

GPU コードならびに多倍長精度アルゴリズムを用いた高密度 QCD 物質の研究

若山 将征 (国土館大学)

概要

有限温度・有限密度系における量子色力学 (QCD) の相図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、QCD 相図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、有限温度・有限密度における QCD 物質の性質の解明を目指す。

今年度は、現実世界に近いセットアップの下で、カノニカル法を用いた格子 QCD による計算を行った。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模型や 2 カラー格子 QCD による計算が有用であり、NJL 模型や PNJL 模型による解析に続き、2 カラー格子 QCD による調査の準備を行った。

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 (国土館大学・理工学部)
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. 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
4. 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

5. Nam, Seung-il (韓国・釜慶大学・物理学科)

理論的考察・プログラム開発

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 物質の性質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

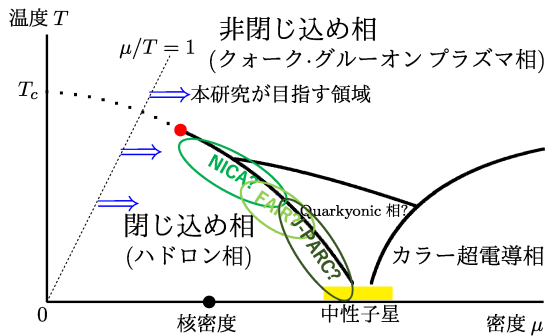


図1 QCD 相図 (予想)

摂動論は適用できず、解決すべき基本的な問題が残っている。そのひとつに、有限密度系での QCD 相図における問題がある。

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。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、有限密度系での QCD 相図における問題は理論と実験双方からの探求が今後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、有限密度における QCD 物質の性質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 ($\mu/T < 1$) にのみ適用が限られ、閉じ込め相や相転移構造が広がっている低温・高密度領域に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 ($\mu = i\mu_{Iq}$) (μ_{qI} は実数) 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。ところが、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。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、さらに、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

2019 年度までに、我々は格子サイズが $16^3 \times 4$ 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 (査読あり学術論文: M. Wakayama *et al.*, Phys. Lett. B793, 227 (2019))。

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。次にフーリエ変換を行って $Z_{GC}(i\mu_{qI})$ からカノニカル分配関数 Z_n

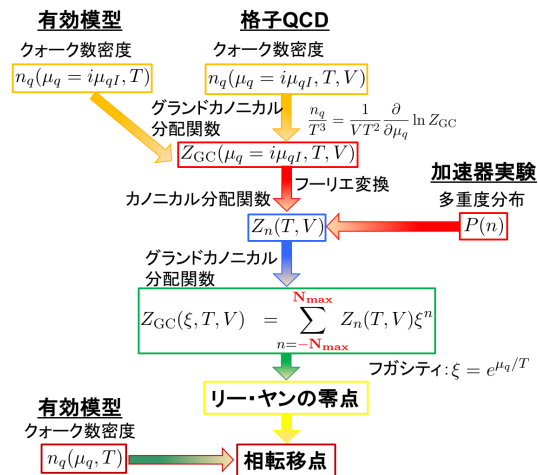


図 2 カノニカル法を用いた格子 QCD および有効模型での研究手順。最も高い精度を要するのは Z_n を求めるためのフーリエ変換の箇所であり、格子 QCD の研究、有効模型の研究ともに多倍長精度計算を行う必要がある。

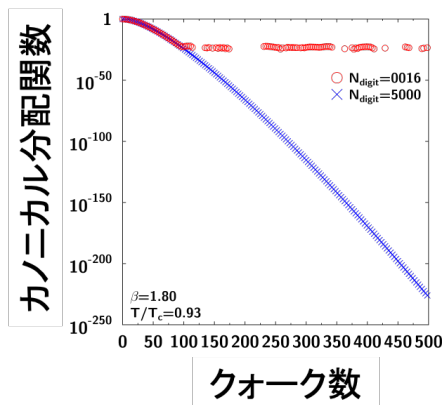


図 3 カノニカル分配関数 Z_n のクォーク数 n 依存性。赤丸印は倍精度、青バツ印は 5000 桁の多倍長精度による計算結果。

を導出するが、 n が大きくなるとフーリエ変換の振動が激しくなり、図 3 に示すように、通常の倍精度計算では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。最終的に、格子 QCD 計算の結果から、 $T/T_c = 0.93$ の温度 (T_c はゼロ密度での擬相転移温度) 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。

