

格子 QCD によるバリオン間相互作用の計算

概要

格子 QCD から NBS(Nambu-Bethe-Salpeter) 波動関数を求めるための計算手順と関連する計算手法について紹介する。

キーワード

格子 QCD 計算、NBS 波動関数、バリオン間相互作用、共役勾配法、畳み込み、高速フーリエ変換

1. 序

強い相互作用の基礎理論である QCD は、クォークに対応するフェルミオン場 $\psi(x)$ とグルーオンに対応するゲージ場 $A_\mu(x)$ を基本的自由度とする $SU(3)$ の非可換ゲージ場の理論である。ラグランジアンは共変微分 $D_\mu = \partial_\mu + igA_\mu$ とゲージ場の場の強さ $F^{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig[A_\mu, A_\nu]$ を用いて、

$$\mathcal{L}_{QCD} = \bar{\psi} (i\gamma_\mu D^\mu + m_q) \psi - \frac{1}{2} \text{Tr} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (1)$$

と書き表すことができる。ラグランジアンが単純である事とは対照的に、QCD は低エネルギーになるにつれて相互作用が非常に強くなり摂動計算が破綻してしまい、直接的な計算が非常に難しくなる。一方で、ハドロンの性質や(今回紹介するような)バリオン間の相互作用を QCD から調べるためには低エネルギーでの非摂動効果を取り込んだ計算が要求される。格子 QCD による定式化はこの要求を満たす方法の一つとして発展してきた。

格子 QCD 計算は QCD を用いた第一原理計算であり、ハドロンの物理を記述するうえで非常に有効である。この理論では、時間を虚時間に代え (Euclid 化)、さらに時空を有限格子状に離散化する事により定式化が行われる。素粒子を記述する場合は格子点上で定義され、格子間を繋ぐリンクとしてゲージ場が定義される。無限自由度である連続場の理論を離散化する事により、理論に含まれる自由度が有限になり、理論が数学的に完全に定義され、種々の物理量を摂動論によらずに第一原理から数値的に求めることが可能になる。ただし、この離散化により理論に有限の格子間隔 a が導入される事になり、 $\mathcal{O}(a)$ による連続極限とのずれを常に意識しておかなければならない。

本稿では、格子 QCD によりバリオン間の相互作用をポテンシャルの形式で表す計算の手順を紹介する事を目標とする。格子 QCD 計算では、Euclid 空間での定式化が使われているために、散乱を扱うことは難しいとこれまで思われてきたが、有限ボックス中での数値データから散乱の基本情報を引き出す定式化が Lüscher により提唱され [1]、さらにこの方法を拡張し核子間のポテンシャルを導出する方法が開発された [2]。このポテンシャル法を用いる事で、格子 QCD により原子核間に作用する核力の本来の姿を明らかにし、実験データが少ないハイペロン力や 3 体核力などについても有用な結果が得られると期待されている。さらに格子 QCD から求められたバリオン間相互作用は、原子核や中性子星の構造計算などに広く応用される可能性をもっている。

2. 格子 QCD 計算

演算子 \mathcal{O} の期待値は Euclid 空間で

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int DUD\psi D\bar{\psi} \mathcal{O} e^{-S_{QCD}^E} \quad (2)$$

で計算される。 S^E は Euclid 空間での作用で、QCD のラグランジアン \mathcal{L}_{QCD} を用いて

$$S_{QCD}^E = \int d^4x \mathcal{L}_{QCD}(x) \quad (3)$$

で定義される量である。格子 QCD 計算では、この計算に対して時空を離散化した量を定義し計算する。

実際に数値計算を行う際には、以下の主要な部分に分けて考える事ができる：

1. グルーオン場 (ゲージ配位) を生成する部分
2. グルーオン場の中を伝搬するクォーク伝播関数を計算する部分
3. クォーク伝播関数を用いてハドロンの相関関数を計算する部分

