



PCクラスタ上の格子QCDシミュレーションシステムの開発研究

課題番号12554008

平成12年度～平成14年度科学研究費補助金(基盤研究(B)(2))

研究成果報告書

平成15年5月

研究代表者 中村 純

(広島大学 情報メディア教育研究センター 教授)



PCクラスタ上の格子QCDシミュレーションシステムの開発研究

課題番号12554008

平成12年度～平成14年度科学研究費補助金(基盤研究(B)(2))

研究成果報告書



平成15年5月

研究代表者 中村 純

(広島大学 情報メディア教育研究センター 教授)

研究組織

研究代表者：中村 純（広島大学・情報メディア教育研究センター・教授）
研究分担者：庄司 文由（広島大学・情報メディア教育研究センター・助手）
研究分担者：日置 慎治（帝塚山大学・経営情報学部・教授）
研究分担者：池坂 守夫（富士通研究所・主管研究員）

研究成果

1. 論文リストP 2
2. 要約P 6
3. 研究論文P 5 8

交付決定額（配分額）

（金額単位：千円）

	直接経費	間接経費	合 計
平成12年度	8,900	0	8,900
平成13年度	1,700	0	1,700
平成14年度	1,500	0	1,500
総 計	12,100	0	12,100

研究発表 (学会誌等)

1. 中村純、野中千穂、室谷心、和田浩明
量子色力学並列シミュレーションのオープンソースの開発
計算工学講演会論文集 Vol.8 (2003) p777-780
2. Shin Muroya, Atsushi Nakamura, Chiho Nonaka
Behavior of Hadrons at Finite Density – Lattice Study of Color
SU(2) QCD
hep-lat/0211010, Phys. Lett. B551 (2003) 305-310
3. 中村純、野中千穂、室谷心
量子色力学シミュレーションの並列化
計算工学講演会論文集 Vol.7 (2002) p191-194
4. O.Miyamura, S.Choe, Y.Liu, T.Takaishi and A.Nakamura
Responses of quark condensates to the chemical potential
Phys.Rev. D66 (2002) 077502
5. A. Nakamura, I. Pushkina, T. Saito, S. Sakai
Screening of hot gluon
Phys. Lett. B549 (2002), 133-138 (hep-lat/0208075)
6. S. Muroya, A. Nakamura and C. Nonaka
Study of the SU(2) High Density System with Wilson Fermion
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)106, (2002),453-455
7. S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi and H. Wada
I=0 scalar channel
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)106, (2002), 272-274
8. S. Choe, Ph. deForcrand, M. Garcia Perez, S. Hioki, Y. Liu, H. Mat-
sufuru, O. Miyamura, A. Nakamura, I.O. Stamatescu, T. Takaishi
and T. Umeda
Quenched charmonium near the continuum limit
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)106, (2002), 361-363
9. T. Saito, A. Nakamura and S. Sakai
Heavy quarks on anisotropic lattices with standard and RG im-
proved actions
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)106, (2002), 415-417

10. T. Saito, A. Nakamura and S. Sakai
Anisotropic Lattice and its Application to Quark Gluon Plasma
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)106, (2002), 543-545
11. S. Choe, Ph. deForcrand, M. Garcia Perez, S. Hioki, Y. Liu, H. Matsufuru, O. Miyamura, A. Nakamura, I.O. Stamatescu, T. Takaishi and T. Umeda
Screening mass responses to chemical potential at finite temperature
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)106, (2002), 462-464
12. S. Choe, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, T. Saito and F. Shoji
Lattice Tool Kit in Fortran90
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)106, (2002), 1037-1039
13. S. Choe, Ph. deForcrand, M. Garcia Perez, S. Hioki, Y. Liu, H. Matsufuru, O. Miyamura, A. Nakamura, I.O. Stamatescu, T. Takaishi and T. Umeda
Responses of hadrons to chemical potential at finite temperature
Nucl.Phys. A698 (2002) 395-399
14. B. Abdullaev, M. Musakhanov and A. Nakamura
Complex Diffusion Monte-Carlo method: tests by the simulations of 2D electron in magnetic field and 2D fermions-anyons in parabolic well
Proceedings of Quantum Monte Carlo Meeting, Trento, 2 - 6 July, 2001, Italy, cond-mat/0202256
15. QCD-TARO Collaboration
Responses of hadrons to chemical potential at finite temperature
Phys.Rev. D65 054501,2002 (e-Print Archive: hep-lat/0107002)
16. 中村純、日置慎治、青山幸也
並列処理でシミュレーション
川田重夫他編、別冊日経サイエンス「シミュレーション科学への招待 - コンピュータによる新しい科学」、pp26-33、日経サイエンス社
17. QCD-TARO Collaboration
MESON CORRELATORS IN FINITE TEMPERATURE LATTICE

QCD.

Phys.Rev. D63 (2001) 054501 . (e-Print Archive: hep-lat/0008005)

18. QCD-TARO Collaboration
Chemical potential response of meson masses at finite temperature
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)94, (2001),453-456
19. S. Muroya, A. Nakamura and C. Nonaka
Monte Carlo study of two-color QCD with finite chemical potential
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)94, (2001),469-472
20. Takahiro Sumiya, Atsushi Nakamura and Masafumi Nishizawa,
Problem Solving Environment for Genome Analysis
Proceedings of the Korean-Japan Computer Graphics Conference
2001 (2001) 196-203
21. QCdTARO Collaboration: Ph.deForcrand, M.García Pérez, T.Hashimoto,
S.Hioki, H.Matsufuru, O.Miyamura, A.Nakamura, I.O.Stamatescu,
T.Takaishi
Renormalization group flow of SU(3) lattice gauge theory - Numerical studies in a two coupling space -
Nucl.Phys. B577, (2000) 263-278
22. F. Shoji, T. Suzuki, H. Kodama, A. Nakamura
NEW GAUGE FIXING METHOD FOR ABELIAN PROJECTION.
Phys.Lett. B476, (2000) 199-204
23. S. Sakai, T. Saito , A. Nakamura
ANISOTROPIC LATTICE WITH IMPROVED GAUGE ACTIONS.
1. STUDY OF FUNDAMENTAL PARAMETERS IN WEAK COUPLING REGIONS.
Nucl.Phys. B584, (2000) 528-542
24. QCD-TARO Collaboration
MONTE CARLO RENORMALIZATION GROUP ANALYSIS OF QCD IN TWO-DIMENSIONAL COUPLING SPACE.
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)83, (2000),872-874 (hep-lat/9910011)

25. QCD-TARO Collaboration
A STUDY OF MESON CORRELATORS AT FINITE TEMPERATURE.
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)83, (2000), 411-413 (hep-lat/9911001)
26. QCD-TARO Collaboration
EFFECTS OF CHEMICAL POTENTIAL ON HADRON MASSES
IN THE PHASE TRANSITION REGION.
Nucl.Phys.(Proc.Suppl)83, (2000), 408-410 (hep-lat/9911034)
27. Sunao Sakai , Atsushi Nakamura , Takuya Saito
ANISOTROPIC IMPROVED ACTIONS. Nucl.Phys.(Proc.Suppl.)83,
(2000), 399-401 (hep-lat/0001004)
28. Y. Liu, O. Miyamura, A. Nakamura , T. Takaishi
SIMULATION OF SU(2) DYNAMICAL FERMION AT FINITE
CHEMICAL POTENTIAL AND AT FINITE TEMPERATURE.
To be published in the proceedings of International Workshop on
Non-Perturbative Methods and Lattice QCD, Guangzhou, China,
15-21 May 2000.