そこで次に、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 (査読あり学術論文: M. Wakayama and A. Hosaka, Phys. Lett. B795, 548 (2019))。

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 $n_q(i\mu_q I)$ 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 $n_q(i\mu_q I)$ 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。

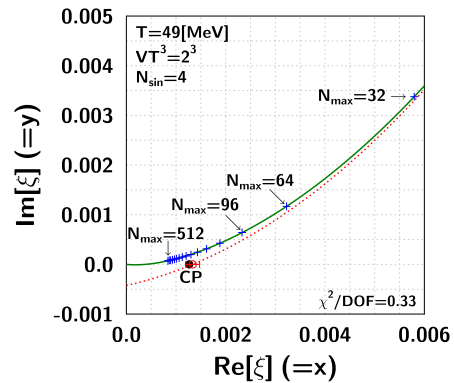


図 4 NJL 模型の計算から得られたリー・ヤンの零点の右端点の N_{\max} 依存性。黒丸印 (CP) は NJL 模型における実際の相転移点を表す。

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 (黒丸印) が正しく得られることがわかった。

5 今年度の研究成果の詳細

今年度はまず、前年度に引き続き、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論文にまとめた (査読あり学術論文: M. Wakayama *et al.*, Phys. Rev. D102, 034035 (2020))。

図 2 における初めの $n_q(i\mu_q I)$ 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

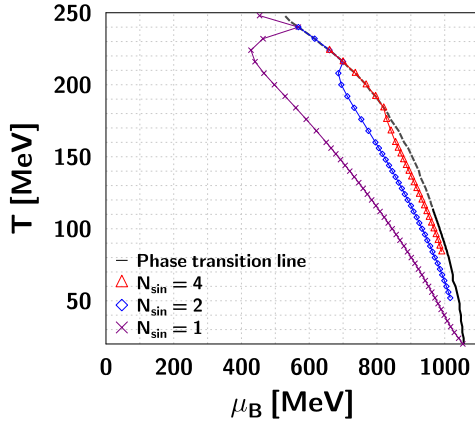


図5 PNJL 模型での μ_B - T 平面におけるカノニカル法の適用限界の N_{sin} 依存性。黒色実線と破線はそれぞれ PNJL 模型における実際の 1 次相転移線とクロスオーバーの線を表す。バツ印、ひし形、三角形でそれぞれ繋げた線より左側がカノニカル法から得られた $n_B^{\text{canonical}}$ と実際の n_B^{exact} とのズレが 10% 未満となる領域であり、カノニカル法の適用可能領域である。

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模型の計算でパラメータ 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示した結果である。 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う必要がある。図5で

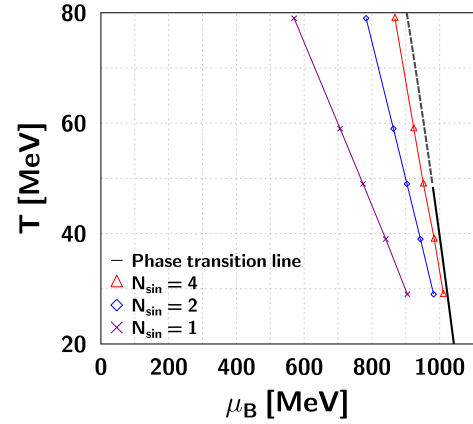


図6 NJL 模型での μ_B - T 平面におけるカノニカル法の適用限界の N_{sin} 依存性。黒色実線と破線はそれぞれ NJL 模型における実際の 1 次相転移線とクロスオーバーの線を表す。その他、図5と同様。

は、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した。図5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。

