

物理点における格子 QCD シミュレーションの実現

I. はじめに

Quantum Chromodynamics (QCD 量子色力学) は素粒子の強い相互作用の基礎理論である。自然界には、原子核を構成する陽子や中性子、これらの粒子を結び付ける核力の担い手である π 中間子等の、ハドロンと総称される一群の粒子がある。QCD によれば、これらの粒子は、全てクォークと呼ばれる、より基本的な粒子が複数個結合してできており、その結合力はグルオンと呼ばれる粒子により媒介されている。

QCD は、クォークとグルオンをそれぞれ表す場を基本的な力学変数として、量子力学と相対性理論に基づいて組み立てられた「場の量子論」である。QCD の著しい特徴はクォーク間の相互作用が近距離になるほど弱くなり、逆に遠距離になるほど強くなることである(漸近自由性)。この性質は、クォークが単独で観測されていない事(クォークの閉じ込め)を説明するが、クォークから構成されているはずのハドロンの性質を预言する上で大きな困難をもたらす。

格子 QCD は、QCD を離散な時間空間格子上に定式化して、スーパーコンピュータによる数値シミュレーションにより、ハドロンとその強い相互作用の様々な性質を計算し预言することを可能とした方法である。

QCD の漸近自由性は 1973 年に発見され、格子 QCD はその直後の 1974 年には定式化された。格子 QCD の数値シミュレーションは 1980 年頃に始まり、長年にわたり様々の努力と進歩が積み重ねられて来た。しかしながら、自然界に対応するカレントクォーク質量での計算(物理点シミュレーション)は、在来 of アルゴリズムでは膨大な計算量を必要とするために、2000 年代になっても実現できず、実験値に比べて遙かに重いクォーク質量での計算結果を物理点に外挿する方法が取られていた。この方法には、外挿に用いる理論式の信頼度と数値的不安定性の問題が付きまとい、格子 QCD の预言の信頼度を損なう大きな要因となっていた。

2000 年代半ばになって、アルゴリズム上の革新があり、同時にスーパーコンピュータの性能向上も合わさって、物理点シミュレーションの実現が具体的な目標となった。物理点シミュレーションは、クォーク質量に関する外挿を必要としないという技術的な利点に留まらず、自然界そのものをシミュレートしているという点も重要であり、外挿に頼る「自然界のシミュレーション」から「自然界そのものの計算」への考え方のシフトも意味している。我々のグループはこのような物理点計算の重要性をいち早く認識し、その実現を目標として、超並列クラスタ計算機 PACS-CS の開発・製作、同計算機上で用いる新規アルゴリズムに基づく計算コードの開発を行い、2008 年に世界の先頭を切って物理点計算を実現した。

本稿では物理点シミュレーションが可能となった理由を解説する。

II. 格子 QCD

我々の住む時間空間は、時間が 1 次元、空間が 3 次元の 4 次元連続体である。格子 QCD では、この連続時空を図 1 のように離散な格子で置き換える。最も簡単な格子は 4 次元立法格子である。格子の節点を格子点、隣り合った格子点間の距離を格子間隔と呼ぶ。格子間隔を記号 a で表せば、 $\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^4$ を 4 次元の整数ベクトルとして、格子点は $\mathbf{n}a$ で表すことができる。隣り合った格子点を結ぶ線分をリンクと呼ぶ。リンクの方向を時空の 4 つの次元に対応して $\mu = 1, 2, 3, 4$ で表せば、リンクは出発点の格子点 $\mathbf{n}a$ と方向 $\mu = 1, 2, 3, 4$ を組み合わせて $\mathbf{n}\mu$ で表すことができる。