研究成果

本研究の目的と要約

– 並列格子 QCD のオープンソースコード –

1 序

格子ゲージ理論は、摂動によらずにゲージ理論の量子化の定式化を与える枠組みである。ユークリッド化した経路積分をモンテカルロシミュレーションにより評価することにより、非摂動領域の振舞いを調べる強力な手法となる。特に QCD では、閉じ込めを中心とする興味深い物理の多くが本質的に非摂動的であるため、ハドロン物理の研究者、場の量子論の研究者の研究の道具として、格子 QCD シミュレーションがもっと利用されるべきであると我々は考えている。

もちろん、最先端の計算機による超大規模な計算は大きな実験に匹敵するものであり、経験を積んだ研究者が共同研究で計算可能性の限界に挑んでいる世界で、片手間でできるようなものではない。しかし一方、計算機、特に PC やワークステーションの高速化、低価格化は著しい速度で進んでおり、しばらく前のスーパーコンピュータ並みの計算資源を研究室レベルで持つことが可能になってきた。ハドロン物理や場の量子論の研究者が研究室の PC でシミュレーションを行い、自分のアイデアを検証してみることが十分に可能な環境になってきている。

しかし、そうは言っても、格子 QCD のシミュレーションコードをゼロから書くのには膨大な時間がかかる。特にデバッグやチューニングは長い苦しい日々の連続になりがちである。多くの研究者は、格子 QCD についての知識、理解は十分にあっても、シミュレーションにまで踏み込むのは躊躇するのが普通であろう。

このような状況を改善するための 1 つの方法は、QCD コードのライブラリーを作ることである。しかし、ライブラリー化してしまうと、決まった計算しかできない。研究者は、いままでにないアイデアを持ち、それを実現したいと考えているわけであるから、ブラックボックスとなってしまうライブラリーは適切な方策とは思えない。実際、多くの研究者は、格子 QCD については十分な理解を持っているわけであり、またある程度のプログラムを書いたり、他人のプログラムを読むことのできる人は多い。元気のあるグループは、格子 QCD を専門分野とするグループからコード

を借りて、自分たちの目的に合わせて書き直すことも行っている。

それならば、十分に分かりやすいコードを提供し、自由に利用してもらえらるような環境を作れば、いままで経験のない研究者であっても、そのコードを読み、そして必要な部分を自分たちの目的のための部品として使うことができるのではないかと考えて、Lattice Tool Kit in Fortran90 (以下 LTK と略記) というプログラム集を開発してみた。以下で議論するコードの全体は

<http://nio-mon.riise.hiroshima-u.ac.jp/~LTK/>

から手に入れることができる。大きなコードは完全にバグが無いということは保証できないので (もし、そのようなことを言う人がいたら、その人の書いたプログラムは絶対に信用してはいけない)、我々もこのコードのバグによってもユーザーが不利益を被っても何も責任は取れないが、オープンソースとして多くの方に利用していただき、問題点が発見されたら改良していきたいと思っている。

Fortran90は、FORTRAN77の後継であるが、オブジェクト指向を取り込んだC++が普及した後に設計された言語であり、C++とほとんど同等のデータ記述能力を持っている。特に、C++の「クラス」に相当する「モジュール」の機能を使うことにより、式との対応が容易に見えるような形でプログラムを書くことができる。

このツールキットは、ブラックボックスとして利用されることを想定してはいない。むしろ、実際にコードを読んで自由に書き直して利用していただきたいと思っている。格子ゲージ理論についての基本的な理解とFortran90についての知識 (そして多少の忍耐) がある方なら数日で全コードを読みきれると考えている。付録Aでこのコードを理解するために必要なFortran90の新しい機能について紹介している*。付録BにLTKコードを利用する際に必要な格子QCDシミュレーションの解説を与える。計算スピードについてもある程度配慮しているが、まずは可読性を優先している。

*格子QCDには興味は無いが、Fortran90の新機能を知っておきたいという方にも役にたつかも知れない。但し、ポインター、自由形式については説明していない。

2 プログラムの構造

2.1 クエンチアップデート

クエンチ近似では、経路積分の中に現れるフェルミオン行列式 $\det W$ を落とす。

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_G - \bar{\psi} W \psi} = \int \mathcal{D}U \det W e^{-S_G} \sim \int \mathcal{D}U e^{-S_G} \quad (1)$$

モンテカルロ計算による経路積分の評価では、

$$P(\{U\}) = \frac{1}{Z} e^{-S_G(U)} \quad (2)$$

の確率でゲージ場を生成していく。数値計算上、大きな時間が使われるのは、 $S_G(U)$ を構成するプラケットの計算である。

$$\sum_{x, \mu} U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x) \quad (3)$$

Fortran90 のモジュールの機能を使うと、この部分を次のようにわかりやすく書くことが可能となる。

./GAUGE/update.f 内のサブルーティン subroutine make_staple より

```
TYPE(g_field1) staple, temp1, temp2, temp3
```

```
c      x+nu temp2
c      .----- .
c      I          I
c  temp1 I          I
c      I          I
c      .          .
c      x          x+mu
```

```
temp1 = u(nu)
temp2 = nu.gshift.u(mu)
temp3 = temp1 * temp2
temp1 = mu.gshift.u(nu)
staple = staple + (fac*(temp3.prodAD.temp1))
```

ここで、TYPE(g_field1) はあらかじめ ./MODULE/g_module1.f において

```
TYPE g_field1
  SEQUENCE
  COMPLEX*16, DIMENSION(NC,NC,NV/NBUSH) :: g
  INTEGER parity, direction
END TYPE
```

のように定義されている。また上記のプログラム中の演算 (=, +, .gshift, .prodAD.) も同様にモジュール中で定義されている。例えば加法は、以下のようにプログラム

