_{QCD}

平成23年8月4日





素粒子原子核物理のさまざまな課題

- 粒子・反粒子の対称性（CP対称性）はどのように破れているか？
 - K中間子混合、B中間子混合、B中間子崩壊の（QCD部分）の計算
 - QCDの θ 項はどこまでゼロなのか？
 - 精密な実験と計算を組み合わせる標準模型のほころびを探る。
- 宇宙が安定に存在する理由？
 - 中性子は陽子より重い。クォーク質量差とQED効果の微妙な相殺。
 - アイススピンの破れの定量的理解。理由はわからないんだけど…。
- 核力の理解
- 有限温度・密度相転移
 - 1次相転移だったら大騒ぎかも（でもたぶん違うらしい）。





まとめ

- 格子QCDで真空のシミュレーション
 - 場の量子論のもっとも面白い問題 = 素粒子の世界の真空を理解。
- QCD なんてずっと前からある。
 - でもわかっているかどうかは別の話。
 - クォークが凝縮する様子をようやくシミュレーションで調べられるようになった。カイラル対称性の自発的破れ。
 - ハドロンのスペクトルも。ようやくスタートライン。

素粒子現象論、原子核理論はいずれ格子QCDを
基礎ツールとするようになる（かも）



