

# カノニカル法に基づいた格子 QCD による、有限温度、有限密度での QCD 相構造の解析

岡 将太郎

立教大学

## 1. はじめに

私たちの世界は、『物質』——すなわち、原子や分子の集まりで構成されている。原子の中には電子と原子核があって、さらに原子核は、陽子と中性子が集まって出来ている。ここまではよく知られている事実だが、陽子や中性子が「クォーク」という粒子で構成されているという話は、物理に携わる人間以外には、あまりよく知られていないようだ。

クォークは、電荷と質量の他に、フレーバー荷およびカラー荷などの量を持った素粒子である。フレーバーは6種類あり、質量が似ているもの同士で3世代に分類されている。それぞれ、アップ、ダウン（第一世代）、チャーム、ストレンジ（第二世代）、トップ、ボトム（第三世代）と呼ばれる。これらは弱い相互作用という力に関わってくるが、ここでは詳細は割愛する。

一方、カラーは3種類あり、光の三原色との類推で、それぞれ赤、緑、青と呼ばれている。電荷を持っていると電磁相互作用が働くように、カラー荷を持っているクォークには、強い相互作用と呼ばれる力が働く。この相互作用は、電磁気力よりも強い引力を生じるという意味で、このように呼ばれている。

陽子や中性子は、3つのクォークが強い相互作用でまとまって構成される、複合粒子である。ただし、適当な色のクォークが集まるのではなく、必ず赤、緑、青のカラーが1つずつ集まって「白色」の組み合わせになるように構成される。同様に、湯川秀樹が存在を予言した「中間子」も2つのクォークによって作られるが、こちらはクォークと反クォーク（つまり、片方が赤なら、もう片方は反赤（色で言うとシアン））の組み合わせになっている。

このように、私たちの世界は、究極的にはクォークという素粒子で構成されている。クォークの存在自体は、すでに加速器による実験で確認されている。しかし、クォークの性質——言い換えれば、強い相互作用が与える力学（QCD）については、まだ分かっていないことが多い。

たとえば、水は常温・常圧では液体だが、温度が0℃になると固体になり、100℃になると気体になる。クォークではどうだろうか？ 私たちの世界の温度・圧力下では、クォークは単体としては現れず、陽子や中性子、中間子等の複合粒子（ハドロン）という状態で存在する。そのまま温度を上げていくと、クォークはハドロンから解放されてプラズマになることが、理論および実験的な解析から知られている。また、圧力を上げていくと超伝導状態が現れることが、理論的に予想されている。

ただし、QCD を非摂動で理論的に解析することは非常に難しく、高温・低温等の極限でのふるまいは比較的調べられているものの、中間の領域でのクォークのふるまいは正確には予想できていない。加速器実験による探索も、すべての温度・圧力領域を調べることは不可能に近いので、別のアプローチによる研究が必要となってくる。

そこで、理論や実験と並ぶ第三のアプローチとして、数値計算が注目されている。具体的には、QCD を時空について離散化して温度・密度の概念を取り入れた「有限温度・有限密度格子 QCD」という理論を使い、クォーク（およびグルーオンと呼ばれるゲージ場）の運動を第一原理計算する。

ゼロ密度での数値計算は、現在までに多数行われており、理論や実験との比較も良い精度で行われてきた。しかし有限密度での数値計算は、後述する「符号問題」という数値計算上の困難があり、物理量を精度よく計算することができずにいる。符号問題の回避を試みる手法として、再重みづけ法 (Reweighting technique)、テイラー展開法、カノニカル法などが提唱されているが、いずれも高密度の領域では、物理量の計算精度が悪くなってしまう。

## 2. 本研究の目的

本研究では、有限温度・有限密度格子 QCD を使った第一原理計算によって、有限温度・有限密度での QCD 相図を作成することを目的としている。符号問題に対しては、カノニカル法を適用し、さらにこの方法を改良することで、これまでの研究より高密度な領域での物理量の高精度計算を目指す。