./MODULE/g_module1.f 中で演算子「+」に関数 gadd を対応させて定義されている。

```
.....
INTERFACE OPERATOR(+)
  MODULE PROCEDURE gadd
END INTERFACE
.....
```

```
c-----c
FUNCTION gadd(a,b) RESULT(c)
c-----c
```

```
TYPE(g_field1), INTENT(IN):: a, b
TYPE(g_field1) c

do i = 1, NV/NBUSH

  c%g( 1, 1, i) = a%g( 1, 1, i) + b%g( 1, 1, i)
  c%g( 1, 2, i) = a%g( 1, 2, i) + b%g( 1, 2, i)
  c%g( 1, 3, i) = a%g( 1, 3, i) + b%g( 1, 3, i)
  .....

enddo

END FUNCTION
```

これらのモジュールで定義された演算も、コンパイラーが計算式の中の変数の型で演算を区別することによって、通常の演算同様適切に行われる。一度演算を定義すると、上記のように通常の演算と同じようにプログラム中で使用することができるので、紙の上での式とコード中の式の距離が短い。

2.2 クォークプロパゲータ

ここでは Wilson fermion、

$$W = I - \sum_{\mu} \kappa_{\mu} ((1 - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta_{x', x+\hat{\mu}} + (1 + \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x')^{\dagger} \delta_{x', x-\hat{\mu}}) \quad (4)$$

を使用している。行列の足であるカラー自由度 a, b 、ディラック α, β 、座標 x' を陽に書けば

$$W_{\alpha, \beta}^{a, b}(x, x') = \delta_{a, b} \delta_{\alpha, \beta} \delta_{x, x'} - \sum_{\mu} \kappa_{\mu} \left((1 - \gamma_{\mu})_{\alpha, \beta} U_{\mu}(x)^{a, b} \delta_{x', x+\hat{\mu}} + (1 + \gamma_{\mu})_{\alpha, \beta} U_{\mu}(x')^{\dagger a, b} \delta_{x', x-\hat{\mu}} \right)$$

クォークプロパゲータは、フェルミオン行列 W の逆であるが、巨大でかつゼロの多い (sparse) 行列なので、ガウス法などの直接法が使われることは無く、線形方程式

$$W \vec{X} = \vec{B} \quad (6)$$

の形にして、共役勾配法 (Conjugate Gradient method、CG) 系統の解法で必要な情報を求めるのが普通である。CG の計算では行列とベクトルの積、 $W \vec{X}$ とベクトルの内積が主たる計算となる。行列とベクトルの積のプログラムは以下のとおりである。

```
! W = I - Sum_{nu} ( kappa_nu(+) Q{+}_nu + kappa_nu(-) Q{-}_nu )
```

```
do nu = 1,4
  temp1 = nu .fshift. x
  temp2 = (-nu) .fshift. x
  temp = temp + ((hopp(nu)*temp1) + (hopm(nu)*temp2))
enddo

wxvect = x - temp
```

上記のプログラム中での演算 (=, .fshift., +, *) も前節と同様に、
./MODULE/f_module.f であらかじめ定義されている[†]。

共役勾配法の部分はプログラムの中では以下のようになっている。

```
USE field_f
TYPE(f_field) wxvect, x, b, res, p, q, s
.....

! ... the iteration starts
do i = 1, imax

    ! ... q = W * p
    if(iflag==1) then
        q = wxvect(p,2)
    else if(iflag==2) then
        q = wxvect(p,3)
    endif

    ! ... c2 = < q | q >
    c2 = q * q
    alpha = c1 / c2
    ! ... x = x + alpha * p
    x = x + (alpha*p)
    .....

enddo
```

このプログラムから分かるように、モジュールであらかじめ演算を定義しておくことにより、コメント文とほとんど同じ形でのアルゴリズムの表現が可能になっている。

[†]f_module.f で定義されている “*” は通常の演算の積とは違うことに注意。ユーザー定義の演算なので、加法、減法より優先して演算されるということはない。

2.3 ハイブリッドモンテカルロ (HMC) 法

クエンチ近似におけるアップデートに加え、ダイナミカルクォーク入りのアップデートで標準で使われるハイブリッドモンテカルロ (HMC) 法のプログラムも用意した。ハイブリッドモンテカルロ法では、フェルミオン行列式をボソン場の積分で表現したときの逆行列の計算、リー代数への射影、それを *exp* の肩に乗せ群にする計算などが現れる。

ここでもモジュール `hmc_mod` (`MODULE/hmc_module.f`) を用意することにより、すっきりとしたわかりやすいプログラムを目指している。

`./HMC/hmc.f` 内のサブルーティン subroutine `stepu` より、

```
USE hmc_mod

TYPE(g_field0) u(4)
TYPE(g_field1) staple, temp1, temp2, temp3

Direction: do mu = 1, 4
  call make_staple(u,staple,mu)    ! Staple for Wilson action
  temp2 = temp1.prodAD.staple    ! u*(staple)_adj

  ..... Projection onto Lie Algebra .....
  call projlink(temp2,temp3,NV)
  call algblink(temp3,c,NV)
  ..... p(new) = p(old) + fac * c .....
  p(mu) = p(mu) + ((factor*fac)*c)
  .....
```

上記のプログラムでは `p(mu)` がハイブリッドモンテカルロ法で必要となる Algebra field (カラーの8自由度と格子点に対応するディメンジョンを持つ配列) であり、例えばここで出てくる加法については `./MODULE/hmc_module.f` において次のように定義されている。

```
INTERFACE OPERATOR(+)      ! A1 + A2
  MODULE PROCEDURE aadd
END INTERFACE
```

.....

```

FUNCTION aadd(x,y) RESULT(z)

TYPE(a_field), INTENT(IN):: x, y
TYPE(a_field) z

do k = 1, NDFALG ! NDFALG : Number of Degrees of
                ! Freedom of Algebra = 8
do i = 1, NV
  z%a(k,i) = x%a(k,i) + y%a(k,i)
enddo
enddo

END FUNCTION

```

2.4 MPIによる並列化

Lattice Tool Kit では MPI (Message Passing Interface) を使用することによりプログラムの並列化を行い、大きな格子サイズの大規模計算も可能になっている (図 1)。MPI による並列計算は分散メモリー型の大型計算機、あるいは近年急速に使用されている PC クラスタ上で有効な数値計算手法である。

PC クラスタでも使える、フリーな MPI 実装系には Argonne National Lab. で開発された、MPICH (Portable Implementation of MPI) がよく使われており、これをインストールすることにより、MPI を使った並列計算が可能になる (<http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/>)。MPI を使わない場合における使用方法については次節のコンパイル、実行で述べる。

並列計算機には、CPU とメモリーを含むプロセッシング・エレメント (PE) がネットワークで結ばれている分散メモリー型と、1 つのメモリーを複数の CPU が共有する SMP (Symmetrical Multi-Processor) 型、およびこの複合型がある。PC をネットワークでつないだ PC クラスタは当然分散メモリー型になる。分散メモリー型では各 CPU ごとにメモリーが分散しているため、各 PE 間でデータのやりとりをする必要がある (図 2)。

