

ゼロ温度QCD

富井 正明

(理研BNL研究センター・コネチカット大学)

格子上の場の理論 夏の学校2024

Sept 9–Sept 13, 2024



RIKEN BNL Research Center

UCONN
UNIVERSITY OF CONNECTICUT

講義内容

1. はじめに

基礎編

2. 相関関数の基礎 — 定義とその役割

3. 相関関数の計算方法

4. 統計解析の基礎

発展編

5. 実用的な相関関数の計算・解析テクニック

1. はじめに

ゼロ温度QCDとは

- 文字通りゼロ温度の QCD
- 特徴
 - ▶ 漸近的自由性、非摂動、対称性の自発的破れ、NG ボソン、カラー閉じ込め
- ダイナミクスの詳細を調べるのに格子QCDが有用
 - ▶ ハドロン質量たった 3,4 個程度の情報をインプットするだけで数多くの実験事実をアウトプットする
 - ▶ 計算方法が（大部分）確立されている
 - ▶ 場合によっては 0.1% くらいの精度が求められる
- 格子分野の中で最も大規模な計算を多く含む
 - ▶ 世界最大級のスーパーコンピュータを使った研究



ありがちなマイナスイメージ

- 何となく古くて地味
 - ▶ 計算理論としては確立していて、やればできるって感じがする
- 背景の物理・モチベーションを理解するのが難しい
- 系統誤差が色々あってモンテカルロ法の美しさから若干かけ離れている
- 後に計算精度が上がると自分の苦労が長く残らないのでは
- 理論物理を志した者としてバリバリの数値計算はちょっと...

人によって興味や思うことはまちまちで、ある意味正しいイメージだし悪いとは思いません。ただ...

知ってて欲しいこと

- 格子QCDの本格計算は素粒子・原子核物理の進展に超重要 (北原さんの講義)
- 実験・現象論の人と直に交流できるテーマ多数
 - ▶ g-2、フレーバー物理、ハドロン相互作用・構造、...
 - ▶ 彼らは格子計算の結果を待っている
 - ▶ 素粒子・原子核の物理をやっている感が出る
 - ▶ 関連するワークショップ・国際会議で実験・現象論の人たちと交流できる
- 富井が考える本格計算する人とは
 - ▶ 素粒子・原子核界限全体では職人
 - ▶ 格子場理論の界限に限れば界限の大きな目的達成のゴールを決めるストライカー

知ってて欲しいこと2

- もちろんネチネチした計算だけが使命ではない
- 本格計算のために直接必要な理論開拓もある
 - ▶ ゼロ温度以外の分野で例えば HMC の高速化も重要 (金森さんの講義の先)
 - ▶ 最近のゼロ温度の計算に直結する理論で例えば有限体積の場の理論の理解は近年非常に重要
 - マルチハドロン系-Lüscher に始まるが計算対象によっては拡張が必要
 - 主要な系統誤差は理論の進展によって解決可能なことも
 - ▶ ストライカーに最後のパスを入れる役割
- 富岳を使った研究をしていたら就職にも有利

Lattice 2024 統計

いわゆるゼロ温度

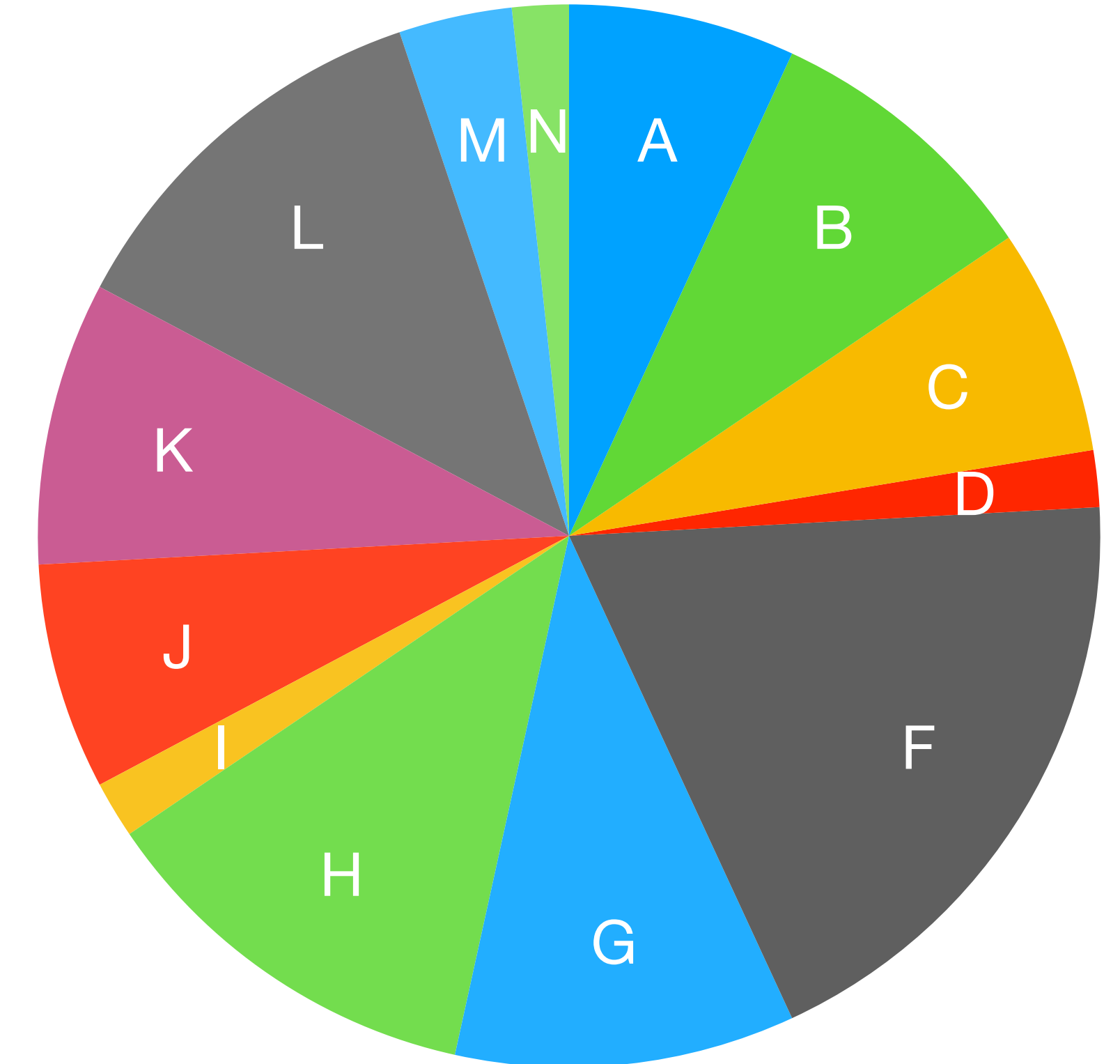
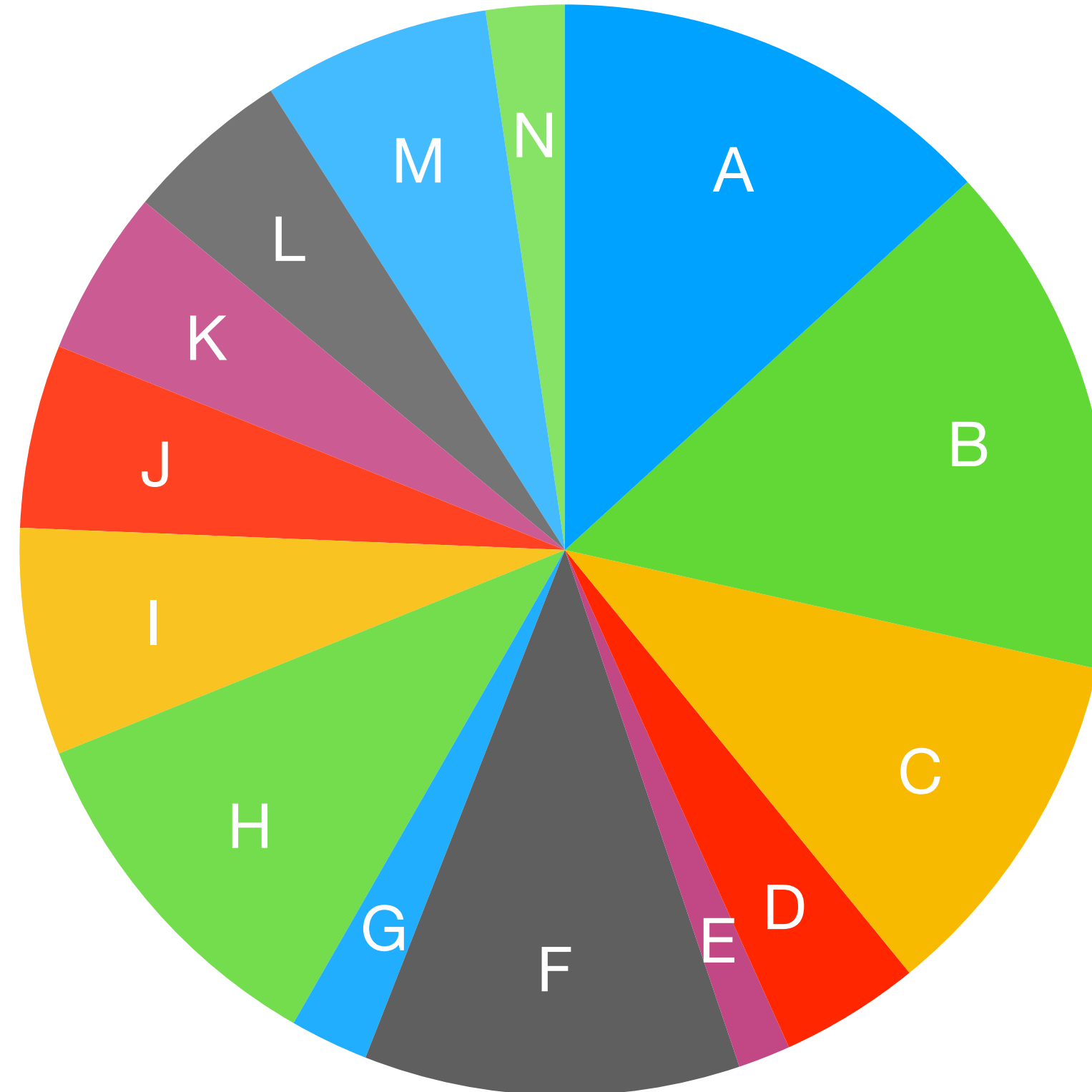
- A Quark and Lepton Flavor Physics
- B Hadrons and Nuclear Spectrum and Interactions
- C Structure of Hadrons and Nuclei
- D Standard Model Parameters
- E Tests of Fundamental Symmetry
- F Algorithms and Artificial Intelligence
- G Software Development and Machines
- H Theoretical Developments
- I QCD at Non-zero Temperature
- J Vacuum Structure and Confinement
- K Quantum Computing and Quantum Information
- L Particle Physics BSM
- M QCD at Non-zero Density
- N Applications outside Particle Physics

パラレルセッション

- 全 386 トーク
- ゼロ温度：45%

ポスターセッション

- 全 58 ポスター
- ゼロ温度：24%



全体の約 42% がゼロ温度の発表

Kenneth G. Wilson Awards

毎年 LATTICE 会議で受賞者の表彰・記念講演がある

2011	Xu Feng, Marcus Petschlies, Karl Jansen, and Dru B.	lepton magnetic moment	ゼロ温度
2012	RBC/UKQCD	$K \rightarrow \pi\pi$, $\Delta I = 3/2$	ゼロ温度
2013	André Walker-Loud	Baryons	ゼロ温度
2014	Gergely Endrödi	Matter in strong magnetic field and QCD thermo	
2015	Stefan Meinel	bottom quark	ゼロ温度
2016	Antonin Portelli	electromagnetic effects on hadron properties	ゼロ温度
2017	Raul Briceño	resonance study	ゼロ温度
2018	Zohreh Davoudi	lattice field theory in a finite volume	ゼロ温度 (目標の理論)
2019	Luchang Jin	HLbL contribution to $g-2$	ゼロ温度
2020	Phiala Shanahan	hadrons and nuclei & AI	ゼロ温度 + ML
2021	Maxwell Hansen	finite volume quantum field theories	ゼロ温度 (目標の理論)
2022	Yong Zhao	parton physics	ゼロ温度
2023	Antoine Gérardin	HVP contribution to $g-2$	ゼロ温度
2024	Michael Wagman	Nuclear Physics	ゼロ温度

若手対象

** 現在の格子場の理論で高い価値のある研究と評価されるのはゼロ温度が中心

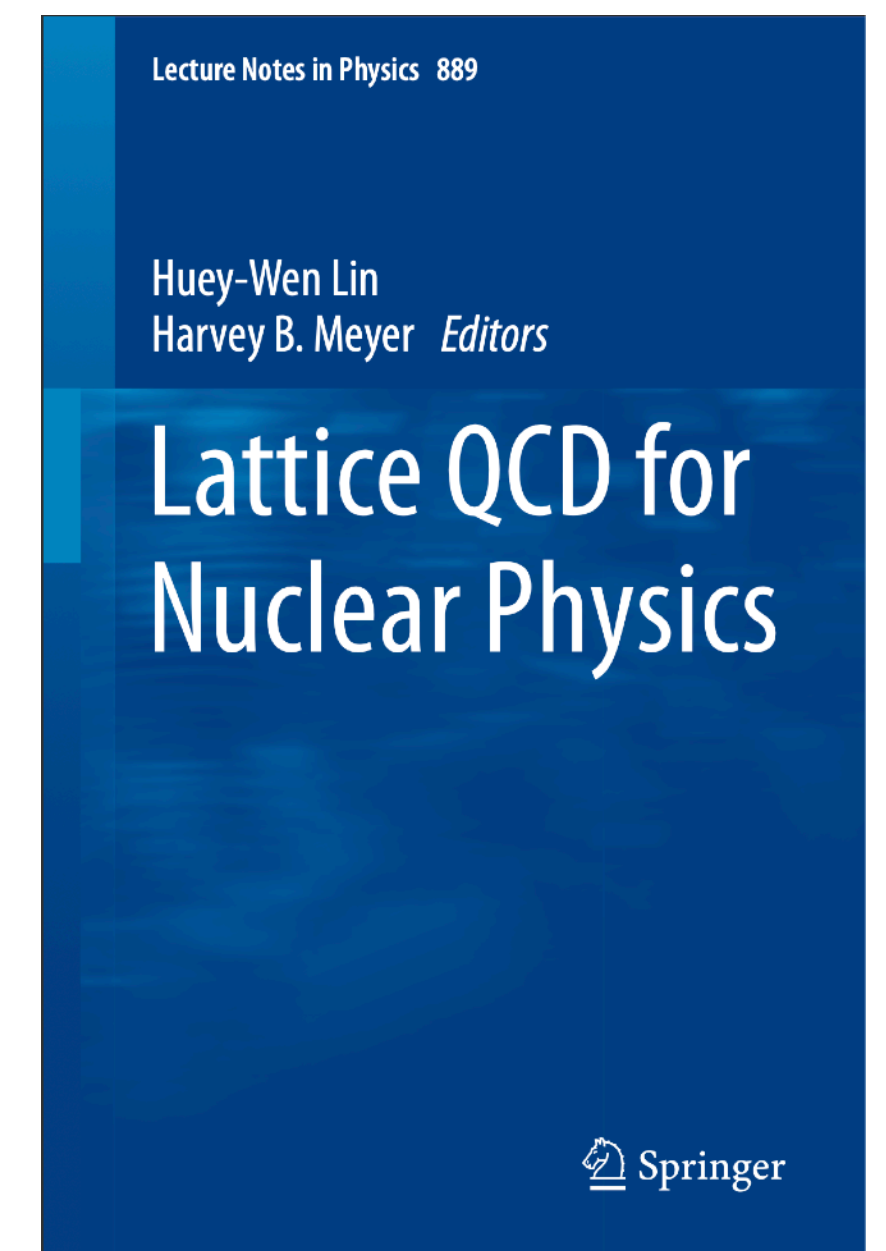
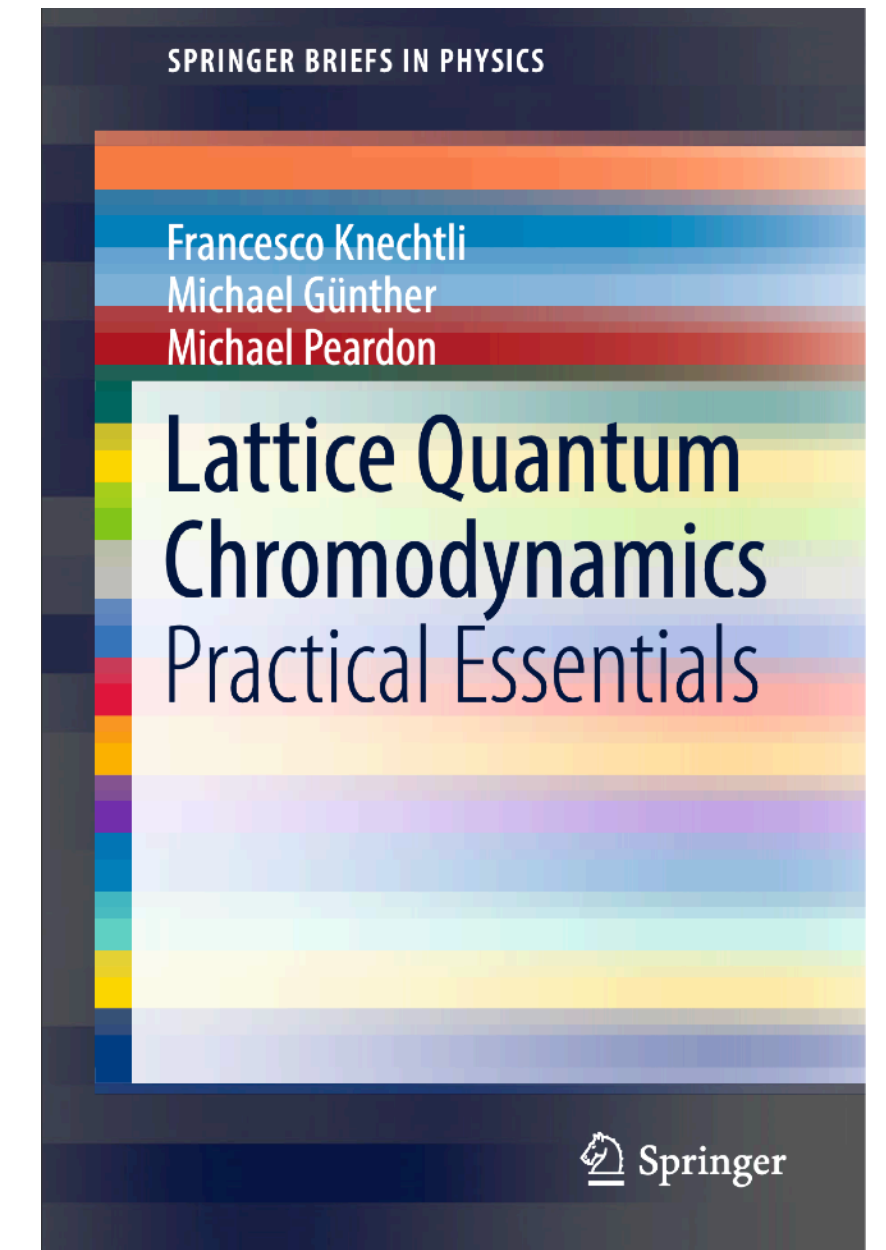
国内の本格計算グループ

