



Title	OCTOPUSを用いた格子QCDによるQCD相図の探索
Author(s)	若山, 将征
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2019, 9, p. 71-74
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/77159
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

OCTOPUS を用いた格子 QCD による QCD 相図の探索

若山 将征

大阪大学 核物理研究センター(RCNP) 核物理理論研究部門

Department of Physics, Pukyong National University

Center for Extreme Nuclear Matter (CENuM), Korea University

1. はじめに

水が個体（氷）－液体（水）－気体（水蒸気）と
いろいろな相を移り変わるように、量子色力学
(QCD)においても相転移現象が存在することが知ら
れている。しかし QCD は強結合の理論ということ
もあり、相転移点の場所などの基本的なことでさえ
現在、解明には至っていない。有限温度・有限密度
における QCD 相図の解明は初期宇宙、銀河や星の
形成、中性子星やブラックホールなどを理解するた
めの重要なインプットを与えることになる。特に、
最近では、中性子星やブラックホールの衝突・合体
による重力波の観測[1]やブラックホールの撮影の
成功[2]などの成果が挙がっており、QCD 相図解明の
重要性が増してきている。

実験ではこれらの問題の解明に向けて、日本の
J-PARC(KEK/JAEA)、ドイツの FAIR(GSI)、ロシアの
NICA(JINR)のような高エネルギー実験が近い将来
稼働することが期待されている。理論では、格子
QCD が QCD の第一原理計算を実行できるほとんど
唯一の手法として知られている。

しかし格子 QCD には有限密度系では「符号問題」
と呼ばれる困難が存在する。格子 QCD では、ゲー
ジ場に対する経路積分はモンテカルロ法を用いて実
行される。ところが有限密度系では、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
るために、モンテカルロ法が破綻してしまう。これ
が「符号問題」であり、QCD の有限密度系を格子
QCD から探索する際には工夫が必要になる。「符号
問題」の解決に向けた手法はこれまでに Taylor 展開
法や再重み付け法、カノニカル法、2 カラー QCD な
ど、多くの手法が提唱されてきた。特に近年、カノ
ニカル法[3]は高精度多倍長計算と組み合わせるこ

とで急速な発展を遂げている。本稿では、カノニカ
ル法を紹介するとともに、この手法が「符号問題」
を解く有力な手法となり得ることをみる。

2. カノニカル法

カノニカル法は純虚数化学ポテンシャルの領域で
は、モンテカルロ法で確率解釈をしている因子が実
数となるため、「符号問題」が存在しないという事実
を利用する。この章ではその利用方法と歴史につい
て紹介する。

まず、グランドカノニカル分配関数 Z_{GC} はカノ
ニカル分配関数 Z_C を用いて、

$$Z_{GC}(\mu, T, V) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} Z_C(n, T, V) \xi^n \quad (1)$$

と定義できる。ここで、 ξ は $\xi = \exp(\mu/T)$ で定義さ
れるフガシティと呼ばれる量であり、 T は温度、 V
は系の体積を表す。純虚数化学ポテンシャルでの
 Z_{GC} に対して Fourier 変換を行うことで、

$$Z_C(n, T, V) = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} e^{-in\theta} Z_{GC}(\mu = i\mu_l, T, V) \quad (2)$$

と、我々は Z_C を得る。ここで、 $\theta = \mu_l/T$ である。純
虚数化学ポテンシャルでの Z_{GC} は従来のモンテカル
ロ法を用いて計算することができるので、式(2)の Z_C
を通じて式(1)から物理的な実数化学ポテンシャル
での Z_{GC} を構築することができる。

カノニカル法の基本的考えは 1992 年に Hasenfratz
と Toussaint によってすでに提唱されていた[3]。カノ
ニカル法の問題点は、式(2)の Fourier 変換を行うと
きに、 n の値が大きくなると $\exp(-in\theta)$ の数値が激し
く振動するために、 Z_C を正しく求められないところ
にあった。長年、この問題は形を変えた「符号問題」
として認識され、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、2016年にこの問題は有効数字の桁落ちが原因であることが指摘された[4]。通常、計算機で扱う倍精度計算(十進法で16桁の計算)で上記のFourier変換を行うと、

$$1.234567890123456 - 1.234567890123455 = 1 \times 10^{-15} \quad (3)$$

のような加減法が頻繁に発生し、実質、有効数字1桁しか信用できなくなる。ところが、

$$1.2345678901234561234 - 1.2345678901234550123 = 1.1111 \times 10^{-15} \quad (4)$$

のように、十進法で数百桁の精度を保証する多倍長計算(式(4)の例では十進法で20桁の計算)を行うことで Z_c が正しく求められるようになり、カノニカル法による有限密度系の探索は有用な手段となり得ることがわかってきた。

