

GPU コードならびに多倍長精度アルゴリズムを用いた 有限密度 QCD における相構造の研究

若山 将征（大阪大学核物理研究センター）

概要

有限温度・有限密度系における量子色力学 (QCD) の相構造は基本的な問題であるが、未だに信頼度の高い結果を得るには至っていない。格子 QCD は QCD を第一原理的に計算できるため、相構造を調査する強力な道具となる。しかし有限密度の格子 QCD は「符号問題」という難題を持ち、格子 QCD による調査は工夫が必要である。近年、カノニカル法は多倍長精度計算と組み合わせることで発展を遂げている。本研究ではカノニカル法を用いて、QCD の相構造の解明を目指す。

今年度は、数値的に簡単なセットアップの下、カノニカル法を用いて格子 QCD から実密度における情報が得られることを明らかにした。また本手法による結果が実際に信頼可能であるかどうか調査する必要がある。この調査は実密度での相構造が既に明らかになっている有効モデルによる計算が有用であり、NJL 模型において、本手法から得られた相転移点を実際のもものと一致することを確かめた。また PNJL 模型において、本手法が閉じ込め相の広い範囲で適用可能なことを示した。

1 共同研究に関する情報

1.1 共同研究を実施した拠点名

大阪大学

1.2 共同研究分野

■超大規模数値計算系応用分野

1.3 参加研究者の役割分担

1. 若山将征（大阪大学・核物理研究センター）
総括・プログラム開発・演算の実行・理論的考察
2. 保坂淳（大阪大学・核物理研究センター）
データの理論考察
3. 飯田英明（東京大学）
データ解析
4. 中村純（大阪大学・核物理研究センター）

プログラム開発・アルゴリズム

5. 伊達進（大阪大学・サイバーメディアセンター）

プログラム開発・アルゴリズム

2 研究の目的と意義

本研究の目的は量子色力学 (QCD) を第一原理から直接非摂動的に計算できる格子 QCD を用いて、有限温度・有限密度における QCD の相転移構造を理解することである。

QCD はクォークとグルーオンを構成要素とする強い相互作用の基礎理論である。QCD の摂動計算による解析は結合定数が小さい高エネルギー領域での物理現象の記述に成功している。しかしながら、結合定数が大きい領域では摂動論は適用できず、解決すべき基本的な問題

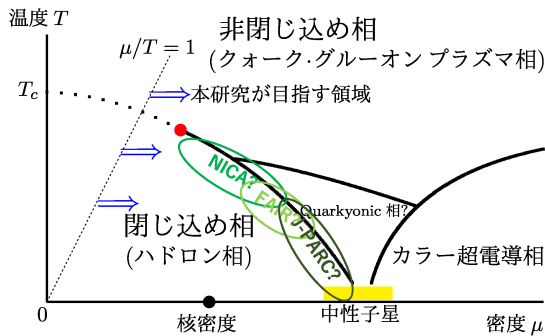


図1 QCD 相図 (予想)

が残っている。そのひとつに、有限密度 QCD における閉じ込め-非閉じ込め相転移線の問題がある。クォークとグルーオンは、我々の世界では個々には観測されず、ハドロンという粒子の内部に「閉じ込め」られる。この「閉じ込め」は、宇宙初期の超高温や、中性子星の中心部などの超高密度の極限状態では、通常の「閉じ込め」状態から「非閉じ込め」状態への相転移が実現していると考えられている (図1 参照)。

実験では、太陽質量の2倍に近い中性子星の発見や連星中性子星の合体からの重力波が観測されるなど、有限密度核物質の信頼度の高い研究の重要性が高まっている。閉じ込め-非閉じ込め相転移線の決定はこれらの物理の基盤となる問題である。また J-PARC(日本) や FAIR(ドイツ)、NICA(ロシア) では、核密度からその数倍の密度までの探索 (図1 参照) の計画・建設が進められており、理論と実験双方からの探求が今後も期待される領域である。

