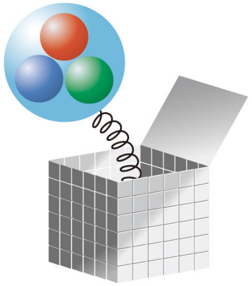


格子QCDシミュレーションとは

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 & 総合研究大学院大学
橋本省二
平成24年7月27日

計算基礎科学連携拠点
JICFuS Joint Institute for Computational Fundamental Science

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

素粒子理論の勉強

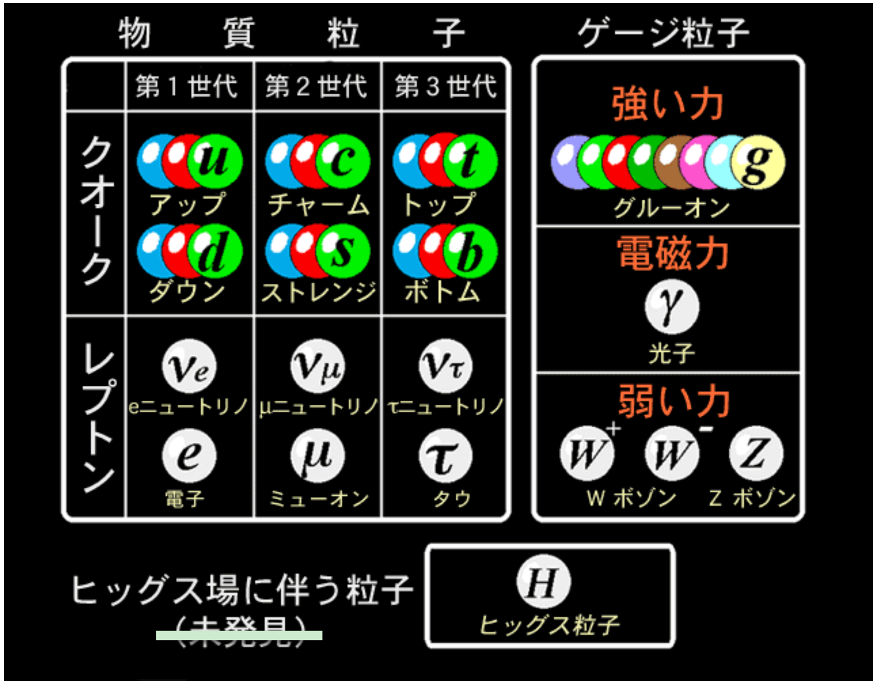
- 場の量子“論”
  - 場の量子化
    - ボソン、フェルミオン、ゲージ場
  - 量子電磁気学
  - 繰り込み
  - 繰り込み群
  - 量子色力学
    - 非可換ゲージ場、漸近自由性…
  - 破れた対称性

- 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は大変。

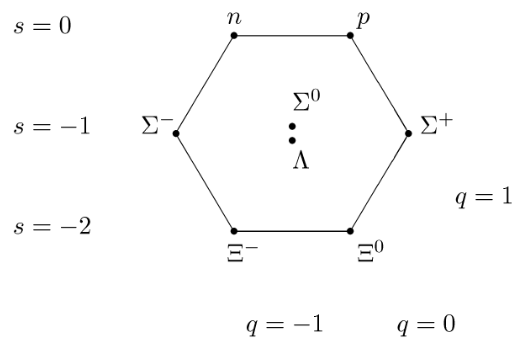
おさらい

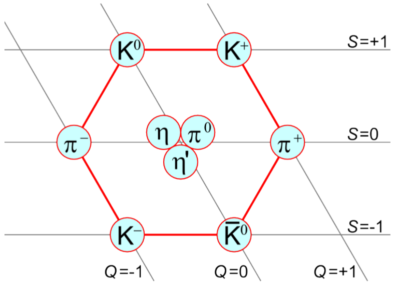
- クォークとレプトン
  - 働く力によっていろんな種類がある。
    - 強い力が働くのがクォーク、働かないのがレプトン。
    - 弱い力はアップとダウンの組に働く。
    - 電磁気力も働かないニュートリノ。
  - 3つの世代も。
    - 通常の物質は第1世代だけ。
    - なぜ3世代なのかは謎。



強い力はむずかしい

- 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。

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）。
  - ハドロン物理という学問が生まれたりする。その先に原子核。（私には）絶望的に難しい。
  - 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。
数値計算でもいいから何とかせよ。

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。

$$S = \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} \mathrm{Tr}\, F_{\mu\nu}^2 + \bar{\psi}(\not{D} + m)\psi \right\}$$

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

  - 見た目は量子電磁気学とそんなに違わない。どこでそんなに苦労するのか。
  - そういえば陽子とか中間子とかはどこ？

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

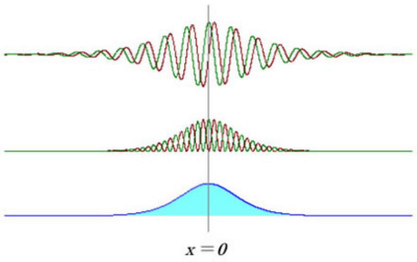
$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},\,t) = \hat{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\Psi(\mathbf{r},\,t)$$

- 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。

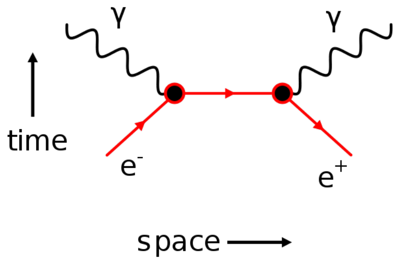
- 2個、3個になっても（反対称化とかあるけど）基本的な論理は同じ。
  - な〜んだ、簡単じゃん。とか言ってはいけない。4個、5個と増えるとどんどん大変になる。