グループ名	研究機関	ゼロ温度の研究内容	格子作用
HAL QCD	理研 和光 阪大 RCNP 京大 基研 など	ハドロン間相互作用、ポテンシャル 重クォーク エキゾチックハドロン	2+1-flavor Wilson-clover fermions 物理点シミュレーション有り
JLQCD	KEK 総研大 阪大 豊中 理研 R-CCS など	フレーバー物理 特に D, B 中間子の崩壊 Belle II 実験と関連 (標準模型のテスト)	2+1-flavor Möbius domain wall fermions Fine lattice: $a^{-1} \approx 4.5 \text{ GeV}$
PACS	筑波大 東北大 理研 R-CCS 広大など	核子構造 形状因子 K中間子セミレプトニック崩壊 $\rightarrow IV_{\text{usl}}$ (標準模型のテスト)	2+1-flavor Wilson-clover fermions 物理点シミュレーション有り (10fm) ⁴ を超える体積 (PACS10)

** 3つのグループは富岳を使った計算をしている

おすすめ教科書

- 比較的古いけど基本的なことが中心
 - ▶ Gattringer & Lang “Quantum Chromodynamics on the Lattice”
 - ▶ 青木さん「格子上の場の理論」
 - ▶ 本格計算しない人はこのくらいで良いかも
- 比較的新しくて最近のゼロ温度計算に実用的なことが豊富
 - ▶ “Lattice Quantum Chromodynamics–Practical Essentials”
 - (Knechtli, Günther, Peardon) Springer (2017)
 - 最近使われている新しい計算手法の説明が富井が知る限り最も多くカバーされている
 - ▶ “Lattice QCD for Nuclear Physics”
 - (H.W. Lin, H.B. Meyer) Springer (2015)
 - スクールの講義録
 - ハドロン・原子核関連の話はさらに詳しい



この講義について

- ゼロ温度 QCD の実践に役立つ基礎知識を例を交えて断片的にお話しします
 - ▶ ゼロ温度 QCD は LATTICE 会議での発表の 40% 以上を占める
 - ▶ 40% のうち共通している基礎知識は多いとはいえ、長い歴史による積み重なりがあり、それを90分でカバーし切るのは難しいです。可能な限り話します
 - ▶ モンテカルロ法の考え方とゲージ配位生成の仕方は別講義があったと思うので、配位を使った測定（相関関数などの計算）とデータ解析についてを中心に話します
- 富井の専門に偏りがちになっている点、表記に一貫性がない点、ご容赦ください
- カバーされていないことも多くあります。
 - ▶ 繰り込み、電磁補正、ハドロン散乱と共鳴状態、スペクトル関数の逆問題など
 - ▶ 教科書、arXiv、セミナー、研究会、研究室での議論などを通して勉強しましょう

2. 相関関数の基礎

定義とその役割

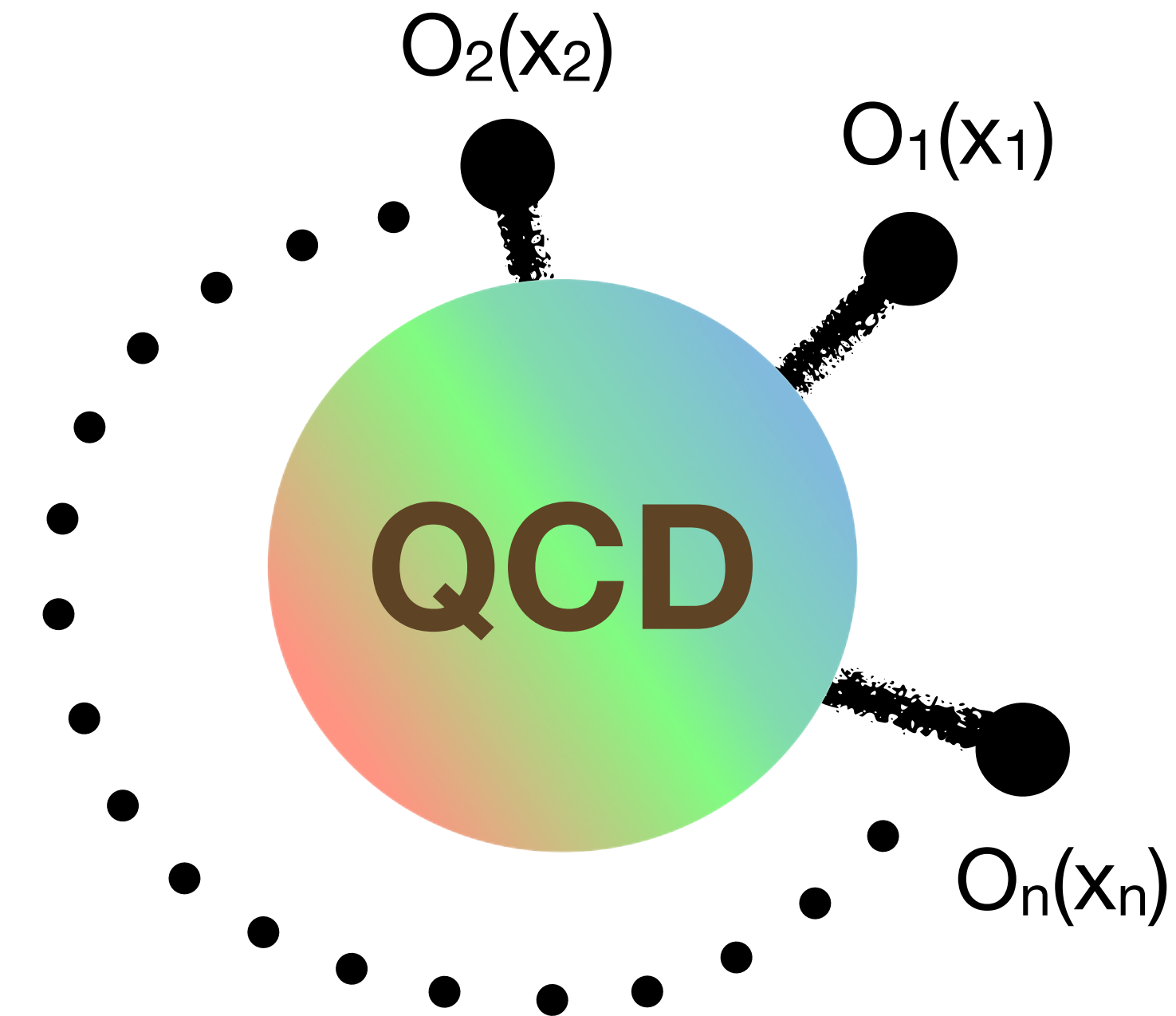
相関関数

- n 点グリーン関数

$$G_{1,2,\dots,n}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \langle O_1(x_1) O_2(x_2) \dots O_n(x_n) \rangle$$

- O_i : クォーク・グルーオン場でできた複合演算子

- ▶ 例1: (局所) 軸性カレント $\bar{u}(x) \gamma_\mu \gamma_5 d(x)$
- ▶ 実践的にめっちゃ多種多様—このバリエーションで色々な物理が見れる
- ▶ 多くの場合ゲージ不変
- ▶ 例2: π 中間子生成演算子 $\sum_{x_1, x_2} \bar{q}(x_1) F(x_1, x) i \gamma_5 \tau^a F(x_2, x)^\dagger q(x_2)$
 - F はスミアリング関数と呼ばれ、 x を中心とする分布関数でグルーオン場を含む (ゲージ不変性壊すことも)
- ▶ ゲージ不変じゃない場合はゲージ固定してグリーン関数を計算



どんな相関関数が面白い？

- 一般の相関関数は色々な情報が入れ混じっている
- 多点関数は複雑なので通常は多くても4点
- 興味のある情報だけを抜き出すために演算子にある種の射影をおこなう

▶ 量子数

クォーク双線形演算子の場合

$$\bar{q}\Gamma T^a q \begin{cases} \Gamma : \text{スピンに関する行列。} J^{PC} \text{ の量子数を決める} \\ T^a : \text{フレーバーに関する行列。アイソスピンなど} \\ \text{フレーバーの量子数を決める} \end{cases}$$

From Gattringer-Lang

State	J^{PC}	Γ	Particles
Scalar	0^{++}	$\mathbb{1}, \gamma_4$	f_0, a_0, K_0^*, \dots
Pseudoscalar	0^{-+}	$\gamma_5, \gamma_4\gamma_5$	$\pi^\pm, \pi^0, \eta, K^\pm, K^0, \dots$
Vector	1^{--}	$\gamma_i, \gamma_4\gamma_i$	$\rho^\pm, \rho^0, \omega, K^*, \phi, \dots$
Axial vector	1^{+-}	$\gamma_i\gamma_5$	a_1, f_1, \dots
Tensor	1^{++}	$\gamma_i\gamma_j$	h_1, b_1, \dots

フレーバー量子数も指定すればさらに
対応するハドロンを分類できる

▶ 空間運動量

$$O(\vec{x}, t) \rightarrow \tilde{O}(\vec{p}, t) = \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} O(\vec{x}, t)$$

** 4次元運動量に射影することも

2点関数

量子数射影を行なったある演算子の 2 点関数 (石川さんの講義)

$$G_\phi(t_1, t_0) = \langle O_\phi(t_1) O_\phi(t_0)^\dagger \rangle \left(= \sum_{\vec{x}_1, \vec{x}_0} e^{-i\vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_0)} \langle O_{\phi \setminus \vec{p}}(\vec{x}_1, t_1) O_{\phi \setminus \vec{p}}(\vec{x}_0, t_0)^\dagger \rangle \right)$$

ϕ : 運動量・量子数の組
 $\phi \setminus \vec{p}$: ϕ から運動量の情報を取り除いた量子数

$$= \langle 0 | O_\phi(t_1) O_\phi(t_0)^\dagger | 0 \rangle + \text{時間方向の有限体積効果 (thermal effects, 今は無視)}$$

$$= \sum_n \langle 0 | O_\phi | \phi, n \rangle \langle \phi, n | O_\phi^\dagger | 0 \rangle e^{-\frac{E_{\phi, n}(t_1 - t_0)}{\hbar}}$$

状態 $|\phi, n\rangle$ が演算子 O_ϕ によって消滅する振幅

状態 $|\phi, n\rangle$ のエネルギー

$|\phi, n\rangle$: ϕ で示される量子数・運動量をもつ n 番目のエネルギー固有状態

** 2 つの演算子を十分に離せば 2 点関数は基底状態の寄与に支配される

- ▶ 2 点関数から基底状態のエネルギー (空間運動量 0 なら質量) が得られる

基底状態のエネルギー

- どのくらい離せば基底状態でサチるのか？

- 有効質量

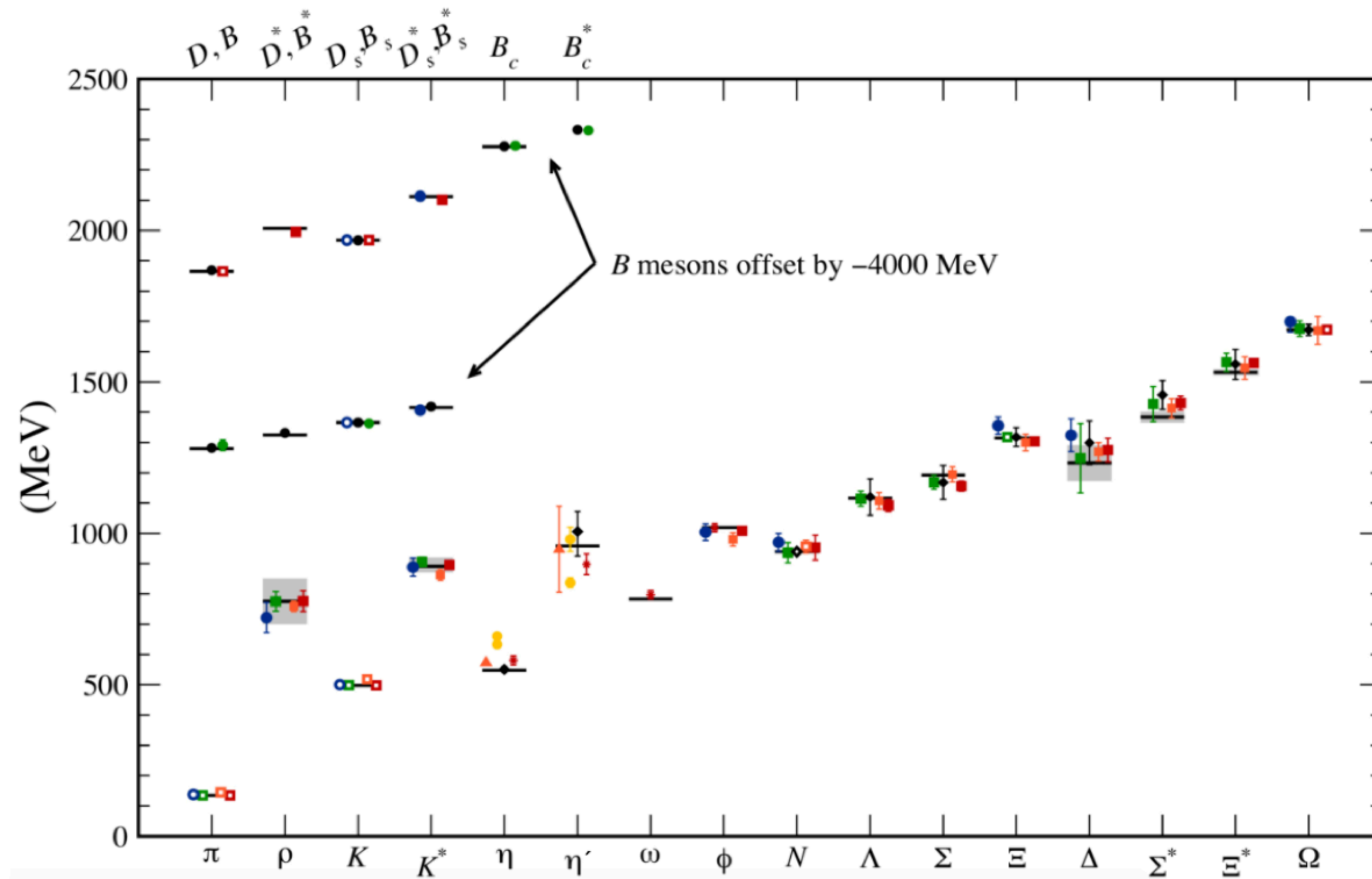
$$E_0^{\text{eff}}(t_1, t_0) = \ln \frac{G_\phi(t_1, t_0)}{G_\phi(t_1 + a, t_0)} \xrightarrow{\text{large } t_1 - t_0} E_0$$