一方、有限密度格子 QCD による第一原理計算は摂動論によらないため、閉じ込め-非閉じ込め相転移線の問題を究明するための強力な道具となり得る。しかし有限密度系においては、格子 QCD には「符号問題」と呼ばれる困難が存在しする。格子 QCD では、経路積分はモンテカルロ法を用いて実行されるが、有限密度系

ではモンテカルロ法を行う際に確率解釈をしている因子が複素数となるため、モンテカルロ法が破綻してしまう。これが「符号問題」である。

有限密度格子 QCD の計算は 1984 年に中村によって最初の挑戦が行われた。その後、再重み付け法やテイラー展開法、カノニカル法等の様々な方法が提唱された。しかし再重み付け法やテイラー展開法は高温・低密度の μ/T が小さい領域にのみ適用に限られ、相転移線が存在すると示唆されている低温・高密度までは到達できていない (図1 参照)。ここで、 T は温度、 μ は化学ポテンシャルである。

一方、カノニカル法は純虚数化学ポテンシャル領域では「符号問題」が存在しないことを利用する。純虚数領域で計算したグランドカノニカル分配関数をフーリエ変換することで、化学ポテンシャルに依らないカノニカル分配関数 Z_n が求められる。カノニカル法では、一旦 Z_n が求めれば、任意の化学ポテンシャルでのグランドカノニカル分配関数 Z_{GC} を得ることが可能である。しかしカノニカル分配関数は粒子数 n が大きくなると、フーリエ変換の振動が激しくなることが知られている。そのため、粒子数 n が大きいところで有意な値を得るためには、膨大な統計量が必要となるため、長年、カノニカル法は実用的ではないと考えられていた。しかし近年、十進法で数百桁の精度を保証する多倍長計算を行うことで、実用に耐えうる統計量にまで抑えられることが発見された。

今日の有限密度系における格子 QCD の大規模シミュレーションは、高統計量に加えて、高精度計算、及び、格子化された4次元時空の分割による大規模並列計算を必要とする段階に来ており、最新の HPC の性能を十分に発揮させることで実現可能となりつつある。

3 当拠点公募型研究として実施した意義

本研究の格子 QCD 計算では、格子サイズは最大で $24^3 \times 24$ であるため、モンテカルロ法を用いて 1.2×10^7 重積分の計算を統計量だけ実行する必要がある。さらに、有限温度・有限密度での計算では格子サイズは $24^3 \times 24$ よりも小さくなるが、温度・密度を変化させる数だけ計算量は増加する。このような大規模数値計算を実施するには、HPC を利用した本制度が必要不可欠である。

特に、本研究では GPU-CUDA プログラムを使用するため、大阪大学の GPU を搭載した OCTOPUS での計算が有用である。本プログラムは既に完成しており、OCTOPUS 上での利用実績もある。また、本プログラムは GPU 上で 4 次元時空全ての点での並列化、つまり、 $24^3 \times 24 (= 331776)$ 並列が可能であり、大規模並列計算を得意とする GPU 計算機を利用することが望ましいと判断した。

4 前年度までに得られた研究成果の概要

5 今年度の研究成果の詳細

2019 年度はまず、格子サイズが $16^3 \times 4$ の下、クォークが比較的重い質量領域 (π 中間子と ρ 中間子の質量比 $m_\pi/m_\rho = 0.80$) での格子 QCD で相転移点の見積もりを行った研究を論文にまとめた (研究業績: 学術論文 PLB793)。

カノニカル法を用いて有限密度中での相転移点を見積もる手順の概略は図 2 に示した。まず、格子 QCD 計算から純虚数化学ポテンシャルでのクォーク数密度 $n_q(i\mu_{qI})$ を求め、純虚数化学ポテンシャルでのグランドカノニカル分配関数 $Z_{GC}(i\mu_{qI})$ を得る。次にフーリエ変換

