

格子 QCD 計算におけるデータ解析と共通シミュレーションコード開発

野秋淳一

高エネルギー加速器研究機構素粒子原子核研究所

概要

クォーク・グルーオンの相互作用を記述する理論 (QCD) は、時空間を格子状に区切ることで数値シミュレーションを実行でき、バリオンとメソンの関わる現象の非摂動計算として定着している。本稿では、この格子 QCD 計算における筆者の経験を概説する。簡単に格子 QCD の研究内容について説明した後、物理計算におけるデータ解析の例をいくつか紹介する。最後の節では、研究者コミュニティ全体で共有するべく開発が進められている数値シミュレーションコードについて、概要を説明する。

1. 格子 QCD

4次元ユークリッド空間を格子に切り、格子点にクォーク場 ψ_x を定義する。これはカラーベクトル (3成分) であり、またスピノル (4成分) でもあるため、時空間の自由度 $\times 12$ の複素グラスマン数である。作用は $S_{\text{QCD}} = S_g[U] + \bar{\psi}D[U]\psi$ と書かれる。ここで $D[U]$ は共変微分 (Dirac 演算子) で、隣接するクォーク (ψ_x) と反クォーク ($\bar{\psi}_{x+\hat{\mu}}$) とをリンク変数 $U_{x\mu}$ によって結びつけている。分配関数は変数 $U, \psi, \bar{\psi}$ についての積分であるが、グラスマン数を直接扱うことはできないので、後二者について積分を実行した後のものを使用する。つまり QCD の分配関数は本質的に

$$Z_{\text{QCD}} = \int [dU] e^{-S_{\text{QCD}}[U]}, \quad S_{\text{QCD}}[U] = S_g[U] + \ln \det D[U] \quad (1)$$

と書ける。

格子計算は大きく以下の2つに分かれる。

- ゲージ配位生成

式 (1) に基づき、分子動力学法によるモンテカルロシミュレーションを行い、全時空間における U の配位 (ゲージ配位) を生成する。生成された配位数によって統計精度が決定される。一旦生成した高コストの配位をコミュニティー間で共有する活動については [1, 2] の url を参照。また、ゲージ配位生成を含むシミュレーションプログラム自体を共有しようとする活動について第 6 節で触れる。

- 物理量の計算

生成されたゲージ配位を用いて物理量を計算する。物理量 O の期待値は

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z_{\text{QCD}}} \int [dU] O e^{-S_{\text{QCD}}[U]} \quad (2)$$

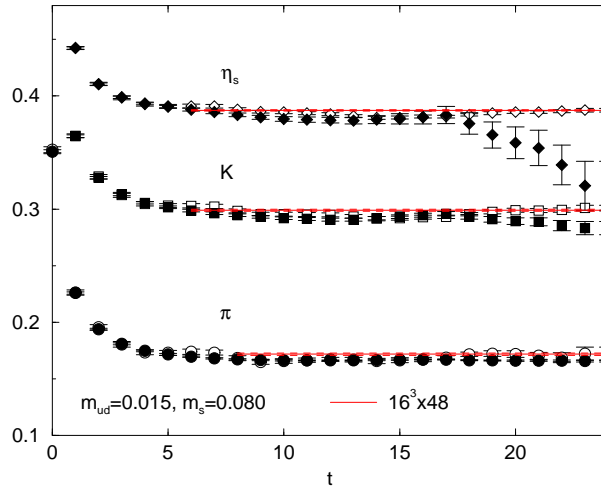


図 1: 中間子の有効質量

と表されるが、モンテカルロシミュレーションでこれと等価な手続きは、(1) ゲージ配位をロードして $D[U]$ を作り、(2) 然るべき条件のもとでクォーク伝搬関数 $D[U]^{-1}$ を必要なだけ計算し、(3) それらを組み合わせる、という作業を繰り返して得られた結果 (データ) の解析をすることである。以下の 4 つの節で、具体的な例を見ていくことにする。