- 有効質量が $t_1 - t_0$ によらなくなった領域で $Ae^{-E_0(t_1 - t_0)}$ で2点関数をフィットすれば基底状態のエネルギーと振幅が求まる。

- ナイーブには、 n 番目の状態の寄与は $t \gg 1/E_n$ で死んでいる

- ▶ 静止系の π 中間子の場合、励起状態のエネルギーは 1 GeV くらいなので、0.2 fm よりももっと離さない基底状態でサチらない

格子QCDによるハドロン質量



MILC (RMP 2010)
 PAC-CS (PRD2019)
 BMW (Science 2008)
 QCDSF (PRD 2011)
 ETM (PRD2014)
 UKQCD (PRD2012)

η, η' : RBC & UKQCD (PRL 2010)

HADSPEC (PRD 2011)

Heavy-light:

FERMILAB-MILC (PRD 2011)

HPQCD (PRD 2011, 12)

Mohler et al (PRD 2011)

Open symbols: fixing parameters

Circles: staggered

Squares: Wilson

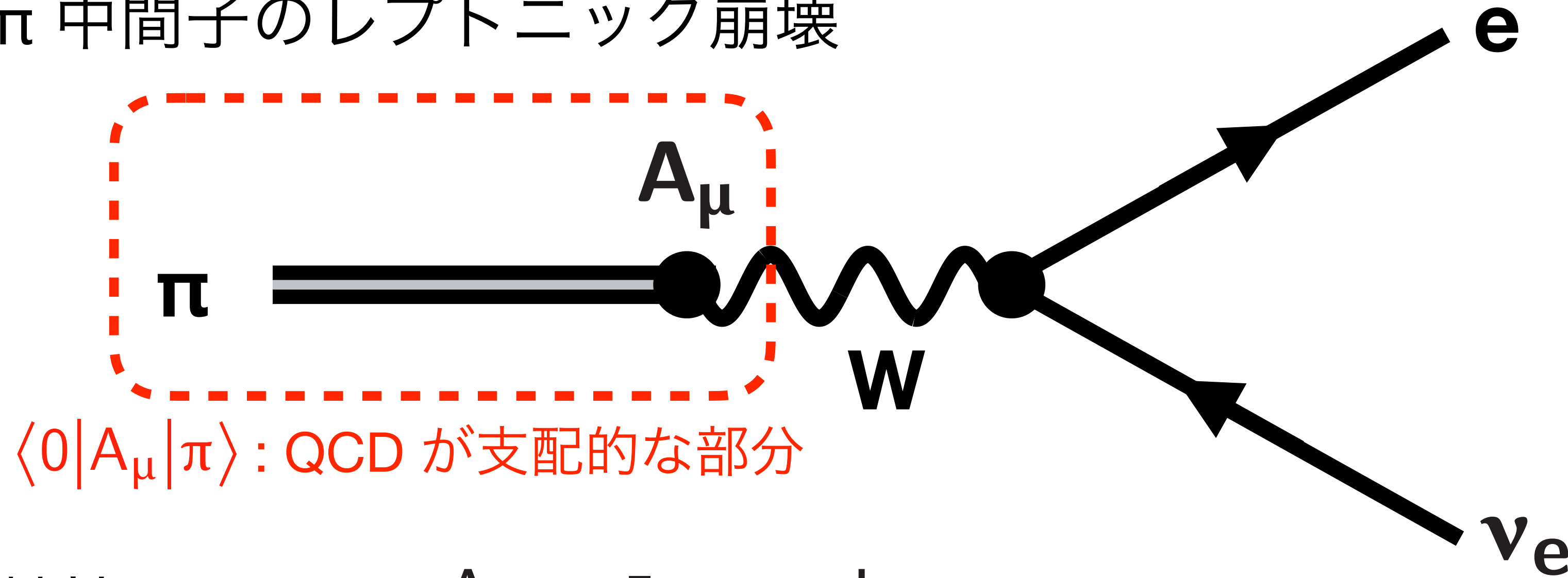
Diamonds: Chiral

A. Kronfeld: Ann.Rev.Nucl.Part.Sci. 62 (2012) 265-284

少ないインプットからこれだけ多様なハドロンの質量が再現できる！

π 中間子の弱崩壊

- π 中間子のレプトニック崩壊



- 軸性カレント $A_\mu = \bar{u} \gamma_\mu \gamma_5 d$

奇パリティの A_μ だけが奇パリティの π と結合

- 弱相互作用 $\frac{G_F}{\sqrt{2}} \cos \theta_c \bar{u} \gamma_\mu (1 - \gamma_5) d \cdot \bar{e} \gamma_\mu (1 - \gamma_5) \nu_e$

- PCAC 関係式 $\partial_\mu \langle 0 | A_\mu | \pi, \vec{p} = \vec{0} \rangle = M_\pi^2 f_\pi$

▶ f_π : 崩壊定数

** 格子場の軸性カレントは一般に繰り込みが必要だけどここでは無視

崩壊定数の計算

- 2点関数

$$G_{PP}(t) = \langle P_{\vec{p}=0}(t) P_{\vec{p}=0}(0)^\dagger \rangle \xrightarrow{\text{large } t} \langle 0 | P | \pi, \vec{p} = \vec{0} \rangle \langle \pi, \vec{p} = \vec{0} | P^\dagger | 0 \rangle e^{-M_\pi t} \quad P: \text{同じ量子数を持った別の演算子}$$

$$G_{AP}(t) = \sum_{\vec{x}} \langle A_4(\vec{x}, t) P_{\vec{p}=0}(0)^\dagger \rangle \xrightarrow{\text{large } t} \langle 0 | A_4 | \pi, \vec{p} = \vec{0} \rangle \langle \pi, \vec{p} = \vec{0} | P^\dagger | 0 \rangle e^{-M_\pi t}$$

- ▶ A_μ が空間方向に周期的境界条件を満たす時

$$\sum_{\vec{x}} \partial_\mu A_\mu = \partial_4 \sum_{\vec{x}} A_4$$

$$\Rightarrow \partial_4 G_{AP}(t) \xrightarrow{\text{large } t} \partial_\mu \langle 0 | A_\mu | \pi, \vec{p} = \vec{0} \rangle \langle \pi, \vec{p} = \vec{0} | P^\dagger | 0 \rangle e^{-M_\pi t} = M_\pi^2 f_\pi \langle \pi, \vec{p} = \vec{0} | P^\dagger | 0 \rangle e^{-M_\pi t}$$

- ▶ $\partial_4 G_{AP}$ と G_{PP} を組み合わせれば f_π が求まる！

- 求め方の詳細は色々あります。元気な人は色々試してください

3点関数

$$\begin{aligned}
 G(t_2, t_1, t_0) &= \left\langle O_{\phi_2}(t_2) O(t_1) O_{\phi_0}(t_0)^\dagger \right\rangle \\
 &= \sum_{m,n} \left\langle 0 \left| O_{\phi_2} \right| \phi_{2,m} \right\rangle \underline{\left\langle \phi_{2,m} \left| O \right| \phi_{0,n} \right\rangle} \left\langle \phi_{0,n} \left| O_{\phi_0}^\dagger \right| 0 \right\rangle e^{-E_{\phi_{2,m}}(t_2-t_1) - E_{\phi_{0,n}}(t_1-t_0)}
 \end{aligned}$$

ハドロン状態からハドロン
状態への遷移行列要素

- 2点関数と合わせればハドロン行列要素が計算できる
 - ▶ 弱相互作用に関係するもの：セミレプトニック・ノンレプトニック崩壊など
 - ▶ 電磁相互作用に関係するもの：形状因子, EDM など
- 多くの場合、真ん中の演算子 O は繰り込みが必要

3. 相関関数の計算方法

相関関数の計算方法

- アンサンブル平均 → 統計平均 (渡辺さん、山崎さん、金森さんの講義)

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{D}q \mathcal{D}U \mathcal{O}(\bar{q}, q, U) e^{-S(\bar{q}, q, U)} \quad \mathcal{O} = O_1(x_1) O_2(x_2) \dots O_n(x_n)$$

Wick contraction
与えられたゲージ場のもとでの相関関数

$$= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U \underbrace{\hat{\mathcal{O}}(D(U)^{-1}, U)}_{\text{Wick contraction}} \underbrace{\det D(U) e^{-S_G(U)}}_{\text{Boltzmann weight}} \xrightarrow{\text{統計平均}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{\mathcal{O}}(D(U_i)^{-1}, U_i)$$

↑ Integrating out fermion fields

- 計算の流れ

- ▶ 配位生成 : U_1, U_2, \dots, U_N Boltzmann weight にしたがう
- ▶ 生成されたゲージ配位 U_i ごとに測定量を計算 $\hat{\mathcal{O}}(D(U_i)^{-1}, U_i)$ (比較的 low cost)
- ▶ 統計解析

通常配位生成がメインのコストだが、一度生成すれば保存して他の計算に何度も使い回せる

“測定”

- Wick contraction

$$\hat{\mathcal{O}}(D(U_i)^{-1}, U_i)$$

- ▶ 与えられたゲージ場 (のサンプル) U_i のもとでの相関関数
- ▶ 一般にはクォーク場を含まない場合 (ポリャコフループの相関関数など) もあるが、本格計算にはクォーク場がたくさん入る

- やり方 (導出は Gattringer の §5.1 など)

$$\hat{\mathcal{O}}(D(U_i)^{-1}, U_i) = \mathcal{O} \left(\frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}}, U_i \right) \exp \left[-\bar{\theta} D(U_i)^{-1} \theta \right] \Big|_{\theta, \bar{\theta} = 0}$$

- ▶ $\theta, \bar{\theta}$: Grassmann 数ベクトル (スピン・カラー・フレーバー・座標の足をもつ)

測定の実例

- π^+ 生成・消滅演算子の2点関数

- ▶ $O_1(x_1) = \bar{u}(x_1)i\gamma_5 d(x_1), O_2(x_2) = O_1(x_2)^\dagger = \bar{d}(x_2)i\gamma_5 u(x_2)$

- ▶ $\mathcal{O} = \bar{u}(x_1)i\gamma_5 d(x_1)\bar{d}(x_2)i\gamma_5 u(x_2)$ 簡単のために演算子のスミアリングしてないけど、する場合は U_i に依存

- ▶ Contraction の計算方法の見本 (グラスマン数の扱い方のルールは教科書)

$$\bar{u}(x_1) \rightarrow \frac{\partial}{\partial \theta_{(u,x_1)}} \quad d(x_1) \rightarrow \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(d,x_1)}} \quad \bar{d}(x_2) \rightarrow \frac{\partial}{\partial \theta_{(d,x_2)}} \quad u(x_2) \rightarrow \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(u,x_2)}}$$

$$\hat{\mathcal{O}}(D(U_i)^{-1}, U_i) = \frac{\partial}{\partial \theta_{(u,x_1)}} i\gamma_5 \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(d,x_1)}} \frac{\partial}{\partial \theta_{(d,x_2)}} i\gamma_5 \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(u,x_2)}} \exp \left[-\bar{\theta} D(U_i)^{-1} \theta \right] \Big|_{\theta, \bar{\theta}=0}$$
前ページの公式に当てはめた

$$= \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \theta_{(u,x_1)}} i\gamma_5 \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(d,x_1)}} \frac{\partial}{\partial \theta_{(d,x_2)}} i\gamma_5 \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(u,x_2)}} \bar{\theta} D^{-1} \theta \cdot \bar{\theta} D^{-1} \theta$$
関係する θ の次数の項だけ exp から取り出した
簡単のため D^{-1} の引数の U_i を省いた

$$= \frac{\partial}{\partial \theta_{(u,x_1)}} i\gamma_5 \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(d,x_1)}} \frac{\partial}{\partial \theta_{(d,x_2)}} i\gamma_5 \bar{\delta}_{(u,x_2)} D^{-1} \theta \cdot \bar{\theta} D^{-1} \theta$$
 $\bar{\delta}_{(u,x_2)} = \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial \bar{\theta}_{(u,x_2)}}$ $\bar{\theta}$ と同様に横ベクトル

測定の実例

$$\hat{O}(D(U_i)^{-1}, U_i) = \frac{\partial}{\partial \theta_{(u,x_1)}} i\gamma_5 \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(d,x_1)}} \frac{\partial}{\partial \theta_{(d,x_2)}} i\gamma_5 \bar{\delta}_{(u,x_2)} D^{-1} \theta \cdot \bar{\theta} D^{-1} \theta \quad \text{前ページ最後の式}$$

$\frac{\partial}{\partial \theta_{(d,x_2)}}$ で最初の θ をたたくと D^{-1} のフレーバー u, d 成分を見ることになり、通常これはゼロ
 → スピン・カラーの縮約を保つためと微分操作をしやすくするために $\bar{\theta} D^{-1} \theta$ を前に持ってこよう

$$= \frac{\partial}{\partial \theta_{(u,x_1)}} i\gamma_5 \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(d,x_1)}} \frac{\partial}{\partial \theta_{(d,x_2)}} \bar{\theta} D^{-1} \theta \cdot i\gamma_5 \bar{\delta}_{(u,x_2)} D^{-1} \theta \quad \text{持ってきた}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \theta_{(u,x_1)}} i\gamma_5 \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_{(d,x_1)}} \bar{\theta} D^{-1} \delta_{(d,x_2)} \cdot i\gamma_5 \bar{\delta}_{(u,x_2)} D^{-1} \theta \quad \text{負の符号は Grassmann 数と微分の入れ替えから}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \theta_{(u,x_1)}} i\gamma_5 \bar{\delta}_{(d,x_1)} D^{-1} \delta_{(d,x_2)} \cdot i\gamma_5 \bar{\delta}_{(u,x_2)} D^{-1} \theta$$

$$= -\text{Tr} \left[i\gamma_5 D_{(d,x_1),(d,x_2)}^{-1} i\gamma_5 D_{(u,x_2),(u,x_1)}^{-1} \right]$$

スピン・カラーの縮約は Tr を取ることで表現した

** スピン・カラーの添え字は省きましたが、初めての方は明示してやった方が良いでしょう

** これが一番簡単な例です。複雑な相関関数を計算する人の多くはこの微分操作をスクリプトなどで自動化しています

測定の例

- 計算結果

アイソスピン極限 $m_u = m_d$ で計算する場合、フレーバーの添え字は省ける

$$\hat{O}(D(U_i)^{-1}, U_i) = -\text{Tr} \left[i\gamma_5 D_{(d,x_1),(d,x_2)}^{-1} i\gamma_5 D_{(u,x_2),(u,x_1)}^{-1} \right] \downarrow = \text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_1,x_2}^{-1} \gamma_5 D_{x_2,x_1}^{-1} \right]$$

- 数値計算するには

- ▶ 与えられたゲージ場 U_i に対してディラック行列の逆 $D(U_i)^{-1}$ が分かればコントラクションが計算できる
- ▶ D はカラー・スピン・座標（・フレーバー）に関する行列で、大きい時は1000億x1000億くらいなので逆行列 $D(U_i)^{-1}$ は現実的には計算できない
- ▶ $D(U_i)^{-1}$ 全体は必要ではない→部分的に計算
- ▶ D_{x_1,x_2}^{-1} は以下の連立方程式の解（石川さんの講義にて解き方の詳細カバー）

$$DX = \delta_{x_2}$$

D^{-1} のカラー・スピンの成分の分（12回）だけ連立方程式を解く必要がある

この後もカラー・スピンは省略する

座標が x_2 に対応する成分が1、他の成分が0のベクトル。point source と呼ばれる

- ▶ D_{x_2,x_1}^{-1} は γ_5 -エルミート性（ $D^\dagger = \gamma_5 D \gamma_5$ ）があれば再び連立方程式を解かなくて良い

運動量射影も考慮した計算手順

$$\left\langle \sum_{\vec{x}_1, \vec{x}_2} e^{-i\vec{p} \cdot (\vec{x}_1 - \vec{x}_2)} \text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_1, x_2}^{-1} \gamma_5 D_{x_2, x_1}^{-1} \right] \right\rangle = L^3 \sum_{\vec{x}_1} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x}_1} \left\langle \text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_1, x_2}^{-1} \gamma_5 D_{x_2, x_1}^{-1} \right] \right\rangle$$