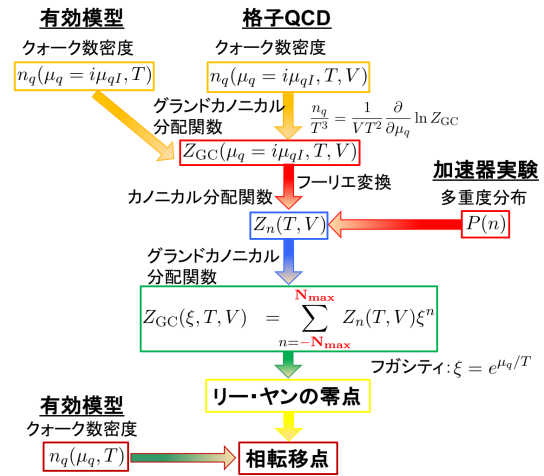


図 2 カノニカル法を用いた格子 QCD および有効模型での研究手順。最も高い精度を要するのは Z_n を求めるためのフーリエ変換の箇所であり、格子 QCD の研究、有効模型の研究ともに多倍長精度計算を行う必要がある。

を行って $Z_{GC}(i\mu_{qI})$ からカノニカル分配関数 Z_n を導出するのだが、 n が大きくなるとフーリエ変換の振動が激しくなり、数値の桁落ちが発生してしまう。そこで本研究では、FMLIB パッケージを用いて約 5000 桁の多倍長精度でフーリエ変換を行なった。 Z_n が求められれば任意の化学ポテンシャルでの Z_{GC} を構築することができる。その後、 Z_{GC} の零点 (リー・ヤンの零点) を調査することで、実密度での相転移点の情報が得られる。ここで、リー・ヤンの零点は高次方程式の解を求める必要があり、100–300 桁の多倍長精度で計算を行った。

図 3 は格子 QCD 計算から得られたリー・ヤンの零点分布の N_{max} 依存性の結果である。ここで、リー・ヤンの零点分布は $\exp(\mu_B/T)$ で定義されるフガシテイ ξ_B の複素平面上でプロットし、 N_{max} はカノニカル分配関数 Z_n に対する粒子数 n の上限値を表す。QCD の相転移点は、 N_{max} が無限大の極限でリー・ヤンの零点が正の実軸を横切る点から特定できる。

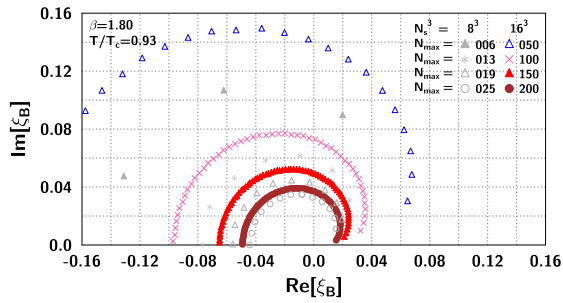


図3 格子 QCD 計算から得られたリー・ヤンの零点分布の N_{\max} 依存性。

$T/T_c = 0.93$ の温度 (T_c はゼロ密度での擬相転移温度) では、 N_{\max} が増加するにつれてリー・ヤンの零点の右端点が正の実軸に近づくことが見て取れる。零点の右端点を線形または 2 次関数で実軸まで外挿することで相転移点の場所を見積もると、 $T/T_c = 0.93$ における相転移の場所は $\mu_B/T \sim 5-6$ 付近にあることがわかった。

しかし今回、相転移点の見積もりはリー・ヤンの零点の右端点を外挿する関数に強く依存し、より正確に見積もりを行うためには適切な外挿方法を調査する必要があることが分かった。格子 QCD 計算では「符号問題」があるため、カノニカル法から得られた相転移点と実際の相転移点を比較検討することは困難である。これを行うためには、実際に相転移点の場所が既に明らかになっている有効模型を用いて本手法の妥当性に関する計算を行うことが有用である。