グルーオンのゲージ場 $F_{\mu,\nu}$ 、クォーク場 ψ からなる作用は微分を含むので、格子上では近傍の変数との相互作用が計算に必要なになる。格子 QCD の並列計算では、通常、格子が PE に分割されるため、各 PE 上で端にいる変数は、近傍の変数が同じ PE 上ではなく、よその PE の上にあることがある。このとき、通信によってその変数の情報を取寄せる必要がある。

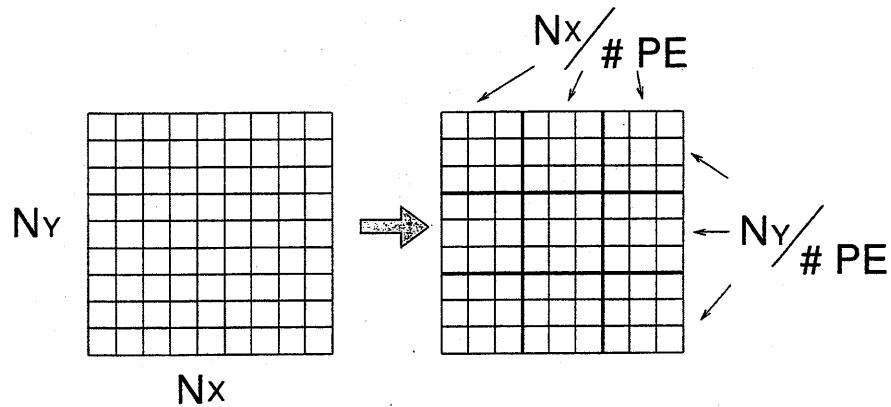


図 1: 格子サイズをプロセッサエレメントの数で分割することにより、大規模計算が可能。

当然、並列で行なう計算処理は、ゲージ部分、フェルミオン部分の両方で考慮する必要があり、LTK では、`./LIBRARY/boundary-gauge.f`, `boundary-fermi.f` の中でそれぞれ用意している。

複数の PE を使って並列計算を行う場合、計算の途中で隣の PE が持つ情報が必要になることがある。この場合、隣同士の PE 間でのデータのやりとりを考慮しなければならない。このときデータをやりとりする場として `wing` とか `fringe` とよばれる「のりしろ」部分を考える。実際のプログラム subroutine `set_wing_f1(a)` (`./LIBRARY/boundary-fermi.f`) から隣同士の PE 間でのデータのやりとりの様子を見ていく。ただし、ここではデータの流れをわかりやすくするために、カラー及びディラックの自由度は省略した。

以下のプログラムは x 軸方向にデータをやりとりしている。

```
c      .... Now we send data
      ! X-direction
      icum = 0
      do it = 1, NT; do iz = 1, NZ
```

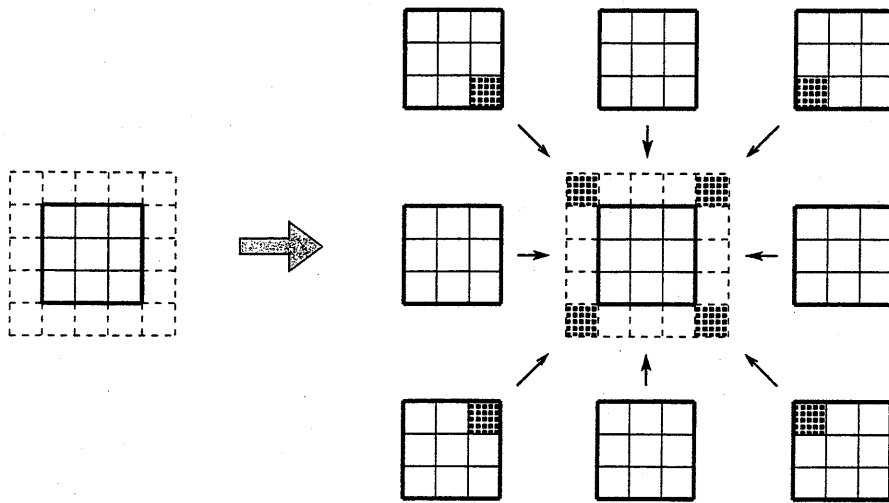



図 2: 隣のプロセッサ要素間で計算に必要なデータのやり取りをする。

```

do iy = 1, NY
  icum = icum + 1
  works1(icum) = a%f(NX, iy, iz, it)
enddo
enddo; enddo

nsend = NY*NZ*NT
call MPI_ISEND(works1(1), nsend, mpi_complex16,
&              iup, 1, mpi_comm_world, jsend1, ierr)

```

c

```

icum = 0
do it = 1, NT; do iz = 1, NZ
  do iy = 1, NY
    icum = icum + 1
    works2(icum) = a%f(1, iy, iz, it)
  enddo
enddo; enddo

```

c

```

nsend = NY*NZ*NT

```

```

call MPI_ISEND(works2(1), nsend, mpi_complex16,
&              idown, 1, mpi_comm_world, jsend2, ierr)

```

まず $ix=1$ 、 $ix=NX$ の情報をそれぞれ `works1`、`works2` に収める。それから `works1` のデータを IUP の PE (図 3 で右隣の PE) へ `works2` のデータを IDOWN の PE (図 3 で左隣の PE) へ送る。

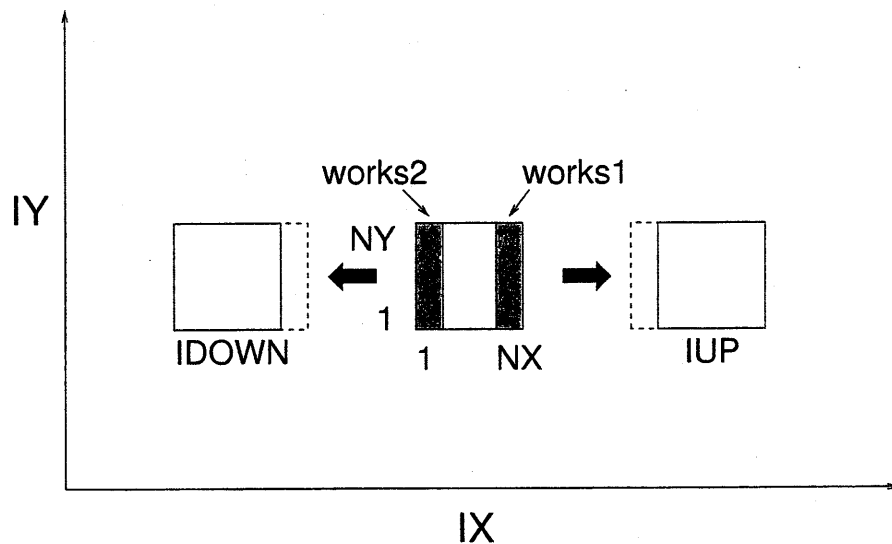


図 3: $ix=1, ix=NX$ のデータをそれぞれ `works1`、`works2` に入れて、IUP, IDOWN の PE に送る。

次に送ったデータを受け取る作業をする。まず IDOWN の PE (図 4 の左端の PE) から `workr1` を、IUP の PE (図 4 の右端の PE) から `workr2` を受け取る。受け取ったデータはのりしろ部分である $ix=0, ix=NX+1$ 部分に入れる。

```

c      ..... Now we receive data      ...
nrecv = NY*NZ*NT
call MPI_Irecv(workr1(1), nrecv, mpi_complex16,
&              idown, 1, mpi_comm_world, jrecv1, ierr)

nrecv = NY*NZ*NT
call MPI_Irecv(workr2(1), nrecv, mpi_complex16,
&              iup, 1, mpi_comm_world, jrecv2, ierr)