- アンサンブル平均をとったものなら並進対称性から x_1, x_2 のどちらかの空間話で運動量射影は達成される
- x_2 は最低 1 点だけでも計算できればコントラクションはOK
- 連立方程式 $DX = \delta_{x_2}$ を解けば D_{x, x_2}^{-1} が得られ、 γ_5 -エルミート性から $D_{x_2, x}^{-1}$ も求まる
- 結局、必要なコントラクションは

$$\sum_{\vec{x}_1} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x}_1} \text{Tr} \left[D_{x_1, x_2}^{-1} \left(D_{x_1, x_2}^{-1} \right)^\dagger \right]$$

- そんな簡単にいかない場合ももちろんあります

測定の例2 : η の2点関数

ローレンツ

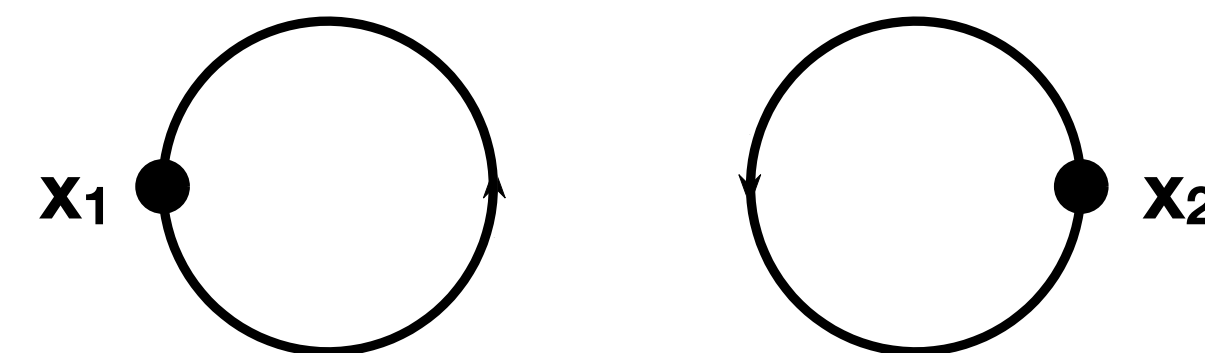
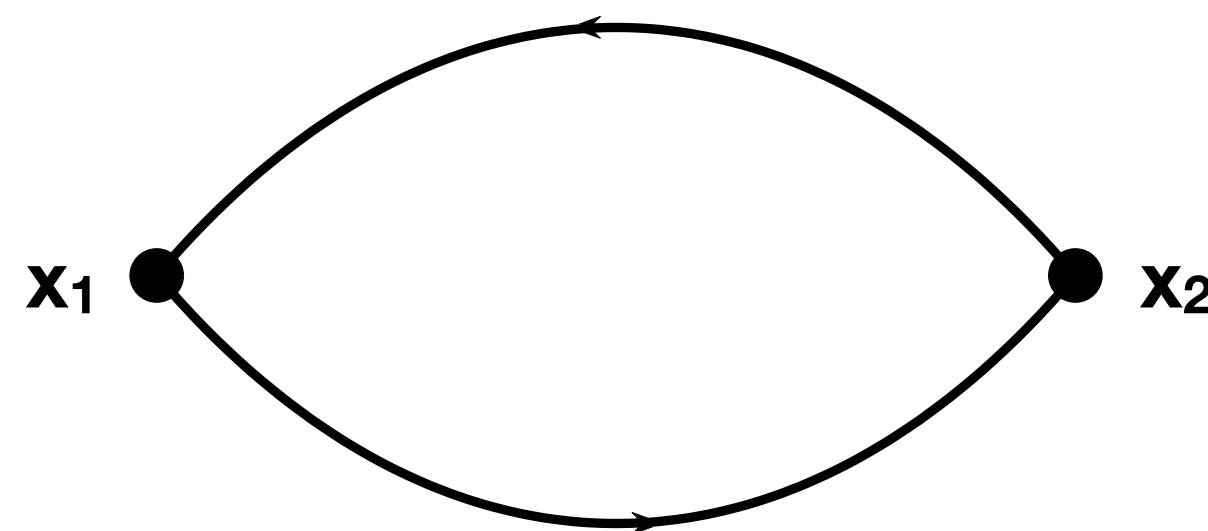
アイソスカラーの擬スカラー演算子

$$O_1(x_1) = \frac{\bar{q}(x_1)i\gamma_5 q(x_1)}{\sqrt{2}} \left(= \frac{\bar{u}(x_1)i\gamma_5 u(x_1) + \bar{d}(x_1)i\gamma_5 d(x_1)}{\sqrt{2}} \right), \quad O_2(x_2) = O_1(x_2)^\dagger = \frac{\bar{q}(x_2)i\gamma_5 q(x_2)}{\sqrt{2}}$$

- ▶ コントラクション

$$\sum_{\vec{x}_1} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}_1} \left\{ \text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_1, x_2}^{-1} \gamma_5 D_{x_2, x_1}^{-1} \right] - \text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_1, x_1}^{-1} \right] \text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_2, x_2}^{-1} \right] \right\}$$

- ▶ これは全格子点 x_1 に対して D_{x_1, x_1}^{-1} が必要



$\text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_1, x_2}^{-1} \gamma_5 D_{x_2, x_1}^{-1} \right]$: 連結ダイアグラム

$\text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_1, x_1}^{-1} \right] \text{Tr} \left[\gamma_5 D_{x_2, x_2}^{-1} \right]$: 非連結ダイアグラム

ノイズ法

- アイデア

- ▶ 逆行列が欲しければ連立方程式 $DX = \delta_{x_2}$ を全ての x_2 に対して解けば良い

$$\sum_{x_2} \delta_{x_2} \delta_{x_2}^\dagger = \mathbb{1} \quad \rightarrow \text{でも行列のサイズが大きすぎるので現実的に無理}$$

- ▶ δ_{x_2} の代わりにより少ないベクトル ξ_i で単位行列を近似できれば勝負できる

$$\sum_i \xi_i \xi_i^\dagger \approx \mathbb{1}$$

- ランダムノイズベクトル

- ▶ N 個のベクトル ξ_i の各成分が $U(1)$ またはその部分群に値をランダムに取れば

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i \xi_i^\dagger = \mathbb{1} + O(1/\sqrt{N})$$

ノイズ法

- 手順

- ▶ 連立方程式 $DX = \xi_i$ を各ノイズベクトル i に対して解く
- ▶ 解 X_i に右から ξ_i^\dagger を掛けて i について平均すれば

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \xi_i^\dagger = D^{-1} + O(1/\sqrt{N})$$

- ▶ 実際に計算する場合、殆どの成分が使われずに終わる巨大行列を無意味に作るのは時間の無駄。今回のように対角成分 (x_1, x_1) だけが欲しい場合はその成分だけを取り出す掛け算をすればよい

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_{i,x_1} \xi_{i,x_1}^\dagger = D_{x_1,x_1}^{-1} + O(1/\sqrt{N})$$

- 高精度を目指すなら改良が不可欠 (時間があれば後で)

4. 統計解析の基礎

カバーしていないこと

- ブートストラップ法の詳細
- ベイズ統計

格子 QCD のデータについて

- データは各配位 U_i ごとに得られる
- 各配位には多種多様な相関関数のサンプルがあり、それぞれ t ごとに複素数の値を持っている。これらを確率変数と見て \vec{x} とまとめて書く
- これらの値は相関し合っている
 - ▶ 共分散 $\sigma_{ab} = \langle x_a x_b \rangle - \langle x_a \rangle \langle x_b \rangle$
 - ▶ 真の共分散は知らないなので $\bar{\sigma}_{ab} = \frac{1}{N-1} \sum_i (\bar{x}_a - x_a^i)(\bar{x}_b - x_b^i)$ と推定する \bar{x}_a : x_a の平均値
- これで確率変数（相関関数）の期待値 \bar{x}_a と誤差 $\sqrt{\bar{\sigma}_{aa}/N}$ は得られた

計算したい量の統計誤差

- 計算したい量はこれら確立変数の関数 $f(\vec{x})$

- ▶ 期待値は $\bar{f} = f(\bar{\vec{x}})$

- ▶ 誤差 (の2乗)

$$(\delta f)^2 = \frac{1}{N} \sum_{a,b} f_a f_b \sigma_{ab}$$

$$f_a = \left. \frac{\partial f}{\partial x_a} \right|_{\vec{x}=\langle \vec{x} \rangle}$$

- ▶ 推定誤差

$$\left(\overline{\delta f}\right)^2 = \frac{1}{N} \sum_{a,b} \bar{f}_a \bar{f}_b \bar{\sigma}_{ab}$$

$$\bar{f}_a = \left. \frac{\partial f}{\partial x_a} \right|_{\vec{x}=\bar{\vec{x}}}$$

- 確率変数が多い場合のこのような誤差伝播による誤差評価はいちいち微分を与えないといけなくて面倒

ジャックナイフ法

- ジャックナイフサンプル

$$\bar{x}_a^i = \frac{N\bar{x}_a - x_a^i}{N-1}$$

- ジャックナイフ法による誤差評価

$$\begin{aligned} \frac{N-1}{N} \sum_i \left(\bar{f} - f(\bar{x}^i) \right)^2 &= \frac{N-1}{N} \sum_i \left(\sum_a \bar{f}_a (\bar{x}_a - \bar{x}_a^i) \right)^2 \\ &= \frac{N-1}{N} \sum_{a,b} \bar{f}_a \bar{f}_b \sum_i (\bar{x}_a - \bar{x}_a^i) (\bar{x}_b - \bar{x}_b^i) \\ &= \frac{1}{N(N-1)} \sum_{a,b} \bar{f}_a \bar{f}_b \sum_i (\bar{x}_a - x_a^i) (\bar{x}_b - x_b^i) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{a,b} \bar{f}_a \bar{f}_b \bar{\sigma}_{ab} = \left(\overline{\delta f} \right)^2 \end{aligned}$$

$(\bar{x}_a - \bar{x}_a^i)$ についての高次もあるが、
N が十分に大きければ or f が線形に
近ければ十分に小さく無視できる

ジャックナイフ法について

- f がどれだけ複雑でも平均値付近で滑らかであれば比較的シンプルに誤差を評価できる方法
- 2つの確率変数が同一のアンサンブルからでない場合や異なる配位のセットから測定された場合への拡張も可能。元気な人は考えてみてください！
追記のスライドに捕捉を入れました (次項)
- 注意点
 - ▶ 確率変数に対して強い非線形性を持つ量で統計数が少ないと前ページの $\bar{x}_a - \bar{x}_a^i$ の高次が無視できなくなって誤差評価を間違えてしまう
 - ▶ 少ない統計では共分散行列の推定値も間違えてしまうので $\frac{1}{N} \sum_{a,b} \bar{f}_a \bar{f}_b \bar{\sigma}_{ab}$ がどれだけ正しいかも微妙
 - ▶ 統計が少ない場合でもある程度マシな誤差評価ができるのがブートストラップ法。この方法のデメリットはリサンプルが膨大になることがある点

追記 ジャックナイフ法の拡張について

1. 複数の格子点におけるシミュレーション結果から連続極限を取る時

- ◆ これは別のシミュレーションのデータは相関していないので、無理にジャックナイフ法でやらなくてもって感じだけど、一応拡張したジャックナイフ法でできます

拡張が望ましい例

2. 同じシミュレーションからでも繰り込みやサンプル AMA をする時

- ◆ 繰り込みなら行列要素の計算に使う配位のセットと繰り込み係数の計算に使う配位が異なる場合は多い
- ◆ サンプル AMA なら近似計算に使う配位より補正の計算に使う配位の方が少ない
- ◆ データ間の相関をちゃんと考慮した誤差評価のできる超ジャックナイフ法は作れます。そこまで徹底的にしなくても良いかもだけど参考に未完成のノートのリンク入れときます：<https://lattice01.phys.uconn.edu/members/tomii/schools/stat.pdf>
- ◆ 他の拡張方法もあると思うので考えてみてください

χ^2 フィット

確立変数 \vec{x} あるいはその関数 f^α が未知定数 \vec{c} に依存したある規則に従うと期待される時

- χ^2 - 期待した規則の正しさを示す指標

$$\chi^2 = \sum_{\alpha, \beta} (f^\alpha(\langle \vec{x} \rangle) - \mathcal{F}^\alpha(\vec{c})) (\sigma^{-1})^{\alpha\beta} (f^\beta(\langle \vec{x} \rangle) - \mathcal{F}^\beta(\vec{c})) \quad \sigma^{\alpha\beta} = \sum_{a,b} f_a^\alpha f_b^\beta \sigma_{ab}$$

- χ^2 を最小にする定数 \vec{c} を見つける: $\frac{\partial \chi^2}{\partial c_k} = 0$

- ▶ \mathcal{F}^α が \vec{c} について線形するとき: $\mathcal{F}^\alpha = \sum_k \mathcal{G}_k^\alpha c_k$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial c_k} = 0 \Rightarrow \sum_l \underbrace{\sum_{\alpha\beta} \mathcal{G}_k^\alpha (\sigma^{-1})^{\alpha\beta} \mathcal{G}_l^\beta}_{\text{matrix}} c_l = \sum_{\alpha\beta} f^\alpha(\langle \vec{x} \rangle) (\sigma^{-1})^{\alpha\beta} \mathcal{G}_k^\beta$$

k, l に関する行列 \rightarrow 逆行列をかませれば \vec{c} が求まる

初期値を決めないといけないけど、Python とかなら大体の関数をカバーして初期値を決めるところから全部できる

- ▶ 線形性がないときは反復的な方法で $\partial \chi^2 / \partial c_k = 0$ を解くことができる

χ^2 フィットの例

2点関数を用いたハドロンエネルギー（質量）の決定

$$C_{\phi', \vec{p}=\vec{0}}(t) \xrightarrow{\text{large } t} A_{\phi', 0} e^{-M_{\phi', 0} t}$$

有効質量 $\ln \frac{C_{\phi', \vec{p}=\vec{0}}(t)}{C_{\phi', \vec{p}=\vec{0}}(t+1)}$ が一定になる領域に選ぶ

- フィット関数

$$\mathcal{F}^\alpha(M_{\phi', 0}, A_{\phi', 0}) = A_{\phi', 0} e^{-M_{\phi', 0} \alpha} \quad \alpha, \beta \in \{t_{\min}, \dots, t_{\max}\} \quad (f^\alpha = C_{\phi', \vec{p}=\vec{0}}(\alpha))$$

- ▶ これは $M_{\phi', 0}$ について非線形 → 反復的なフィット

- 時間方向の格子サイズは有限 (T) なので以下がより実用的

$$\mathcal{F}^\alpha(M_{\phi', 0}, A_{\phi', 0}) = A_{\phi', 0} \left(e^{-M_{\phi', 0} \alpha} + e^{-M_{\phi', 0} (T-\alpha)} \right)$$

χ^2 フィットの实用

- 実践的にはジャックナイフサンプルに対してフィットを行う
- χ^2 の定義に出てくる σ は実は何でも良い
 - ▶ $\sigma^{\alpha\beta} = \sum_{a,b} f_a^\alpha f_b^\beta \sigma_{ab}$ とした時のフィットを correlated fit という
 - ▶ 共分散行列の非対角項を落としたものを uncorrelated fit という
 - ▶ correlated fit はフィット結果の統計誤差を最小にするが、実用的には統計が少ない時に共分散行列が不正確になると、統計誤差は過小評価されることも
 - ▶ correlated fit はフィットするデータ点の数 (α の取る値の数) がサンプル数より十分に小さければ大丈夫とされている
 - ▶ uncorrelated fit はより安定していて精度もそんなに悪くならない
 - ▶ correlated fit が何か変な振る舞いをしていたら uncorrelated fit も検討しましょう
- フィット結果の χ^2 / dof がおよそ 1 の時、用いたフィット関数はもっともらしいとされる

degrees of freedom: (データ点の数) - (フィットパラメータの数)

自己相関

- マルコフ連鎖を利用する格子QCDのモンテカルロ法では異なるサンプル間 (ゲージ配位 U_i と U_j における相関関数) に相関がある

$$C_a^{i,j} = \langle (\langle x_a \rangle - x_a^i) (\langle x_a \rangle - x_a^j) \rangle - \langle x_a \rangle^2 \neq 0$$

- 量によってはトポロジーの凍結時に急増する
- 誤差評価に影響しうる
- 自己相関関数 $C_a(t) = C_a^{i,i+t}$
 - ▶ ここではサンプル間のモンテカルロ時間は一定 (=1) としている
 - ▶ 自己相関長 τ_a : $C_a(t) \sim e^{-t/\tau_a}$
- これを計算すると計算した量の自己相関について情報が得られる