そこで今年度は、QCD に基づく有効模型である南部・ヨナ・ラシニオ (NJL) 模型を用いてカノニカル法の妥当性に関する計算を行った研究を論文にまとめた (研究業績: 学術論文 PLB795)。

カノニカル法を用いて有限密度中での相転移点を見積もる手順の概略は図 2 に示した。格子 QCD 計算と有効模型での計算の場合との違

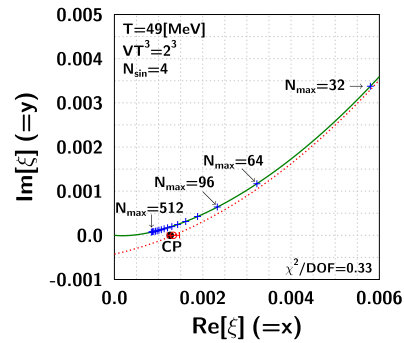


図4 NJL 模型の計算から得られたリー・ヤンの零点の右端点の N_{\max} 依存性。黒丸 (CP) は NJL 模型における実際の相転移点を表す。

いは初めの純虚数化学ポテンシャルでのクォーク数密度 $n_q(i\mu_{qI})$ を求める方法である。格子 QCD では、モンテカルロ法を用いて $n_q(i\mu_{qI})$ を計算するが、NJL 模型では、平均場近似を行い、ギャップ方程式を数値的に解くことによって求める。有効模型の計算におけるその後の手順は格子 QCD の場合と同様であり、約 5000 桁の多倍長精度でフーリエ変換を行い、約 300 桁の多倍長精度でリー・ヤンの零点を求めた。

図 4 は NJL 模型の計算から得られたリー・ヤンの零点の右端点の N_{\max} 依存性を示した。十分に大きい体積の下、リー・ヤンの零点の右端点 (バツ印) を外挿し (実線)、適切な差し引きを行うことで (破線)、NJL 模型における実際の相転移点 (黒丸) が正しく得られることがわかった。

今年度はさらに、より QCD の性質に近いポリャコフ型 NJL (PNJL) 模型での計算を行い、カノニカル法の妥当性についての調査を行った (学術論文 Phys. Rev. D に投稿中)。

図 2 における初めの $n_q(i\mu_{qI})$ を計算するには、NJL 模型では 1 つのギャップ方程式を解くだけで良かったが、PNJL 模型では 3 元連立

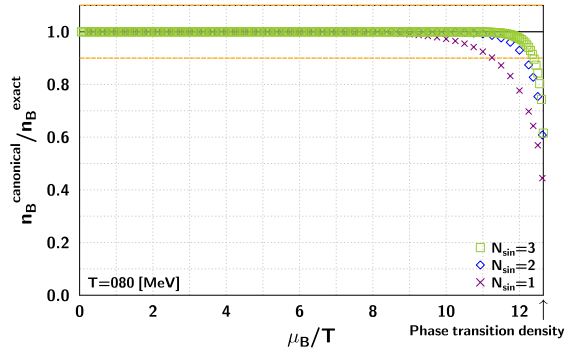


図5 PNJL 模型の計算でカノニカル法を用いて得られたバリオン数密度 $n_B^{\text{canonical}}$ と実際のバリオン数密度 n_B^{exact} の比の N_{sin} 依存性。

ギャップ方程式を解く必要があり、計算量が大幅に増大してしまう。本研究では PNJL 模型の純虚数化学ポテンシャルでのコード開発から始め、ガウス求積法の適用や予めギャップ方程式の解を見積もる等のチューニングを行うことで計算量を減らした。 $n_q(i\mu_{qI})$ を計算した後は NJL 模型と同様、約 5000 桁の多倍長精度でフーリエ変換を行い、 Z_n から Z_{GC} を構築した。その後、約 300 桁の多倍長精度でバリオン数密度 n_B を求めた。

