

量子色力学 (QCD) を計算するには

1 概要

量子力学の登場により、古典粒子と古典場という描像は量子状態や量子場に置き換わりました。これは理論としては嬉しいのですが、計算機の立場では次元の呪いという、計算量が莫大に増加する問題をさらに悪化させてしまいました。計算物理学では、モンテカルロ法によってこの問題に乗り越えています。このポスターでは、量子色力学 (QCD) という理論の計算手法として広く用いられている、格子量子色力学 (格子 QCD) の概説を行います。

2 経路積分表示の量子場

2.1 経路積分

量子力学ではシュレーディンガー方程式が主に使われますが、これは

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1)$$

と、量子状態が時間が進むにつれて変化していく (時間発展) 描像を基礎としています。

一方で、ファインマンの考案した経路積分表示の量子力学では、ある時空点 (q, t) から別の時空点 (q', t') にどれだけ波動が伝わるか (遷移確率振幅、 $U(q', t'; q, t)$) に興味を中心にあり、これをシュレーディンガー方程式から変形していくと

$$U(q', t'; q, t) = \int [Dq(t)] e^{iS[q(t)]} \quad (2)$$

となります。ここで、 $\int [Dq(t)]$ は t から t' までの全時刻での位置 $q(t)$ 全てについての積分という意味です。実際には全ての経路を舐めるのは無理なので、 N 個の標本点による経路の近似の $N \rightarrow \infty$ の極限として定義します。 S は作用と呼ばれ、粒子の経路 (ここでは $q(t)$) について定まる実数値です。これを解釈すると、(仮想的な) 粒子の全経路 $q(t)$ を考え、各経路の重みを $e^{iS[q(t)]}$ で足し合わせる (図 1)、ということになります。ただし、 $e^{iS[q(t)]}$ というのはこの段階では重みというよりは位相と呼ぶ方が正確です。

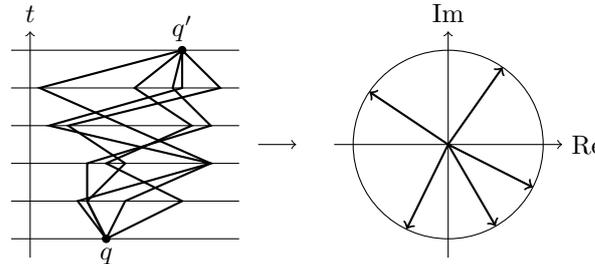


図 1: 経路積分の模式図

2.2 虚時間

後知恵的ですが、位相による経路積分は計算機との組み合わせが悪いので、虚時間形式というテクニックでこれを普通の重みにすることを考えます。これは、普通の状況では実数が入る t に対して (純) 虚数 $t = -i\tau$ を入れるという操作で、その結果式 (2) は

$$U(q', \tau'; q, \tau) = \int [Dq(\tau)] e^{-S[q(\tau)]} \quad (3)$$

と、位相の部分を実数の重みに書き換えることができます。(この操作はこの後行うモンテカルロ法の準備になっています。)

虚時間の状態を考えても実際の状態は実時間に沿っているから意味がないように思われますが、実は実時間での $t \rightarrow -\infty, t' \rightarrow \infty$ の極限と、虚時間での $\tau \rightarrow -\infty, \tau' \rightarrow \infty$ の極限は同じ結果が得られます。このことを使って、物理量 O の期待値 $\langle O \rangle$ は経路積分の時間範囲を十分長く取って

$$\langle O \rangle = \frac{\int [Dq(\tau)] e^{-S[q(\tau)]} O[q(\tau)]}{\int [Dq(\tau)] e^{-S[q(\tau)]}} \quad (4)$$

と表せます。

2.3 量子場

古典粒子が各時刻でいくつかの値を持っていたのに対し、古典場では各時刻の各点で値を持ちます。つまり、古典粒子の (q, t) に対応するものは $(\phi(x), t)$ のようになって、 x で添字付けられた無限次元の質点と見做せます。これに対して式 (4) の形まで持っていくと

$$\langle O \rangle = \frac{\int [D\phi(x, \tau)] e^{-S[\phi(x, \tau)]} O[\phi(x, \tau)]}{\int [D\phi(x, \tau)] e^{-S[\phi(x, \tau)]}} \quad (5)$$

