



Title	SXにおける格子ゲージ場のモンテカルロシミュレーション
Author(s)	宮村, 修
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1988, 69, p. 21-30
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65774
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

S X における格子ゲージ場のモンテカルロシミュレーション

大阪大学 基礎工学部 数理教室 宮村 修

1. はじめに

格子ゲージ場のモンテカルロシミュレーションは格子化された時空上に定義された強い相互作用を持つゲージ場の系を数値的にシミュレートすることにより、その非摂動的様相の解析を行うものである。格子ゲージ場の理論的構成は K. Wilson により 1974 年に提出されたが、1980 年代に入り、M. Creutz が SU_2 ゲージ場におけるモンテカルロシミュレーションの有効性を示している^{1,2)}、世界中で活発な研究が行なわれてきている。現在、この手法を用いて、クォーク・グルーオン系の力学である Quantum Chromo Dynamics (QCD) の非摂動的様相、核子質量の計算やクォーク・ハドロン相転移の有無等の問題、の解析が大規模なシミュレーション (CPU 時間にして数百時間から千時間におよぶ) により行なわれつつあり、素粒子・原子核物理の一分野として定着し、又今後も計算機の発展とともにさらに活発化するものと考えられている^{3,4)}。

格子ゲージ場のモンテカルロシミュレーションにおいては数値計算上の問題として、

(i) 多量の変数 ($10^{4\sim6}$ 個) により決定されるゲージ場のストカスティックな更新

(ii) クォーク等のフェルミオン場を含んだ場合の大行列 ($10^6 \times 10^6$) の逆行列演算

を高速で実行することが決定的である。本文では筆者等が作成した SU_2 及び SU_3 ゲージ系シミュレーションコードの概要と、(i) に関する SX におけるベクトル化について報告する。

本文の構成は以下の様になっている。

2. 2-1 格子ゲージ場と作用 S

2-2 ゲージ場の更新手法

2-3 SX におけるシミュレーションコード例の概要

3. 3-1 色わけ法による更新のベクトル化

3-2 乱数のベクトル化による高度ベクトル化

4. まとめと今後の展望

2. 格子ゲージ場シミュレーションの概要

ここでは格子ゲージ場シミュレーションについてその基本要素であるゲージ場とシミュレーションコードの概要について述べる。詳しくは参考文献 4), 5) を見て頂きたい。

2-1 格子ゲージ場と作用S

格子ゲージ場では格子化された時空上に定義された群Gの元になっている場を考える。以下簡単のために格子化時空の大きさを L^4 とし、群Gとして SU_N を考えよう。K. Wilsonによる定式化ではゲージ場は隣接格子点を結ぶリンク上の SU_N 行列である。ある格子点 $m (= (n_x, n_y, n_z, n_t))$ からは4つの異なった隣接格子点へのリンクがあるから全時空で $4 \times L^4$ の SU_N 行列がひとつの場の配位となる。以下リンク上のゲージ場のことをリンク変数と呼ぶが今の場合これは

$$U_\mu(n) \in SU_N, \quad n(\text{格子点} = (n_x, n_y, n_z, n_t)), \quad \mu(\text{リンク方向} = \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{t})$$

と書かれる。各リンク変数は SU_N の場合 N^2-1 ケのパラメーターで指定されるからひとつの配位を決めるには $4 \times L^4 \times (N^2-1)$ ケのパラメーターを与えねばならない。たとえば $L=10, N=3$ の場合には32万ケのパラメーターとなる。

リンク変数はそれぞれ自由ではなく相互作用を持つ。連続極限において、Quantum Chromodynamicsの作用になるという条件を充すWilsonの格子化された作用は¹⁾

$$S = \beta \sum_{n, \mu, \nu} \left(1 - \frac{1}{N} \text{Tr} P_{\mu\nu}(n) \right) \quad (1)$$