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^+ は調和振動子と同様の交換関係を満たすことにする。

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

第二量子化

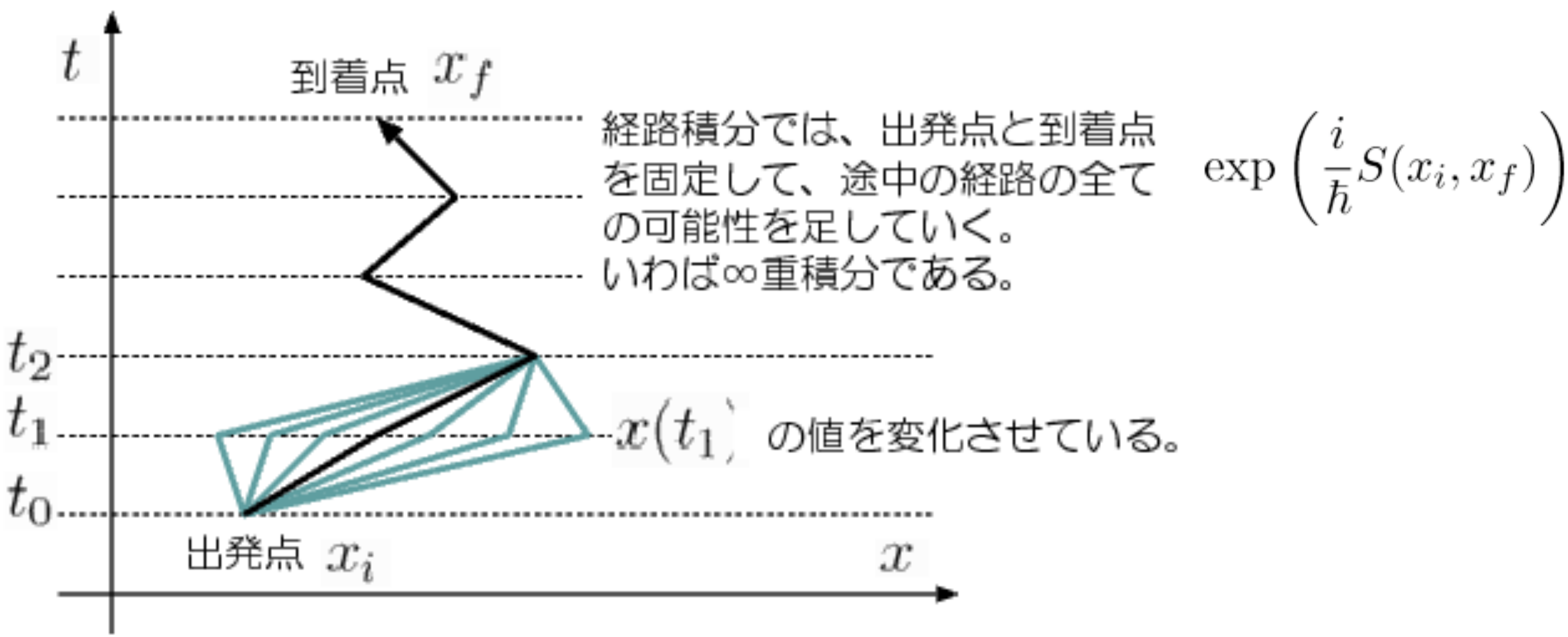
  - すると、振幅 a の取る値は 1, 2, 3, … と数えられる。

＝“粒子”

- “ヒッグス粒子”と“ヒッグス場”の関係も…

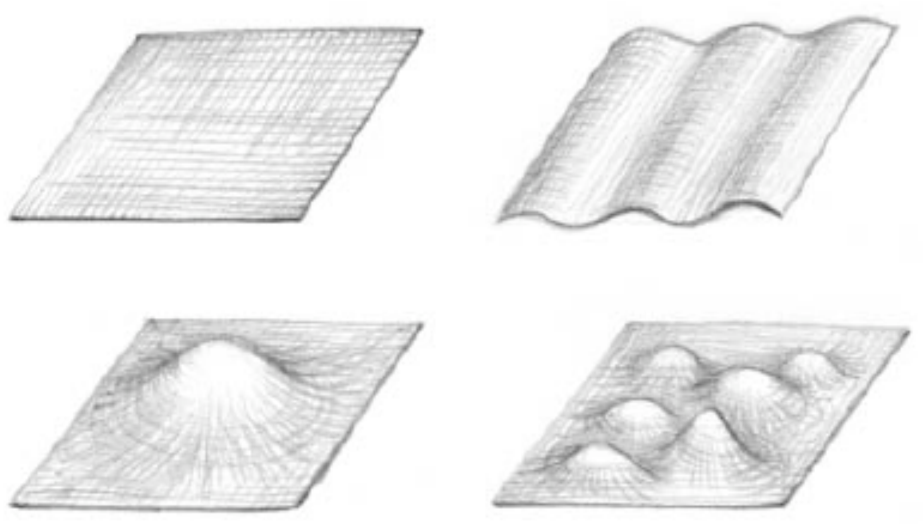
経路積分

- でもね、交換関係なんて意味がわかんない。
  - 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。
  - 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)。



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。



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

- あとはラグランジアンを指定して計算する。

そうか。積分するだけね。

- だけど、普通は経路積分なんて計算できない。
  - 超多重積分:

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

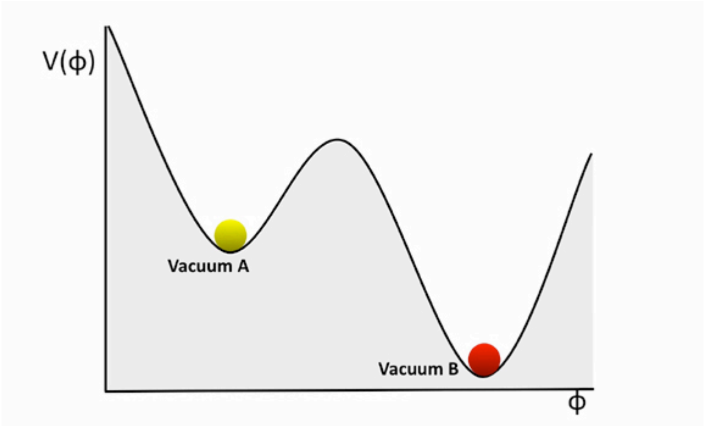
- 唯一、まともに何かできるのはガウス積分に帰着できるとき。
  - 自由場の理論: $S \sim \phi^2$
  - 相互作用があるときは、自由場の理論をもとにした展開を考える。