となります。1 粒子の場合は全ての経路を舐めたのに対して、量子場の場合には場がとり得る全ての状態を舐めることとなります。(図 2)

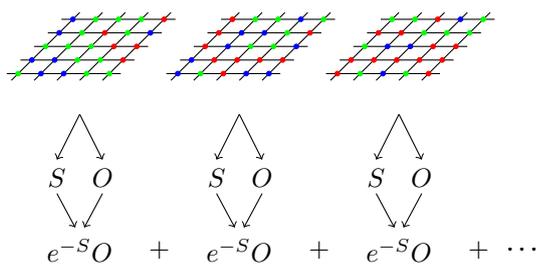


図 2: 経路積分での期待値計算の模式図 (量子場の場合)

QCD では場としてクォーク場 (ディラック場) ψ とグルーオン場 (ゲージ場) U を考えるので、積分の部分が若干書き変わって

$$\langle O \rangle = \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S} O}{\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S}} \quad (6)$$

となります。

3 モンテカルロ法

3.1 次元の呪い

ともあれ、格子量子場における物理量 O の期待値 $\langle O \rangle$ は、経路積分表示・虚時間形式の下で式 (6) と書くことができました。しかし、この積分を誠実に計算することは (U 、 ψ を相当荒くサンプリングしても) **明らかに不可能**です。というのも、 $\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\psi$ という積分は実際には時空の各軸の分割数を N とすれば $O(N^4)$ 次元の積分になりますから、誠実に計算するとなると $2^{O(N^4)}$ 点のサンプルが必要になります。現在のスーパーコンピュータでもざっくりと秒間 2^{60} 回計算ができる (≈ 1 EFLOPS) というのが最高性能ですので、誠実な積分は $N = 2, 3$ が限界です。

これが**次元の呪い**と呼ばれる現象で、計算量が**系の大きさ**に対して指数関数的に跳ね上がってしまう*1という、大規模計算でよく立ち現れる問題です。

3.2 モンテカルロ法

次元の呪いに対処する方法の 1 つが**モンテカルロ法**です。モンテカルロ法の基本的なアイデアは、**全体から乱択された十分な大きさの標本は、全体の性質を維持している**とい

うことにあります。今回の例でいえば、積分を誠実に計算せずとも、十分な点でサンプリングすれば良いということになります。

式 (6) の積分をざっくり和とみなして*2変形すると次のようになります。

$$\langle O \rangle = \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S} O}{\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S}} \quad (7)$$

$$= \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \frac{e^{-S} O}{\int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S}} \quad (8)$$

$$= \sum_{U, \bar{\psi}, \psi} \frac{e^{-S}}{\sum_{U, \bar{\psi}, \psi} e^{-S}} O[U, \bar{\psi}, \psi] \quad (9)$$

$$=: \sum_{U, \bar{\psi}, \psi} p[U, \bar{\psi}, \psi] O[U, \bar{\psi}, \psi] \quad (10)$$

これは、 $(U, \bar{\psi}, \psi)$ が確率分布 $p[U, \bar{\psi}, \psi]$ に従う確率変数であると捉えたと、その時の O の期待値の計算式になっています。すると統計学から、 **$p[U, \bar{\psi}, \psi]$ に従って $(U, \bar{\psi}, \psi)$ の標本を生成すれば、標本から計算した O の平均の期待値も $\langle O \rangle$ に一致します。**つまり、精度こそ落ちますが、 $(U, \bar{\psi}, \psi)$ の標本さえ適切に生成できれば、計算量は標本数 N に対して $O(N)$ で振る舞うので、まともな時間で積分の評価ができるのです。

3.3 マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法

とはいえ、ただのモンテカルロ法では e^{-S} の積分を p の中に閉じ込めただけなので、結局積分しなくてはなりません。この積分を排除するために、**マルコフ連鎖**という概念を導入します。マルコフ連鎖のイメージは、状態が複数あって、それらを次々にジャンプしていく (遷移する) というものです。ただし、このジャンプの行き先は常に決まっているのではなく、各位置で候補が何個もあり、確率的に選ばれます。(図 3)