```

```

icum = 0
do it = 1, NT; do iz = 1, NZ
  do iy = 1, NY
    icum = icum + 1
    a%f(NX+1,iy,iz,it)=workr2(icum)
  enddo
enddo; enddo

```

```

icum = 0
do it = 1, NT; do iz = 1, NZ
  do iy = 1, NY
    icum = icum + 1
    a%f(0,iy,iz,it)=workr1(icum)
  enddo
enddo; enddo

```

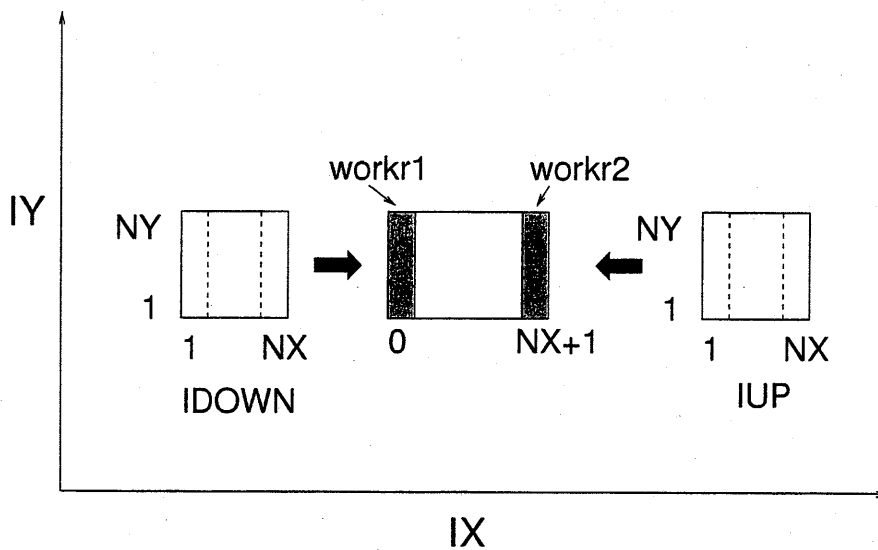


図 4: IDOWN の PE、IUP の PE から workr1、workr2 をうけとり、のりしろ部分 $ix=0$ 、 $ix=NX+1$ 部分に入れる。

このようにして計算に必要なデータを隣同士の PE でやりとりをする。

Y軸方向のデータのやり取りも同様。ここでは、もっとも簡単なフェルミオン場について説明をした。ゲージ場についてはもう少し工夫をしている。

ここでは実際のプログラムを見ながら簡単にMPIによるプログラムの中でのデータのやりとりの様子を説明した。MPIを使ったプログラミング方法の詳細については青山幸也氏(日本アイ・ビー・エム株式会社、現在理研)による「並列プログラミング虎の巻」(<http://www-6.ibm.com/jp/rs6000/resource/ufo/Wh>)という大変実践的でわかりやすい解説書があり、これを参照されたい。またMPI-J メーリングリスト、MPI 関連文書の日本語訳などMPIについての情報は<http://www.ppc.nec.co.jp/mpi-j/index.html> より得られる。

なお、MPIを使って計算している時は、得られた結果はそれぞれのPEの中での結果であることに注意されたい。全体での値を求めるためには各PEから出力して後で処理するか、以下のようなプログラムに変更する必要がある。2行目から4行目は、各PE上のplaqの合計をplaqsumに入れ、それをPE数で割っている。

```
call meas1(u,plaq)
call MPI_ALLREDUCE(plaq,plaqsum,1,MPI_REAL8,MPI_SUM,
& MPI_COMM_WORLD,IERR)
plaq = plaqsum/nprocs
```

2.5 境界条件の処理

周期的境界条件

$$x(N+1) = x(1) \quad (7)$$

$$x(0) = x(N) \quad (8)$$

をプログラムで表現する方法はいろいろある。

```
DO i = 1, N
  ia = i+1
  ib = i-1
  if(i==N) ia = 1
  if(i=1) ib = N
  xa = x(ia)
```

```

    xb = x(ib)
    ...
ENDDO

```

とするのが、一番直接的で分かりやすいが、条件式は一般に時間がかかり、また、ベクトル処理をする計算機ではベクトル化を阻害する。

配列 x に余分な要素 $x(0)$ と $x(N+1)$ を持たせておいて

```

REAL, DIMENSION(0:N+1) :: x

x(0) = x(N)
x(N+1) = x(1)
DO i = 1, N
    xa = x(i+1)
    xb = x(i-1)
    ...
ENDDO

```

あるいは、一度だけ

i	inn(i,1)	inn(i,2)
1	2	N
2	3	1
3	4	2
	...	
N-1	N	N-2
N	1	N-1

という配列 inn を作っておき

```

DO i = 1, N
    xa = x(inn(i,1))
    xb = x(inn(i,2))
    ...
ENDDO

```

と書くこともできる。どの形式がよいかは、使用する計算機による。

3 LTKf90 の使い方

3.1 ディレクトリ構造

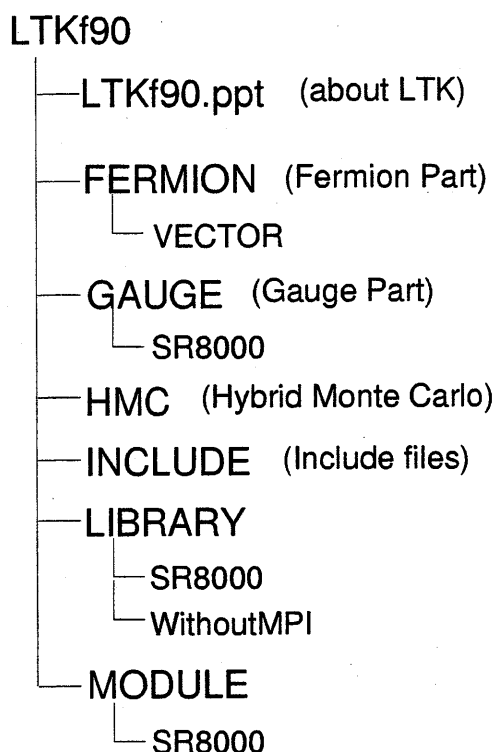


図 5: LTKf90 のディレクトリ構造

LTKf90.ppt には LTK についての説明が記述してある。FERMION にはフェルミオン部分についてのプログラム一式、GAUGE にはゲージ部分についてのプログラム一式、HMC にはハイブリッドモンテカルロ法に用いるプログラム一式がそれぞれ用意されている。INCLUDE には格子サイズ、並列計算をするときにプロセッサエレメントの数を規定するファイル、LIBRARY、MODULE には各計算に必要なモジュール、プログラムがそれぞれ収められている。FERMION、GAUGE、LIBRARY、MODULE にそれぞれある VECTOR、SR8000 のディレクトリ中のプログラムはそれぞれベクトル計算機、SR8000 でチューニングされている。