2017年には、 Z_{CG} を求める方法としてクォーク数密度からのアプローチ法が提唱された[5]。この手法はまず、純虚数 μ 領域でクォーク数密度の計算を行う。この領域でのクォーク数密度は高温領域では多項式近似、低温領域ではFourier展開近似が良く成り立つことが知られており、それを利用することで、より大きい n に対する $Z_c(n)$ が得られるようになる。

本稿では、クォーク数密度からのアプローチ法を利用し、十進法で5,000桁の多倍長精度計算を用いることで式(2)のFourier変換を実行した。図1にあるように、倍精度計算では $n > 100$ で $Z_n = Z_c(n)/Z_c(0)$ における有効数字の桁落ちが起こっているが、多倍長精度計算では桁落ちは発生していないことがわかる。クォーク数密度からのアプローチ法を利用しない倍精度計算の場合、 $n=10$ 程度までの Z_n までしか求められないという事実に鑑みると、近年におけるカノニカル法は有限密度中での相転移点を調査するための有力な手法にまで発展したと考えられる。

3. Lee-Yangの零点

数値計算では、式(1)のフガシティ展開は無限大まで取ることができず、ある有限の上限値 $N_{\max}$ までで打ち切られる。 $N_{\max}$ は系の(ネット)クォーク数の上限値を意味するので、系の自由度は有限の $N_{\max}$ に

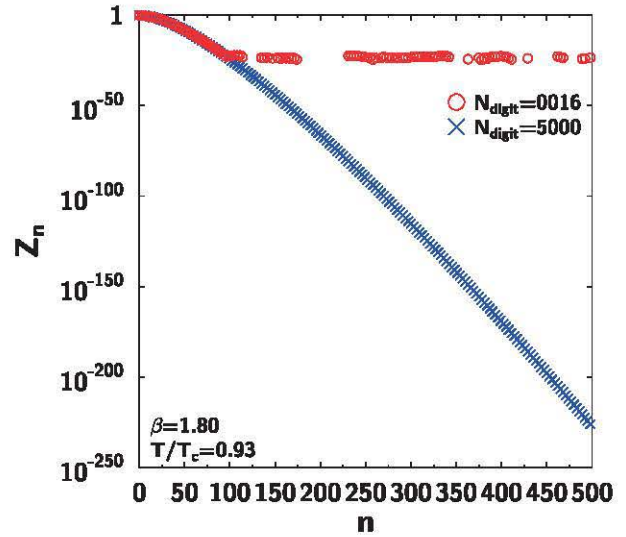


図1: 規格化されたカノニカル分配関数 $Z_n=Z_c(n)/Z_c(0)$ のクォーク数 n 依存性。赤丸と青バツはそれぞれ倍精度と多倍長精度の計算結果を表す。

よって制限される。自由度が有限である系は実数化学ポテンシャル領域において相転移を持つことは決してないので、実際の相転移の情報を引き出すには工夫する必要がある。

そこで注目するのが、Lee-Yangの定理[6]で知られるグランドカノニカル分配関数の零点(Lee-Yangの零点)である。式(1)のフガシティ展開を有限値 $N_{\max}$ までで打ち切ったとき、フガシティ ξ を複素数にまで拡張すると、Lee-Yangの零点は ξ の複素平面上に $2N_{\max}$ 個だけ存在する。 $N_{\max}$ を大きくしていくと、Lee-Yangの零点の個数も増加する。 $N_{\max}$ が無限大の極限で、 ξ の複素平面上でLee-Yangの零点が集積し留まる場所が実際の相転移に相当する点である。従って、我々は ξ の正の実軸付近のLee-Yangの零点の $N_{\max}$ 依存性を調査する。

4. 格子QCD計算

この章では、格子QCD計算から求めたLee-Yangの零点(LYZ)の結果について紹介する[7]。我々はハイブリッドモンテカルロ法を用いて、ゲージ配位を生成した。空間方向の格子サイズが $N_s=16$ 、時間方向の格子サイズが $N_t=4$ 、 π 中間子と ρ 中間子の質量比が $m_\pi/m_\rho=0.80$ のもと、格子QCD計算を行った。