ここで $P_{\mu\nu}(n)$ は格子点 n から $\mu-\nu$ 平面の単位格子面(Plaquette)に沿って4ケのリンク変数をかけたもの(4ケの SU_N 行列積)

$$P_{\mu\nu}(n) = U_\mu(n) U_\nu(n+\hat{\mu}) U_\mu(n+\hat{\nu})^\dagger U_\nu(n)^\dagger \quad (2)$$

である。 \dagger はエルミート共役を表すが、リンクを逆行する時はリンク変数のエルミート共役が現れる。ある格子点 n についての $P_{\mu\nu}(n)$ のケ数は、面の取り方の自由度で6通りである。一方、あるリンク変数 $U_\mu(n)$ に対してこの作用により関連してくるリンク変数は

$$U_\nu(n+\hat{\mu}), U_\mu(n+\hat{\nu}), U_\nu(n), U_\nu(n+\hat{\mu}-\hat{\nu}), U_\mu(n-\hat{\nu}), U_\nu(n-\hat{\nu}), \nu \neq \mu \quad (3)$$

で ν 方向の自由度3を考慮すると18ケのリンク変数 $U_\mu(n)$ に対して近接相互作用をしている。

2-2 ゲージ場の更新手法

量子場の理論においてはある物理量 O は対応する演算子 \hat{O} のゲージ場の配位についての期待値で

ある。この際、ゲージ場配位としては(3)の作用について e^{-S} を重み関数とするカノニカルアンサンブルである。つまり

$$\langle O \rangle = \frac{\int [dU] e^{-S} O(\{U\})}{\int [dU] e^{-S}} \quad (4)$$

である。ここで

$$\int [dU]$$

は全てのリンク変数について SU_N 群のパラメーター空間上の不変積分を行うことを意味する。前述の様にこのパラメーターのケ数は $10^{4\sim 6}$ にもなるので直接的な積分は実行できない。そこで(4)のかわりに、ある初期配位から出発してそれを順次ストカスティックに更新して行き、十分に更新が進んだ時点で、時系列的相関のない間隔で O の期待値を取り、それらを平均するという手法が取られる。⁵⁾

$$\langle O \rangle \simeq \frac{1}{N_{\text{sample}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{sample}}} O(\{U\}_i) \quad (5)$$

ここで更新法に要求されることは、この様にしてつくられた配位の集合が

$$\{\{U_\mu(n)\}_i; i=1,\dots,N_{\text{sample}}\} \sim \text{canonical ensemble with } e^{-S} \quad (7)$$

となる様なアルゴリズムであることである。この様な更新の手法として

メトロポリス法 (J. Metropolis 等 (1953))

熱浴法、擬熱浴法 (M. Creutz (1980)、L. Marinari – N. Cabbibo (1983))

改良型ランジュバン法 (福来 – 宇川 (1985)、G. Batrouni 等 (1985))

等が現在使用されている。これらはいずれもストカステックな更新であるので乱数により

$$\{U_\mu(n)\}_{\text{New}} \leftarrow \left[\{U_\mu(n)\}_{\text{old}}, \text{乱数} \right]$$

の様にリンク変数を更新してゆく。単純なランジュバン法を例にとると

$$U_\mu(n)_{\text{New}} = e^{iX(n,\mu)} U_\mu(n)_{\text{old}} \quad (8)$$

with

$$X(n, \mu) = -i \delta \sum_{a=1}^{N^2-1} t^a \sum_{ij} (t^a U_\mu(n))_{ij} \frac{\partial S}{\partial (U_\mu(n))_{ij}} + \sqrt{\delta} \sum_{a=1}^{N^2-1} t^a \eta^a \quad (9)$$

となる。ここで $t^a, a=1, \dots, N^2-1$ は SU_N 群のジェネレーターで N^2-1 個の $N \times N$ エルミート行列である。 δ はランジュバンタイムを離散化した時間ステップである。(9)の第一項はリンク変数に作用の極小値へむかわせようとする古典力である。これに対して第二項はガウス型乱数 $\eta^a, a=1, \dots, N^2-1$ によるランダム力で量子効果を表している。(9)を実際に更新に用いるためには古典力部分を(3)の関連近接リンクより計算することと、ランダム力用の乱数を与えることが必要となる。又、(9)はあるリンク変数 $U_\mu(n)$ に対する更新であったので系全体の更新のためには $4 \times L^4$ 個のリンク変数全部について次々と(9)を施こしてゆかねばならない。