3.2 コンパイル、実行

まず、ディレクトリ INCLUDE へ行き、para.h 中の iprocs と jprocs を $\text{iprocs} \times \text{jprocs}$ が並列実行したい PE の数になるように編集する。例えば 4 台の CPU で実行したいときは、iprocs=2、jprocs=2 あるいは iprocs=1、jprocs=4 あるいは iprocs=4、jprocs=1 となる。クエンチのアップデートを行いたい時にはディレクトリ GAUGE へコンフィグレーションを読んで、ハドロンのプロパゲータを計算したい時はディレクトリ FERMION へ、ハイブリッドモンテカルロ計算をしたい時はディレクトリ HMC へ移動する。そのディレクトリで

```
% ./paraset
```

とすると、それぞれに適したパラメータファイル (para_geometry) ファイルを生成する。次に、INCLUDE ディレクトリの中のファイル para_geometry の中の格子サイズを目的に合わせて変更する。元のディレクトリ (GAUGE か FERMION か HMC) へ戻って、Makefile の中の

```
FCC = ....
```

の右辺を計算機のコンパイラに合わせて直す。

```
% make
```

コマンドを実行する。(コンパイルする際にできたオブジェクトファイルなどは make clean により一括して消すことができる。)

input ファイルの中を目的に合わせて編集し

```
% ./a.out < input
```

で実行する。

3.2.1 MPI を使わない時

LIBRARY ディレクトリにあるファイルの一部を、WithoutMPI というディレクトリの中にあるファイルに差し替える。

3.2.2 アルゴリズムの選択

クエンチアップデートには Metropolis と Heatbath が用意してある。GAUGE/main.f の中の

```
SWEEP1 : do n1 = 1, nsweep1
```

```

*           call  update1(u,beta)    !  for Metropolis
           call  update3(u,beta)    !  for the pseudo-heat bath

           enddo SWEEP1

```

を編集してアルゴリズムを選択する。

3.2.3 ゲージの作用の選択

GAUGE/update.f の中の

- call make_staple(u,staple,mu) を選べばプラケット作用
- call make_istaple(u,staple,mu) を選べば $1 \times 1 + 1 \times 2$ 改良作用になる。

1×1 と 1×2 の項の係数は subroutine make_istaple の中の
PARAMETER (c0=3.648, c1=(-0.331))
で調節する。

3.2.4 誤差の評価

./LIBRARY の中に、よく利用されるジャックナイフ法による誤差評価のためのプログラム jack.f が用意されている。

N 個のデータ x_1, x_2, \dots, x_N があつた時、その平均は $\langle x \rangle = \sum_1^N x_i$ 、誤差は σ/\sqrt{N} (σ は分散) であるが、ジャックナイフ法はもう少し手の込んだことをする。 N 個のデータを b 個のデータからなる m 個のクラスターに分ける ($N = mb$)。1 番目のクラスター (x_1, x_2, \dots, x_b) のデータを除いて (decimation) 計算した平均を X_1 、2 番目のそれを X_2 、 m 番目のクラスターを除いて計算した平均を X_m とする。この (X_1, X_2, \dots, X_m) の揺らぎから誤差を計算する。具体的な計算法はプログラム jack.f から容易に読み取れる。

3.3 環境に依存する問題

- 日立 SR8000 を使用する場合は、SR8000 というディレクトリ (LIBRARY と MODULE にある) の中のファイルを 1 つ上のディレク

トリの同じ名前のファイルと置き換えると効率が良くなる。

- ベクトル型スーパーコンピュータを使うときは、VECTOR というディレクトリ (FERMION にある) 中のファイルを1つ上のディレクトリの同じ名前のファイルと置き換えると効率が良くなる。PCでも、この置きかえで性能が向上することは多いと思われる。
- モジュールを定義しているファイルは現在すべてMODULEというディレクトリに置かれているが、コンパイルするディレクトリにそのファイルがあることを要求するコンパイラもある。その場合は、モジュール定義用ファイルをコンパイルディレクトリに移動し、Makefile 中の該当ファイルのパスを変更する必要がある。
- モジュール名と、そのモジュールを定義しているファイルの名前が一致していることを想定しているコンパイラがある。その場合は、ファイル名を変更する必要がある。

謝辞

LTKf90 のプログラムの作成にあたって I. Pushkina さん 羽藤隆夫さんの協力に感謝する。また、青山幸也氏と福田正大氏には全体を通読して、貴重な御意見を戴いた。G. Bali 氏からは図 15 の ps ファイルの提供を受けた。

Appendix

A Fortran 90

ここでは、FORTRAN77 から Fortran90 に移項した際に新しく追加された機能のうち、Lattice Tool Kit の中で使われているものについて説明する。

A.1 モジュール

モジュールには2つの機能がある。第一は大局的 (global) な変数の利用を可能にすることである。これまでの FORTRAN では、プログラム単

位 (main、サブルーティン、関数) 内の変数は、そこでだけ有効な局所的 (local) なものであった[‡]。大局的な変数を利用したいときは、COMMON を使うことで実現してきたが、言語設計の専門家から見ると COMMON は危険なものらしい (ここは、我々は専門家ではないので十分には理解していない)。Fortran90 では、MODULE を使って大局的な変数を定義できる。

```
MODULE common_variables
  REAL pi, energy, p
END MODULE
```

```
SUBROUTINE s1
USE common_variables
...
END
```

```
SUBROUTINE s2
USE common_variables
...
END
```

第二の機能は、ユーザーによる新しい型の定義である。REAL, INTEGER, COMPLEX などと同じように自分の使いたい変数の型を導入し、それに対する演算規則を定義することができる。C++における class に対応する。

以下は、2次元ベクトルとその加法を定義している例である。

```
MODULE vec_def

  TYPE vector
    REAL x, y
  END TYPE

  INTERFACE OPERATOR(+)