計算を現実世界に近づけるためには、できるだけ大きな体積とできるだけ細かい格子間隔のもとで数値シミュレーションを実行せねばならない。また、元の連続理論のもつ対称性を良い近似で保ちつつ、現実の軽いクォーク質量を格子上で実現することも必要である。実際に行われるシミュレーションはこれらの理想から多少なりと離れざるを得ないため、複数のパラメータのもとで繰り返し計算を行い、それらの結果を外挿して最終結果とする。この外挿という手段も上記後者に分類される。

2. ハドロン質量の計算

対象とするハドロンをゲージ配位中に伝搬させ、そのふるまいから質量や崩壊定数といった基本的物理量を引き出すことができる。例えば擬スカラー中間子 M の、点 x から y への伝搬は

$$C(y, x) \equiv \text{Tr}[M(y)M(x)] = \text{Tr}[D_1^{-1}(y|x)D_2^{-1}(y|x)] \quad (3)$$

というように、Dirac 演算子の逆行列 (クォーク伝搬関数) の組み合わせで得られる (ここで D_1, D_2 は M を構成するクォークに対応する Dirac 演算子)。 $C(y, x)$ の時間方向への減衰のしかたを解析すれば、 M の質量が得られる。図 1 で図示しているのは、隣接する時間スライスごとに質量を解析した結果で、有効質量とよばれる。ここからおおよそのふるまいを読みとることができる。技術的には、データの非線形フィットと統計処理であり、質量計算自体はもはやルーチンワークである。しかしこれは数値シミュレーション全体のベンチマーク的意義を持つため、避けて通れないステップである。また統計精度を上げるためのさまざまなアイ

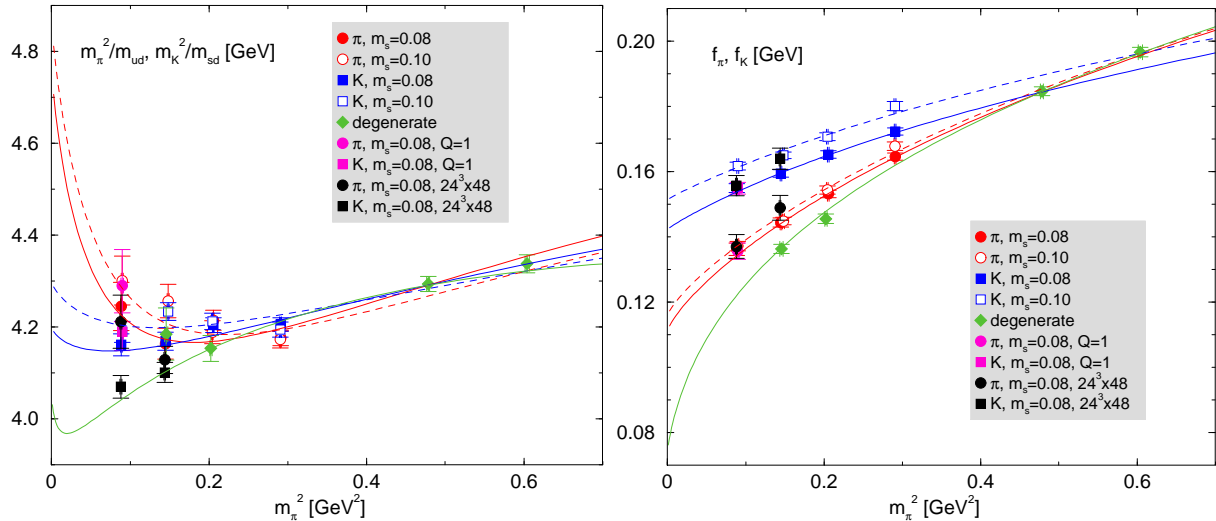


図 2: カイラル外挿の例。左：中間子質量、右：中間子崩壊定数。文献 [4] より引用。

デアを試す場ともなっている。さらには次節で紹介するように、場の理論という大きな枠組みから見た興味とも繋がっている。

3. カイラル外挿

前述したように、格子 QCD 計算で最終結果に辿りつくためには、数ステップのデータ外挿が必要である。その中で、シミュレーションに用いたクォーク質量を現実のもの、ひいてはゼロ質量にまで外挿する手続きは“カイラル外挿”と呼ばれている。u,d,s といった比較的軽いクォークによって構成される物理系では、カイラル対称性と呼ばれる対称性が(近似的に)実現し、これをもとにした有効理論が構成される。通常、シミュレーションで得られたデータのクォーク質量への依存性は単純ではなく、この有効理論からの予言をガイドとして外挿が行われる。