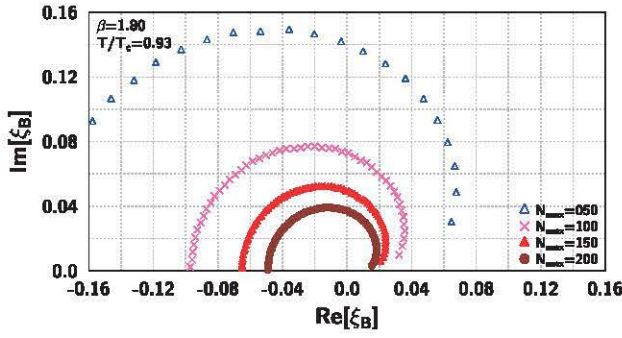


図 2 : $T/T_c=0.93$ での複素フガシティ平面上における LYZ の $N_{\max}$ 依存性。

数値計算の一部は大阪大学 RCNP/CMC の GPU ノード群を搭載した OCTOPUS 上で行われた。GPU は大規模並列計算を得意とするので、GPU コードを $16^3 \times 4 (=16,384)$ 並列計算ができるように設計した。また Fourier 変換で有効数字の桁落ちが発生しないよう、FMLIB パッケージ[8]を用いて 5,000 桁の多倍長計算を実現した。LYZ の計算では主に OCTOPUS の汎用 CPU ノード群を利用した。しかし、 $N_{\max}=2048$ のように $N_{\max}$ が大きくなると、汎用 CPU ノード群のメモリ上限値である 192[GByte]ではメモリ不足となるので、その場合にはメモリ上限値が 6[TByte]である大容量主記憶搭載ノード群を用いた。

図 2 は有限温度 $T/T_c=0.93$ での複素フガシティ平面上における LYZ の $N_{\max}$ 依存性を示した。ここで、 T_c はゼロ化学ポテンシャルでの擬相転移温度を表す。我々が興味のあるのは実数化学ポテンシャルでの相転移なので、第一象限にある $\min(\text{Im}[\xi])$ で定義された LYZ の右端の $N_{\max}$ 依存性に注目する。 $N_{\max}$ が増加するにつれて、LYZ の右端は正の実軸に近づくことがわかる。これを 1 次関数または 2 次関数で $N_{\max}$ が無限大の極限へ外挿し実軸との交点を読み取ること、 $T/T_c=0.93$ において $\mu_B/T \sim 5-6$ 付近に相転移点が存在すると見積もることができた。ここで μ_B はバリオン化学ポテンシャルで $\mu_B=3\mu$ と定義される。

5. NJL 模型での計算

前章では、格子 QCD を用いて LYZ の分布から相転移点を見積もったが、 $N_{\max}$ が無限大となる物理的

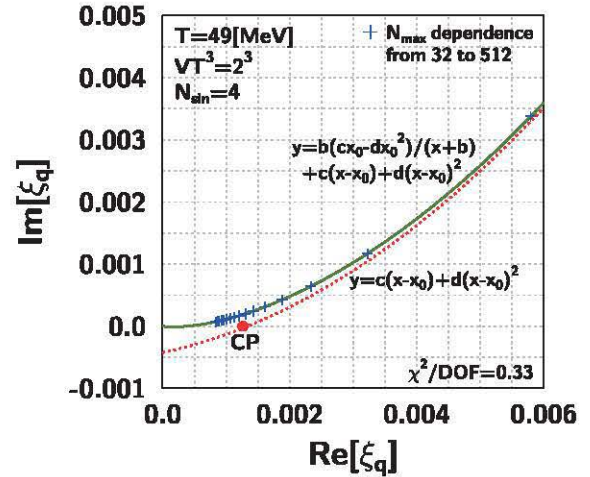


図 3 : $T=49[\text{MeV}]$ での複素フガシティ平面上における LYZ の右端の $N_{\max}$ 依存性。青プラスが LYZ の右端を表し、赤丸が実数化学ポテンシャル領域で計算された期待される臨界点(CP)に対応する。

状況への外挿手法は確立されておらず、議論すべき問題として残っている。この問題を議論するために、我々は QCD の有効模型のひとつである南部-ヨナラシニオ (NJL) 模型[9]での研究を行う。NJL 模型における相転移構造は既によく知られているため、既知の相転移点とカノニカル法から得られる相転移点を比較することで、有限自由度の効果などの調査が可能となる。

図 3 では、 $T=49[\text{MeV}]$ での複素フガシティ平面上における LYZ の右端の $N_{\max}$ 依存性を示した。 $N_{\max}$ が増加するにつれて LYZ の右端は実軸に近くが、実数化学ポテンシャル領域で計算された期待される臨界点(CP)の上部を通り越して原点へ向かっていることがわかる。この理由は、クォーク数密度からのアプローチ法でクォーク数密度を有限項の Fourier 展開で近似したため、実数化学ポテンシャル領域で相転移が起こらなくなったことによると考えられる。