```

[‡]このこと自体は、プログラム単位の「カプセル化」のための重要なポイントであり、よいことである。

```

MODULE PROCEDURE vadd
END INTERFACE

CONTAINS

FUNCTION vadd(a,b) RESULT(c)
  TYPE(vector), INTENT(IN):: a, b
  TYPE(vector) c
  c%x = a%x + b%x
  c%y = a%y + b%y
END FUNCTION

END MODULE

```

```

-----c
PROGRAM f90test
-----c

USE vec_def
TYPE(vector) p, q, r

    p = vector(0.5, -1.5)
    q = vector(0.5, 0.5)
    r = p + q
write(*,*) r

END

```

A.2 DO ループ

FORTRAN77では、繰り返しループは

```

DO 10 i = 1, N
  ....
10 CONTINUE

```

というように番号でループを指定することが基本であった。当時から多くのコンパイラーが拡張として認めていた

```
DO i = 1, N
...
END DO
```

が Fortran90 では標準の繰り返しの書き方になった。さらに、

```
Step: DO i = 1, N
...
ENDDO Step
```

というように、ループに名前を付けることもできる。長いループや、たくさんのループの入れ子になっている時に、名前を付けることで見やすいコードを書くことができる。

A.3 変数の宣言

FORTRAN77 では、変数の宣言は例えば、

```
REAL x
```

もし配列であれば、

```
REAL x
DIMENSION x(10)
```

あるいは

```
REAL x(10)
```

と宣言した。これらの書き方はすべて Fortran90 でも有効であるが、さらに

```
REAL, DIMENSION(10):: x
```

という書き方が導入された。おそらく Fortran90 の設計者は、これを標準とすることを推奨しているのではないかと思う。DIMENSION の宣言以外のものも書くことができ、特に重要なのは、サブルーティンや関数の引数に対し

```

SUBROUTINE sub(x,y)
REAL, INTENT(IN)::x
REAL, INTENT(OUT):: y
.....

```

ということに、サブルーティンにとってのインターフェースである引数が、入力であるか出力であるかを指定することが出来るようになった（入力/出力両方である引数は INTENT(INOUT) とする）、このように書いても、直接的には何か変わるわけではないので、面倒なだけと感じる方もあるかと思うが、大規模なプログラムの難しいバグは、引数の受け渡しの部分に潜んでいることが多く、コンパイラーが引数の役割を知ることが出来るチェックもより広くできるはずである。INTENT 属性を指定するのは、よい習慣である。

B やさしい格子 QCD シミュレーション入門

B.1 目的

この付録では、数値シミュレーションを実際にやった経験の無い人を対象として、格子ゲージ理論のモンテカルロ (MC) シミュレーションの方法をやさしく解説する。格子モンテカルロシミュレーションはある意味“数値実験”である。物理を研究している人ならば、どんな理論家であっても自分の研究の中で実験データを利用するものであろう。同じ様な意味で、数値シミュレーションのデータももっと広い範囲の研究者に利用されるべきものである。その際、実験データの場合と同じように、どのように取得されたデータをどんな風に処理したのか、そして、どのような点が難しいのかを理解しておくことは、データを有効に利用するために重要なことである。この付録が、これから格子ゲージ理論の数値シミュレーションを始めようとする方や、数値計算を自身では行わないが、その結果には興味のある方々の役に立つことを願っている。

この解説では、モンテカルロデータがどのようにして得られるのかをできるだけやさしく説明するつもりである。さらに格子ゲージ理論のシミュ

A.NAKAMURA , Acta.Phys.Pol.B16, (1985), 635 “PRACTICAL INTRODUCTION TO MONTE CARLO OF LATTICE QCD AND ITS APPLICATION TO QUARK GLUON PLASMA” より抜粋、一部加筆訂正

レーションの色々な技法に対する簡単な解説も与えることにする。もっと深い理解のためには参考文献 [2]-[9] を参照してほしい。この解説自身は専門家でなくても、他の文献を参照したりする必要なく、肘かけ椅子に座ったままで容易に読み通せることを目指して記述した。

B.2 多次元空間での積分 [10]

n 次元上での数値積分を考えることにする

$$I = \int f(x) dx_1 dx_2 dx_3 \dots dx_n. \quad (9)$$

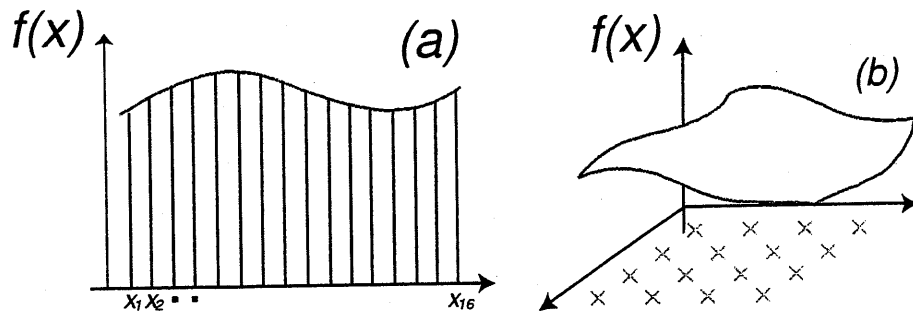


図 6:

いま、数値積分をする際に 16 点しか評価できなかつたとしよう。それでも $n = 1$ の場合には、たぶん妥当な近似値を得ることできるであろう (図 6a)。 $n = 2$ ではそれぞれの方向に 4 点しか存在しないことになり (図 6b), ここから得られる結果は、おそらく、それほど信頼のおけるものではないであろう。さらに $n = 10$ の場合には一つの方向について、1.32 点しか取ることができないことになり、もはや誰もこの計算から得られた結果を信用しないであろう。式 (9) を台形公式 (rectangle rule) で評価すると。誤差のオーダーは

$$Error \sim \frac{1}{N^{\frac{1}{n}}} \quad (10)$$

となる。ここで N は、被積分関数の値を求める点の総数である (いまの例では 16)。非常に大きな n に対しては、シンプソン法やガウス法であっても、実用にならなくなってしまう。 $n > 5$ の次元程度から、式 (9) を精度良く計算するのは難しくなる。これから解説しようとしている格子 QCD の場合には n はだいたい数 10 万、あるいはそれ以上のオーダーになる。通常、点 x は n 次元空間中で規則的に選ばれるが、もしこの代表点を n 次元空間中でランダムにとってみると (図 7)、一般的な統計学の理論から

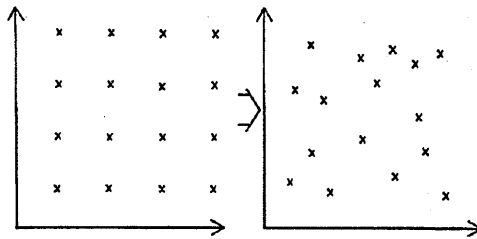


図 7:

$$Error \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (11)$$

が言える。ここで、式 (11) の中に、積分空間の次元、 n が現れていないことが重要である。つまり、 n が非常に大きい場合であっても、 N さえ大きければ、正確な値を得ることができるのである。これがモンテカルロ法の本質的なアイデアである。