2-3 SXにおけるシミュレーションコード例の概要

筆者等はSXによる高速シミュレーションを念頭において、 SU_2 及び SU_3 格子ゲージ場のシミュレーションコードを作成した。これらのコードは最終的には次章で述べるベクトル化のための手法により若干の複雑さをもつが、ここでは基本的構成について述べる。

まずリンクを同定するための通し番号、リンクアドレスを次の様にする。

$$J = 1 + ix + iyL + izL^2 + itL^3 + i_\mu L^4 \quad (10)$$

ここで ix, iy, iz, it はそれぞれ x, y, z, t 座標で 0 から $L-1$ までの整数値を取る。 i_μ は方向を指定する“座標”で x, y, z, t 方向がそれぞれ $0, 1, 2, 3$ となる。 J の取る値は 1 から $4 \times L^4$ でリンクをユニークに指定する。

次にリンク変数 $U_\mu(n)$ は SU_N の行列であるが、 SU_2, SU_3 の場合対応する配列として

$$U_\mu^{SU_2}(n) = \begin{pmatrix} a_0 + ia_3 & ia_1 + a_2 \\ ia_1 - a_2 & a_0 - ia_3 \end{pmatrix} \text{ with } a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = 1 \leftrightarrow A(J, I), J=1, \dots, 4L^4, \\ I=1, \dots, 4$$

$$U_\mu^{SU_3} \leftrightarrow \begin{cases} UR(J, IA, IB) \\ UI(J, IA, IB) \end{cases} \quad J=1, \dots, 4L^4, I_A, I_B=1, 3 \quad (11)$$

を考える。(SU_2 の場合、必要なパラメーター数は本来 3 個、 SU_3 の場合は 8 個で良いのだが取り扱いの容易さを考えて(11)のように配列を取っている)

プログラムの構造は図のブロックダイアグラムのようにになっている。スタートから順に説明すると、ステップ S1では関連リンク変数を指定するアドレス配列を作成する。これは一次元化されたリンクアドレス(0)の定義に従って関連リンク変数(3)を指定するリストアドレスを準備するもので更新の際の呼び出しを即時に行うためのものである。次のステップ S₂ではリンク変数の初期配位を設定するもので $U_{\mu}(n)$ を単位行列に置くコールドスタートや乱数で行列要素を与えるホット