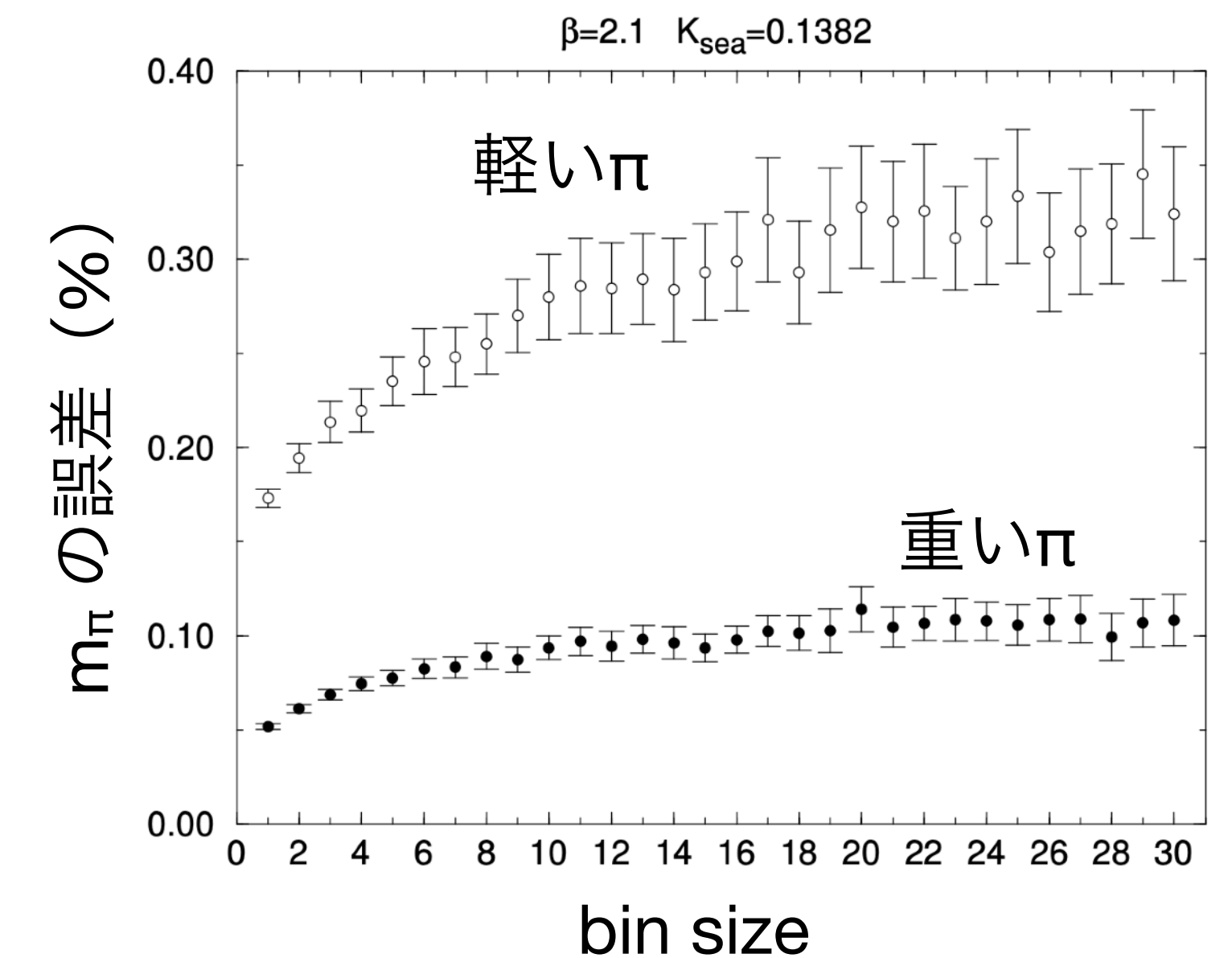
自己相関の実践的な対応

- ジャックナイフサンプルのブロッキングを変える

$$\bar{x}_a^i = \frac{N\bar{x}_a - x_a^i}{N-1} \rightarrow \bar{x}_a^i = \frac{N\bar{x}_a - \sum_{j=bi}^{bi+b-1} x_a^j}{N-b}$$

ビンサイズ b のジャックナイフサンプルと呼ぶ
全サンプルから b サンプル分を取り除いたもので平均

- ▶ ある意味連続する b 個のサンプルを同一のゲージ配位からサンプルしていると見れる
- ▶ b がある程度大きいと誤差評価が b に依存しなくなる。それが大体自己相関長に相当する
- ▶ b が自己相関長より小さいと誤差を過小評価してしまう



自己相関の実践的な対処法

- ** 自己相関長は 解析する量や解析の仕方によって違う
- 最初に測定した相関関数やそこからすぐに得られるハドロン質量における自己相関を調べて自己相関長が分かった気になっていても、最終的に論文に載る量はそれよりも自己相関が長い可能性がある
- 最初に自己相関を調べるのは良いけど、最終的に論文に載せる量とにたどり着くのはもっと後の場合が多い。さらにその後解析方法を改良して誤差が小さくなったってこともある
- 論文に乗る量の最終解析方法で自己相関を確認することも大事

5. 実用的な相関関数の計算・

解析テクニック

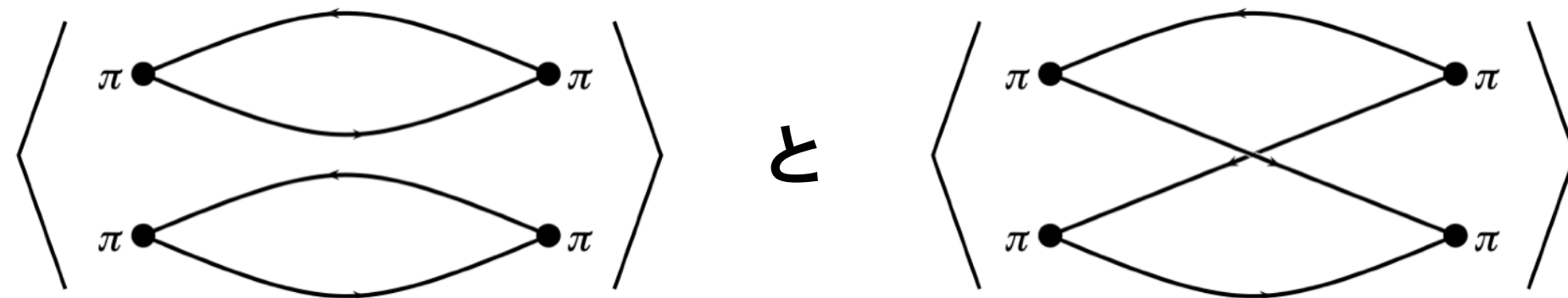
素粒子・原子核界の職人に向けて

- 相関量による誤差相殺
- Variational method (GEVP method)
- 色々な伝播関数の計算方法
- All-mode averaging

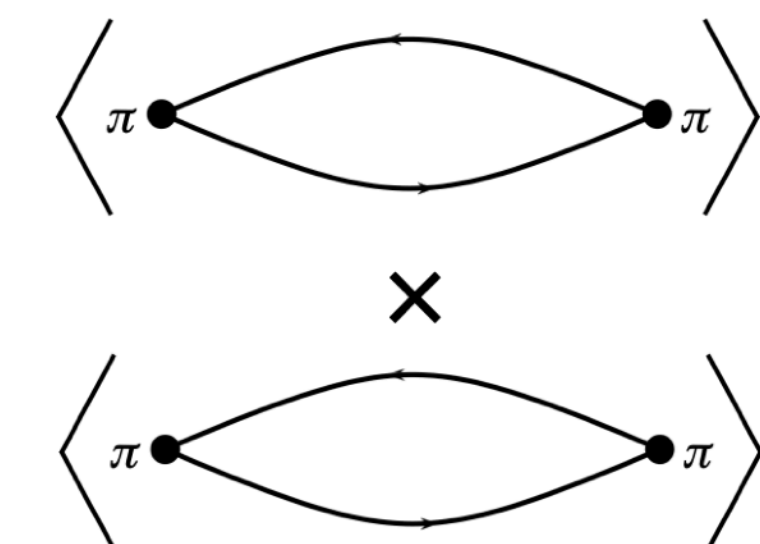
相関量による誤差相殺

- 2つの測定量の間には強い相関がある場合がある
- 例1：有限体積における $\pi\pi$ 状態と $\pi\pi$ 間の相互作用を切ったもの（ここではアイソスピン-2）