詳細な説明は避けるが、ゲージ場に対応するリンク変数 U は e^{-S} に比例した確率で生成されるので、演算子 \mathcal{O} の期待値は生成されたゲージ配位毎に計算された \mathcal{O} の平均として求める事ができる。格子 QCD 計算は、ハドロンに対する第一原理計算であるが、数値計算によるシミュレーションにおいては、モンテカルロ計算に基づくため、有限の統計誤差を持つ事になる。

格子 QCD 計算の場合は、上記の 1. に相当するゲージ配位生成の部分の部分を他の部分と切り離して計算する事が可能である。つまり、国内外を問わず、ある研究グループが作成したゲージ配位データを用いて異なるグループが研究に

利用する事が可能なのである。現在では ILDG/JLDG [3] により、格子 QCD 研究グループ間での世界規模のゲージ配位データ共有が行われており、計算資源の節約とともに研究の高速化に役立てられている。我々の計算でも一般に公開されているゲージ配位をしようして NBS 波動関数を求めている。

3. クォーク伝搬関数

ゲージ配位が与えられたとして、物理量を計算するためには、クォークの伝搬関数を求める必要がある。クォーク伝搬関数が求められれば、それをもとにしてハドロンの伝搬関数が構成できる。

クォーク伝搬関数 S_q を得るためには、 D をディラック演算子として以下の線型方程式を解く必要がある。

$$D[U]_{x,y} S_q(y, x_0) = \eta_{x,x_0}, \quad (4)$$

この式は x_0 に源をもつクォークが x まで伝搬する事を意味しており、この式を S_q について解く事によってクォークの伝搬関数を得る事ができる。

格子作用としては、格子間隔 $a \rightarrow 0$ の極限で連続理論の作用を再現するものを任意に選ぶ事ができる。我々の計算では、例えば Wilson 作用を考えると Dirac 演算子は

$$D[U]_{x,y} = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} (1 - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta_{x+\hat{\mu},y} + (1 + \gamma_{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(x) \delta_{x,y+\hat{\mu}} \quad (5)$$

で表される。実際に我々の計算で用いている演算子は、この演算子に加えて

$$-\delta_{x,y} c_{SW} \kappa \sum_{\mu < \nu} \sigma_{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (6)$$

で定義される clover 項を付け加えた演算子を用いている。今の場合、フェルミオン行列 D 近隣の僅かな格子点のみを関係づけており、そのほとんどの要素が 0 であるような疎行列である事が分かる。格子の x, y, z, t 方向のサイズをそれぞれ N_x, N_y, N_z, N_t とすると、フェルミオン行列のサイズは $n \equiv 3 \times 4 \times N_x \times N_y \times N_z \times N_t$ として、 $n \times n$ となる。ここで 3 はカラー自由度の数、4 はクォークと反クォークのスピンの上向き、下向きに相当する自由度を表している。 $N_x N_y N_z N_t = 32^4$ のサイズの格子では、約 $10^7 \times 10^7$ のサイズの行列になる。このような大規模疎行列による線形方程式を解くために共役傾斜法 (CG 法) が用いられる事が多い。

CG 法による反復計算の回数は一般に線形演算子 D の最小固有値と最大固有値の比で定義される条件数で決まることが分かっているため、クォークの質量が軽いほど最小固有値が小さくなり、収束に必要な反復回数が多くなることがわかる。従って、 u, d クォークが非常に軽い物理点での格子 QCD 計

算は、線形方程式の計算量が非常に多くなることにより困難になっている事が分かる。我々の計算で、CG法で求めていたクォーク伝搬関数を安定化双共役勾配法 (BiCGstab 法) に変えたところ、実測値で約 3 倍の高速化に成功している。しかし、BiCGstab 法では計算量を減らす事が出来るが、一般的に残差が単調減少しないという性質があり、残差の収束を毎回確認していく必要がある。