## 3. 物理量の計算と符号問題

QCD の相構造を調べるためには、熱力学量を計算する必要がある。実際の数値計算では、そのための最も基本的な準備として、考えている系の分配関数の計算から始めていく。

グランドカノニカル分配関数  $Z(\mu)$  は、経路積分の表式では以下のように記述される。

$$Z(\mu) = \int \mathcal{D}U [\det \Delta(x, x', \mu)]^{N_f} e^{-S_G}$$

ただし、 $\mu$  は化学ポテンシャル (密度の代わりに使うパラメータ。 $\mu$  が大きいと、系の密度も高い)、 $U_i$  はリンク変数 (ゲージ場)、 $N_f$  はフレーバー数<sup>1</sup>、 $S_G$  はゲージ作用である。 $\Delta(\mu)$  はフェルミオン行列であり、ここでは以下に示すウィルソン・フェルミオンを使用する。

$$\Delta(x, x', \mu) = \delta_{x, x'} - \kappa \sum_{i=1}^3 \{ (1 - \gamma_i) U_i(x) \delta_{x', x+i} + (1 + \gamma_i) U_i^\dagger(x') \delta_{x', x-i} \} \\ - \kappa \{ e^{+\mu} (1 - \gamma_4) U_4(x) \delta_{x', x+\hat{4}} + e^{-\mu} (1 + \gamma_4) U_4^\dagger(x') \delta_{x', x-\hat{4}} \}$$

このとき、物理量の期待値は、

$$\langle O(\mu) \rangle = \frac{1}{Z(\mu)} \int \mathcal{D}U O(\mu) [\det \Delta(x, x', \mu)]^{N_f} e^{-S_G}$$

このように書くことができる。

ここでは簡潔に書いているが、リンク変数  $U_\mu$  は多くの添え字 (時空で 4 つ、カラーが 2 つ、ローレンツが 1 つ) を持つ変数であるため、この積分の実行には莫大な計算コストがかかる。そのため、 $[\det \Delta(x, x', \mu)]^{N_f} e^{-S_G}$  を確率としたモンテカルロ積分を実行することで、計算コストを削減することになる。

<sup>1</sup> 一般的に、異なるフレーバーのクォーク (たとえばアップとダウン、アップとトップなど) は質量が異なるが、ここで言うフレーバー数は、「同じ質量の」クォークが何種類あるか、という意味で使われている。特に有限密度格子 QCD では、軽いクォークであるアップとダウンを同じ質量であるとみなし、その他のクォークは重たいため無視することが多い ( $N_f = 2$  とする)。

これらの計算は、ゼロ密度 ( $\mu = 0$ ) の場合は問題なく実行することができる。しかし有限密度 ( $\text{Re}(\mu) \neq 0$ ) の場合は、 $\det \Delta(\mu)$  が複素数となってしまう、モンテカルロ積分が実行できなくなる[1,2]。この問題は「符号問題」と呼ばれており、1985年ごろに発見されてから現在まで、数多くの研究者たちを悩ませ続けている。

#### 4. 符号問題の回避を試みる手法

モデル計算やパラメータの外挿をせずに符号問題の回避を試みる手法は、以下に挙げる3つの手法がある。

##### ①再重みつけ法

この手法では、グランドカノニカル分配関数を以下のように式変形して計算を行う。

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= \int \mathcal{D}U [\det \Delta(x, x', \mu)]^{N_f} e^{-S_G} \\ &= \int \mathcal{D}U \frac{[\det \Delta(x, x', \mu)]^{N_f} e^{-S_G(\beta)}}{[\det \Delta(x, x', \mu_0)]^{N_f} e^{-S_G(\beta_0)}} [\det \Delta(x, x', \mu_0)]^{N_f} e^{-S_G(\beta_0)} \\ &= Z(\mu_0) \left\langle \frac{[\det \Delta(x, x', \mu)]^{N_f} e^{-S_G(\beta)}}{[\det \Delta(x, x', \mu_0)]^{N_f} e^{-S_G(\beta_0)}} \right\rangle_{\mu_0} \end{aligned}$$