図5は PNJL 模型の計算でカノニカル法を用いて得られたバリオン数密度 $n_B^{\text{canonical}}$ と実際のバリオン数密度 n_B^{exact} の比の N_{sin} 依存性を示した結果である。ここで N_{sin} は、カノニカル法で n が大きい領域でも Z_n が精度良く求められるよう、 $n_q(i\mu_{qI})$ を有限項 (N_{sin} 項) の \sin 関数で近似したときに現れる量であり、理想的には N_{sin} は無限大に取るべき量である。しかし格子 QCD 計算では N_{sin} を無限大に取ることは不可能であるため、有効模型を用いて、有限の N_{sin} においてカノニカル法がどこまで適用可能であるか調査を行なった。図5より、 N_{sin} が大きくなるにつれて、 $n_B^{\text{canonical}}$

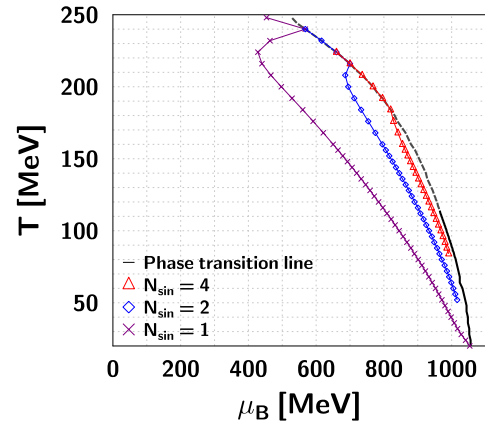


図6 PNJL 模型での μ_B - T 平面におけるカノニカル法の適用限界の N_{sin} 依存性。黒色実線と破線はそれぞれ PNJL 模型における実際の1次相転移線とクロスオーバーの線を表す。バツ印、ひし形、三角形でそれぞれ繋げた線より左側がカノニカル法から得られた $n_B^{\text{canonical}}$ と実際の n_B^{exact} とのズレが10%未満となる領域であり、カノニカル法の適用可能領域である。

の値は n_B^{exact} の値に近づくことがわかる。また、 $n_B^{\text{canonical}}$ の n_B^{exact} からのズレが10%未満となる領域をカノニカル法が適用可能な領域と定義すると、 $T = 80\text{MeV}$ での適用限界は $N_{\text{sin}} = 1, 2, 3$ ではそれぞれ $\mu_B/T = 11.3, 12.1, 12.4$ となった。

温度を変えて、それぞれの N_{sin} に対してカノニカル法の適用限界を調査した結果を図6に示した。図6のバツ印、ひし形、三角形でそれぞれ繋げた線より左側が $n_B^{\text{canonical}}$ と n_B^{exact} とのズレが10%未満となる領域であり、カノニカル法の適用可能領域である。これにより、低温領域では、 $N_{\text{sin}} = 1$ でも相転移が起こるすぐ近くの高密度領域までカノニカル法が適用できることがわかった。また、 $N_{\text{sin}} = 4$ まであれば、閉じ込め相のほとんど全ての領域でカノニカル法が適用可能であることがわかった。

2019年度の最後に、これまでの数値的に簡単なセットアップでの格子QCD計算と有効模型(NJL模型とPNJL模型)の計算を踏まえ、 $m_\pi/m_\rho = 0.43$ とより現実に近い設定での格子QCD計算を行った。当初予定していた空間方向の格子サイズ $N_s^3 = 32^3$ では調査に時間がかかり過ぎることが判明したが、有効模型の計算により有限体積効果は5 fm程度あれば十分に抑えられることが分かったため、 $N_s^3 = 24^3$ に変更して計算を進めた。