    = 摂動論

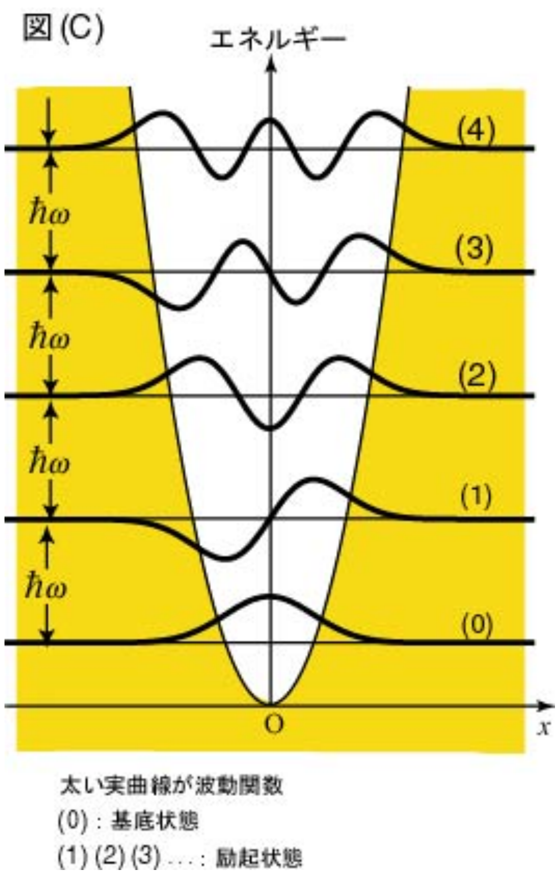
    - 展開のベースが現実に近ければ、これがよい近似になる。

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。



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



どこら辺まで振れるかという問題。

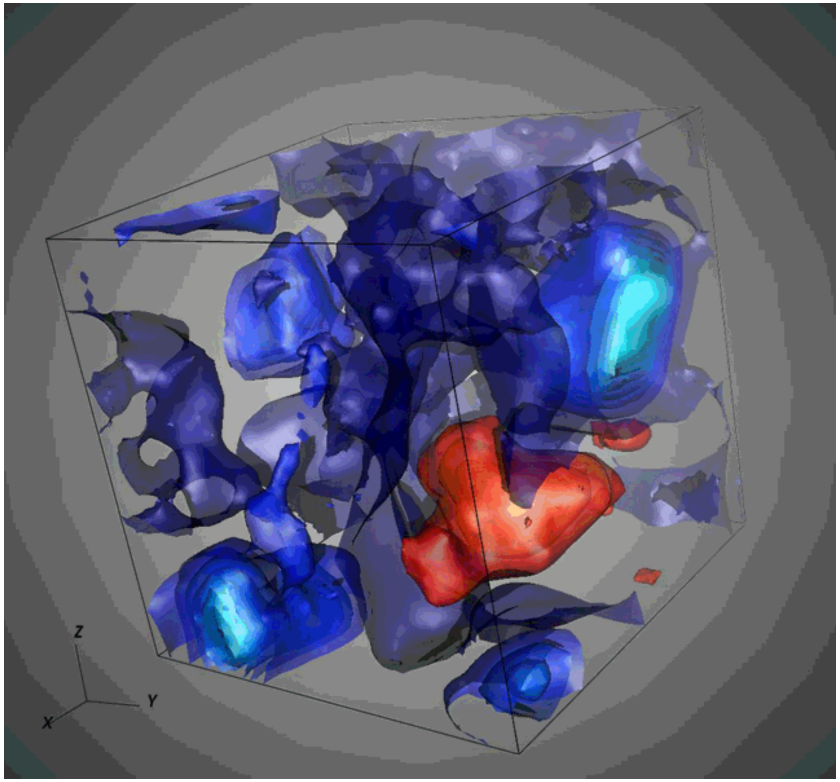
真空とはどんなものか？

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。本当はそれに興味がある。でも、さっきの「交換関係」みたいな簡単な話にはもはやならない。