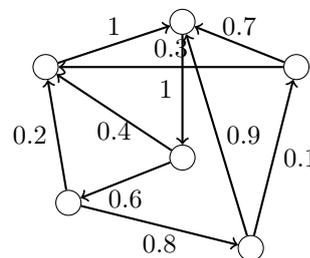


図 3: マルコフ連鎖の模式図

このステップを十分繰り返すと、各状態にいる確率は一

*1 次元の呪いは動力学・行列力学でも残る。具体的には状態の次元が $2^{O(N^3)}$ 、演算子の次元が $2^{O(N^3)} \times 2^{O(N^3)}$ になる。

*2 実際には連続確率分布として取り扱うことになる。

*3 ただし、既約、非周期的、再帰的など、いくつかの条件を満たす必要がある。

定の値に落ち着きます*3。もし、状態として $(U, \bar{\psi}, \psi)$ をとり、さらに各状態にいる確率が $p[U, \bar{\psi}, \psi]$ に落ち着くようにジャンプの行き先に確率を割り振ることができれば、このジャンプに従って次々に状態を選び、それをモンテカルロ法の標本とすれば良いわけです。果たして、そのような確率の割り振り方は(多数)存在します。

よく使われる方法としてメトロポリス・ヘイスティングス (M-H) 法があります。今回の場合、新しい状態の候補 $(U', \bar{\psi}', \psi')$ を(対称な確率分布で*4)生成して作用 S' を計算し、確率 $\min(1, e^{\beta(S-S')})$ で遷移する、という手順になります。

3.4 ハミルトニアン・モンテカルロ (HMC) 法

さらに、新しい状態候補を適切に(具体的には、遠方から)選ばないと、元々の状態と似たり寄ったりの状態ばかりを遷移することになり、本来の確率分布を再現するには大きな標本が必要になってしまいます。かといって遠方から選ぶと S が大きい(遷移確率が小さい)状態ばかりが候補に上げられてしまい、これも本来の確率分布を舐め切れません。

ハミルトニアン・モンテカルロ (HMC) 法では、状態を仮想的な粒子の位置とみなし、その生成確率を位置エネルギーと対応づけた上で、粒子のランダムウォーク(酔歩)を考慮することで、遷移確率が近しく、しかも遠方の状態を効率的に選び出すことができます。今回の場合、仮想ハミルトニアン H として

$$H = \frac{1}{2}p^2 + S(q) \quad (11)$$

を定めておいて、適当なガウス分布で p を生成し、適当な時間ステップ Δt で運動させる、という操作を繰り返すことになります。

4 負符号問題

以上で基本的な計算手法は一通り見ましたが、まだ問題が残っています。経路積分 $\int DU D\bar{\psi} D\psi$ のうち、 U はただの実数ですから素直に計算機に持ち込めますが、 $\psi \cdot \bar{\psi}$ は実数ではなくグラスマン数という、反可換性 $\psi_a \psi_b = -\psi_b \psi_a$ を特徴とする奇妙な量による積分となっています。幸いにもこの積分は手計算で処理できるのですが、その結果は**正負どちらも取り得る**ことがわかります。このことは、モンテカルロ法との組み合わせを考えると、 e^{-S} が正であるのに対してそこに余計な負符号の係数が付くことになって、被

積分関数を確率として扱えなくなることを意味します。これではモンテカルロ法は上手く行きません*5。

この問題を**負符号問題**といい、フェルミオン系に広く見られる問題です。とりあえずの解決策として Willson フェルミオンや Staggered フェルミオンなどが使われていますが、元の作用 S に余計な項を加えたり、粒子に元々はなかったサブカテゴリを付け加えたりと、真に調べたい物理系の性質を歪めてしまいます。

負符号問題は計算物理学の一大問題であり、その解決に多大な努力が向けられています。**経路積分繰り込み法**やその**テンソルネットワーク**による表現など、解決の糸口となる研究も現れてきています。

参考文献

- [1] Heinz J Rothe. **Lattice gauge theories: an introduction**. World Scientific Publishing Company, 2012.
- [2] 青木 慎也. **格子 QCD によるハドロン物理: クォークからの理解**. 共立出版, 2017.

*4 対称な確率分布で生成するとは、状態 x から新しい状態候補として y が生成される確率と、その逆の確率が等しいということ。

*5 正負を分けて集計すれば適用できなくもないが、位相の足し合わせの場合同様、正負の標本が打ち消しあって、収束性が非常に悪くなる。