

有限密度格子 QCD の数値シミュレーション

永田 桂太郎

高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所

筆者は有限温度密度下での QCD の性質を格子 QCD と呼ばれる手法にいくつかの新たな技法を組み合わせ研究を行っている。以下ではカノニカル法を用いた有限密度格子 QCD の方法とその数値的な実行法の紹介を行う。

量子色力学 (QCD) はクォークとグルーオンの力学を記述する強い相互作用の基礎理論である。クォークとグルーオンの相互作用は "色" と呼ばれる量子数に対する非可換ゲージ理論により記述されることが知られている。有限温度・密度下における QCD は初期宇宙における高温状態、原子核、中性子星中心部における高密度状態など多様な現象に関わっており、その解明に向けて有限温度密度の QCD への興味が大きくなってきている。

QCD は非摂動的性質を持ち場の理論における摂動展開が一般的には適用できないため、QCD の解析には格子 QCD と呼ばれる数値解析法が主に用いられる。格子 QCD とは格子状に離散化された系において QCD の作用を定義し、その経路積分をモンテカルロ法によって評価する方法である。

クォークが化学ポテンシャル μ を持つ場合、QCD の分配関数は

$$Z(\mu) = \int \mathcal{D}U (\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-S_G} \quad (1)$$

と書く事が出来る。ここで、 U はゲージ場 (リンク変数)、 S_G はゲージ作用 (またはヤンミルズ作用)、 N_f はアップクォークやダウンクォークなどのフレーバ数、 $\Delta(\mu)$ はクォーク伝搬関数の逆行列である。QCD 作用においてクォーク場は双一次形式として現れるためクォーク場は代数的に処理する事が出来、その結果フェルミオン行列式 $\det \Delta(\mu)$ が現れる。格子 QCD ではゲージ場 U の配位をモンテカルロ法で生成することにより経路積分を実行する。ボルツマン因子 $(\det \Delta)^{N_f} e^{-S_G}$ は配位の更新における重みとして用いられる。 $\det \Delta$ は大規模行列の行列式であるが、分子動力学法とモンテカルロ法を組み合わせたハイブリッドモンテカルロ法を用いた効率の良い計算法が開発されている。

零密度 ($\mu = 0$) の場合、ボルツマン因子は実でありモンテカルロ法は有効な方法であるが、 μ が非零実数の場合、 $\det \Delta(\mu)$ が複素数となりモンテカルロ法は破綻する。これは「符号問題」と呼ばれており、符号問題のため有限密度格子 QCD の研究は難しい問題として知られている。 μ/T についてのテーラー展開や μ を虚数に解析接続する方法など、符号問題に対する様々な回避法がこれまでに研究されてきている。

以下ではフェルミオン行列式の次元縮約公式とカノニカル法を用いた方法を紹介する [1, 2]. 正準集団と大正準集団の間には

$$Z(\mu) = \sum_n Z_n e^{n\mu/T} \quad (2)$$

の関係がある. ここで Z_n は粒子数 n の場合の分配関数である.

Z_n の計算法の 1 つにクォーク行列式に対する縮約公式を用いた方法がある. 格子 QCD 作用の時間方向は局所性の要請から最近接相互作用と境界条件の項によって構成されており, 時間成分の行列として表示すると帯成分と対角成分に値を持ち, 他は零となるような構造を持っている. このような構造を持つ行列式を代数的に実行する公式が導出されており, これにより行列式の時間成分を代数的に実行することが出来る. 化学ポテンシャルはカレントの時間成分に結合するため, 行列式の時間成分を計算することが同時に $e^{\mu/T}$ の展開式を与えることになる. 縮約公式によりクォーク行列式は

$$\det \Delta(\mu) = C_0 e^{-N_r \mu / (2T)} \det(Q + e^{-\mu}) \quad (3)$$

と変形される. C_0, Q はクォーク行列 Δ を時間方向の行列構造に注目して分解, 再構築したもので, ランクは Δ に比べて $1/N_t$ に縮小されている. Q の固有値を λ_n と書くと

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \xi^{-N_r/2} \prod_{n=1}^{N_r} (\lambda_n + \xi), (\xi = e^{-\mu/T}) \quad (4)$$

を得る. これを ξ の多項式として展開し, 各係数のアンサンブル平均を取れば Z_n が求まる.