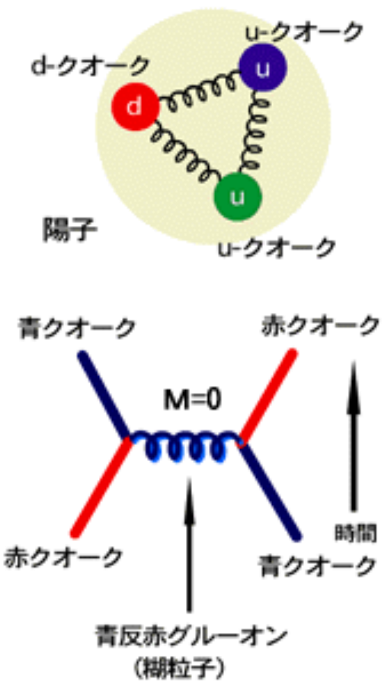
量子色力学の真空

- こんな感じ



2. 格子QCDシミュレーション

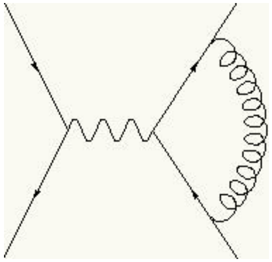
強い力

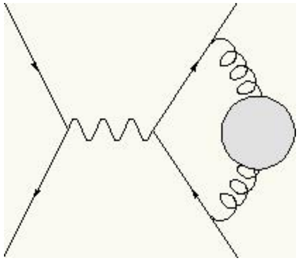


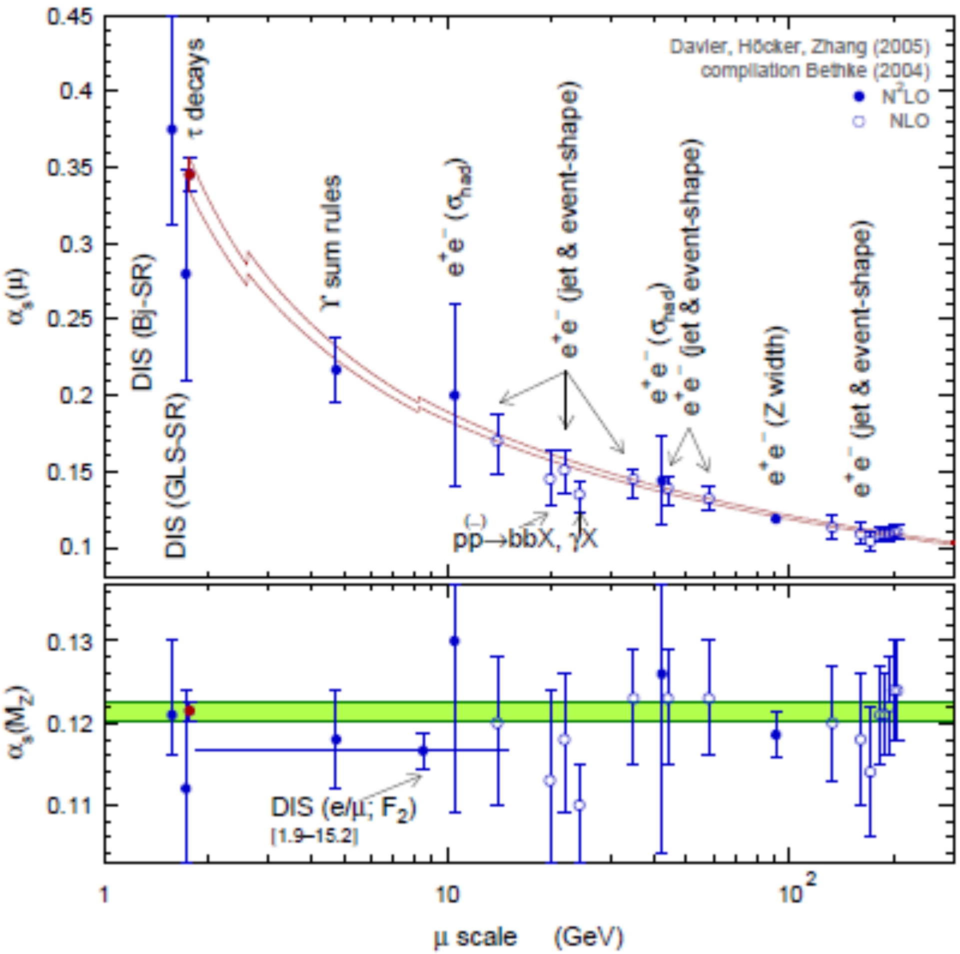
- 量子色力学(QCD)
  - 量子電気力学(QED)と似ている。ただし、
  - U(1) → SU(3): クォークがもつ3色の色荷（南部の発案）に力が働く。
  - 光子の代わりにグルーオンをやりとり。
  - グルーオンも色をもつ。
  - 漸近自由性 = 近距離では力が弱くなる

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。



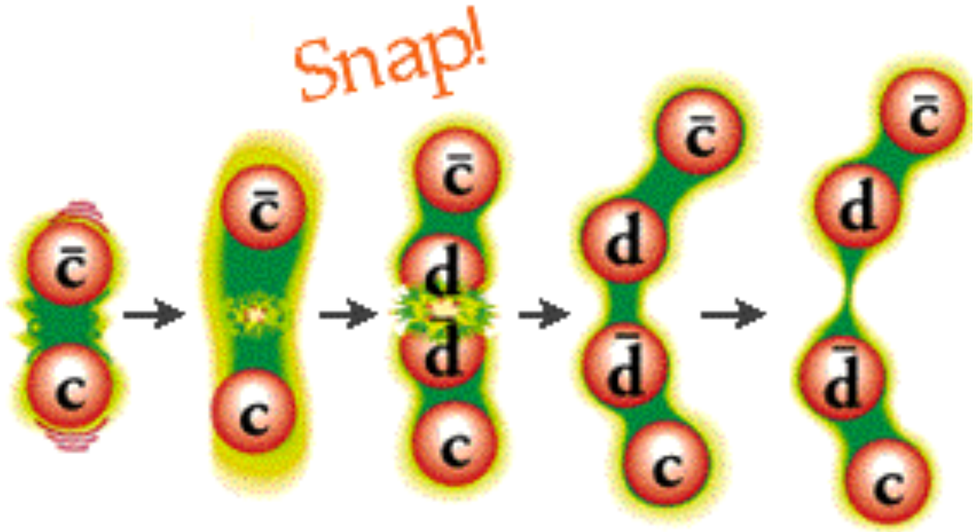




とっても強い力

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

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

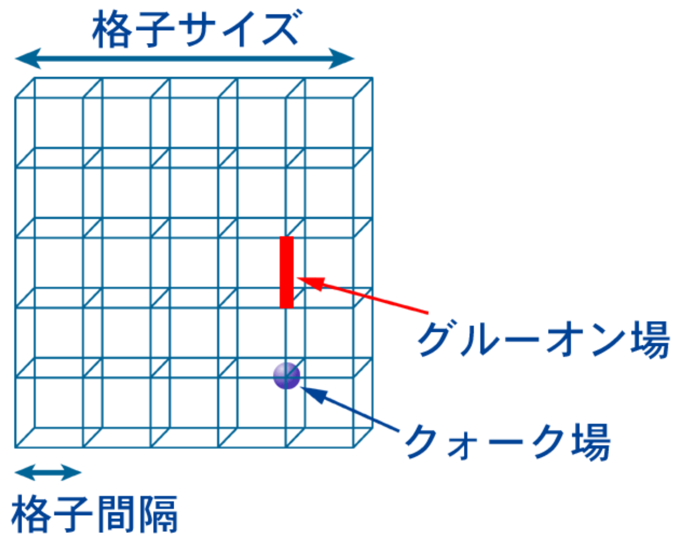
$$F_{\mu\nu}^a=\partial_\mu A_\nu^a-\partial_\nu A_\mu^a+g\,f^{abc}A_\mu^b A_\nu^c$$

$$D_\mu=\partial_\mu-igT^aA_\mu^a$$

- 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
  - 3x3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。