ここで $\beta$ は有効結合定数であり、 $\langle \dots \rangle_{\mu_0}$ は $\mu = \mu_0$ のゲージ配位を使って計算した期待値を表す。この手法のアイデアは、確率に出てくる位相部分を、測定値である物理量に押し込んでしまおうというものである。この手法ではモンテカルロ積分が実行できるようになるが、符号が変わる関数の積分となるため、位相が激しく変化する領域では計算精度が確保できなくなる。

##### ②テイラー展開法

この手法では、測定する物理量をテイラー展開し、その係数を測定する手法である。以下では出てこないため、詳細は割愛する。

##### ③カノニカル法

この手法では、統計力学で使われるフガシィティ展開を使い、必要に応じてグランドカノニカル分配関数とカノニカル分配関数 $Z_n$ を変換して使う手法である。

$$Z(\mu) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} Z_n \xi^n, \quad \xi := e^{\mu/T}$$

フガシィティ展開はカノニカルの量をグランドカノニカルの量に変換する関係であるが、この式から逆方向に変換する関係も導くことができる。

$$Z_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\left(\frac{\mu_I}{T}\right) Z(\mu = i\mu_I) e^{-in(\mu_I/T)}$$

これはちょうど、純虚数化学ポテンシャル $\mu = i\mu_I$ に対するフーリエ変換の形になっている。フェルミオン行列 $\Delta(\mu)$ の定義から、純虚数化学ポテンシャルの場合は $\det \Delta(\mu)$ が実になることが分かるので、モンテカルロ積分の確率が複素数ではなく実数になり、(フレーバー数 $N_f$ が偶数の場合は)積分が実行できるようになる。

これらの式を使い、

- a. 純虚数化学ポテンシャル $\mu = i\mu_I$ で $Z(i\mu_I)$ を計算する
- b.  $Z(i\mu_I)$ を $\mu_I$ についてフーリエ変換して、 $Z_n$ を得る
- c. フガシティ展開を使って、 $Z_n$ から任意の化学ポテンシャルの $Z(\mu)$ を構成する

という流れでグランドカノニカル分配関数(と物理量)を計算する手法が、カノニカル法である[3]。この手法は、符号問題をうまく回避できそうに見えるが、実際はフーリエ変換の計算で激しく振動する積分が生じ、計算精度が悪くなる。

## 5. カノニカル法の改良(先行研究)

カノニカル法の改良に関する先行研究で代表的なものは、以下の2点がある。

### ① $\det \Delta(\mu_I)$ の計算手法の改良

フェルミオン行列は、ランクがかなり大きい(時空の体積 $\times 3$ (カラー) $\times 4$ (ディラック))行列であるため、行列式の計算コストが非常に高くなる。計算コストを下げるために、通常はホッピングパラメータ展開(HPE)という手法を使う。この手法では、ウィルソン・フェルミオンが $\Delta(\mu) = 1 - \kappa Q(\mu)$ という形で書けることを利用し、

$$\det \Delta(\mu) = \exp[\text{Tr} \log \Delta(\mu)] = \exp \left[ -\text{Tr} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\kappa Q)^n \right]$$

このように展開することで、行列式をべき級数に変えて計算する。ホッピングパラメータ展開は、ホッピングパラメータ $\kappa$ が小さい場合(つまり、クォークの質量が重い場合)のみ有効になる。また、 $\mu$ を変えるたびに行列式を再計算する必要があり、計算効率が悪い。

そこで、経路積分における「閉じたループ」の和がトレースに対応すること、およびループが格子時空の時間方向に一回巻き付くごとに $\xi = e^{\mu/T}$ の係数がつくことを利用して、

$$\det \Delta(\mu) = \exp \left[ -\text{Tr} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (\kappa Q)^n \right] = \exp \left[ \sum_{n=-\infty}^{\infty} W_n \xi^n \right]$$