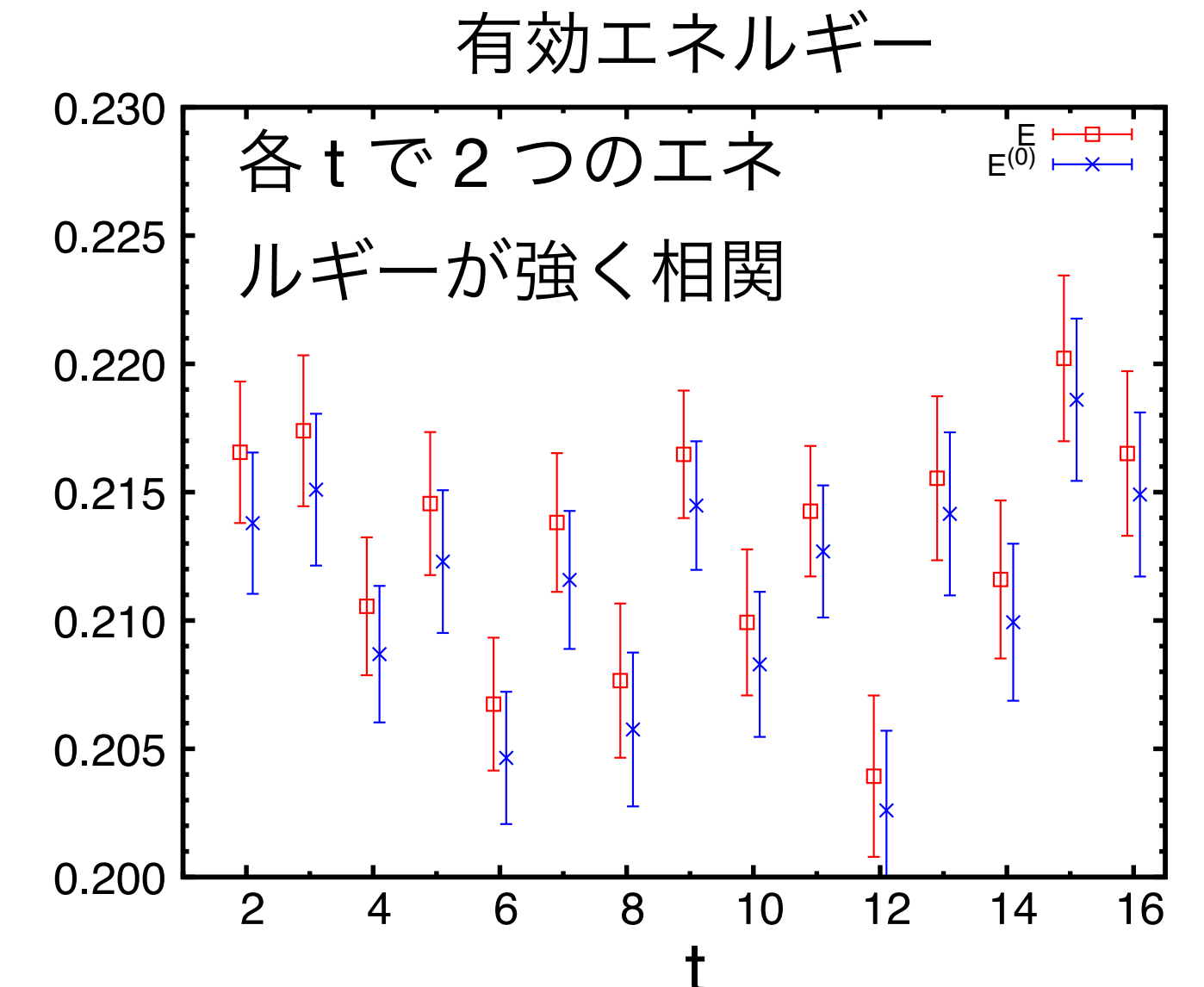
▶ $\pi\pi$ 相互作用あり



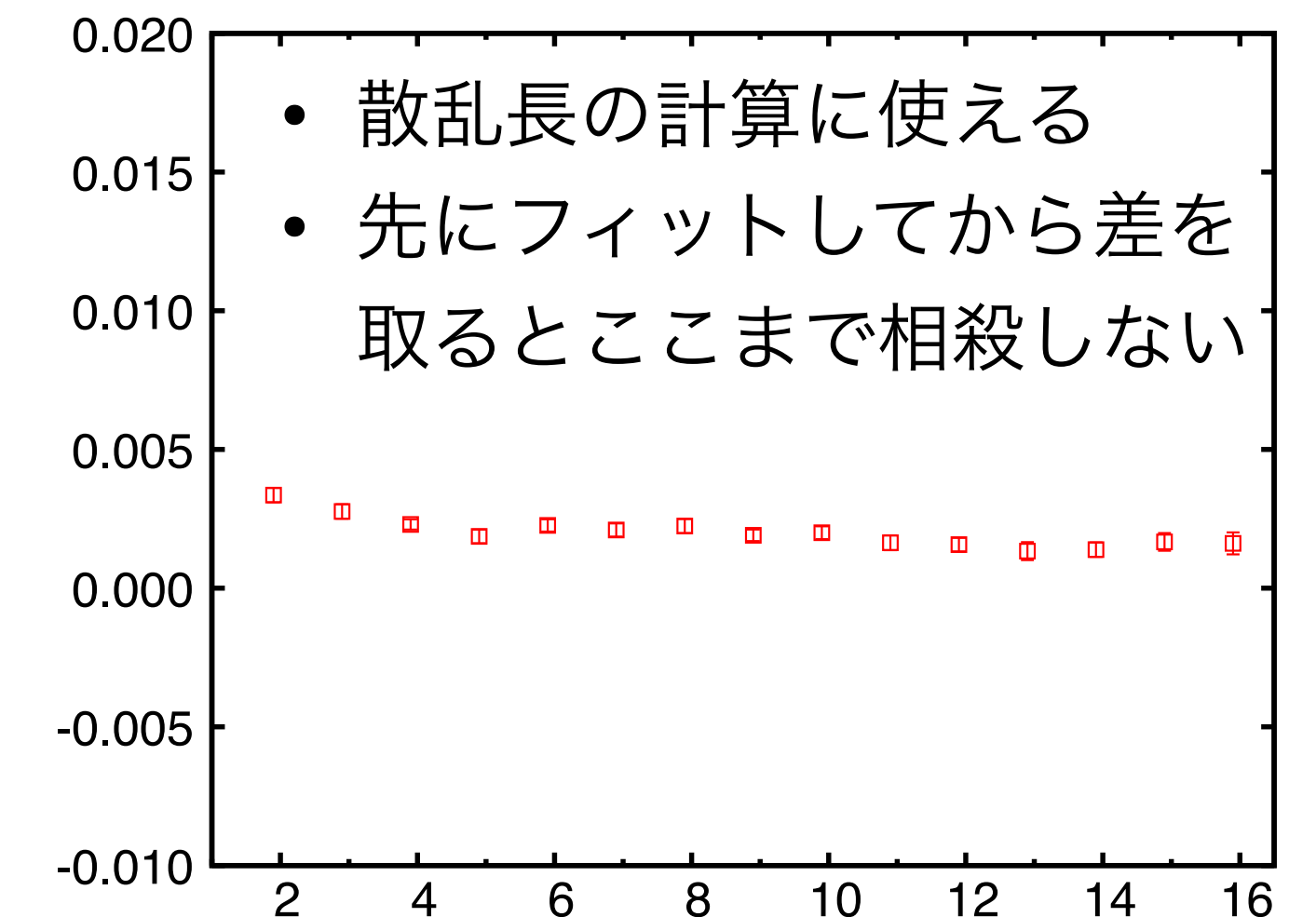
▶ $\pi\pi$ 相互作用なし



先にサンプル平均取ってから掛け算
ここから得られるエネルギーは $2m_\pi$



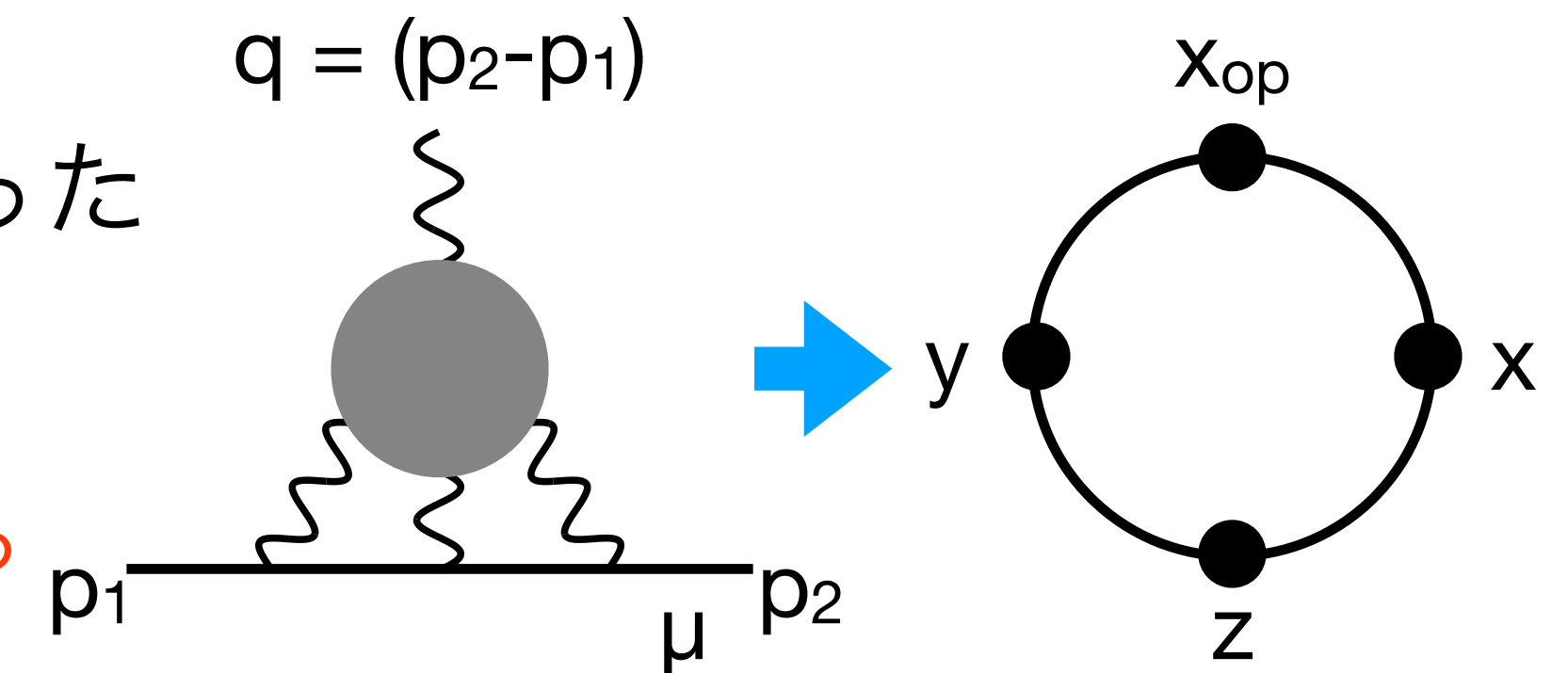
↓ 差を取る



HLbL によるミュオン $g-2$ への寄与

- 10年前は HVP 以上に重要度が高かった
 - 現象論モデルの信憑性が微妙だった
 - HVP の data-driven approach は今より信頼があった

ハドロンの部分は J^{em} の4点関数



並進不変性で $w = (x+y)/2$ 動かした

$$M_\mu(q) = \sum_{x,y,z} F_\mu(\vec{q}, x, y, z, x_{op}) \underline{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}_{op}}}$$

\vec{x}_{op} についても並進不変にする

$$= \sum_{x,y,z} F_\mu\left(\vec{q}, \frac{x-y}{2}, -\frac{x-y}{2}, z-w, x_{op}-w\right) e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}_{op}-\vec{w})}$$

$$\rightarrow \sum_{r,z,x_{op}} F_\mu\left(\vec{q}, \frac{r}{2}, -\frac{r}{2}, z, x_{op}\right) e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}_{op}}$$

$$r \equiv x - y, \quad z - w \rightarrow z, \quad x_{op} - w \rightarrow x_{op}$$

x, y の和を r, x_{op} の和で表現

r 小 \rightarrow 寄与大 : r の小さいデータを important sampling

これだけでもシャれたアイデアだと思ったが...

相関量による誤差相殺 例 2

- ミューオン $g-2$ への HLbL による寄与

Ph.D 学生のアイデア

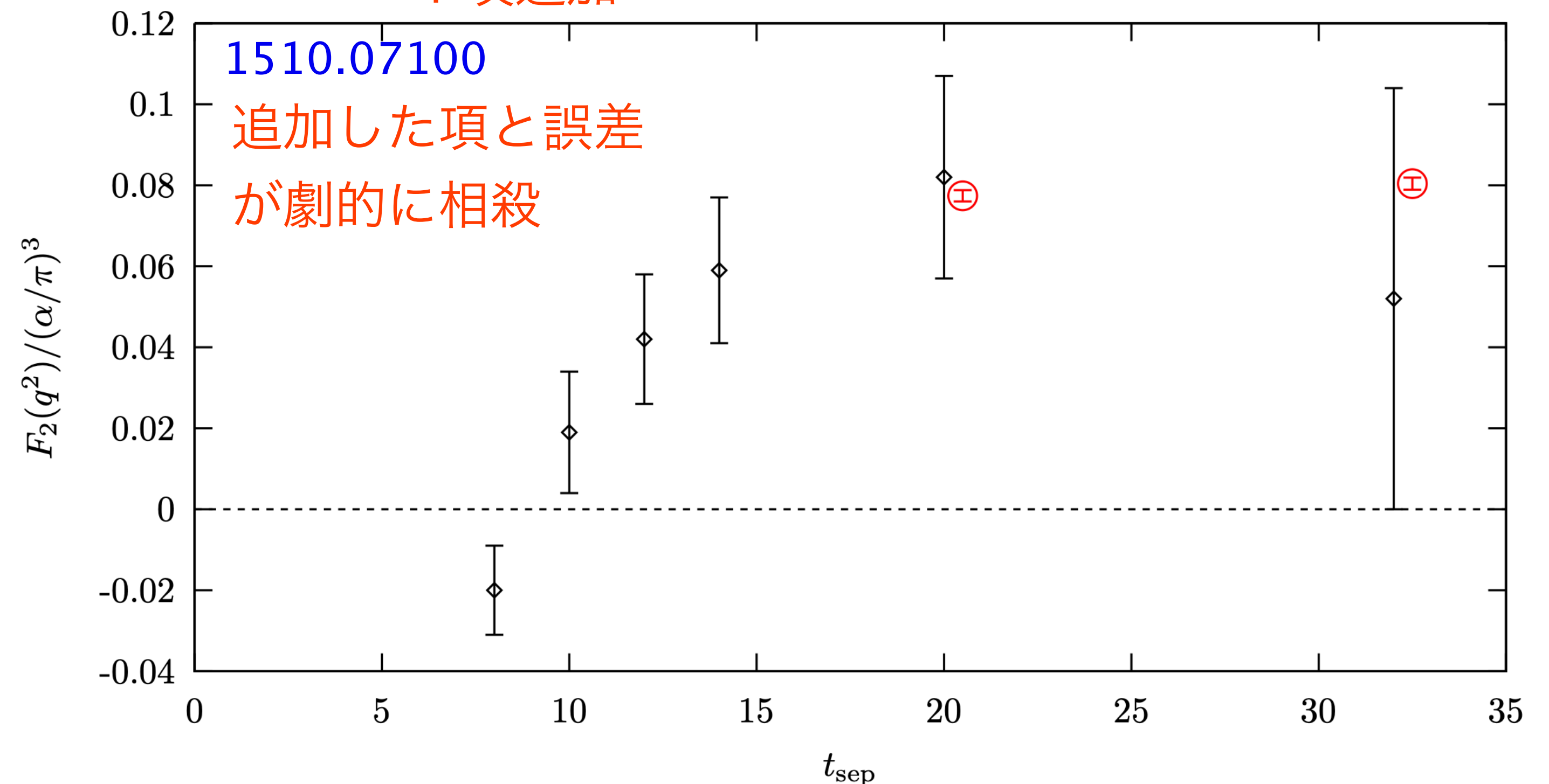
$$\sum_{r,z,x_{op}} F_\mu \left(\vec{q}, \frac{r}{2}, -\frac{r}{2}, z, x_{op} \right) e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_{op}} \rightarrow \sum_{r,z,x_{op}} F_\mu \left(\vec{q}, \frac{r}{2}, -\frac{r}{2}, z, x_{op} \right) \left(e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_{op}} - 1 \right)$$

1 項追加

$q = 2\pi/L$ $N_{prop} = 81000$ \blacklozenge
 $q = 0$ $N_{prop} = 26568$ \oplus

ロジック

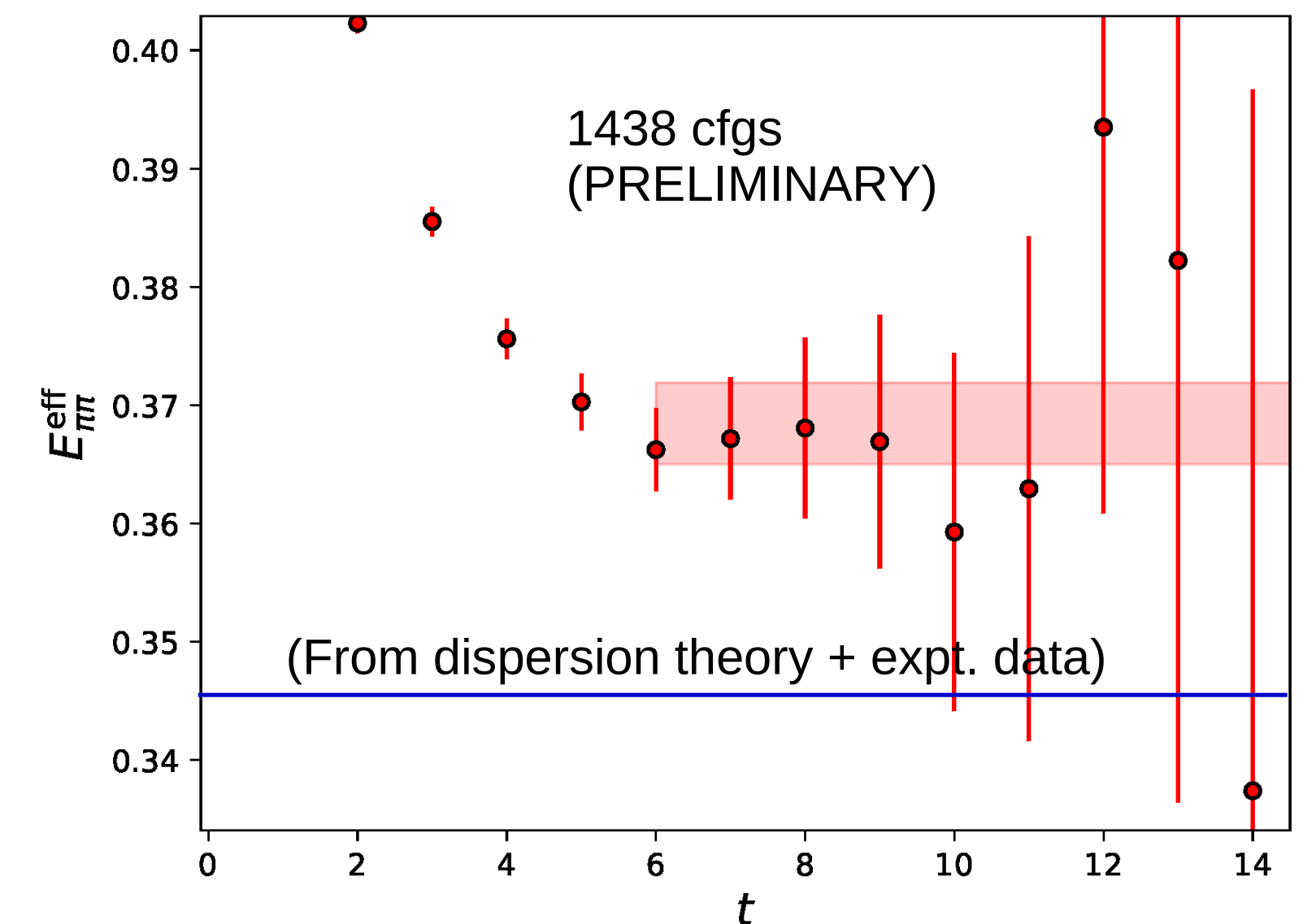
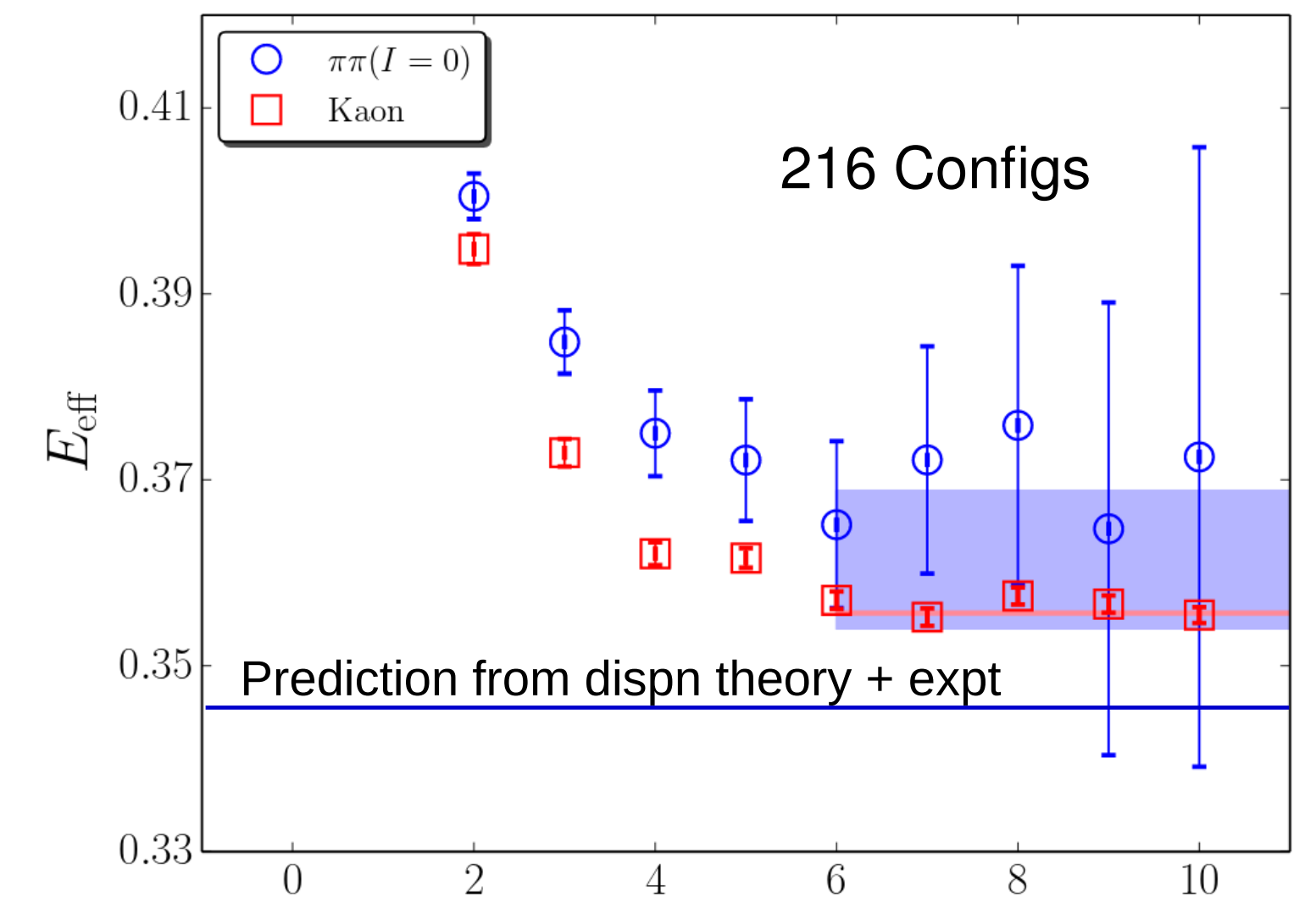
- x_{op} ってベクターカレントの場所を表している
- F_μ の x_{op} に関する時空和は表面項として Ward-Takahashi 恒等式により消える
- F_μ を x_{op} の和中で足し引きするのは自由



ドクターの学生がしばらく続くと思われていた問題を一気に終わらせた (厳密には言い過ぎだけど)

励起状態

- 相関関数 $\langle O_1(t) O_0^\dagger(0) \rangle$
 - ▶ t 小 \rightarrow 励起状態の寄与のせいで基底状態の寄与がちゃんと見えない
 - ▶ t 大 \rightarrow 誤差が大きくシグナルが取れない
- 過去に何度か無理やり t の小さいところでシグナルを取るうとして励起状態の寄与を過小評価して世間を騒がせたことがある
 - ▶ NN
 - ▶ $K \rightarrow \pi\pi$
- 励起状態も考慮して1つの相関関数を解析するとシグナルがかなり悪くなる