格子上の理論

- 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）。

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

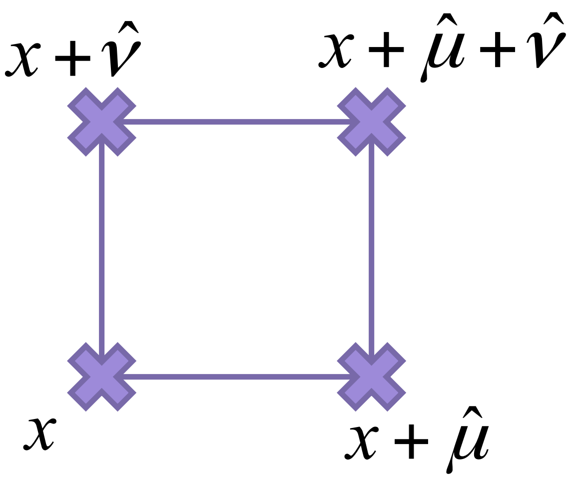
$$\bar{\psi}(x)V^\dagger(x) \quad V(x)U_\mu(x)V^\dagger(x+\hat{\mu}) \quad V(x+\hat{\mu})\psi(x+\hat{\mu})$$

$$U_\mu(x) = \exp\left[igaA_\mu(x)\right] = 1 + igaA_\mu(x) + \ldots$$

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

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。



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

ゲージ理論のラグランジアン

ゲージ作用

- 連続極限*a*→0では通常のものに戻る。

$$S=\frac{6}{g^2}\sum_x\sum_{\mu<\nu}\left[1-\frac{1}{3}\mathrm{Re\,Tr}\left[U_\mu(x)U_\nu(x+\hat{\mu})U_\mu^\dagger(x+\hat{\nu})U_\nu^\dagger(x)\right]\right]$$

$$\to a^4\sum_x\sum_{\mu<\nu}\mathrm{Re\,Tr}\left[F_{\mu\nu}^2\right]$$

$$=\int d^4x\,\frac{1}{4}\left(F_{\mu\nu}^a\right)^2$$

  - 唯一ではない。より速く連続極限に近づくものを考えてもよい。

- 結合定数: β≡6/g^2
  - 統計モデルでは 1/kT に相当。β=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 でおきかえ。

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

  - U=exp(iagA)~1+iagA+…
    - a~0 か g~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等 (~N³)。

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

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。

これは全然無理。

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。

$$Z = \int [dU] \det(D[U] + m)^2 e^{-S_g}$$

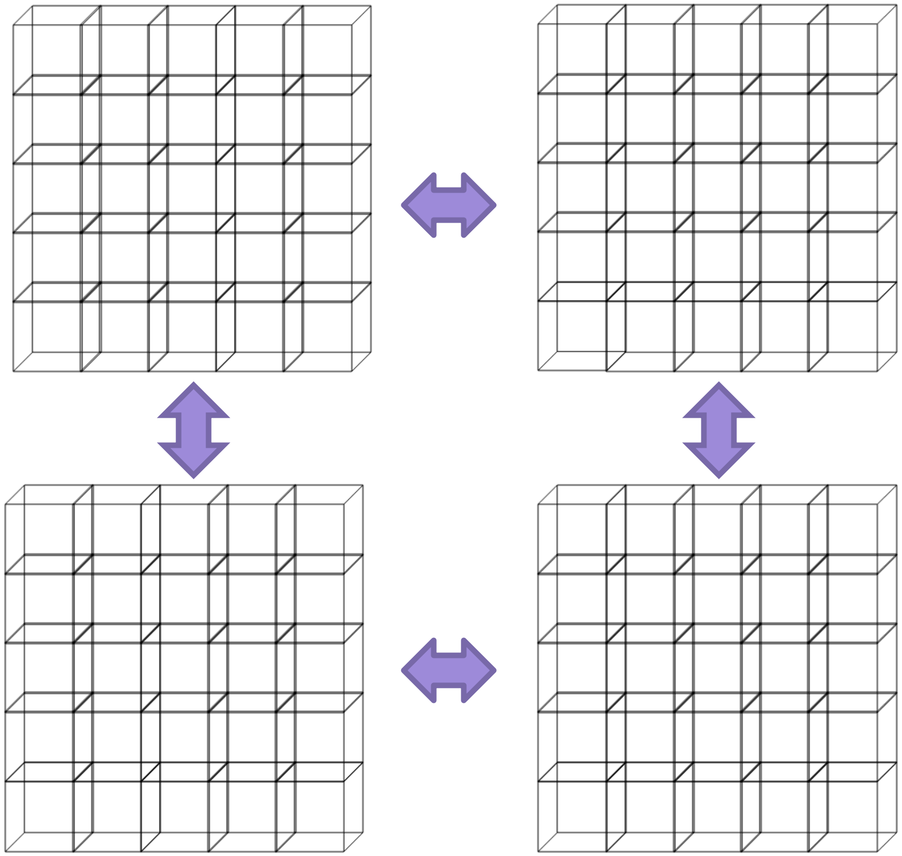
$$= \int [dU][d\phi] e^{-S_g - \phi^\dagger (D[U]+m)^{-2}\phi} = \int [dU][d\phi] e^{-S_g - |(D[U]+m)^{-1}\phi|^2}$$

  - 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。
  - QCDのシミュレーションというのは、要はいつも逆行列の計算をやっている。