有限温度の格子QCD計算では、温度 T は時間方向の格子サイズ N_t と格子間隔 a を用いて $T = 1/(N_t a)$ から求まる。 N_t は非連続的にしか変化させられないので、今回は a を変化させて温度依存性の調査を行う。 a の変化はゼロ温度での m_π/m_ρ を一定に保ちつつ格子パラメータ (β, κ) を変化させることで得られるが、 $m_\pi/m_\rho = 0.43$ となる (β, κ) のパラメータ線は知られていない。そこで本研究ではまず、格子サイズが $N_s^3 \times N_t = 24^3 \times 24$ のゼロ温度において、 $m_\pi/m_\rho = 0.43$ となる (β, κ) のパラメータ線の調査を行なった。

次に、得られたパラメータ線上で $N_t = 4$ の有限温度の計算を行うことにより、ゼロ密度での擬相転移温度 T_c の値を求めた。そして、 $N_t = 4$ について閉じ込め・非閉じ込め相それぞれに対する温度(計2点)でのクォーク数密度の計算までを終えた。しかし $m_\pi/m_\rho = 0.43$ かつ $N_t = 4$ の環境下で T_c 付近の温度を調査するには、格子間隔 a が大きくなり過ぎることがわかった。

そこで、 $N_t = 6$ についても計算を行い、有限格子間隔依存性についても議論することにした。 $N_t = 6$ の計算については、 (β, κ) のパラメータ線の調査が終わり、まだ若干の計算が必要であるが T_c のおおよその値まで求まった。そしてクォーク数密度の計算については、 T_c 以

上と T_c 付近の温度(計2点)に対して終えた。 T_c 以下の温度に対しては、格子間隔 a が大きくなり過ぎるために $N_t = 6$ では信頼度の高い結果が得られないことがわかった。そのため、 $T = 1/(N_t a)$ の関係より、 a はそのままで N_t を大きくして $N_t = 8$ に取ることにより調査を進めることにした。 T_c 以下の $N_t = 8$ の計算は2020年度に持ち越した。

6 今年度の進捗状況と今後の展望

数値的に簡単なセットアップでの格子QCD計算の研究を仕上げることに、有効模型(NJL模型とPNJL模型)の計算による調査は計画通りに進めることができた。特に有効模型の計算からは、より現実世界に近い格子QCD計算や今後の研究を進める上での重要な知見を得ることができた。

より現実世界に近い格子QCD計算の進捗状況については以下の通りである。有効模型の計算結果により、当初予定していた空間格子サイズ $N_s^3 = 32^3$ ではなく $N_s^3 = 24^3$ でも十分に有限格子サイズ依存性を取り除けることが分かり、計算時間を抑えることができた。またPNJL模型の計算から、 $N_{\text{sin}} = 1-4$ 程度でもカノニカル法を用いて閉じ込め相のほとんどの領域を議論できることが分かったので、統計量は想定よりも少なく済むことが判明した。一方で、格子QCD計算を進めていくうちに、有限格子間隔の問題に直面し、時間方向の格子サイズを $N_t = 4$ から $N_t = 6, 8$ へと大きくする必要が出てきて、多くの計算リソースを費やすことになり、一部の計算は2020年度に持ち越すことになった。

今後の展望についても、有効模型の計算による知見から若干の修正を行うことにした。当初はリー・ヤンの零点の振る舞いを調べることで、現実世界に近い格子QCD計算からQCD

の相転移線を決定するのが目的であった。しかしながら、NJL 模型の計算により、それを安全に行うには $N_{\text{sin}} \geq 4$ の高次の近似項まで必要とし、格子 QCD 計算においても多くの統計量が必要となる。一方で、PNJL 模型の計算では、相転移線には届かないまでも、 $N_{\text{sin}} = 1-4$ 程度あればカノニカル法を用いて閉じ込め相のほとんどの領域を議論できることが分かった。