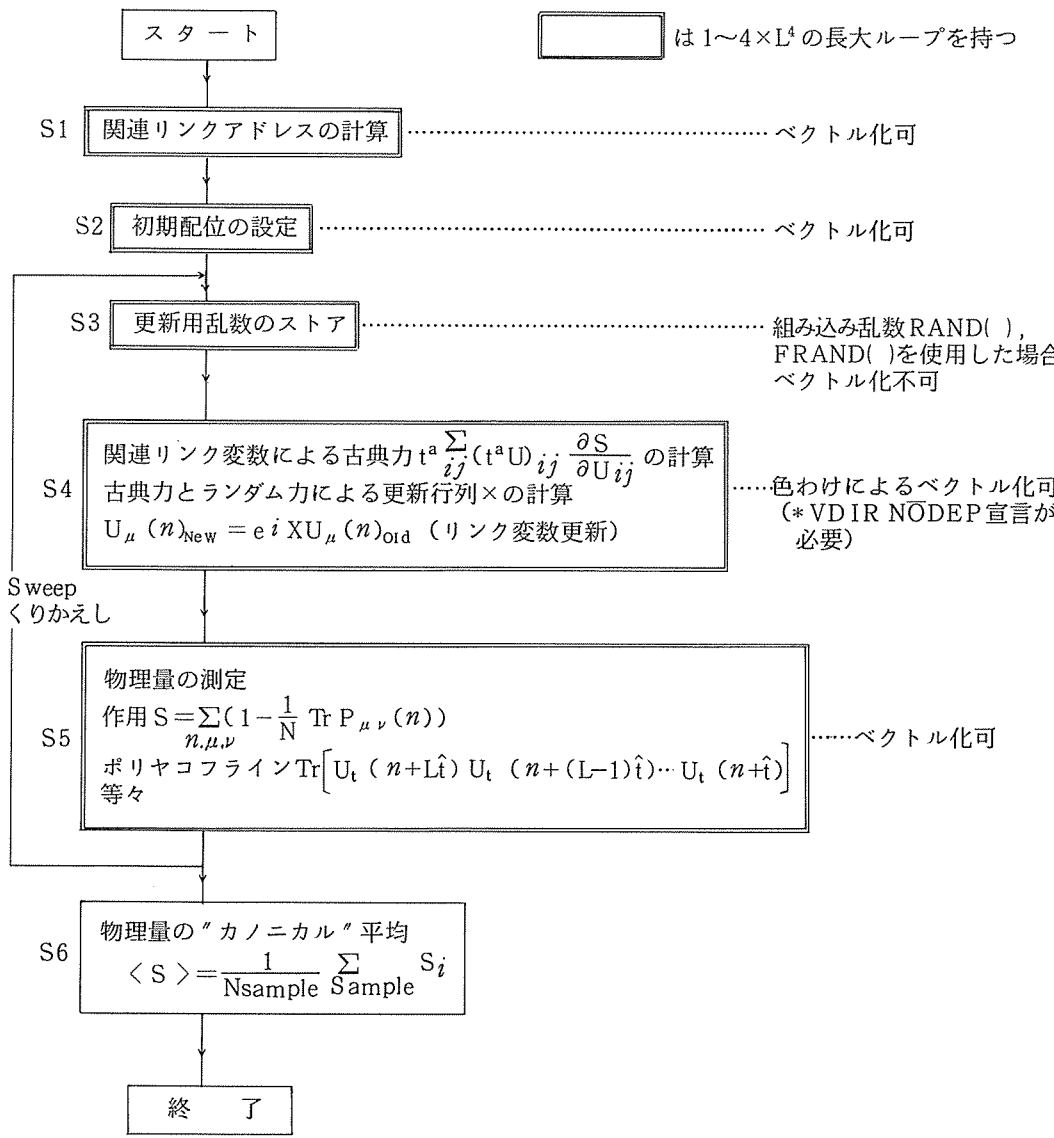


図1 格子ゲージ場シミュレーションコードのブロックダイアグラム

スタート等が設定される。ステップS3では次のステップS4の更新プログラムに使用するために乱数を配列にストアする。これは、組み込みの乱数、RAND(), FRAND等をS4で引用するとベクトル化の阻害要因となるのであらかじめ配列に入れておくことによって更新段階での乱数の並列的引用を可能とするものである。S4はリンク変数を次々と4L⁴更新してゆくプログラムで、更新されるべきリンク変数に対してS1で用意したリストアドレスを使い関連リンク変数を呼び出し古典力を計算し、又S3でストアしておいた乱数によるランダム力を合わせてランジュバン法による更新を行なう。S5では更新されたゲージ場の配位にたいして、作用Sの値や、Wilson loop, ポリヤコフライン等、系の性質を特徴づける物理量の値を求める。このS3からS5までを1スウィープというが、これを十分くりかえした後(通常 $10^{2\sim4}$ 回)最終段階S6にうつりS5で測定した物理量の平均を求め(5)の意味での物理量の期待値を出す。