ここから先は詳細になるので割愛。
物理量計算も別途。

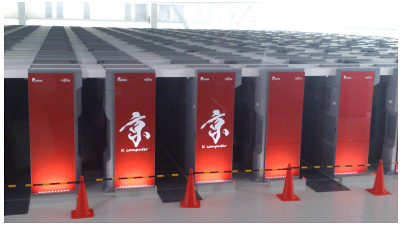
大規模計算

- 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



スーパーコンピュータ

- 「京」
  - 10ペタフロップス --- 世界最速(だった)スパコン
  - 理化学研究所・計算科学研究機構
    (神戸ポートアイランド)



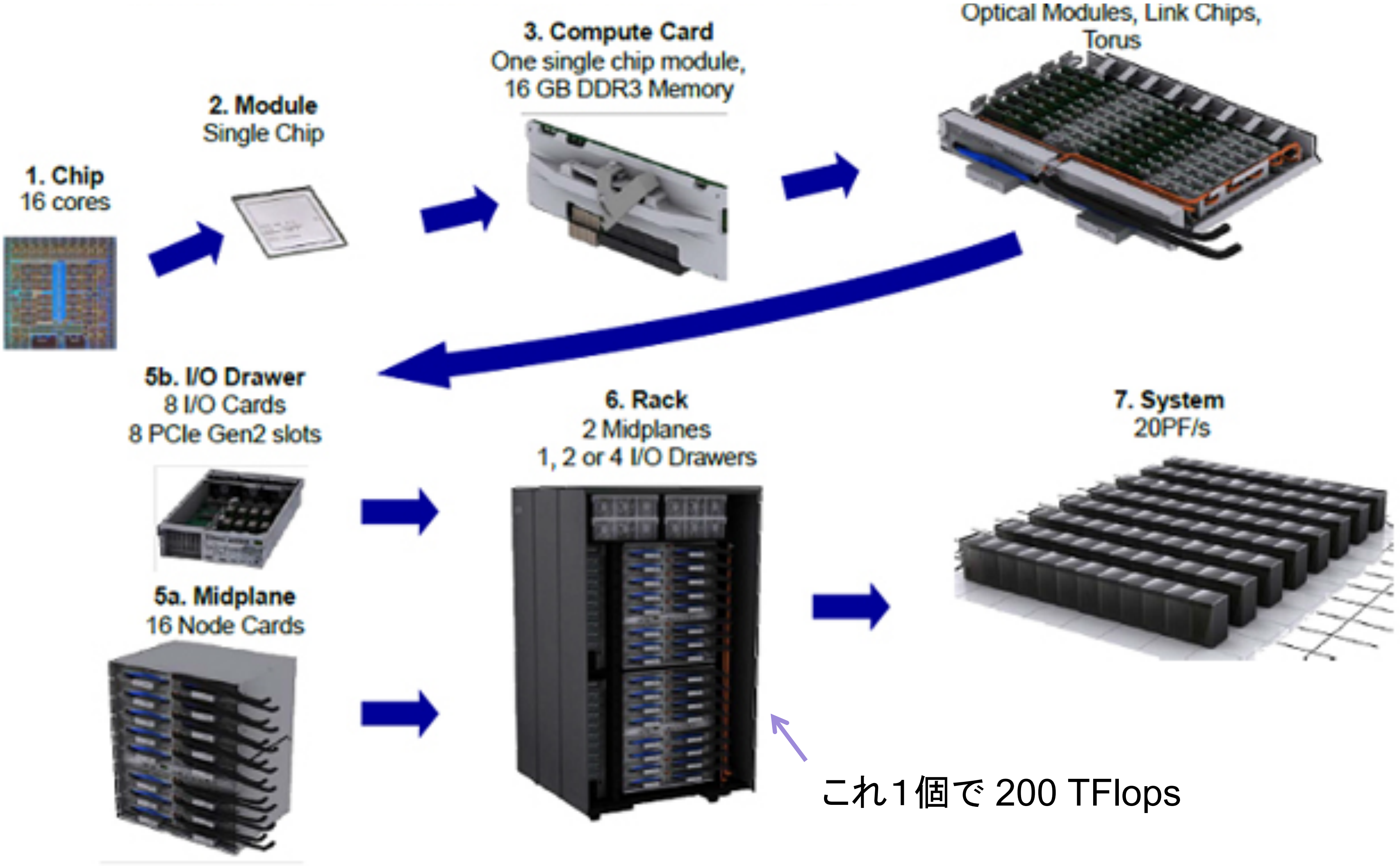
KEK のスパコン

- 今春から本格稼働
  - ~ 1ペタフロップス（でもこっちは素粒子・原子核専用）

日立 SR16000 M1

IBM Blue Gene/Q

Blue Gene/Q



これ1個で 200 TFlops

3. どんなことがわかる？

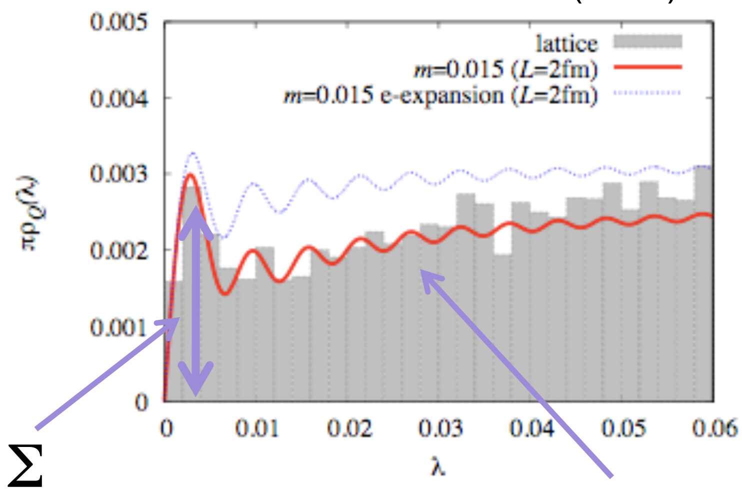
真空の様子

- 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。

JLQCD (2010)



Σ

Fit with NLO χPT

Banks-Casher (1980)