クォーク伝播関数についても共有化することが可能である。実際、我々の研究グループ内でクォーク伝播関数の共有を行い、計算時間の節約を行っていた事もあるが、このデータ量はゲージ配位のデータ量よりも遥に大きい事と、高度に並列化されたスーパーコンピュータでの計算時間が BiCGstab 法の導入により大きく改善されたため、この量の共有化は現在は行っていない。

4.NBS 波動関数

あるゲージ配位のもとでクォーク伝搬関数が求まると、ハドロンの伝搬関数を構成する事ができるようになる。NBS 波動関数を求めるにはハドロンの 4 点関数を計算する必要がある。

$$\sum_{\vec{x}} \langle B_1(\vec{x} + \vec{r}, t) B_2(\vec{x}, t) \bar{B}_1(t_0) \bar{B}_2(t_0) \rangle \quad (7)$$

この期待値の縮約をとり、クォークの伝搬部分に先に求めた解を代入し計算する事で、バリオンの 4 点関数が求められる。実際の計算では、バリオンの 4 点関数が早く基底状態に達するように、クーロンゲージ条件を課した wall source を用いているので、バリオンの source に関する座標の情報が無くなっている。

バリオン 4 点関数は十分に大きな t に対して

$$\sum_{\vec{x}} \langle B_1(\vec{x} + \vec{r}, t) B_2(\vec{x}, t) \bar{B}_1(t_0) \bar{B}_2(t_0) \rangle \sim A \phi_{B_1 B_2}(\vec{r}) e^{-Et} \quad (8)$$

のように振る舞い、ここから NBS 波動関数 $\phi(\vec{r})$ を抜き出す事が出来る。我々の計算では、この同時刻 NBS 波動関数を Schrödinger 方程式に代入し、ポテンシャルを導出を行っている。この計算部分については大規模計算とは関係が無いので説明は割愛する。

この 4 点関数は数学的に畳み込み (convolution) になっており、

$$W(\vec{r}) = \sum_{\vec{x}} f(\vec{x} + \vec{r}) g(\vec{x}) \quad (9)$$

を計算する事になる。この計算はフーリエ変換により、各関数のフーリエ変換の積に変換できる事が容易に分かる。一般に、離散系での数値計算では定

義通りの畳み込みを計算する代わりに、関数 f, g の高速フーリエ変換 (FFT) を計算し、それらの積の結果を逆高速フーリエ変換 (IFFT) する事により畳み込み計算を行う方法が採用されている。我々の計算でも同様に、全ての \vec{r} における 4 点関数を計算する際に高速フーリエ変換を用いる事で全体の計算時間を減らす事に成功した。しかし、フーリエ変換を行うためには多くの通信を要し、それに伴い現在の我々の計算ではこの部分でボトルネックを生じている。このため、更なる計算の高速化を実現するためには、3次元フーリエ変換をより高速におこなうためのプログラム変更が必要となっている。

まとめ

本報告では格子 QCD から NBS 波動関数を導出する計算方法に関する報告を行った。この計算で重要な点は、大規模疎行列から逆行列を求める事と、畳み込みによる全空間の波動関数を求める事にある事がわかる。どちらも、物理学的に必要な事が多く、これらを素早く計算するアルゴリズムの開発が重要となる。

最後に、本計算は格子 QCD 計算用に開発された CPS コード [4] を改造して使ったものである。将来的には HPCI 戦略プログラムで開発されている QCD コード [5] に合流する事を計画している。

References

- [1] M. Lüscher, U. Wolff, Nucl. Phys. B339, 222(1990).
- [2] N. Ishii, S. Aoki and T. Hatsuda, Phys. Rev. Lett. 99, 022001(2007).
- [3] See ”<http://www.lqcd.org/ildg>” / ”<http://www.jldg.org>”
- [4] Columbia Physics System(CPS), <http://qcdoc.phys.columbia.edu/cps.html>
- [5] <http://www.jicfus.jp/field5/jp/promotion/qcdcode/>