しかしそもそも有効理論と第一原理である QCD との整合性は自明ではない。発想を逆転させ、シミュレーションによりクォーク質量を自由に変えられる利点を利用して、データの質量依存性と有効理論のそれとを比較することで、場の理論自体の理解が深められると期待できる。その目的には、格子上で最も簡単に計算できる中間子質量と崩壊定数が最適である [3, 4]。図 2 にこれらの物理量についてカイラル外挿の例を示す。技術的には、多項式展開の形で表される有効理論からの予言にデータをフィットさせていくことである。十数個のパラメータと、独立でない数十個のデータ点による統計処理が主な作業である。

4. 非摂動くりこみ

一般にすべての物理量は相互作用に伴う発散を処理して計算される。格子計算で(自動的に)行われる発散処理を実験と比較可能なものに変換するためには、くりこみと呼ばれる補正を要する。ほぼ全ての物理計算にとって必須のステップであり、ときには最終結果の含む誤差を大きく増やす要因となるため、非摂動くりこみと呼ばれる系統的計算手法が提唱されている。

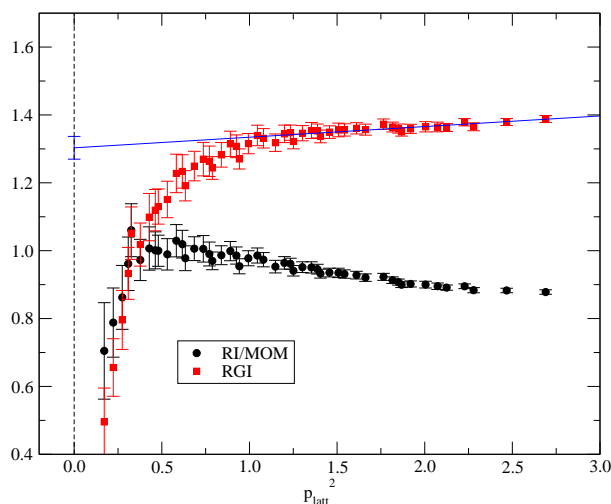


図 3: スカラー演算子の非摂動くりこみ。文献 [5] より引用。

主要部の計算と同一のゲージ配位上の運動量空間で当該演算子がうける量子補正を計算し、予め定められたくりこみ条件を適用することで、第一段階の結果が求まる。これを複数の運動量について繰り返し、カイラル外挿を行った結果として最終的なくりこみ因子を求める。

重要な応用例として、素粒子標準理論のパラメータであるクォーク質量の計算が挙げられる。クォーク質量は作用(くりこみによって不変)のなかでスカラー演算子の係数として現れるので、必要なのはこの演算子のくりこみ因子の逆数である。量子補正はフーリエ変換により得た運動量空間でのクォーク伝搬関数で演算子のバーテックスを構成して得ることができる。図 3 では各運動量配位で求められたスカラー演算子のくりこみ因子を(4-loop レベル摂動計算の結果により)目的の流儀に則ったくりこみ因子に変換し、外挿している。これをすべてのゲージ配位セットについて繰り返して、再度の外挿を経て最終結果を得る。より複雑な演算子のくりこみも、手続きとしては同様である。挿入する運動量によるバリエーション、微分を含んだ演算子への応用なども研究されている。