N_{sin} 依存性に対する模型依存性を調査するために、PNJL 模型と同様の調査を NJL 模型においても実施した。その結果を図6に示す。図6より、NJL 模型においても PNJL 模型と同様、 $N_{\text{sin}} = 1$ でも有限密度の広い範囲でカノニカル法が適用でき、 $N_{\text{sin}} = 4$ 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る。従って、少

なくとも NJL 模型と PNJL 模型とでは、 N_{sin} 依存性の模型依存性は小さいことがわかった。

2020 年度は次に、2 カラー ($N_c = 2$) の格子 QCD を用いてカノニカル法の妥当性の調査を進めた。これまでの有効模型によるカノニカル法の妥当性の調査では、有効模型は平均場近似を行っているために、QCD の非摂動効果を正しく取り入れられていない可能性がある。一方、2 カラー格子 QCD は通常の 3 カラー ($N_c = 3$) の格子 QCD と同様、2 カラー QCD を非摂動的に直接数値計算できる手法である。また、2 カラー格子 QCD では、理論が持つ対称性の特殊性により、有限温度・有限密度においても「符号問題」が存在しない。そのため、カノニカル法から得られた結果と実際の有限密度での結果を比較検討することが可能である。

この調査を行うためには、 $N_c = 2$ の格子 QCD コードを作る必要があり、まずはそのコードの作成に取り掛かった。ここで、 $N_c = 2, 3$ だけでなく、 N_c を一般化したコードは他の研究にも応用が可能である。そのため、我々は複素ヤコビ法やグラム・シュミットの直交化法による QR 分解などを用いて、 N_c を一般化した格子 QCD のコードを完成させた。また、 $N_c = 4$ 以上の場合には正しい計算結果が得られているかどうかを先行研究と比較して確かめる必要があるが、本研究を終えた後に、格子 QCD コードを N_c に対して一般化する手法を計算機科学等の分野で報告したい。また、それと同時に、作成したコードは中村氏が運営している Web ページ (<https://nio-mon.riise.hiroshima-u.ac.jp/LTK/>) にて公開することも検討している。 $N_c = 2$ の場合については、我々のコードによる結果が先行研究の結果と一致することを確認したので、次年度以降、2 カラー格子 QCD コードを用いたカノニカル法の妥当性の本格的な調査が可能である。

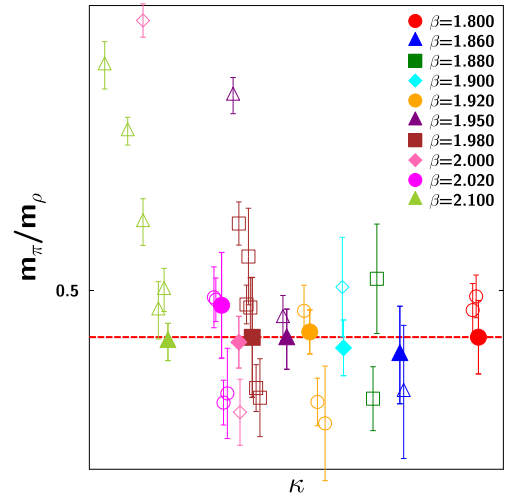


図 7 格子 QCD 計算によるゼロ温度における m_π/m_ρ の格子パラメータ (β, κ) 依存性。

通常の 3 カラーの格子 QCD の研究については、前年度に引き続き、より現実世界に近いセットアップでの計算を行った。具体的には、空間格子サイズを前回の $N_s^3 = 16$ から $N_s^3 = 24$ に大きくし、 π 中間子と ρ 中間子の質量比を $m_\pi/m_\rho = 0.80$ から $m_\pi/m_\rho = 0.46$ まで小さくし、実際の質量比 ($m_\pi/m_\rho = 0.17$) に近づけた。空間格子サイズの大きさが $N_s^3 = 24$ で物理的に十分であることは、有効模型 (NJL 模型と PNJL 模型) による調査の成果である。

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、 $m_\pi/m_\rho = 0.46$ 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、 $m_\pi/m_\rho = 0.46$ となる (β, κ) のパラメータ線の調査を行なった。ゼロ温度でのゲージ配位の生成は実時間、計算機時間ともに最も時間がかかる工程であるが、前年度の計算と合わせて、図 7 に示すように、9 点でのパラメータのチューニングを終えることができた。