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

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

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

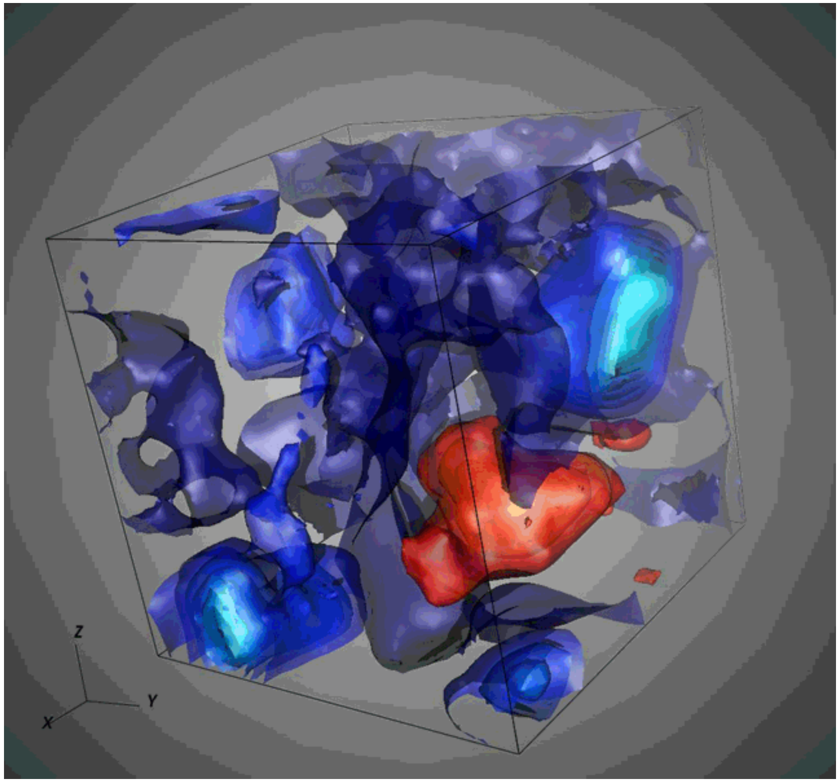
有限のカイラル凝縮 =
自発的カイラル対称性の破れの直接計算。

固有モードがこれ

- 低エネルギーモード
  - カイラル（右or左）
  - 局在しているっぽい。

  - ただしこれがそのまま物理量ではないので注意。
  - なんで摂動計算できないかわかるでしょ。こんなにぐちゃぐちゃ。

JLQCD (2011)



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QCDの開始当初からの目標 …
    - 格子ゲージ理論の始まり: K.G. Wilson (1974)
      - ゲージ理論を格子上に定義して強結合での計算を可能にする。
      - 繰り込み群:無限自由度の場の量子論の意味が明確になった。
    - 数値シミュレーション。M. Creutz (1980)
      - 最初の数値シミュレーション。強結合展開で見つかったクォークの閉じ込めは、弱結合(連続極限の近く)でも正しそう。

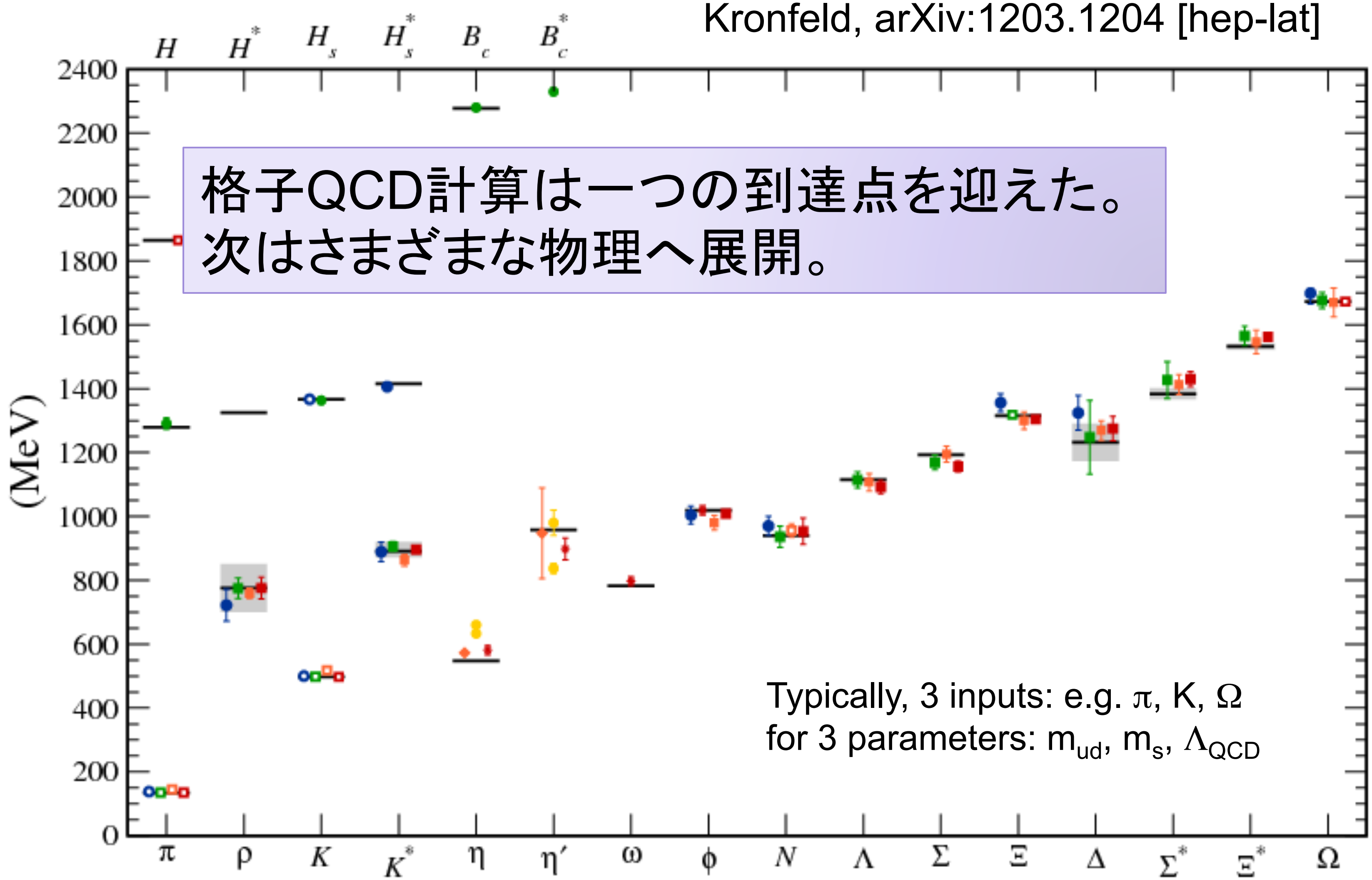
  - 格子計算へのインプットは
    1. 全体のスケール(あるいは結合定数)
    2. 個々のクォーク質量