クォークを表す場合は、各格子点に定義されるので q_n と表すことができ、グルオンを表す場合は各リンクに定義されるので $U_{n\mu}$ と表記する。

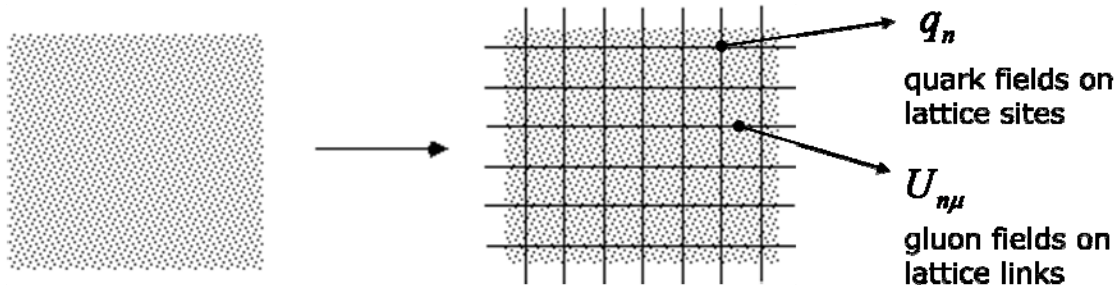


図 1 連続時空（左）と離散な時空格子（右）及びクォーク場とグルオン場

力学系としての格子 QCD の性質を定めるのは格子上に定義された「作用」と呼ばれる量で、クォーク場 q_n とグルオン場 $U_{n\mu}$ の関数であり、次のような形をしている。

$$S_{\text{QCD}} = \sum_{n\mu\nu} \text{Tr}(U_{n\mu\nu}) + \sum_{n,n'} \bar{q}_n (D[U] + m_q)_{n,n'} q_{n'}$$

ここで $n\mu\nu$ は格子点 n を頂点として μ 方向と ν 方向に張られる正方形（プラケットと呼ぶ）にそってのグルオン場 U の積、 $D[U]$ はクォーク場を繋ぐ行列で Dirac 行列と呼ばれる。また m_q は、カレントクォーク質量である。

格子 QCD は素粒子というミクロの世界を記述するので量子力学に従う。Feynman によれば、量子力学としての QCD は、次の多重積分（Feynman の経路積分）で定義される。

$$Z_{\text{QCD}} = \int \prod_{n\mu} dU_{n\mu} \prod_n dq_n d\bar{q}_n \exp(-S_{\text{QCD}}) \quad (1)$$

積分変数は全てのリンクにあるグルオン場と全ての格子点にあるクォーク場であるので、無限次元積分であるが、時空体積を有限にとることにより、大次元だが有限次元の積分と考えることができる。

このような大次元の積分を実行するために 20 世紀の半ばに考えられたのが Monte Carlo 法である。この方法は、積分変数を統計的変数と考え、 $\exp(-S_{\text{QCD}})$ に従うグルオン場とクォーク場の統計分布を発生させることによって、積分を統計平均値を求める操作に置き換える。

グルオン場 $U_{n\mu}$ は通常の数で表せる場であるのでこのような操作はコンピュータ上で高

速に実施することができる。一方クォークは、複数のクォークがある場合には、相互の入れ替えによって、波動関数の符号が変わるフェルミ粒子であるので、 q_n は交換のもとで反可換 $q_n q_{n'} = -q_{n'} q_n$ という性質を持つ特殊な「数」である。このような「数」はそのままでコンピュータ上で計算できる数ではない。幸い QCD の作用はクォーク場について双一次形式の形をしているので、通常の数で表せる擬クォーク場 ϕ_n を使って(1)式は次の式に同値であることを示す事ができる。

$$Z_{\text{QCD}} = \int \prod_{n\mu} dU_{n\mu} \prod_n d\phi_n d\bar{\phi}_n \exp(-S'_{\text{QCD}})$$

但し

$$S'_{\text{QCD}} = S_{\text{gluon}}[U] + \sum_{nn'} \bar{\phi}_n \left(\frac{1}{D[U] + m_q} \right)_{nn'} \phi_{n'}$$