と総和をとりなおす[4]。この手法は「巻きつき数展開(WNE)」と呼ばれている(詳細は省くが、係数の $W_n$ を求める方法はいくつかある[4,5])。このようにすることで、ある化学ポテンシャル $\mu_0$ で $W_n$ を一回求めておけば、上の式を使って任意の $\mu$ で $\det \Delta(\mu)$ を求めることができるようになる。

### ②多倍長精度計算

カノニカル法には、フーリエ変換の計算で精度が悪くなり、それ以降の計算ができなくなる問題がある。この問題は、フーリエ変換の際に激しい桁落ちが生じることで発生する[6]。桁落ち誤差の影響を少なくするためには、多倍長精度計算によって演算に用いる変数の有効桁数を増やし、桁落ちが発生しても有効桁が十分残るようにすればよい[6]。著者らの数値計算のセットアップでは、変数の有効桁は400桁程度必要となる。

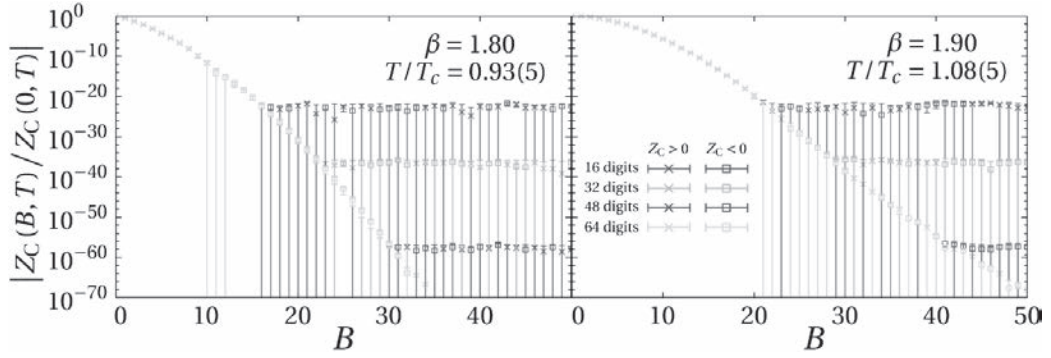


図 1 : カノニカル分配関数と多倍長精度計算

著者らの先行研究[7]から引用。縦軸はカノニカル分配関数、横軸はバリオン数。変数の有効桁数を変えて、カノニカル分配関数を計算した。赤が 16 桁、緑が 32 桁、青が 48 桁、シアンが 64 桁である。

## 6. カノニカル法の改良 (本研究)

本研究では、ホッピングパラメータ展開を改良することにより、従来よりも高密度の領域や、クォーク質量が軽い領域での物理量の計算を目指す。フェルミオン行列は  $\Delta(\mu) = 1 - \kappa Q(\mu)$  という形をしているが、 $Q(\mu)$  の  $\mu$  依存性は時間方向にしかないため、時間方向と空間方向を分けて

$$\Delta(\mu) = 1 - \kappa Q_s - \kappa Q_t(\mu) = [1 - \kappa Q_s] \left[ 1 - \frac{\kappa}{1 - \kappa Q_s} Q_t(\mu) \right]$$

このように書くことができる。これを使うと、グランドカノニカル分配関数は

$$Z(\mu) = \int \mathcal{D}U \left( \det[1 - \kappa Q_s] \det \left[ 1 - \frac{\kappa}{1 - \kappa Q_s} Q_t(\mu) \right] \right)^{N_f} e^{-S_G}$$

となる。さらに、この式の行列式部分に再重みつけ法を適用することで、

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= \int \mathcal{D}U \left( \frac{\det \left[ 1 - \frac{\kappa}{1 - \kappa Q_s} Q_t(\mu) \right]}{\det \left[ 1 - \frac{\kappa}{1 - \kappa Q_s} Q_t(\mu_0) \right]} \right)^{N_f} [\det \Delta(\mu_0)]^{N_f} e^{-S_G} \\ &= Z(\mu_0) \left\langle \left( \frac{\det \left[ 1 - \frac{\kappa}{1 - \kappa Q_s} Q_t(\mu) \right]}{\det \left[ 1 - \frac{\kappa}{1 - \kappa Q_s} Q_t(\mu_0) \right]} \right)^{N_f} \right\rangle_{\mu_0} \end{aligned}$$