  これだけ。他はすべて予言。

ハドロン･スペクトル

Kronfeld, arXiv:1203.1204 [hep-lat]

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: e.g. π, K, Ω
for 3 parameters: m_{ud}, m_s, Λ_{QCD}

じゃあ、どんなことを調べてみたい？

- 簡単な問題
  - 基底状態の粒子の質量、崩壊定数
  - 基底状態の粒子の弾性散乱の形状因子: パイ中間子形状因子、核子の荷電半径など。（実はここら辺でもうほころびが見えたりする。）
  - 基底状態から基底状態への遷移形状因子 K→π とか。
- 難しい問題
  - 粒子の2体散乱： I=2 ππ はまだまし。I=1 ππ は大変。
  - 励起状態のエネルギー
- もっと難しい問題
  - ２体の非弾性散乱。よく言われるエギゾチックはこういうのが多い。
  - I=0 の状態。これは大いなる野望かも。
- どうしようもない（？）問題
  - ３体以上。
  - インクルーシブとか、光円錐上に離れた演算子とか。。。

さまざまな課題

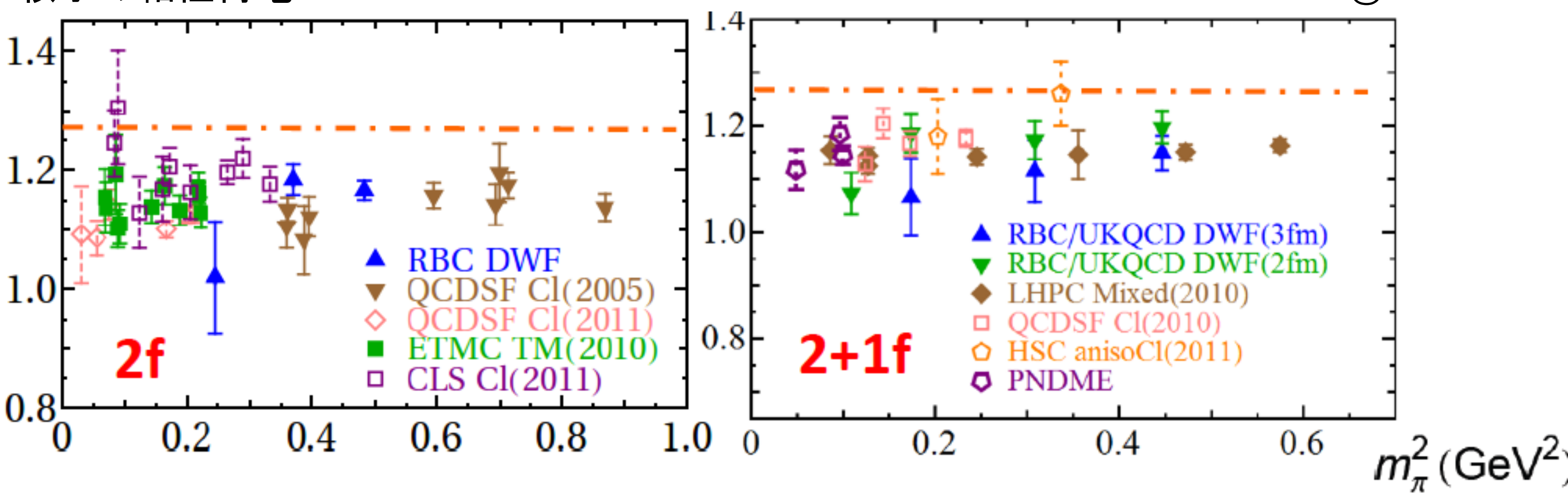
- 粒子・反粒子の対称性（CP対称性）はどのように破れているか？
  - K中間子混合、B中間子混合、B中間子崩壊の（QCD部分）の計算
  - QCDのθ項はどこまでゼロなのか？
  - 精密な実験と計算を組み合わせて標準模型のほころびを探る。
- 宇宙が安定に存在する理由？
  - 中性子は陽子より重い。クォーク質量差とQED効果の微妙な相殺。
  - アイソスピンの破れの定量的理解。理由はわからないんだけど…。
- 核力の理解
- 有限温度・密度相転移
  - １次相転移だったら大騒ぎかも（でもたぶん違うらしい）。

注意！

- 格子QCDなら何でも正しいのか。
  - 本来そういうつもりでやっている。場の量子論の定義にもとづいて計算。
  - でも、気をつけて。いろんなところで「ずる」しているかも。
    - 理論的枠組みは正しいか。解析の全ステップでチェックされているか。

核子の軸性荷電

Lin @ Lattice 2012



どうも合わない。有限体積効果？ 励起状態の寄与？ よくわかってない。

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。
  - ようやくもっともらしいシミュレーションができるようになった。
  - ハドロンのスペクトルも。ようやくスタートライン。

独り言：
ヒッグスは見つかったけど、超対称粒子は見つからない。
まだしばらくはダイナミクスを調べる時代かも。
よく見ると積み残した問題はいっぱいあるみたい。。。