で、Dirac 行列の逆行列が現れることが特徴である。

III. Hybrid Monte Carlo アルゴリズム

グルオン場 $U_{n\mu}$ と擬クォーク場 ϕ_n が、統計分布 $\exp(-S'_{\text{QCD}})$ に従うような統計的アンサンブルを生成するには、分子動力学の一種である Hybrid Monte Carlo 法が使われる。この方法では、連続な Monte Carlo 時間 τ を導入し、この時間に対応してグルオン変数 $U_{n\mu}$ に共役な運動量 $P_{n\mu}$ を導入する。そうして、共役ペア $U_{n\mu}$ と $P_{n\mu}$ に対して次の Hamilton 方程式を考える。

$$\frac{dU_{n\mu}}{d\tau} = P_{n\mu} \quad , \quad \frac{dP_{n\mu}}{d\tau} = -\frac{dS_{\text{gluon}}[U]}{dU_{n\mu}} + \bar{\phi}_n \left(\frac{1}{D[U] + m_q} \right)_{nm'} \frac{dD_{m'k'}[U]}{dU_{n\mu}} \left(\frac{1}{D[U] + m_q} \right)_{k'k} \phi_k$$

(2)

共役ペア $U_{n\mu}$ と $P_{n\mu}$ について、ある初期条件から出発してこの Hamilton 方程式を数値的に解き、一定時間経過した後の共役ペア $U_{n\mu}$ と $P_{n\mu}$ に対して、適切な棄却を行えば、統計分布 $\exp(-S'_{\text{QCD}})$ に従う統計分布が生成されることが証明できる。

この方法は 1980 年代半ばに提案され、クォークの効果を含む格子 QCD シミュレーションの代表的な方法として用いられて来た。2000 年頃には様々のカレントクォーク質量、格子体積、格子間隔に対するシミュレーションの経験が蓄積され、Hybrid Monte Carlo 法による格子 QCD 計算によって物理量を計算するために必要な計算量に対する評価式が得られていた。2001 年に我々の見出した評価式は次の通りである【文献 1】。

$$\text{演算量} \approx 1.9 \left[\frac{\#\text{conf}}{1000} \right] \left[\frac{m_\pi}{500\text{MeV}} \right]^{-6} \left[\frac{L}{3\text{fm}} \right]^5 \left[\frac{a}{0.1\text{fm}} \right]^{-7} \text{Tflops} \cdot \text{years}$$

ここで $\#\text{conf}$ は統計平均に使う独立なアンサンブル数、 m_π は π 中間子の質量で 500MeV は 2000 年頃のシミュレーションで使われた標準的な値、 L は格子サイズで 3fm は同じく 2000 年頃の標準的な値で陽子・中性子が入る程度の大きさ、 a は格子間隔で 0.1fm は格子間隔が有限の影響を数%レベルに抑えるために最低限必要な値である。

図 2 の茶色の線は、この評価式を π 中間子の質量の関数としてプロットしたものである。2000 年頃の計算は π 中間子質量が 500MeV 程度であり、100 個程度のアンサンブルを生成

するには $0.2\text{Tflops}\cdot\text{years}$ 程度の計算量が必要であったが、これは当時のスーパーコンピュータの性能である約 1Tflops を持つてすれば 1 年間程度の計算で充分実現できたのである。