Variational method [Lüscher-Wolf, 1990]

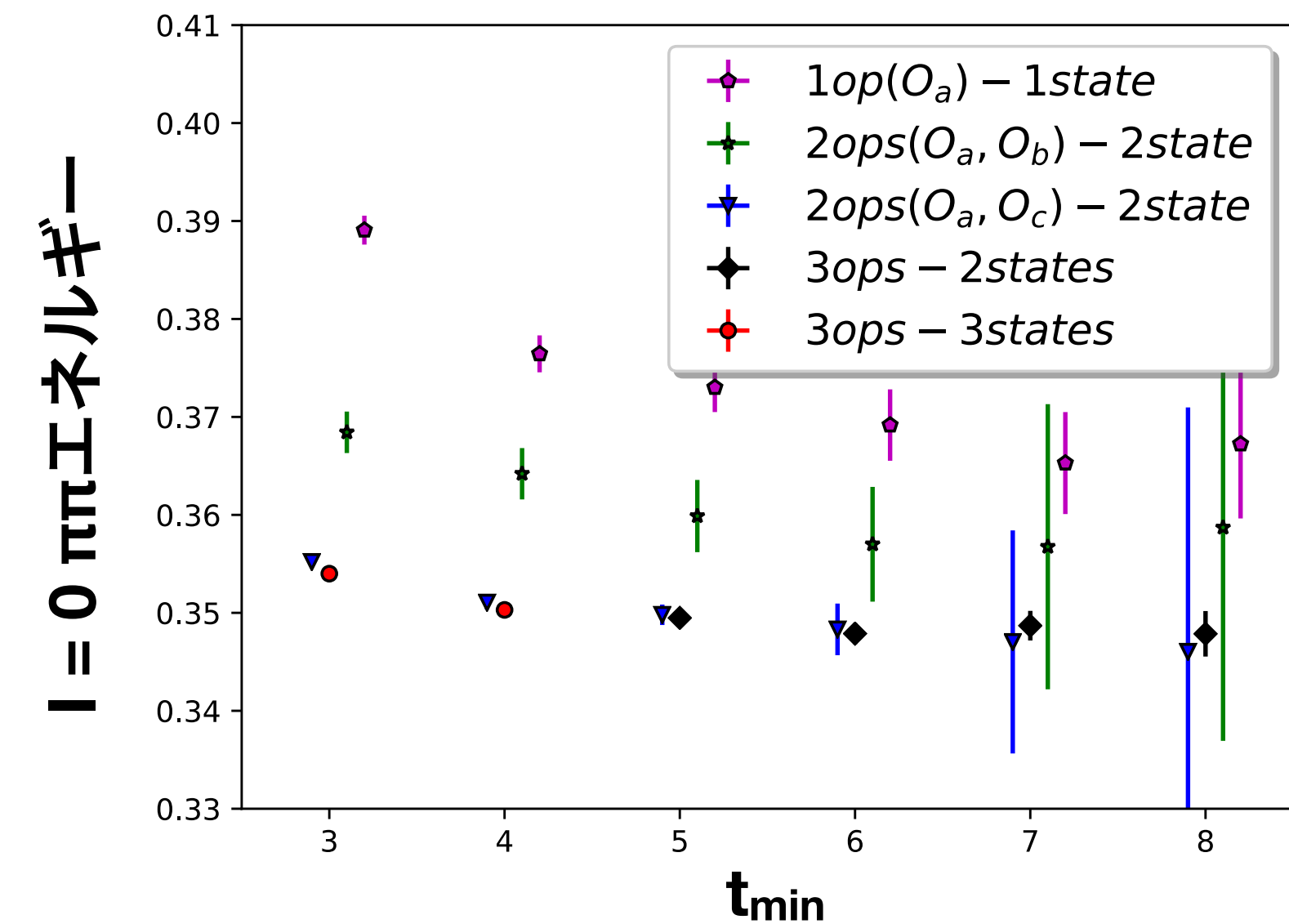
- 一般固有値問題 GEVP (Generalized Eigenvalue Problem)

$$C(t)v_n(t, t_0) = \lambda_n(t, t_0)C(t_0)v_n(t, t_0) \quad C(t) : \text{相関関数の } N \times N \text{ 行列 } C_{ab}(t) = \langle O_a(t)O_b(0)^\dagger \rangle$$

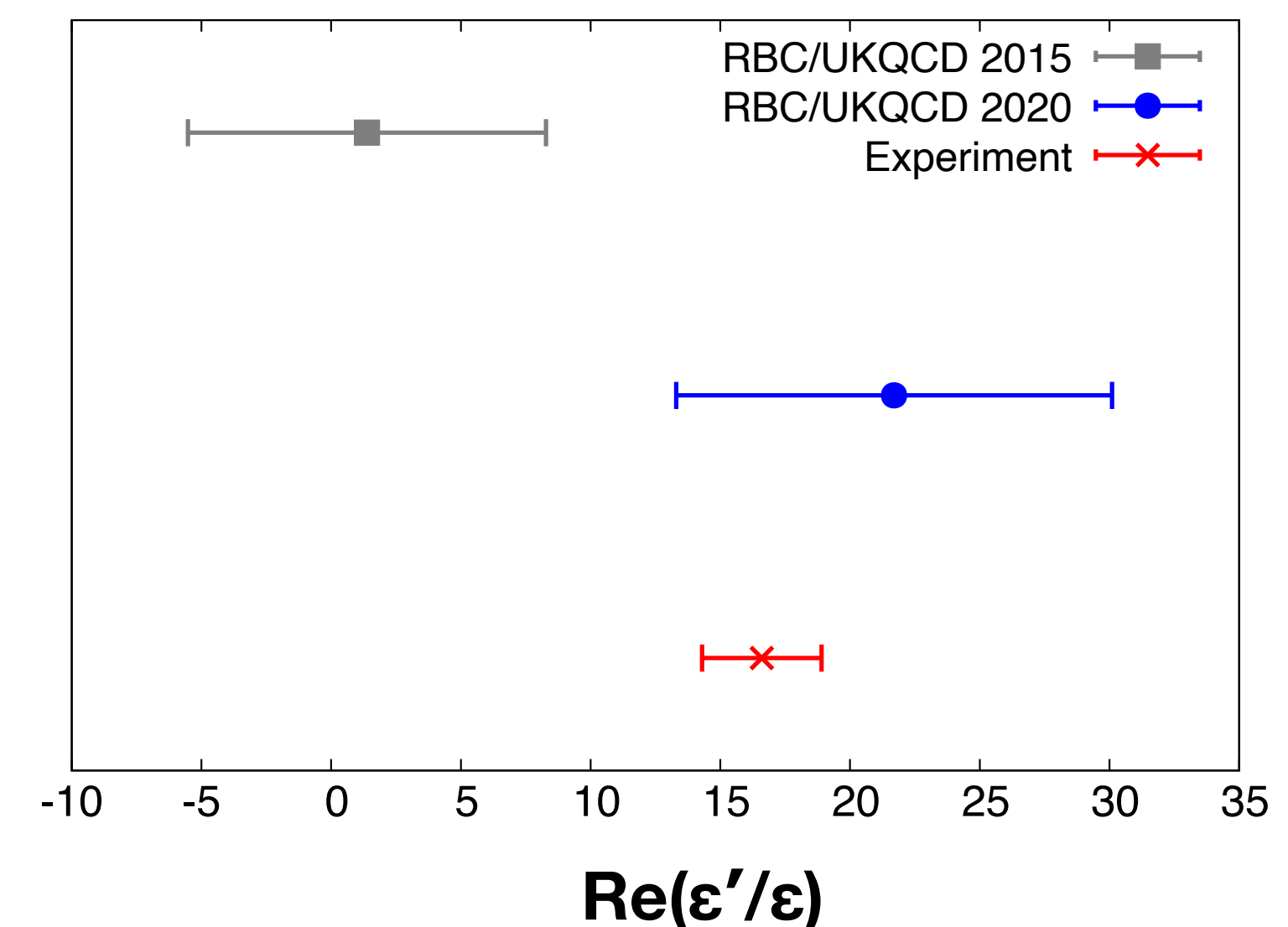
- ▶ $O'_n = \sum_a v_{n,a}^* O_a$ n 番目の状態とよく結合
- ▶ $\lambda_n(t, t_0) = e^{-\underline{E}_n(t-t_0)}$ at large t & $t_0 \rightarrow$ 励起状態のダメージ少なくエネルギーを抜き出せる
- ▶ エネルギーだけでなく行列要素などにも使える
- $C(t_0)$ から $C(t)$ への時間変化の様子を追跡 \rightarrow 一般固有値がエネルギーと関連する
- 有限統計で実践する際の注意点
 - ▶ $C(t_0)$ が正則でないとき解けないが有限統計では固有値が誤差の範囲で 0 になり得る
 - ▶ N が大きすぎると精度のでない固有値も見ないといけなないので注意
 - ▶ N を適度のサイズにするか、rebasing [2301.09286](#)

励起状態をより慎重に扱って結果が変わった例

- $K \rightarrow \pi\pi$ に見られる CP の直接的破れ ε'
- 約 30 年計算が待たれていた
- $I = 0$ の $\pi\pi$ の基底状態が必要
 - ▶ 2015 年 $\pi\pi$ の演算子 1 つ
 - ▶ 2020 年 $\pi\pi$ の演算子 3 つ (σ の演算子含む)
- 2015 年は実験とズレていて世間を騒がせてしまった
- 格子 QCD の専門家としては大事な教訓



σ を含めると
結果が大きく
動いた



スメアリング

- 簡単のためクォーク双線形

$$\bar{q}\Gamma T^a q \begin{cases} \Gamma : \text{スピンに関する行列。} J^{PC} \text{ の量子数を決める} \\ T^a : \text{フレーバーに関する行列。アイソスピンなど} \\ \text{フレーバーの量子数を決める} \end{cases}$$

- スメアリング：カラー・座標に関する行列 F （スメアリング関数）を挟むこと

$$\sum_{x_1, x_2} \bar{q}(x_1) F(x, x_1)^\dagger \Gamma T^a F(x, x_2) q(x_2)$$

- ▶ 演算子に空間的な広がりを持たせることで high mode を殺して統計エラー削減
- ▶ 一般にゲージ配位に依存
- ▶ ゲージ不変性を壊すこともある (exponential, wall) → ゲージ固定して計算
- ▶ コントラクションの計算は大きな抵抗なくできる

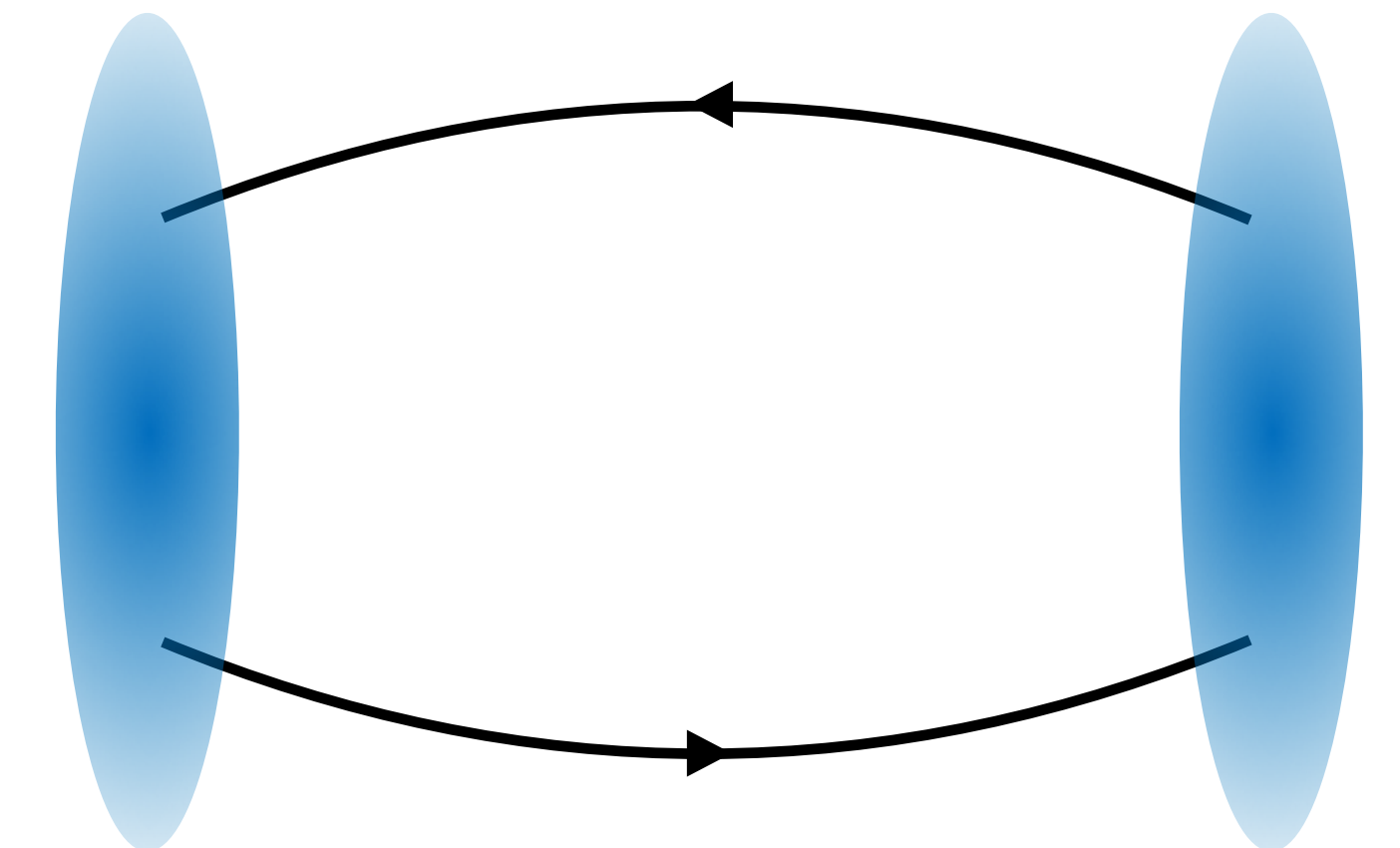
smearred source

- 2点関数のコントラクションの例

$$\begin{aligned}
 & -\sum_{x_1} \sum_{y_1, y_2, y_3, y_4} \text{Tr} \left[\Gamma F(x_1, y_1) D_{y_1, y_2}^{-1} F(x_2, y_2)^\dagger \Gamma F(x_2, y_3) D_{y_3, y_4}^{-1} F(x_1, y_4)^\dagger \right] \\
 & = -\sum_{x_1} \sum_{y_1, y_2, y_3, y_4} \text{Tr} \left[\gamma_5 \Gamma F(x_1, y_1) \underbrace{D_{y_1, y_2}^{-1} F(x_2, y_2)^\dagger \Gamma}_{DX = F(x_2, \bullet)^\dagger \text{ の解}} \gamma_5 \left(\underbrace{F(x_1, y_4) D_{y_4, y_3}^{-1} F(x_2, y_3)^\dagger}_{\text{こっちも同様}} \right)^\dagger \right]
 \end{aligned}$$

γ_5 -エルミート性

- この $F(x_2, \bullet)^\dagger$ を smearred source と呼ぶ
- 連立方程式を解いた後に $F(x_1, y_1)$ を掛けて y_1 で和を取ればスマアしない時と同じ形



形状因子

- π 中間子 形状因子

$$\langle \pi^+ (\vec{p}_f) | J_\mu^{\text{em}} | \pi^+ (\vec{p}_i) \rangle = (p_f + p_i)_\mu F^{(\pi)}(Q^2)$$

- 形状因子の Q^2 -依存性を見れば...