次に、得られたパラメータ線上で $N_t = 6, 12$ の有限温度の計算を進めた。しかし、当初予定していた $N_t = 12$ での有限温度では、計算で得られるクォーク数密度の絶対値が統計誤差と比べて小さいため、有意な結果を得るためには統計量を多くとる必要があることがわかった。限られた計算機資源ではその統計量を溜めることは難しいと判断し、実現可能な計算規模である $N_t = 6, 8$ の有限温度の計算へと計画を変更した。

有限温度のゲージ配位については、 $N_t = 6$ の計算の擬相転移温度 T_c 以上と T_c 付近の温度、 $N_t = 8$ の計算の T_c 以下の温度ともに計算を終えた。また、それら全てのゲージ配位に対するクォーク数密度の格子 QCD 計算も利用可能計算機資源の 3% を残して完了した。現在、結果を解析中であり、その後、論文にまとめる。

6 今年度の進捗状況と今後の展望

PNJL 模型の計算によるカノニカル法の妥当性の調査については、NJL 模型の追計算による模型依存性による調査を加えることで、計画通りに論文にまとめることができた。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。

2 カラー格子 QCD によるカノニカル法の妥当性の調査については、今年度中にカラー N_c を一般化した格子 QCD のコードの開発が、 $N_c = 4$ 以上の計算結果の先行研究との比較を除いて、完了させることができた。

より現実世界に近いセットアップでの格子 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、 $N_s^3 = 24^3$ 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、時間方向の格子サイズが $N_t = 6$ の他に当初予定していた $N_t = 12$ での有限温度の計算は多くの計算リソースを費やすことがわかったため、 $N_t = 6, 8$ での有限温度の計算へと変更することになった。 $N_t = 6$ の計算の擬相転移温度 T_c 以上と T_c 付近の温度、 $N_t = 8$ の計算の T_c 以下の温度ともに、ゲージ配位の生成、クォーク数密度の計算を終え、 N_t の変更以外は概ね計画通りであった。また、最も実時間のかかるゼロ温度でクォーク質量が一定となる格子パラメータの組を決定する計算が完了したことは大きい。

今後の展望については、まず、通常の 3 カラーの格子 QCD 計算の結果を解析し、論文にまとめる。また、2 カラー格子 QCD 計算によるカノニカル法の妥当性の調査を、今年度開発したコードを用いて本格的に始める。その研究を終えた後に、格子 QCD コードをカラーに対して一般化する手法を計算機科学等の分野で報告し、コードを Web 上に公開する予定である。

また、今年度、有効模型を用いた高温・高密度でのカノニカル法の妥当性の調査、および、数密度だけでなく真空期待値やエントロピー等の物理量に対する密度依存性の調査は今後の課題として残した。さらに、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については、今年度の格

子 QCD 計算の解析を終えた後に進めていく。
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。

7 研究業績一覧（発表予定も含む）

学術論文（査読あり）

1. 若山将征, Seung-il Nam(+), 保坂淳, “Use of the canonical approach in effective models of QCD,” Phys. Rev. **D102**, pp. 034035-1 - 034035-9 (2020).

国際会議プロシーディングス（査読あり）

なし

国際会議発表（査読なし）

1. Seung-il Nam, “QCD phase diagram via the canonical method in the PNJL model with complex quark chemical potential”, Korea Physical Society (KPS) spring meeting, オンライン、2020 年 7 月 (口頭発表).
2. (招待講演) Seung-il Nam, “QCD in medium”, Nuclear Physics School 2020, オンライン、2020 年 6 月 (口頭発表).

国内会議発表（査読なし）

1. 若山将征, 「カノニカル法を用いた格子 QCD による有限温度・有限密度 QCD の研究」、2020 年度 RCNP スパコン共同利用成果報告会、大阪大学&オンライン、2021 年 3 月 (口頭発表).

公開したライブラリ等

なし

その他（特許, プレス発表, 著書等）

なし