ここで, C_0, Q は μ に依存せず, 従って λ_n も μ に依存しない. μ 依存性はフガシティ ξ にのみ含まれており, $\{\lambda_n\}$ を求めれば任意の μ に対して $\det \Delta$ を求めることが出来る. つまり, (4) 式は $\det \Delta$ の μ 依存性を解析的に与える式になっている.

この計算を数値的に実行するには

(i) ハイブリッドモンテカルロ法によるゲージ配位の生成

(ii) Q の固有値問題

(iii) (4) 式の展開, および各項のアンサンブル平均

を行う必要がある. (i) は通常のハイブリッドモンテカルロ法を用いて行った. ここで化学ポテンシャルが非零実数の場合はモンテカルロ法は利用できないため, $\mu = 0$ においてモンテカルロ法を実行した. 有限の μ における物理量の計算は例えば Reweighting 法を用いることで行うことができる. Q は一般の複素行列であるので, 固有値計算 (ii) ではライブラリ LAPACK のサブルーチン ZGEEES を用いた.

(iii) では数値計算上の課題が 2 つある. 1 つ目は因数分解された次数の大きい多項式の展開, 2 つ目は倍精度変数のオーバーフロー/アンダーフローの問題である.

今, (4) 式の次数 N_r はおよそ 10,000 程度であり, 展開の演算量はおよそ $O(n^2)$ 程度である. このオーダーでは全体に占める計算時間がかなりの大きくなり, また計算誤差が大きくなりやすいので計算の高速化と解の精度を保つための工夫が必要である. ここでは, 以下のように再帰的方程式

$$\sum_{k=0}^M C'_k \xi^k = (B_0 + B_1 \xi) \sum_{k=0}^{M-1} C_k \xi^k \quad (5)$$

を用いた. 係数は

$$C'_0 = B_0 C_0 \quad (6)$$

$$C'_k = B_{k-1} C_k + B_k C_{k-1} \quad (k = 1, 2, \dots, M-1) \quad (7)$$

$$C'_M = B_1 C_{M-1} \quad (8)$$

から求まる.

C_n は $O(\lambda^n)$ であるので, n の変化に伴い指数的に変動し, これがしばしばオーバーフロー/アンダーフローを引き起こす. 任意精度計算ライブラリ GMP や FMLib 等を利用する事でこの問題を解決することが可能であるが, 一方, ライブラリの使用は高速化阻害要因となりやすく, 計算時間の大幅な増加を招く. この問題を克服するため, 我々は拡張変数 "Wide Range Float" を開発した.

今の計算では, 各 c_n は $O(\lambda^n)$ 程度の数であり, その計算に要求される有効桁数は倍精度で十分であり, 足りないのは指数部の大きさである. そこで, 我々は倍精度変数と整数を組み合わせ

$$a \times b^i$$

という変数を導入した. b は基数で, 固定された整数を用いる. a , ($1 \leq |a| < b$) は仮数部を表し, 倍精度変数を用いる. i は指数部で整数を用いる. これにより倍精度よりも大きな指数部を表すことが出来る. "Wide Range Float" を用いることで再帰的展開計算を高速に実行する事が出来る. 例えば, 同様の計算を Vandermonde 行列式を用いた方法と比較すると, Q の固有値 λ_n は近い値を取るものが多く, Vandermonde 行列式の方法では次数 100 程度から精度の劣化が起こる. また, 計算に任意精度 Library を用いた場合, 任意精度変数用行列計算ライブラリなども必要となる.

我々の方法では, 次数 10,000 でも十分な精度を保ち, かつ高速に計算することが出来る.

結果や詳細は以下の文献 [1], [2] を参照. また, その他の有限密度格子 QCD については [3], [4] を参照.

1. K. Nagata, A. Nakamura, PRD82, 094027, (2010); arXiv:1009.2149.
2. K. Nagata, et. al. PTEP01A, 013 (2012); arXiv:1204.6480.
3. K. Nagata, A. Nakamura, JHEP1204, 092, (2012); arXiv:1201.2765.
4. K. Nagata, A. Nakamura, PRD83, 114507 (2011); arXiv:1104.2142.