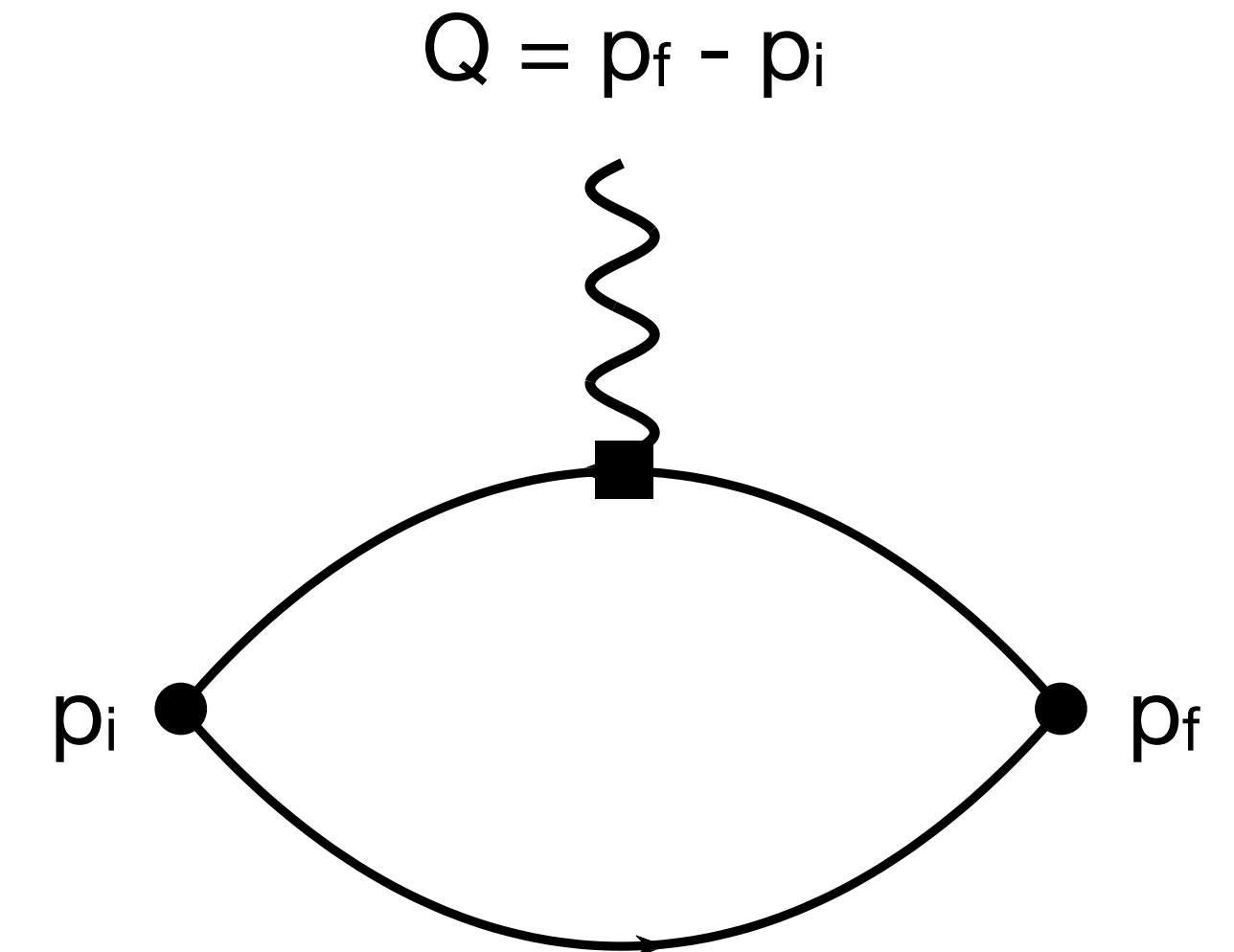
$$F^{(\pi)}(Q^2) = 1 - \frac{1}{6} \langle r^2 \rangle_V Q^2 + O(Q^4)$$

$\langle r^2 \rangle_V$: π 中間子 荷電半径

- コントラクション

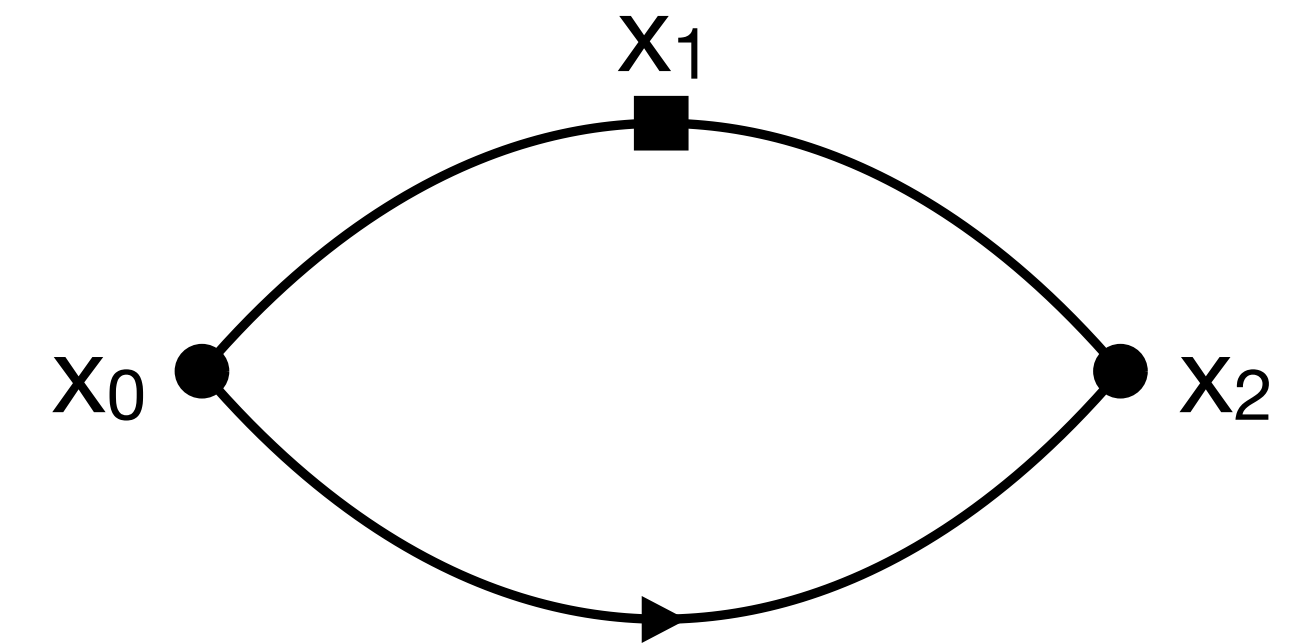
$$\sim \text{Tr} \left[\sum_{\vec{x}_1, \vec{x}_2} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{x}_1 - i\vec{p}_f \cdot \vec{x}_2} \gamma_5 D_{x_2, x_0}^{-1} \gamma_5 D_{x_0, x_1}^{-1} \gamma_\mu D_{x_1, x_2}^{-1} \right]$$

- ▶ (少なくとも) 2つの点で空間和が必要 → どうやって計算すれば良いか

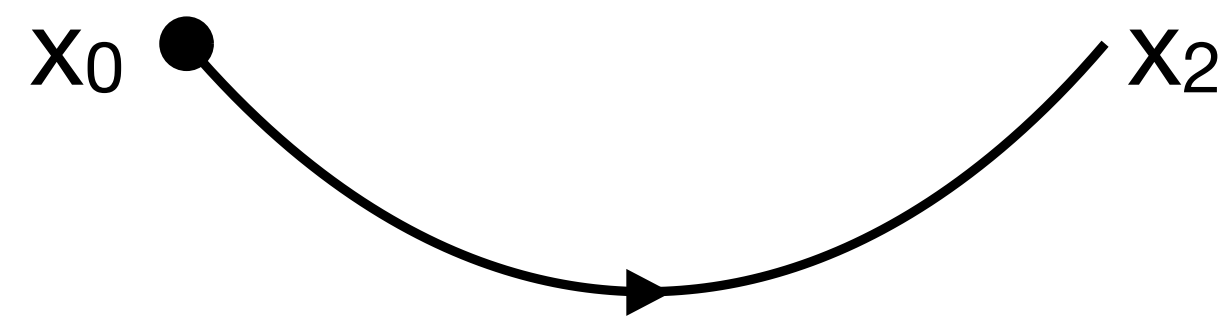


sequential source を用いた計算

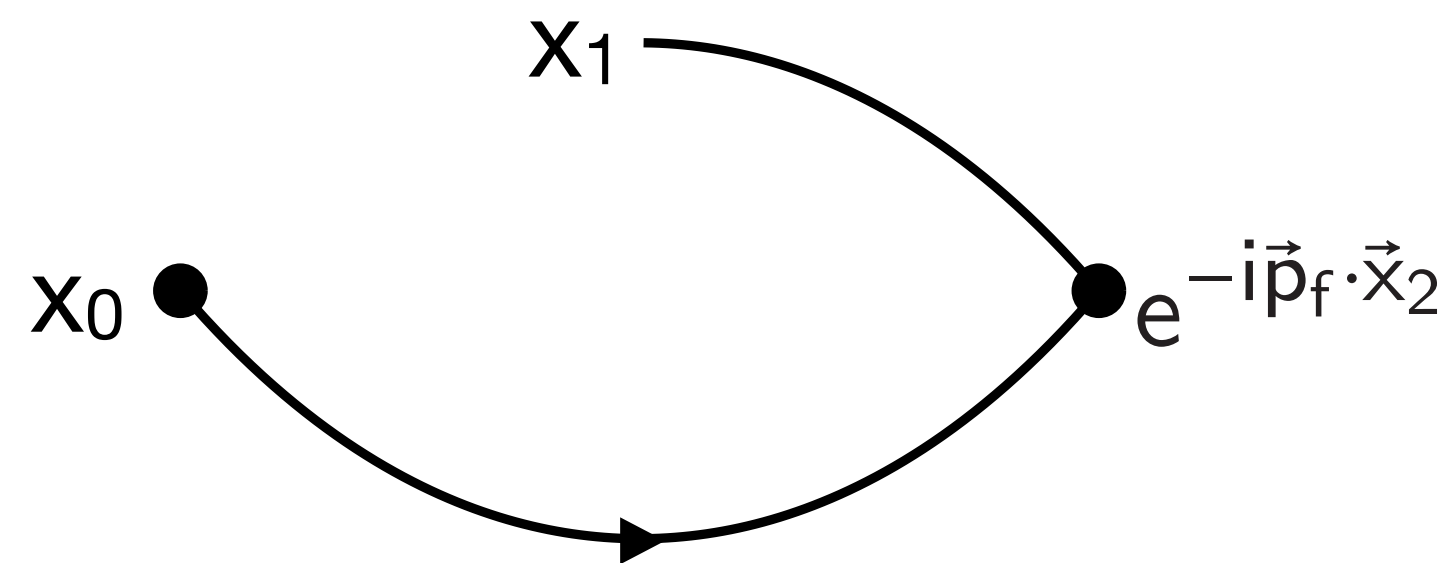
$$\left[\sum_{\vec{x}_1, \vec{x}_2} e^{i\vec{Q}\cdot\vec{x}_1 - i\vec{p}_f\cdot\vec{x}_2} \gamma_5 D_{x_2, x_0}^{-1} \gamma_5 D_{x_0, x_1}^{-1} \gamma_\mu D_{x_1, x_2}^{-1} \right]$$



1. x_0 を source に伝播関数を計算



2. x_2 についてフーリエ変換してそれを source に連立方程式を解く



$$DX = \sum_{\vec{x}_2} e^{-i\vec{p}_f\cdot\vec{x}_2} D_{x_2, x_0}^{-1}$$

これが sequential source

3. D_{x_0, x_1}^{-1} は前と同様に γ_5 -エルミート性を使って計算できる

必要な運動量のペア p_f の分だけ連立方程式を解かないといけないけど、割とコスパの良い方法

All-to-all propagators [hep-lat/0505023](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0505023)

- 目標： D^{-1} (の任意の成分を含むコントラクション) を計算
- ピュアなノイズ法では十分な精度がでないことがある
- Low mode approximation $D^{-1} \approx \sum_{i=0}^{N_l} |\lambda_i\rangle \frac{1}{\lambda_i} \langle \lambda_i|$
 - ▶ $|\lambda_i\rangle$: D の i 番目に小さい固有値 λ_i に対応する固有ベクトル
 - ▶ 各モードの寄与 $\sim 1/\lambda_i \rightarrow$ 寄与の大きなものだけでも厳密に
 - ▶ $12 \times$ (格子体積) 個の固有ベクトルまで求めれば厳密だけどもムリ
 - ▶ Lanczos 法などで $100 \sim 10,000$ 個ほど求める
 - ▶ クォークの質量が小さいほど low modes の固有値が小さいので重要
 - ▶ 体積が大きいほどモードが多いので固有ベクトルも多いと良い

All-to-all propagators

- Low mode 近似は近似なので系統誤差が出てしまう
 - ▶ ノイズ法も厳密じゃないけど、厳密からのずれを統計誤差として扱える
- Low mode 近似とノイズ法のハイブリッド
 - ▶ ノイズ法 $DX_i = \xi_i$ $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \xi_i^\dagger = D^{-1} + O(1/\sqrt{N})$
 - ▶ Low mode 近似で求めた固有空間を除外してノイズ法を行う
 - ▶ 伝播関数に重要な寄与を与える low modes の部分は厳密なまま D^{-1} に含める

$$D^{-1} = \sum_{i=0}^{N_l} |\lambda_i\rangle \frac{1}{\lambda_i} \langle \lambda_i| + \frac{1}{N} \sum_i X_i \xi_i^\dagger$$

- ▶ ノイズの連立方程式を解く際に low modes がないと速くなる
- ▶ 格子体積が大きければ精度も出やすい

Distillation

0905.2160

- distillation 伝播関数 (“perambulator”)
 - ▶ 連立方程式: $DX^n = V^n$
 - ▶ Perambulator: $G_{t_1, t_2}^{m, n} = \sum_{\vec{x}} \left(V_{(\vec{x}, t_1)}^m \right)^\dagger X_{(\vec{x}, t_2)}^n$
 - ▶ distillation source vectors: $\Delta_{\vec{x}, \vec{y}} V_{(\vec{y}, t)}^n = \lambda^n V_{(\vec{y}, t)}^n$ 空間方向にゲージ不変なラプラシアン
の固有ベクトルがよく使われる
 - ▶ Perambulator: 空間座標の代わりにラプラシアンの固有空間のラベルに関する行列
- 4D 座標を成分に持つ通常の伝播関数に比べてかなり小さい行列
- ソースのスメアリング付随: $F(x_1, x_2) = \sum_n V^n V^{n\dagger}$

Distillation について

- ソース点の 3D の空間に関して和が取れているので all-to-all と同じクラス
- Perambulator は空間座標に依存しないサイズの小さい形
 - ▶ 一度計算したら保存して後で別の計算にも使える
 - ▶ all-to-all に比べてコントラクションが簡単
 - ▶ コントラクションの大変な（伝播関数が大量にある）計算に有用
 - ▶ 例 1：長距離 HVP による $g-2$ への寄与（ 20×20 くらいの $\pi\pi$ 相関関数 \rightarrow GEVP）
 - ▶ 例 2： $0\nu 2\beta$ 、 $K \rightarrow \pi\pi$ の電磁補正（伝播関数が多い）
- V^n を計算するのに大きい行列サイズの数百個の低い固有値・固有ベクトルを各ユークリッド時刻で求めないといけない（all-to-all より伝播関数そのもののコストは大）

複数ソース点で平均

- 例

$$\sum_{\vec{x}} \text{Tr} \left[D_{x,0}^{-1} \left(D_{x,0}^{-1} \right)^\dagger \right] \rightarrow \frac{1}{\#\mathcal{X}_0} \sum_{x_0 \in \mathcal{X}_0} \sum_{\vec{x}_1} \text{Tr} \left[D_{x_1+x_0, x_0}^{-1} \left(D_{x_1+x_0, x_0}^{-1} \right)^\dagger \right]$$

- 各ソース点 x_0 を離しておけば同じ配位でも相関が小さい (例外あり)
- 実質サンプル数を増やすことになる
- ソース点をランダムに選ぶ方が良いという話も
- ソース点の数 \propto コスト : all-to-all とどっちが良いか?

All-mode averaging (AMA)

1208.4349

- ソース点の数 = 求める伝播関数の数 \propto コスト
- 伝播関数の大部分は大雑把に計算
 - ▶ $DX = \eta_{x_0}$ を近似的に速く解く
 - ソルバーの精度（反復回数・収束条件）を緩める
 - ドメインウォールフェルミオンの場合 L_s を小さくする
 - など
- 少しだけ厳密に計算

$$\frac{1}{\#\mathcal{X}_0} \sum_{x_0 \in \mathcal{X}_0} C_{\text{approx}}(x_0) + \frac{1}{\#\mathcal{X}'_0} \sum_{x_0 \in \mathcal{X}'_0} (C_{\text{exact}}(x_0) - C_{\text{approx}}(x_0))$$

$$\#\mathcal{X}'_0 \ll \#\mathcal{X}_0$$

近似計算なので比較的 low cost で
統計を増やせる

“相関量による誤差相殺”が起きて
いて少ない統計でも精度が取れる

サンプル AMA

2301.09286

- all-to-all や distillation では全ソース点を入れているようなものなので今のアイデアは使えない
- ソース点の代わりに厳密に計算する配位の数減らす
- 統計解析は厳密には通常のジャックナイフ法では相関の取り扱いが完璧にはできないが、ジャックナイフ法の拡張は可能
- AMA の考え方は他のところでも使われている (富谷さんの講義)

ありがとうございました