そこで、QCD の相転移線を決定する研究を行う前に、より計算量が少なく済む、格子 QCD 計算から有限温度・有限密度系における状態方程式のインプットを与える研究を優先させることにした。(2020 年度の継続課題名の変更はこれが理由である。) 第一原理計算である格子 QCD から状態方程式のインプットを与えることができれば、中性子星の内部構造の調査に繋げることができ、宇宙・天体物理学の発展が期待される。また、これまではクォーク数密度の有限密度依存性のみを焦点を当てて研究を行ってきたが、多角的に状態方程式への示唆を与えるために、真空期待値やエントロピー等の物理量の検討も今後進めていく。

7 研究業績一覧 (発表予定も含む)

学術論文 (査読あり)

- M. Wakayama, A. Hosaka, “Search of QCD phase transition points in the canonical approach of the NJL model,” *Phys. Lett.* **B795** 548-553, 3 July, 2019.
- M. Wakayama, V. G. Bornyakov, D. L. Boyda, V. A. Goy, H. Iida, A. V. Molochkov, A. Nakamura, V. I. Zakharov, “Lee-Yang zeros in lattice QCD for searching phase transition points,” *Phys. Lett.* **B793** 227-233, 10 May, 2019.

国際会議プロシーディングス (査読あり)

国際会議発表 (査読なし)

- (招待セミナー講演) M. Wakayama, “The canonical approach in the PNJL models toward an understanding of QCD at finite density,” Theory Seminar, Sun Moon University, 15 January, 2020.
- (招待講演) M. Wakayama, “The canonical approach in the NJL and PNJL models toward an understanding of QCD at finite density,” Different approaches to the hadron and nuclear physics from the high density and temperature perspectives, Inha University, 28 October, 2019.
- (招待講演) M. Wakayama, “Search of QCD phase transitions at finite density with the canonical approach,” Heavy Ion Meeting 2019-10, APCTP, 19 October, 2019.
- (招待講演) A. Nakamura, “Lattice QCD at finite density,” The Future of lattice-QCD studies in Korea, Pukyong National University, 6 September, 2019.
- (招待講演) M. Wakayama, “Lee-Yang zeros analysis of effective theories toward lattice QCD,” The Future of lattice-QCD studies in Korea, Pukyong National University, 6 September, 2019.
- (招待講演) M. Wakayama, “Lattice QCD calculations at the dense matters using the canonical approach,” Physics on Exotic Nuclei, Dense Matters, and Hadrons in the Universe, Pukyong National University, 14 August, 2019.

国内会議発表 (査読なし)

- 若山将征、「格子 QCD による有限温度・有限密度 QCD 相図の決定」、2019 年度 RCNP スパコン共同利用成果報告会、大阪大学、2020 年 3 月 25 日 (オンライン開催).
- 若山将征、Seung-il Nam、保坂淳、「カノニカル法を用いた PNJL 模型による QCD 相図の研究」、日本物理学会第 75 回年次大会、名古屋大学、2020 年 3 月 17 日 (オンライン開催).
- 若山将征、中村純、飯田英明、「カノニカル法による QCD 相図の解明に向けた格子 QCD と NJL 模型による計算」、平成 30 年度 SX-ACE/OCTOPUS@RCNP 成果報告会、大阪大学、2019 年 4 月 12 日.

その他 (特許, プレス発表, 著書等)

- T. Nakano, M. Fukuda, H. Kanda, N. Aoi, A. Sato, M. Yosoi, S. Umehara, H. Noumi, A. Hosaka, “The Research Center for Nuclear Physics at Osaka University,” Nuclear Physics News (Nuclear Physics European Collaboration Committee), **Vol. 29, No. 4**, 4-9, 20 December, 2019.
- M. Wakayama, “Lee-Yang zeros for the investigation of phase transition points by using OCTOPUS,” RCNP Annual Report 2018, **Highlights of Super Computer**, 1-7, 26 April, 2019.
- M. Wakayama, S-i. Nam, A. Hosaka, “The use of the canonical approach in effective models of QCD,” [arXiv:2003.13556 [hep-ph]], (学術論文 Phys. Rev. D に投稿中).