となる。この表式にすると、行列式をホッピングパラメータ展開する際に、空間方向の伝搬 ( $\det[1 - \kappa Q_s]$ ) に対しては展開を行う必要がなくなるため、より高精度で分配関数を計算できると期待される。

## 7. 数値計算

今回の計算は、改良した手法のテストが目的であるため、格子サイズと配位数を小さくし、パラメータも一組に絞って計算を行った。具体的には、以下の値を用いた。

- 格子サイズ :  $4 \times 4 \times 4 \times 4$
- 配位数 : 30 配位
- $\beta = 1.70$ ,  $\kappa = 0.148086$  ( $m_\pi/m_\rho = 0.65$ ,  $T/T_c = 0.94(3)$ )
- $N_f = 2$

作用については、ゲージ部分は岩崎ゲージ、フェルミオン部分はクローバー項入りのウィルソン・フェルミオンを使用した。

このセットアップでは、パイ中間子とロー中間子の質量比が $m_\pi/m_\rho = 0.65$ となるが、現実の世界では $m_\pi/m_\rho = 0.18$ であり、現実よりもクォーク質量がかなり重い場合のシミュレーションとなっている。また、臨界温度 $T_c$ よりも低い温度であるため、クォーク・グルーオンプラズマ相ではなく、ハドロン相側での計算となる。

以下では、得られた結果の一部を紹介する。

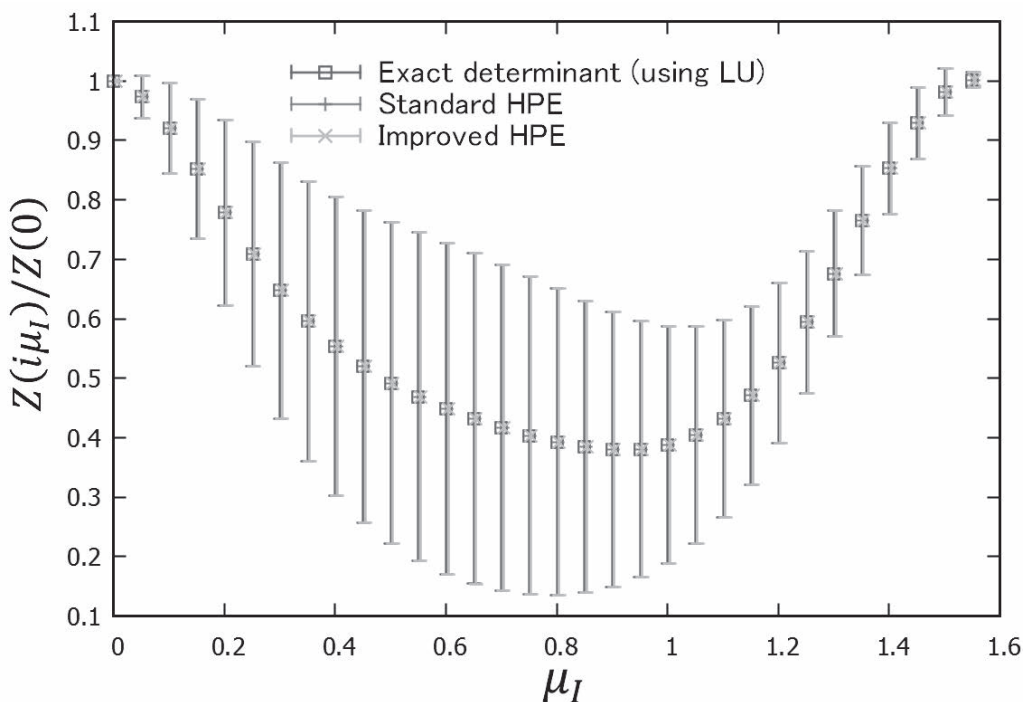


図2:各手法で計算した $Z(i\mu_I)$ の比較 (5 配位)

