

課題名 (タイトル) :

有限密度 QCD の大規模並列シミュレーション

利用者氏名 : 中村 純

所属 : 延興放射線研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

QCD (量子色力学) は我々の世界の物質を形成するクォークとグルーオンの力学であり、その高い非線形性と遠距離での強い結合定数のために、数値シミュレーションが強力な解析手法となっている。これまでに密度がゼロの系に対しては、ゼロ温度、有限温度共に格子 QCD が多くの情報をもたらしてきた。しかし、有限密度系ではモンテカルロ計算を行おうとすると、通常は確率となる因子が複素数になってしまう「符号問題」が起こり、もっとも困難なシミュレーションと言われてきた。

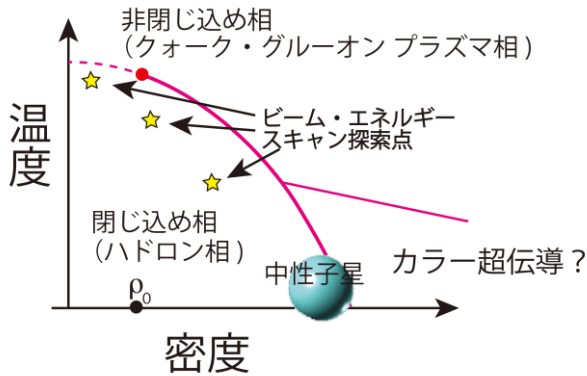


図 1: 予想されている QCD 相図と Riken-BNL 実験の探索点

一方、有限密度系の非摂動的解析は、中性子内部や宇宙初期、そして Riken-BNL で進められている RHIC (高エネルギー重イオン加速器) 実験の理解のために必須であり、有限密度・有限温度では上図のように QCD は豊富な相図を持つことが予想されている。第一原理計算である格子 QCD で有限温度・密度の相構造を明らかにすることは、物理的に非常に重要な課題となっている。

これまで、多変数再規格化法、虚数化学ポテンシャル法などが提案され、これまでの理研 RICC

での研究でプログラムを開発し、適用範囲を調べてきた。その結果、これらが適用できるのは μ/T (μ はクォーク化学ポテンシャル、 T は温度) が 1 程度までであり、高温・高密度の極限状態 QCD を研究するのは難しいことが明らかになってきた。

これまでに調査した方法の中のカノニカル法は、永田-中村のフガシティ展開法を利用すれば正確に求められるが、この方法では巨大な行列の固有値を求める必要があり、物理系に対して信頼できる結果を得るために、格子の大きさを大きくしていくのが困難であると思われる、また

$$Z_n = \int \frac{d\theta}{2\pi} e^{i\theta n} Z(\theta = \mu/T) \quad (1)$$

によってカノニカル分配関数 Z_n を求める手法は小さな n に対してのみ結果を得ることができ、実用にはならなかった。この方法では化学ポテンシャル μ を純虚数にとることにより、大分配関数の計算で符号問題が起こらないようにしている。

もしカノニカル分配関数が十分大きな n まで求めることができれば

$$Z(\mu) = \sum_n Z_n (\exp(\mu/T))^n \quad (2)$$

により、(純虚数だけでなく実数の) 化学ポテンシャル μ における大分配関数を計算することができる。

理化学研究所で、格子 QCD シミュレーションについて集中講義を行ったところ、全国の大学院生、若手研究者が有限密度格子 QCD プロジェクトに参加してくれることになった (Zn-Collaboration)。皆で検討を続けた結果、これまで大きな n まで (1) 式で Z_n が計算できなかった

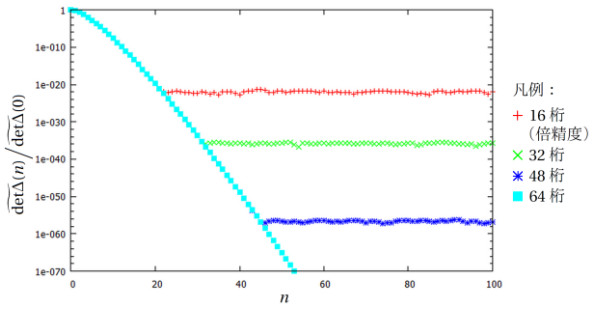


図 2 : カノニカル分配関数の精度改善

たのは、フーリエ変換で n が大きいときは大きな桁落ちが起こっていることが原因であることが分かってきた。さらに、多倍長計算をすることにより、この問題は解決できる可能性が高いことも分かってきた。

