

KEK 大型シミュレーション実施報告書

SC-XQCDJ グループ

1 研究組織

研究責任者

中村 純 (なかむら あつし) 広島大学情報メディアセンター・教授

共同研究者

永田 桂太郎 (ながた けいたろう) 東京大学・理学研究科・研究員

2 研究課題の背景

RHIC, LHC などでの高エネルギー重イオン反応、中性子星内部などは有限密度の物質系である。有限温度・密度で、QCD はどのような相図を示すか、また中性子内部はどのような密度でクォーク系となるか、またさらには、重い原子核内で QCD はどのような性質を示すのかは、非常に興味深い物理的問題であり、NJL 模型等で多くの計算、検討が行われている。

しかし、モデル計算には不定性が大きく、パラメータを変えると、その予言する描像も変わってしまう。QCD に基づく第一原理計算が強く求められている。

その計算は、以下の統計系を格子 QCD に対して数値的に評価することを意味する：

$$Z = \text{Tr} e^{-\frac{1}{kT}(H-\mu N)} = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\frac{1}{kT}S_G - \bar{\psi}\Delta\psi} = \int \mathcal{D}U \prod_f \det \Delta(m_f) e^{-\frac{1}{kT}S_G} \quad (1)$$

しかし、 $\det \Delta$ の実数性を保証する関係式

$$\Delta(\mu)^\dagger = -D_\nu \gamma_\nu + m + \mu^* \gamma_0 = \gamma_5 \Delta(-\mu^*) \gamma_5 \quad (2)$$

が有限の μ 、すなわち有限バリオン密度系ではなりたたず、符号問題が生じる。そのため、モンテカルロ計算の適用が難しく、もっともチャレンジングな数値シミュレーションとなっている。

3 本年度の研究報告 - Reduction 公式構築とコード開発

有限密度格子 QCD 計算の重要な手法の 1 つである Multi-Parameter Reweighting 法では

$$\frac{\det \Delta(\mu)}{\det \Delta(0)} \quad (3)$$

が Reweighting ファクターとして現れ計算する必要がある。また、キャノニカル法でも、 $\det \Delta(i\mu)$ を $\phi = i\mu/T$ に関してフーリエ変換する必要があり、数値的には不安定になることが知られているので、 μ について陽な式が求められる。

行列式については、数値的に求めるには N^3 (N は行列のランク) の計算量が必要となり、また現在知られている解法は行列のスパース性を利用することが難しいため、もし同じ行列式の値を与えるよりランクの低い行列を構成できれば、大きな計算量の減少となる。それが密行列になることは問題とならない。

KS フェルミオンについては、このような式は Gibbs によって与えられている [1]。しかし、我々がシミュレーションで採用する Wilson 型フェルミオンについては、そのような式は得られておらず、Gibbs による導出を単純に適用することもできない。(Wilson フェルミオンに現れる $(r \pm \gamma_4)$ が、 $r = 1$ では逆を持たないことに起因した困難が生じる)

我々は、ほぼ半年をかけて以下の式を得ることに成功した [2]。

$$\det \Delta = (c_a c_b)^{-N/2} z^{-N/2} \left(\prod_{i=1}^{N_t} \det(\alpha_i) \right) \det(z^{N_t} + Q). \quad (4)$$

ここで、 $Q = (\alpha_1^{-1} \beta_1) \cdots (\alpha_{N_t}^{-1} \beta_{N_t})$ また、

$$\begin{aligned} \alpha_i &= \alpha^{ab, \mu\nu}(\vec{x}, \vec{y}, t_i) \\ &= c_a B^{ab, \mu\sigma}(\vec{x}, \vec{y}, t_i) r_-^{\sigma\nu} - 2c_b \kappa r_+^{\mu\nu} \delta^{ab} \delta(\vec{x} - \vec{y}), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \beta_i &= \beta^{ab, \mu\nu}(\vec{x}, \vec{y}, t_i), \\ &= c_b B^{ac, \mu\sigma}(\vec{x}, \vec{y}, t_i) r_+^{\sigma\nu} U_4^{cb}(\vec{y}, t_i) - 2c_a \kappa r_-^{\mu\nu} \delta(\vec{x} - \vec{y}) U_4^{ab}(\vec{y}, t_i), \end{aligned} \quad (6)$$

はブロック行列で、化学ポテンシャルにはよらない。(したがって Q も μ に依存しない)

Q の固有値を λ_n とすると

$$\det(z^{N_t} + Q) = \prod_{n=1}^{N_{\text{red}}} (\lambda_n + z^{N_t}), \quad (7)$$

となり、 z^{N_t} で展開すると、

$$\begin{aligned} z^{-N/2} \prod_{n=1}^{N_{\text{red}}} (\lambda_n + z^{N_t}) &= \sum_{n=-N_{\text{red}}/2}^{N_{\text{red}}/2} c_n (z^{N_t})^n \\ &= c_{-N_{\text{red}}/2} (z^{N_t})^{N_{\text{red}}/2} + \cdots + c_0 + \cdots + c_{N_{\text{red}}/2} (z^{N_t})^{-N_{\text{red}}/2}, \end{aligned} \quad (8)$$

$z^{N_t} = e^{-\mu/T}$ は fugacity である。

この式を計算するプログラムを開発し、 4^4 の小さな格子の上で、確かに元の行列式を再現することの確認等を行った。その際に、係数 c_n が 10^{400} 程度の大きな範囲を動くため、計算精度を満たすためのアルゴリズムを開発した。

これらの準備のため、今回は実際の CPU 時間は使用していないが、より現実的な $12^3 \times 6$ 程度の格子上での計算はワークステーションで計算できる範囲を大きく超えるため、次期には大規模な計算のための利用を計画している。

References

- [1] P.E. Gibbs, Phys. Lett., B172 (1986) 53.
- [2] K. Nagata and A. Nakamura, Wilson Fermion Determinant in Lattice QCD, Phys. Rev. D82 094027 (arXiv:1009.2149) gata and A. Nakamura,