5. ハドロン行列要素

第 2 節で紹介した物理計算のアイデアは、より複雑な物理量を求める際にも適用される。すなわち、クォーク伝搬関数を計算したうえで、それらを組み合わせて計算したい物理量に伴う複合演算子と反応過程前後のハドロンとの間の伝搬関数を構成する。例えばハドロン A, B が演算子 O を介して反応するならば、物理計算の段階で、伝搬関数 $\langle A(t_1)O(t)B(t_2) \rangle$ をつくる (t_1, t_2, t はそれぞれの演算子の置かれた時刻を表す)。このデータを解析する段階で、各々の演算子が十分に離れた領域から行列要素 $\langle A|O|B \rangle$ を抜き出すことができれば、カイラル外挿と O のくりこみを組み合わせて最終的な結果が得られる。 $K \rightarrow \pi$ 過程における一例を文献 [6] に見ることができる。これに限らず、より複合的な計算についても様々な考慮点(格子上で構成できるか、意味のある質量領域に居るか、安定状態を抜き出せるか、統計誤差を抑えられるか、くりこみ乗数が計算可能か、手持ちのゲージ配位で十分か、等々)を検討して可能性を探り、素粒子現象論への寄与を続ける必要がある。より進んだ応用例として、 $|A\rangle, |B\rangle$ が励起されている状態である場合や多粒子状態である場合などでも研究が進められている。

6. 共通コードの開発

これまでの節で紹介してきた内容は、発展を含めても格子計算全体の話の半分でしかない。計算コストの面からみるとその割合はさらに小さくなる。冒頭の節で述べたように、格子計算はゲージ配位生成なくしては成り立たない。研究者コミュニティで過去に生成された配位を共有することで中小規模の研究が促進され、複数の研究グループが連携して大規模な計算資源を確保することができれば、過去には手の届かなかったような計算を射程に収めることができる。そしていずれの方向への研究活動にも、いまや品質の高いシミュレーションコードが求められている。

品質が高いとは、ハードウェア依存が無いが最小限であり、読み易く、不必要に難解でなく、一旦慣れてしまえば誰でも容易に保守・拡張でき、間違った使用が禁止されるように設計されており、プログラミング単位が意味を持って組み合わせられているか独立しているためにその理解を助け、マニュアルが整備されていて良い教材としても使え、かつこれらのために実行速度が犠牲にならないもの、という意味である。もしそのようなシミュレーションコードを開発し、研究者コミュニティで共有できたならば、これまで費やしていた労力を別の箇所に集中でき、共通の基盤をもつことにより研究者間の意思疎通もスムーズになることだろう。

この理想に近づくために、我々は過去のシミュレーションコードを寄せ集めるだけでなく、ソフトウェア設計という新たな観点から見直す作業を進めている。オブジェクト指向言語 C++ を用いることで、表現手段に目処が立った。しかし、個々のパーツをどう組み合わせるかは未知数であり、それを議論するために有志によって開かれる定期的会合は既に 30 回を越えている。実際のところ、問題を正しく理解し表現することが実際の開発の大半である。

似たようなとりくみが既に海外で複数なされているにも関わらず、我々はいままた新たに一からコード体系を開発している。どうしてそれらを使わせて貰うだけでは駄目なのか？我々の理解に基づく我々の表現を体得することを通じて、格子 QCD といういまや成熟した計算科学分野を再構成する必要に迫られているからだと思われる。なお、この活動の一部は url[7] に紹介されている。

参考文献

- [1] <http://www.jldg.org/>
- [2] <http://ildg.sasr.edu.au/Plone>
- [3] J. Noaki *et al.* (JLQCD and TWQCD Collaborations), Phys.Rev.Lett.101:202004,2008
- [4] J. Noaki *et al.* (JLQCD and TWQCD Collaborations), PoS(Lattice 2010)117.
- [5] J. Noaki *et al.* (JLQCD and TWQCD Collaborations), Phys.Rev.D81:034502,2010.
- [6] J. Noaki *et al.* (CP-PACS Collaborations), Phys.Rev.D68:014501,2003.
- [7] <http://www.jicfus.jp/jp/2011-3/>