

格子 QCD を用いた非摂動 QCD 計算

概要

非摂動的な取り扱いが困難である QCD を計算機を用いて摂動的に解くことができる格子 QCD の計算科学的側面の基礎を紹介する。主に使用される手法は、Hybrid Monte Carlo(HMC) 法を用いた新しい統計配位の生成であり、その際に数十万～数百万規模の疎行列の逆行列計算を必要とする。また、現在開発中の格子 QCD 共通コードの紹介をする。

キーワード

格子 QCD、HMC 法、大規模疎行列の逆行列計算

1 序

本報告で紹介する計算の目的は、特定の作用に従う統計配位の生成及び、その統計配位を利用した様々な物理量の計算である。その中で計算時間の大部分をしめるのは大規模疎行列の逆行列計算である。格子 QCD の計算機シミュレーションにおける主な計算制約は 3 つあり、格子サイズ、クォーク質量、使用する作用の物理的性質である。これら 3 つを計算資源や対象となる物理量に合わせ適切に調整することが肝心になる。

現在、開発中の格子 QCD 共通コードで使用されているプログラミング言語は C++ と MPI であり今年 (H23 年) 度中の公開予定である。このプログラムの中には現在使用されている主な作用を含み、デスクトップからスパコンまで C++ と MPI が使えればどこでも使用できることを目標としている。

2 格子 QCD

簡単は格子 QCD の導入を行う。詳しい導入は格子 QCD の入門書 [1] を見ていただきたい。連続ミンコフスキー空間で定義された場の理論をユークリッド、離散化をすることにより格子 QCD の分布関数は

$$Z(U) = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \exp \left[-S_G[U] - \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) D[U](x,y) \psi(y) \right] \quad (1)$$

とかける。ここで U はゲージ場を表す変数であり、 S_G はゲージ場による作用、第 2 項はクォークによる作用を表す。また、 D は離散化した Dirac 作用素である。ここでは S_G や D の具体的な形は紹介しないが、これらには離散化による不確定性があり (連続極限で元の理論に合流すればどんな形をしていても良い)、物理的性質の良いものほど後で紹介する計算でコストがかかるようになる。このあと、最終的に体積を有限にすることで計算機上で計算できるようになるが、クォークの取り扱いに注意する必要がある。

以下同種のクォークが 2 個存在するとして話をすすめる。クォークはフェルミオンであり、 $\bar{\psi}$ や ψ はグラスマン数であり $\psi^2 = 0$ という性質を持つ数である。このため直接計算機で扱うことが出来ず、実際に積分することにより

$$Z(U) = \int \mathcal{D}U \det(D^\dagger D) \exp [-S_G[U]] \quad (2)$$

となる。最後に擬フェルミオン場 ϕ を導入することにより

$$Z(U) = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi \exp \left[-S_G[U] - \sum_{x,y} \phi^\dagger(x) (D^\dagger[U] D[U])^{-1}(x,y) \phi(y) \right] \quad (3)$$

と変形することができ計算機で取り扱うことができるようになる。この時 $\phi^\dagger(x) (D^\dagger[U] D[U])^{-1}(x,y) \phi(y)$ の計算が最も時間のかかるところである。また、クォークが奇数個の時も同じような変形により、計算することができる。あとは、HMC 法に従い新しいゲージの統計配位 U_i を生成することで物理量 $\mathcal{O}[U]$ の期待値は

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{O}[U] \exp \left[-S_G[U] - \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) D[U](x,y) \psi(y) \right], \quad (4)$$

$$= \sum_i \mathcal{O}[U_i] \quad (5)$$

と計算できる。

3 数値計算

格子 QCD で使用される、HMC 法による統計配位の生成をまとめると

1. 統計配位の初期状態を決める。
2. 共役運動量などの変数を乱数から生成する。
3. 分子動力学に基づき時間発展させる。
4. 新しい配位を受け入れるかどうか判断し、1 に戻る

の 4 段階からなる。この中で計算量が多く重要なのは 3 段階目の分子動力学である。

分子動力学のステップでは、前章で紹介したようにクォーク作用を擬フェルミオンとして扱うため Dirac 作用素の逆行列を扱う必要がある。この Dirac 作用素は格子サイズ-カラー自由度 (3)-スピン表現 (4)-複素数 (2) 次元であり、大規模計算では実数換算で数百万次元になることもあり、計算時間の大部分を占めることになる。通常、大規模疎行列のため CG 法などの反復解法を用いて逆行列を計算するが、新しいアルゴリズムの採用、初期解の推測や単精度加速等様々な方法を用いることもある。

また同時に、Dirac 作用素自体の計算も同時に並列化を行う必要があり、Dirac 作用素の計算に伴う通信がボトルネックになる傾向がある。このため大規模計算では、格子を分割する形や方法などマシンの通信特性にあわせてチューニングする必要がある。更に、物理的性質の良い作用素を用いた計算では、作用素自体が複雑な形をしているため、作用素の計算をより最適化する必要がある。

4 共通コードに関して

現在開発中の格子 QCD 共通コードでは

- 可読性
- 拡張性
- 汎用性
- 実行性能

を柱として開発中である。最終的な目標としているのは、「格子 QCD を学んだ学生が読んで理解でき、自分の必要となるパーツを既存のコードを元に加えることができ、どんな環境でも実行ができ、そこそこの速度が出る。」ことであり、また、「各研究者が共通コー

ドを元に各拠点のスパコン用にチューンすることで大規模計算にも使用が耐えられるもの。」である。まだまだ、流動的な要素も多いが、骨格ができつつある。

5 まとめ

本報告では、格子 QCD の簡単な計算科学的側面の基礎をまとめ、現在開発中の共通コードの方向性や設計思想などを紹介した。まだ開発中のコードであり、計算結果やチューンの方法などの具体的な事は何も書かない。なるべく早い公開へ向けてがんばっていきたい。

参考文献

[1] 青木慎也、格子上の場の理論（シュプリンガー・フェアラーク東京）