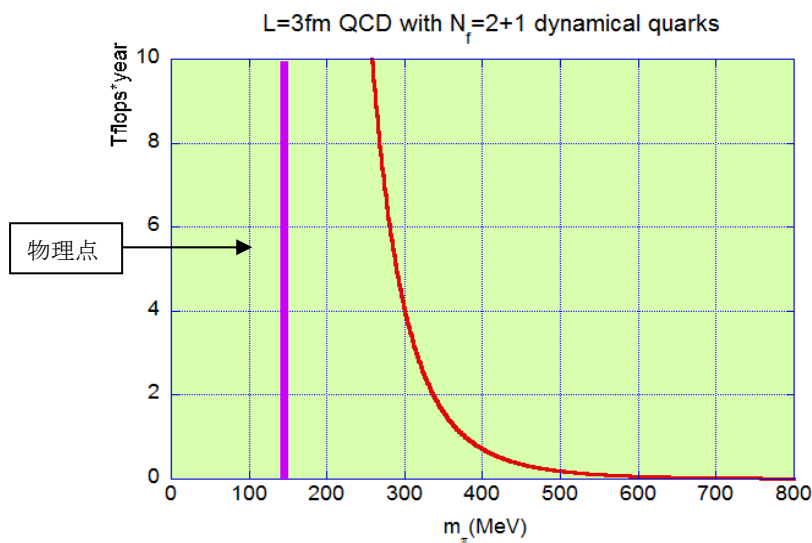


図 2 Hybrid Monte Carlo 法による格子 QCD 計算に必要な演算量

しかしながら、自然界の π 中間子の質量は 135MeV (図 2 の紫色の縦線の位置) であり、 500MeV からの外挿は非常に遠く、不確定性が高い。一方で、計算を物理点で行おうとすると図 2 から判るように、計算量は急速に増大する。この事情が明らかにされたのは、2001 年にドイツのベルリンで行われた国際会議であったので、この困難は Berlin wall の問題と呼ばれるようになった。

IV. Hybrid Monte Carlo アルゴリズムの高速化

Berlin Wall の認識が契機となってアルゴリズム改善の努力が始まった。2005 年になって鍵となる発見があった【文献 2】。

運動量 $P_{n\mu}$ の Monte Carlo 時間微分に対する Hamilton 方程式の右辺は、Monte Carlo 法において共役ペア $U_{n\mu}$ と $P_{n\mu}$ を変化させる「力」と考えることができる。Hamilton 方程式をコンピュータで Monte Carlo 時間について積分する場合には、連続な Monte Carlo 時間 τ をステップ $\delta\tau$ で離散化して数値積分を行う必要がある。「力」が大きいほど時間ステップ $\delta\tau$ は小さく取らないと時間積分が不安定になる。

(2) の第二式から判るように、力は、グルオンから来る部分 (第一項) とクォークから来る部分 (第二項) からなる。クォークから来る部分は Dirac 行列の逆行列を含む式になっている。単位の Monte Carlo 時間 $\tau = 1$ だけ Hamilton 方程式を積分するには $1/\delta\tau$ 回だけ逆行列を計算する必要がある。

逆行列の計算は共役傾斜法等の反復法により行われるが、その計算量は行列の最大固有値と最小固有値の比 (条件数) で決まる。格子 QCD の Dirac 行列の場合には、最大固有値は $O(1)$ 、最小固有値はカレントクォーク質量 m_q なので条件数は $1/m_q$ である。自然界には

up, down, strange, charm, bottom, top の 6 種類のクォークがあるが、このうち up と down は特に軽く対応する条件数は $O(1000)$ にもなるために、反復回数が $O(1000)$ を超えることも珍しくない。ステップサイズ $\delta\tau$ は通常 0.01 から 0.001 であるので、単位の Monte Carlo 時間 $\tau = 1$ だけ Hamilton 方程式を積分するだけでも、10 万回から 100 万回のディラック行列の掛け算計算が必要となる。これが通常の Hybrid Monte Carlo に Berlin wall がある原因である。

力のクォーク部分は Dirac 行列の逆行列を含むので、それには、運動量 $\mathbf{p}_{n\mu}$ の載っているリンク $\mathbf{n}\mu$ の近傍の寄与だけでなく遠距離からの寄与も含む。前者はクォーク場の量子揺らぎの言葉で言えば短波長 (UltraViolet) であり、後者は長波長 (InfraRed) の寄与である。