Z_n は n が大きくなると何十桁も減少するが、 μ/T が大きいと (2) 式右辺の $(\exp(\mu/T))^n$ の項が増大するため、このような小さな Z_n も精度良く計算する必要がある。しかし、これまでの科学技術計算で標準的に使用される倍精度計算では必要な精度は実現できず、10進で50から150桁ほどの精度が必要となることが分かった。これまで格子 QCD 分野の High Performance Calculation で多倍長というのはほとんど使われたことがなく、本プロジェクトでも導入して使いこなすためにかなりの期間を必要とした。

2. 具体的な利用内容、計算方法

式 (1) の中の $Z(\theta)$ を求めるために、以下の表式を使う

$$\begin{aligned} Z(\mu) &= \int \mathcal{D}U \det \Delta(\mu) e^{-S_G} \\ &= \int \mathcal{D}U \frac{\det \Delta(\mu)}{\det \Delta(\mu_0)} \Delta(\mu_0) e^{-S_G} \end{aligned} \quad (3)$$

ここで μ_0 を純虚数に取る。こうすることにより、この行列式は実になるので、通常のモンテカルロ積分を実行できる。クォーク行列 Δ は

$$\Delta = I - \kappa Q$$

いう形をしており、重いクォークに対してはホッピングパラメータと呼ばれる κ は小さい。

そこで今回は

$$\begin{aligned} \det \Delta &= \exp(\text{Tr} \log(I - \kappa Q)) \\ &= \exp\left(\text{Tr} \sum_m \kappa^n Q^m\right) \end{aligned}$$

と展開 (ホッピングパラメータ展開) を行った。化学ポテンシャル μ は κ の中に含まれる。

これを (3) 式に代入してモンテカルロ積分で $Z(\mu)$ を評価し、それを (1) 式のようにフーリエ変換し、得られたカノニカル関数 Z_n を (1) 式に代入して任意の実化学ポテンシャルでの大分配関数が求まる。

ただし、フーリエ積分はフーリエ級数で近似し、多倍長で計算を行っている。多倍長計算には FMLib を使用した。

<http://myweb.lmu.edu/dmsmith/fmlib.html>

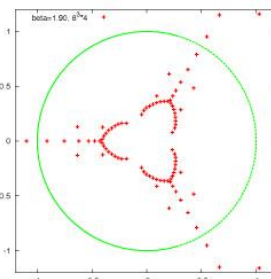
式 (2) によって作られた $Z(\mu)$ は、複素数化学ポテンシャルへも拡張できる。 Z をフガシティ

$$\xi = e^{\mu/T}$$

の関数として複素フガシティ平面上での Z のゼロ点はリー・ヤンゼロとして知られており、系の層構造を表すものとなっている。本定式化ではこのリー・ヤンゼロを求めることが可能である。ただし、ここでも多倍長計算が必須であった。

3. 結果

以上の定式化を使って数値計算を進め、カノニカル分配関数 Z_n 、圧力、ナンバー密度、その感受率、リー・ヤンゼロの計算を進めている。



図は、高温の非閉じ込め相 (クォークグルーオン相) でのリー・ヤンゼロである。

4. まとめ

現在、比較的小さなサイズの格子を使い、ホッピングパラメータを主として使った計算により、物理的に意味のある結果を得るためにどの程度の精度が必要かを調査している。

式(2)から分かるように、大きな化学ポテンシャル領域を調べるためには、大きな n まで Z_n を計算する必要がある。 Z_n は n の増大とともに急速に減少するので、より精度の高い計算が必要となる。

5. 今後の計画・展望

現在、 Z_n で n が数十の大きさまでの計算を実行できるようになっている。QCD 相図を解明するためにはこの倍ほどの領域まで計算する必要がある。そのためには高速の多倍長計算が必要となる。現在の多倍長計算はライブラリーを利用している。これは一変数が演算を含めてオブジェクト化されている。しかし本計算では大量の配列に対する倍精度計算が必要であり、非常に多くの時間がかかる。この問題を解決するためには、自前の多倍長計算コードを開発する必要がある。

また、ホッピングパラメータ展開は、質量の逆冪展開であるため、現実の軽いクォークの計算が難しい。現在の格子 QCD の計算技術では、現実の軽いクォーク質量でシミュレーションを行うことが可能になっている。しかし、式(1)のフーリエ積分では多くの化学ポテンシャルの点で計算をする必要がある。このような点を考慮した新たなアルゴリズムを検討している。

【国際会議などの予稿集、proceeding】

Quark Matter 2014 Proceedings

1. Atsushi Nakamura, Keitaro Nagata

What are multiplicity distributions telling us about the QCD phase diagram?

Nuclear Physics A931, (2014) pp. 825–830