次にベクトル化に関する各ステップの性質を述べる。S1は単純なリストベクトルの計算なのでそのままベクトル化する。S2, S5は配列の定義引用を含んでいるが定義一引用関係に干渉がないのでそのままベクトル化する。S3は組み込み乱数を利用している限り(現在のSXでは)ベクトル化できない。これを改良する方法については3-2に述べる。S4はこのシミュレーションコードによるAP時間の主要部分を占めるのでぜひともベクトル化したい部分であるが更新操作が関連リンク変数の引用を含むので定義一引用関係の干渉がある。これをさける手法は色わけ手法と呼ばれているが、3-1で述べる。S4は色わけ手法により非干渉グループわけした場合、ベクトル化宣言、*VDIR NODPによりベクトル化する。S6は単純計算なので問題とならない。

以上が我々が作成したシミュレーションコードの概要であるが、構造としては単純な部分が多いので大部分のベクトル化が可能であり、ベクトル演算率はS3において組み込み乱数を使用した場合でも、更新法により若干の差はあるもののSU₂格子ゲージ場コードにおいては80~95%のベクトル演算率、SU₃の場合には90%前後のベクトル演算率となりベクトル計算機としてのSXの有効な利用ができた。表1は作成したコードの主要なもののリンク当りの更新時間等を表したものである。絶対的な更新時間/リンクはメトロポリス法や改良型ランジュバン法が良いが、ゲージ配位の更新についての時系列的相関より更新度を見ると、熱浴法や擬熱浴法が良いので実際のシミュレーションコードとしての有用性は別に評価しなければいけないが、表1に見る限りSXによるベクトル演算の効用は非常に大きい。又、後述のベクトル化乱数を使用した場合はベクトル演算率が、99%を超えベクトル性能の最大限の利用が可能となった。この時の擬熱浴法によるSU₃ゲージ場シミュレーションコードによる更新時間/リンクは30 μ sであるが、現在CRAY等の使用で公表されている値30 ~ 18 μ sと同程度となった。これについてはプログラムの洗練によりさらに10 μ s程度向上できるものと思われる。

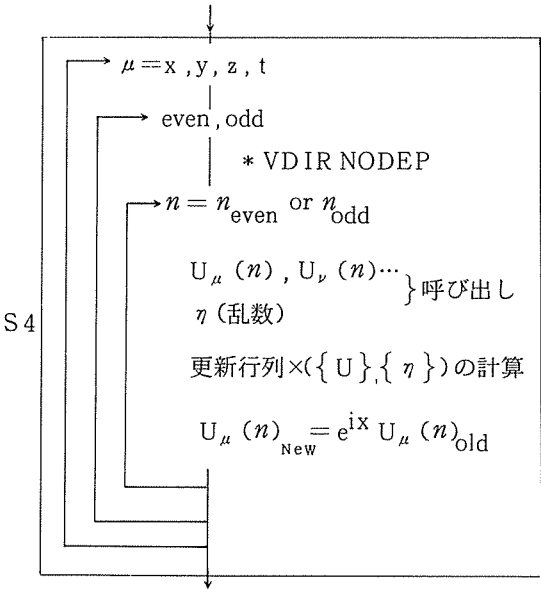
3. 更新プログラムのベクトル化

3-1 色わけ法による更新のベクトル化

リンク変数を更新するには近接の関連リンク(3)を引用しなければならないため、全てのリンク変数を同時に並列的に更新すると定義一引用関係の干渉が起る。しかし(3)を見ると関連リンクは更新したいリンク変数を含む単位格子面上に限られているので2格子単位以上離れていれば同時更新しても干渉しない。そこでリンク変数をグループわけし、同一グループ内のリンクは干渉しない様にしておきベクトル化更新をすれば良い。我々が作成したコードは格子数Lが偶数の場合のチェスボード型色わけを採用したが、以下にそれを述べる。リンク変数 $U_\mu(n)$ はリンクのつけねの4次元座標 n と方向 μ で指定される。まず方向 μ を指定する。次に格子点 n を偶格子点と奇格子点にわけ

$$\{n\} \rightarrow \{n_{\text{even}} : n_x + n_y + n_z + n_t = \text{偶数}\} + \{n_{\text{odd}} : n_x + n_y + n_z + n_t = \text{奇数}\}$$