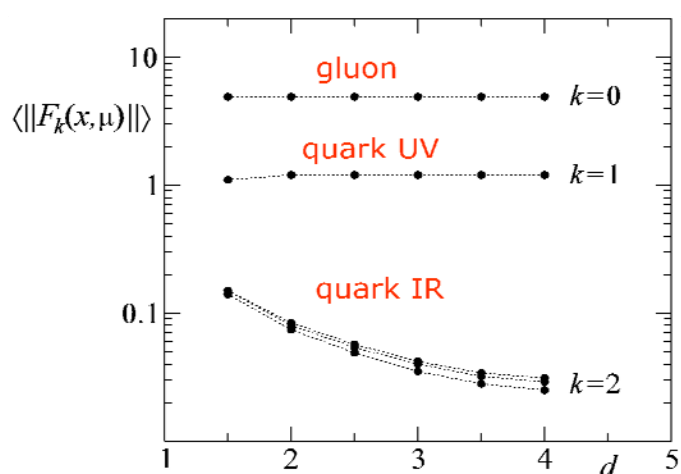


図3 Hamilton 方程式の力の 3 つの項の大きさ【文献 2】

図 3 に「力」を、グルオンから来る項、クォークの UV 部分から来る項、クォークの IR 部分から来る項の 3 つに分け、運動量 $\mathbf{p}_{n\mu}$ の載っているリンク $\mathbf{n}\mu$ からの距離 d の関数として求めた結果を示す【文献 2】。この図から明らかなように、3 つの項はその大きさが大よそ一桁づつ異なっている。

従来の Hybrid Monte Carlo 法では、3 つの項に共通のステップを使っていた。図 3 の結果を見れば、この共通のステップは、力の値が最も大きいグルオン部分により決まる。しかしながら、クォークの UV 部分はグルオン部分より約 5 倍小さく、クォークの IR 部分はさらにその約 5 倍小さい。これらに対するステップサイズは、力の大きさに逆比例して大きく取っても Monte Carlo 時間積分が安定に行えることは明らかである。従って、3 つの項のステップサイズは以下のように取れば良いことになる。

$$\delta\tau_{\text{gluon}} : \delta\tau_{\text{quark UV}} : \delta\tau_{\text{quark IR}} \approx 1 : 5 : 25$$

逆行列の計算で最も計算時間を要するのは最小固有値に関するモードの計算であり、これはクォークの IR 部分に寄与する。従って、IR 部分に対するステップサイズを 25 倍にできるということは、最も時間を要する計算を従来の 1/25 で済ませられるということであり、その分必要な計算時間が短縮されることになる。

クォークの力への寄与を UV 部分と IR 部分に分解する具体的な方法は二つが提案された。一つの方法は、格子全体 Λ を小さな格子（領域）の集合体 $\Lambda = \cup_i \Lambda_i$ に分割し、Dirac 行列をそれぞれの小さな格子 Λ_i 内で定義される部分と、異なる小さな格子間を繋ぐ部分に分解する方法である。前者が UV に、後者が IR に対応する。この方法を用いた改善されたアルゴリズムを領域分解 Hybrid Monte Carlo 法と呼ぶ【文献 2】。

もうひとつの方法は、Dirac 演算子 $D[U] + m_q$ を、カレントクォーク質量が本来の値よりわずかに大きい値に対応する Dirac 演算子 $D[U] + m'_q$ を使って、 $D[U] + m_q = (D[U] + m_q)/(D[U] + m'_q) \cdot (D[U] + m'_q)$ と書きなおす。こうすれば $D[U] + m'_q$ が UV に対応し、 $(D[U] + m_q)/(D[U] + m'_q)$ が IR 対応する。これを質量前処理法と呼ぶ。

我々は領域分解 Hybrid Monte Carlo 法を選び、2006 年から開発が始まった超並列クラスタ計算機 PACS-CS に実装した。図 4 に、領域分解 Hybrid Monte Carlo 法により図 3 と同じ計算をした場合の演算量評価を茶色の実線で示す。茶色の点線は図 3 の実線と同じである。線と点線の比較から判るように、 $m_\pi \approx 300\text{MeV}$ で約 10 倍、より軽い π 中間子ではさらに大きな計算の高速化が実現され、結果として物理点計算が約 2Tflops*years で可能となった。PACS-CS はピーク性能 14Tflops であり開発した領域分解 Hybrid Monte Carlo コードに対して実効性能は約 15–20%であるので 1 年間の計算で物理点計算が充分に実現できた【文献 3】。