有限項の Fourier 展開での近似の効果を踏まえ、我々は外挿関数

$$y = \frac{b(cx_0 - dx_0^2)}{x + b} + c(x - x_0) + d(x - x_0)^2 \quad (5)$$

を用いて LYZ の右端の外挿を行うことを考える。ここで、 $y=\text{Im}[\xi]$ 、 $x=\text{Re}[\xi]$ であり、 b と c, d, x_0 はフィッティングパラメータである。式(5)は基本的に

は $x=x_0$ まわりでの Taylor 展開のような 2 次関数で構成されている。もし系が $x=x_0$ で相転移点を持っていれば、 $N_{\max}$ が無限大へ外挿する関数は $x=x_0$ の点で実軸と交わることが期待される。しかし、有限項の Fourier 展開近似のせいで実数化学ポテンシャル上では相転移点は存在しないため、外挿関数には原点を通るように第 1 項のような補正項が必要になってくる。LYZ の右端をフィットした式(5)の関数を図 3 に実線で示した。また、Fourier 展開の有限項効果と考えられる第 1 項を差し引いた関数を点線で表した。点線は実数化学ポテンシャル領域で計算された期待される臨界点を再現できていることがわかる。

6. おわりに

我々は格子 QCD と NJL 模型において、カノニカル法から計算された LYZ を用いて有限密度中での相転移点の調査を行った。格子 QCD 計算の結果のひとつとして、 $T/T_c=0.93$ において $\mu_B/T \sim 5-6$ 付近に相転移点が存在すると見積もることができた。

しかし、 $N_{\max}$ が無限大となる物理的状況への外挿手法は確立されておらず、議論すべき問題として残っている。そこで我々は NJL 模型での研究を行った。NJL 模型における相転移構造は既によく知られているため、既知の相転移点とカノニカル法から得られる相転移点を比較することで、有限自由度の効果などの調査が可能となる。NJL 模型での計算の結果として、クォーク数密度からのアプローチ法における Fourier 展開の有限項近似の効果の抽出に成功した。また、その効果を外挿関数から差し引くことで期待される相転移点を再現できることがわかった。

現在、より現実世界に近い空間方向の格子サイズが $N_s=24$ かつ $m_\pi/m_\rho=0.48$ のもとでの計算を OCTOPUS 上で実行中である。NJL 模型で理解が深まった LYZ の外挿手法を用いることで、信頼度の高い現実的な相転移構造が得られると期待される。

謝辞

本研究は、V. G. Borynakov 氏、D. L. Boyda 氏、V. A. Goy 氏、飯田英明氏、A. V. Molochkov 氏、中村純氏、

V. I. Zakharov 氏、保坂淳氏との共同研究として行われた。また本研究は韓国科学技術情報通信部(MSIT)による韓国研究財団(NRF)の助成を受けている(No.2018R1A5A1025563)。なお本研究の数値計算は、大阪大学 CMC 大規模計算機システム公募型利用制度、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(課題番号: EX18705)と大阪大学 RCNP からの支援の下、NEC OCTOPUS の多大な計算機資源を使用して行われた。さらに CMC 主催の「2018 年度対面利用相談」により、コード開発の有益な助言を頂いた。そして、管理・運営に携わっている多くの方々には、いつも利用者視点でシステムの変更や問題解決をして頂き、安定的に計算機を利用することができた。ここに感謝の意を表する。

参考文献

- (1) B. P. Abbott et al. [LIGO Scientific and Virgo Collaborations], Phys. Rev. Lett. **116**, 061102 (2016).
- (2) K. Akiyama et al. [Event Horizon Telescope Collaboration], Astrophys. J. **875**, L6 (2019).
- (3) A. Hasenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys. B **371**, 539 (1992).
- (4) R. Fukuda, A. Nakamura and S. Oka, Phys. Rev. D **93**, 094508 (2016).
- (5) V. G. Borynakov, D. L. Boyda, V. A. Goy, A. V. Molochkov, A. Nakamura, A. A. Nikolaev and V. I. Zakharov, Phys. Rev. D **95**, 094506 (2017).
- (6) C. N. Yang and T. D. Lee, Phys. Rev. **87**, 404 & 410 (1952).
- (7) M. Wakayama, V. G. Borynakov, D. L. Boyda, V. A. Goy, H. Iida, A. V. Molochkov, A. Nakamura and V. I. Zakharov, Phys. Lett. B (2019) (in press) arXiv:1802.02014 [hep-lat].
- (8) D. M. Smith, FMLIB1.3 (2015).
<http://myweb.lmu.edu/dmsmith/FMLIB.html>.
- (9) Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, Phys. Rev. **122**, 345 (1961); Phys. Rev. **124**, 246 (1961).