それぞれのグループないの格子点は2単位格子以上離れていることは定義より明らかである。従ってリンクのグループわけを μ と格子点の偶奇性によりグループわけすれば良い。この様に、全リンク変数をいくつかの非干渉グループにわけけることを色わけ法というが(多色アルゴリズム)今の場合、更新のループの構造は下図の様になり最深部のループが*VDIR NODEP宣言によりベ



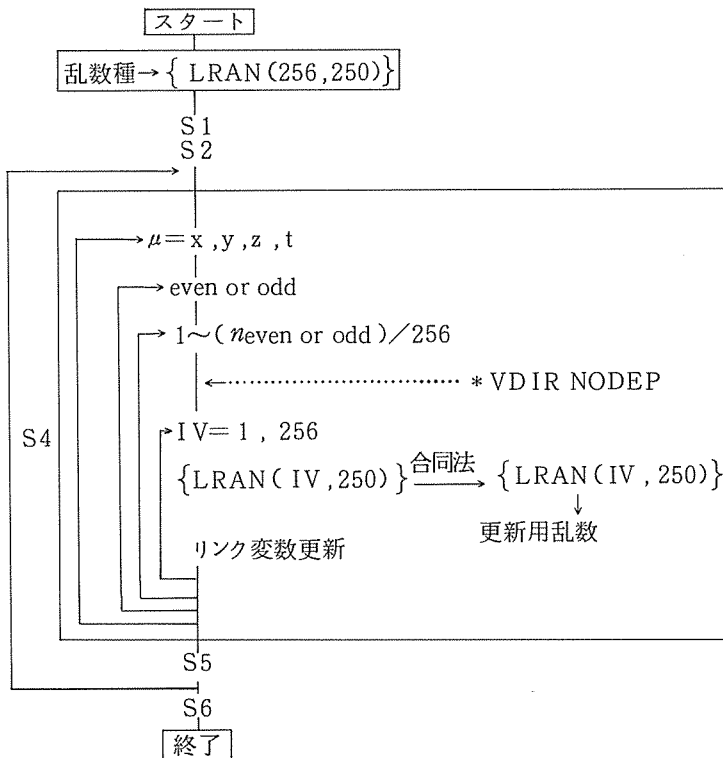
クトル化される。ループ長は $L^4/2$ であるので、Lが6以上では256を超し、ベクトル化は十分に意味を持つ。

なおリンク変数に対する境界条件のことは省略したが、ここで述べた方法は週期境界条件と適合する。なお奇数格子、ヘリカル境界条件の色わけについては文献を参照していただきたい。⁴⁾

3-2 乱数のベクトル化による高度ベクトル化

2-3においては更新用乱数をストアすることにより更新プログラムのベクトル化阻害要因を取り除くことを述べたが、ストアのプログラム自身は現在のS Xの組み込み関数RAND, FRAND等を使用している限りベクトル化できない。格子ゲージ場シミュレーションに限らずモンテカルロ型シミュレーションの多くの場合にベクトル化された乱数は有用と思われる。我々が作成した格子ゲージ場シミュレーションコードの場合、ベクトル演算率を99%以上にできたので、以下にそれを述べる。

通常乱数はそれ以前の乱数から適当なアルゴリズムを使って生成されるので、ひとつの乱数列を並列的に同時に引用するのにむいていない。これを克服するには (a) 乗積合同法 ($x_{n+1} = \lambda_1 x_n \pmod{P}$) を用いて k-step まで先の乱数を $x_{n+k} = \lambda_1^k x_n \pmod{P}$ として生成する方法や、(b) 独立な乱数列を256ヶ考える方法等が考えられる。筆者等が採用したのは (b) の方法でプログラムのスタート直後に乱数種を256組用意し、それをもとにして乱数が必要な時毎に合同法で作り出してゆくものである。従って乱数ストアのプログラムは必要としない。乱数用の配列として設定したのは整数型2次元配列LRAN(256, 250)であり、前述の色わけ法による更新の最深部のループを256 (又はそれに近い適当な数) に分割し、そのループ内で256組の乱数列を使用する。下図にその使用の様子を示すがベクトル化は最新部のループに行なわれる。