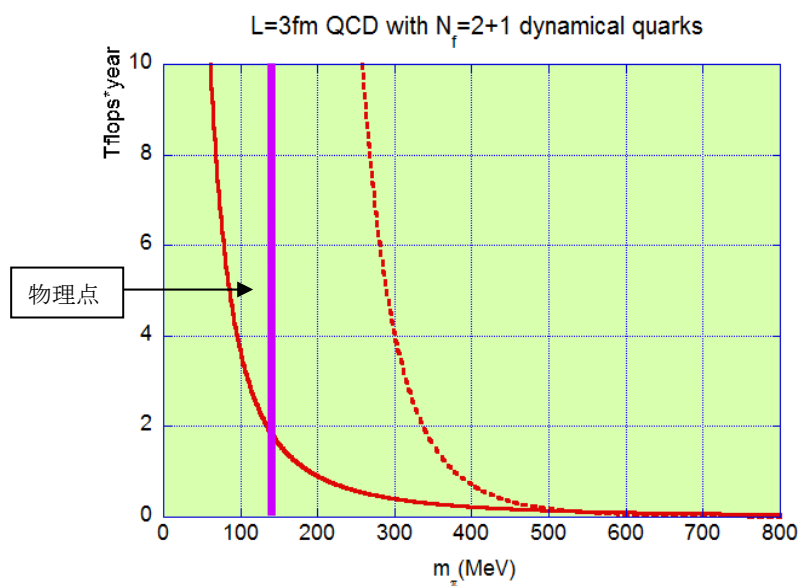


図 4 領域分解 Hybrid Monte Carlo 法による計算量評価

なお、実際にこの計算を実現するに当たっては多くの困難があった事を注記する。上記の領域分解 Hybrid Monte Carlo 法コードは、 π 中間子質量が約 200MeV まで順調に動作したが、それ以下では Hamilton 方程式の Monte Carlo 時間積分が不安定となり発散する現象や Dirac 行列の逆行列の計算が収束しない現象等に峯着しそのままでは使えなかつ

た。これらの問題を解決するには考えうる殆ど全ての対策の総動員が必要であった。

Monte Carlo 時間積分が不安定に対しては、クォークの IR 部分を質量前処理法を適用して更に細かく分割し、力の大きさを分解縮小した。

Dirac 行列の逆行列の収束の問題に対しては、①初期ベクトルを、Monte Carlo 時間積分の過去に遡って保持しておき、最適な組み合わせを計算して使用する方法、②収束上最も問題となる小さな固有値及び負の固有値をあらかじめ計算しておき、この部分を Dirac 行列から抜き出すことにより条件数を大きくして解く方法を工夫し、これらの対策を組み込んだコードを開発し、問題発生状況に応じて切り替えることにより、安定して逆行列を求めることを可能とした。

V. まとめ

我々は π 中間子質量 $m_\pi = 155\text{MeV}$ の計算を世界で初めて実現し、さらにその後 **reweighting** の方法を用いて物理点 $m_\pi = 135\text{MeV}$ での計算を、これも世界で初めて実現した【文献 4】。我々と同時期に、世界的には、比較的物理点に近いカレントクォーク質量まで計算が実現できれば後は外挿に頼ることで充分ではないかとの考えが強かったが、我々はそのような中途半端なスタンスを排し、実現可能であれば物理点計算こそが追及すべき目標であるとして研究を進めた点に特徴がある。我々の考え方は世界的に幅広い影響を与え、現在では出来る限り物理点において計算を行い、外挿の不定性を排除する研究が主流になっている。

参考文献

- 【1】 A. Ukawa, Nucl. Phys. B, Proc. Suppl. 106, 195 (2002).
- 【2】 M. Luescher, Comput. Phys. Commun. 165, 199 (2005).
- 【3】 PACS-CS Collaboration, S. Aoki et al., Phys. Rev. D79, 034503, 2009.
- 【4】 PACS-CS Collaboration, S. Aoki et al., Phys.Rev.D81:074503, 2010.