$Z(i\mu_I)$ の計算結果の比較。赤色のデータはLU分解によって行列の固有値を求めることで計算した厳密解、青色のデータは通常のHPEによる計算結果、緑色のデータは改良したHPEによる計算結果。トレースは、後述のノイズ法を使わず、定義通りに計算した。

図2は、分配関数の計算に必要な $Z(\mu = i\mu_I)$ を様々な手法で計算し、グラフにしたものである。赤色は厳密解、青色は通常のHPEで、緑色は改良したHPEのデータである。これは動作確認のために行ったテストデータであり、配位の数が非常に少なく、誤差もかなり大きい。しかし図を見ると、少なくともこのセットアップでは、いずれの手法も全く同じ結果を出していることが分かる。

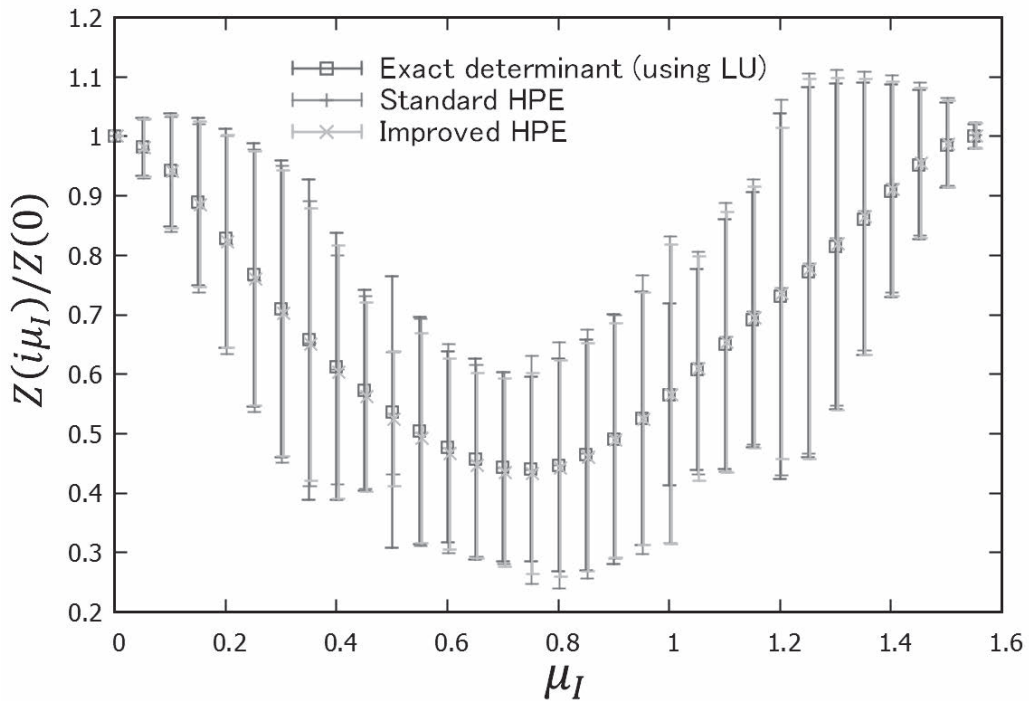


図3：各手法で計算した $Z(i\mu_I)$ の比較（30 配位）

$Z(i\mu_I)$ の計算結果の比較。赤色のデータはLU分解によって行列の固有値を求めることで計算した厳密解、青色のデータは通常のHPEによる計算結果、緑色のデータは改良したHPEによる計算結果。HPEの計算で出てくるトレースは、ノイズ法という手法で評価している。