この方法は乱数を引用する毎に生成するので、メトロポリス法や熱浴法など、更新に実際使用する乱数のケ数があらかじめわかっていない場合にはストア法が多めに乱数をストアしておかなければいけないのに比べ経済的である。しかしどの方法が良いかはまだ経験が不十分であり、目下検討中である。格子ゲージ場シミュレーションコードの場合、乱数の引用ケ数が多いSU₃

擬熱浴法（ストア法ではリンク当り1回の更新に60ヶ程度）では乱数のベクトル化の効用は特に著しい（表1）。

4. まとめと今後の展望

SU₂及びSU₃格子ゲージ場のシミュレーションコードを作成しSXにおけるベクトル化したシミュレーションを行なったが、その結果は表1に見る様にベクトル演算の効用が非常に大きいことがわかった。フェルミオン場の入らないゲージ場のみの系では更新プログラムのベクトル化が色わけ手法によって容易に実行でき、SXにおいてはむしろ乱数のベクトル化の工夫が必要とされた。乱数のベクトル化が行なわれた場合のベクトル演算率は99%を超し、又更新速度も現在世界で使われている他機種のベクトル計算機によるものと水準に到達した。

格子ゲージ場シミュレーションの数値計算上のもうひとつの問題はフェルミオンが入った系における大行列（ $10^6 \times 10^6$ 程度）の高速逆行列演算であるが今回はそこまで手がおよばなかった。素粒子物理の問題としてもフェルミオンが入った系が現実的であり、SXにおけるシミュレーションコードの作成は有意義と思われる。

最後に本文の主題となった格子ゲージ場モンテカルロシミュレーションコードとSXにおける高速化は昭和62年度の「SXのためのベクトル計算技法の開発」の一計画として承認され、実行されたものであることを記するとともに大阪大学大型計算機センターにこの機会を与えていただいたことを感謝します。

又、本コードの作成は筆者の他に広瀬喜久治（帝国女子大）、神吉健（近畿大）、橋本貴明（東大原子核研）が協力して行った。又、基礎工学部大学院生、日置慎治氏にも協力していただいた。擬熱浴法についてはC. De Tar氏（Utah大）の示唆に感謝します。

参考文献

- 1) K. Wilson, Phys. Rev. D10 (1974) 2445
- 2) M. Creutz, Phys. Rev. D21 (1980) 2315
- 3) M. Fukugita, 京都大学基礎物理学研究所レポート RIFP-703 (1987)
- 4) M. Creutz, Brookhaven National Lab. レポート BNL-39747 (1987)
- 5) C. Rebbi, "Lattice Gauge Theory and Monte Carlo Simulations" World Scientific Pub (1983)

プログラム名	ゲージ群	更新法	ベクトル化更新	乱数	更新時間/リンク		更新度
					ACOS 2000	SX-2	
SU2MET5	SU2	メトロポリス法 (10hit)	×	RAND	70 μ s	/	良くない
SU2HBC1	"	熱浴法	○	RAND, FRAND	190 μ s	16.3 μ s	良
SU2HBT1	"	"	○	ベクトル化乱数	/	6.8 μ s	良
SU2LANG8	"	改良型ランジュバン法 (1 hit)	○	RAND, FRAND	85 μ s	7.6 μ s	メトロポリス よりは良
SU2LANT1	"	"	○	ベクトル化乱数	/	5.1 μ s	99.8 %
SU3AVM2	SU3	擬熱浴法	○	RAND	580 μ s	6.5 μ s	良
SU3AVM1	"	"	○	ベクトル化乱数	/	3.0 μ s	良
SU3LANG0	"	改良型ランジュバン法 (1 hit)	○	RAND	530 μ s	2.7 μ s	メトロポリス よりは良

表1 SXにおける格子ゲージ場シミュレーションコードとその性能