図3は、30 配位で $Z(\mu = i\mu_I)$ を計算した結果である。先ほどと同様に、赤色が厳密解、青色が通常のHPE、緑色が改良したHPEである。青色と緑色のデータについては、計算コストを減らすため、行列のトレースを「ノイズ法<sup>2</sup>」と呼ばれる手法で評価し、それを使って $Z(i\mu_I)$ を計算している。図を見ると、通常のHPEのデータも改良後のHPEのデータも、厳密解から少しずつれていることが分かる。ノイズを使って計算しているため仕方ないが、このデータをフーリエ変換してカノニカル分配関数 $Z_n$ を求めるときに、 $n$ が大きいところではこのずれの影響が顕著に出てくる。そのためあまり好ましくはないが、誤差棒の大きさに比べて十分小さいずれなので、この段階ではまだ何も言えない。

<sup>2</sup> この手法では、ノイズベクトル $\eta$ を十分な数だけ用意して、トレースを以下のように評価する。

$$\text{Tr}A = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \eta^{(i)}, A\eta^{(i)} \rangle$$

ここで、 $\eta^{(i)}$ は $i$ 本目のノイズベクトル、 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は内積、 $A$ はランク $n_{\text{rank}}$ の正方行列である。ただしノイズベクトルは、以下の性質を満たすように作られる。

$$\frac{1}{n_{\text{rank}}} \langle \eta^{(i)}, \eta^{(j)} \rangle = \delta_{ij}$$

## 8. まとめ

得られた結果はいずれも誤差が大きく、判断しづらいデータが多かったが、全体的に以下の傾向が見られた。

- ・改良した HPE は、通常の HPE と比べ、少なくとも同等な精度で分配関数を計算できる
- ・通常の HPE および改良した HPE は、正確にトレースをとる場合は厳密解とほぼ一致する

今回の計算では、通常の HPE と改良した HPE の差が見られなかった。そのため今後の課題としては、通常の HPE では計算が難しくなる領域（クォーク質量が軽い領域）で数値計算を行い、改良した HPE が上手く動作するか確認することが挙げられる。また、今のままでは格子サイズが小さすぎるため、実際に物理量を数値計算するときのセットアップで、十分な統計をとって分配関数を計算する必要がある。

---

## 謝 辞

本研究を行うにあたり、有益な議論をしていただいた Zn Collaboration の皆様に感謝いたします。特に、プログラムの作成やデータ解析をお手伝いいただき、多くの助言をしていただいた福田龍太郎氏（東京大学）に感謝いたします。

本研究の数値計算は、FX10（東京大学情報基盤センター）および SX-ACE（大阪大学核物理研究センター）上で実行されたものである。

本研究は、東京大学情報基盤センター「平成 28 年度スーパーコンピューター若手・女性利用者推薦課題」として採択され、実行された研究である。

## 参 考 文 献

- [1] J. Engels and H. Satz, "*Deconfinement at finite baryon number density*," *Phys. Lett. B* **159** (1985) 151.
- [2] 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. B* **275** (1986) 296.
- [3] A. Hasenfratz and D. Toussaint, "*Canonical ensembles and nonzero density quantum chromodynamics*," *Nucl. Phys. B* **371** (1992) 539.
- [4] A. Alexandru, M. Faber, I. Horvath, and K-F. Liu, "*Lattice QCD at finite density via a new canonical approach*," *Phys. Rev. D* **72** (2005) 114513, arXiv:hep-lat/0507020.
- [5] R. Fukuda, A. Nakamura, S. Oka, S. Sakai, A. Suzuki and Y. Taniguchi, "*Beating the sign problem in finite density lattice QCD*," *PoS (LATTICE2015)* 208 (2015).
- [6] Shotaro Oka for Zn—Collaboration, "*Exploring finite density QCD phase transition with canonical approach —Power of multiple precision computation—*," *PoS (LATTICE2015)* 166 (2015), arXiv:1511.04711.
- [7] Ryutaro Fukuda, Atsushi Nakamura, and Shotaro Oka, "*Canonical approach to finite density QCD with multiple precision computation*," *Phys. Rev. D* **93** (2016) 094508.