容易に想像できるように、上で議論した積分精度は関数 f の形にも依存している。 f がほとんど平らな関数ならば積分は容易に実行することができるが (図 8b)、 f が急激に変化する関数の場合、積分の実行はそれほど簡単ではなくなる (図 8a)。

この問題に対しては、「インポートランス サンプリング (Importance Sampling)」と呼ばれる、強力な技法が知られている。まず、新しい変数 t を次のように定める。

$$\frac{dx}{dt} \sim \frac{1}{f} \quad (12)$$

これから、

$$I = \int f(x(t)) \frac{dx}{dt} dt \quad (13)$$

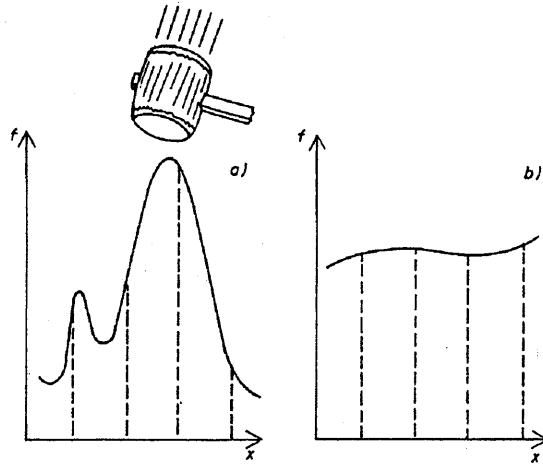


図 8:

となる。条件 (12) より、式 (13) の被積分関数はほとんど平らになる。この単純な変数変換は実際に多くの場合に有効に働く。

インポートランス サンプリングは考え方は極めて明確であるが、はたして実際に (12) を満たすような変数 t をうまく見つけられるかどうかの問題である。この点についてもう少し詳細に検討してみよう。ヤコビアン dx/dt は f を補正するように決めている (図 9a,b,c)。つまり (12) は、 f が大きければ dx/dt は小さく、 f が小さければ dx/dt は大きくなるように決めている。 $dx/dt \sim \Delta x/\Delta t$ なので、もし一定の Δt だけ離れた点をつかって数値積分を行うとしたら、大きい f に対しては Δx は小さくなり、小さい f に対しては Δx は大きくなる。つまりインポートランス サンプリング法は「 $f(x)$ が大きな値となる付近では x の点を多く取れ」と言う意味になる。

インポートランス サンプリングに基づいて点を機械的に選ぶ方法に「メトロポリスアルゴリズム (Metropolis 法)」がある [11] §. いま、

$$\int e^{-S(x)} dx \quad (14)$$

という積分を考えることにする。このとき具体的にやるべきことは表 1 のフローチャートにしたがって x を選ぶということだけである。この手

§この論文は有名な割には実際には読んだ人は少ないかもしれない。物理屋には大変読みやすい論文である。

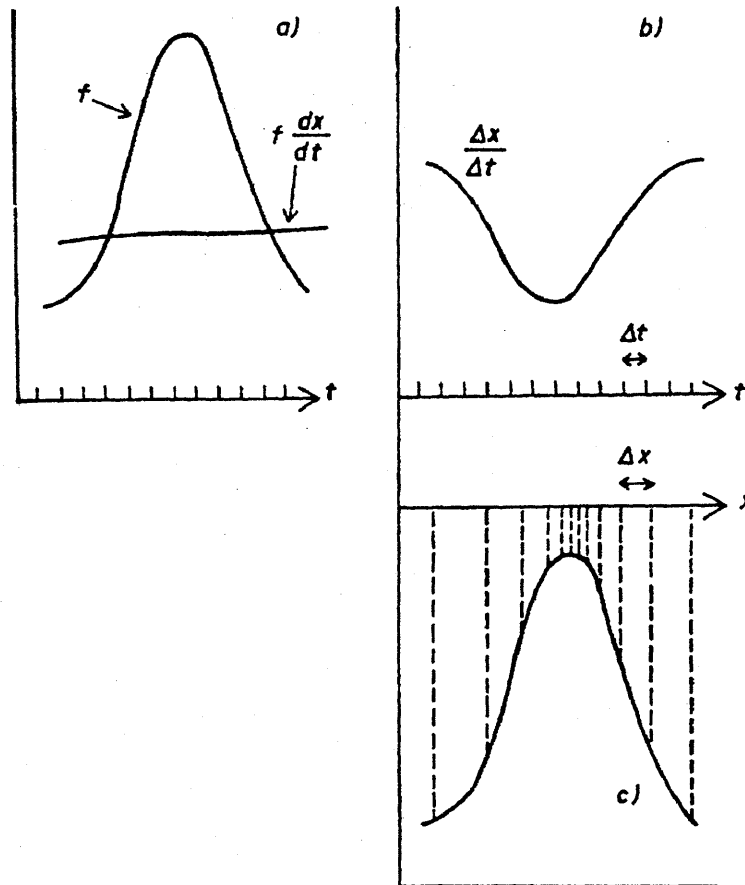


図 9:

続きをなんども繰り返すことでたくさんの点 x を発生させると、得られた点 x の分布密度が $\exp(-S(x))$ に比例する。簡単な場合で、実際に何が起こるのか“数値実験”してみることを勧める。図 10 は $S = x^2$ の場合に、表 1 の手続きに従って得られた点の分布を表している。

モンテカルロ計算では、空間 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ 中の点をランダムに次々と巡っていく。空間中の点 A と B の近傍 dx 中の確率をそれぞれ $P(A)dx, P(B)dx$ とする。また A にいたあと B に遷移する確率を $p(A \rightarrow B)$, その逆を $p(B \rightarrow A)$ とする。

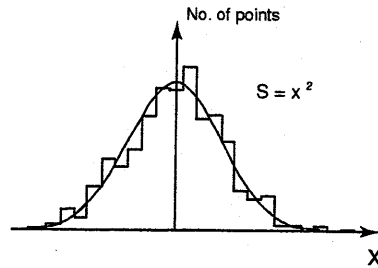


図 10:

まず $S(A) > S(B)$ の場合を考える。メトロポリスアルゴリズムでは、

$$\begin{aligned} p(A \rightarrow B) &= 1 \\ p(B \rightarrow A) &= e^{-(S(A)-S(B))} \end{aligned} \quad (15)$$

である。空間の中で、点 A から B に流れていく数は $P(A)p(A \rightarrow B)$ であり、点 B から A に流れていく数は $P(B)p(B \rightarrow A)$ で与えられる。したがって、もし平衡状態に達していれば、この両者は等しいはずなので、

$$P(A) = P(B)e^{-(S(A)-S(B))} \quad (16)$$

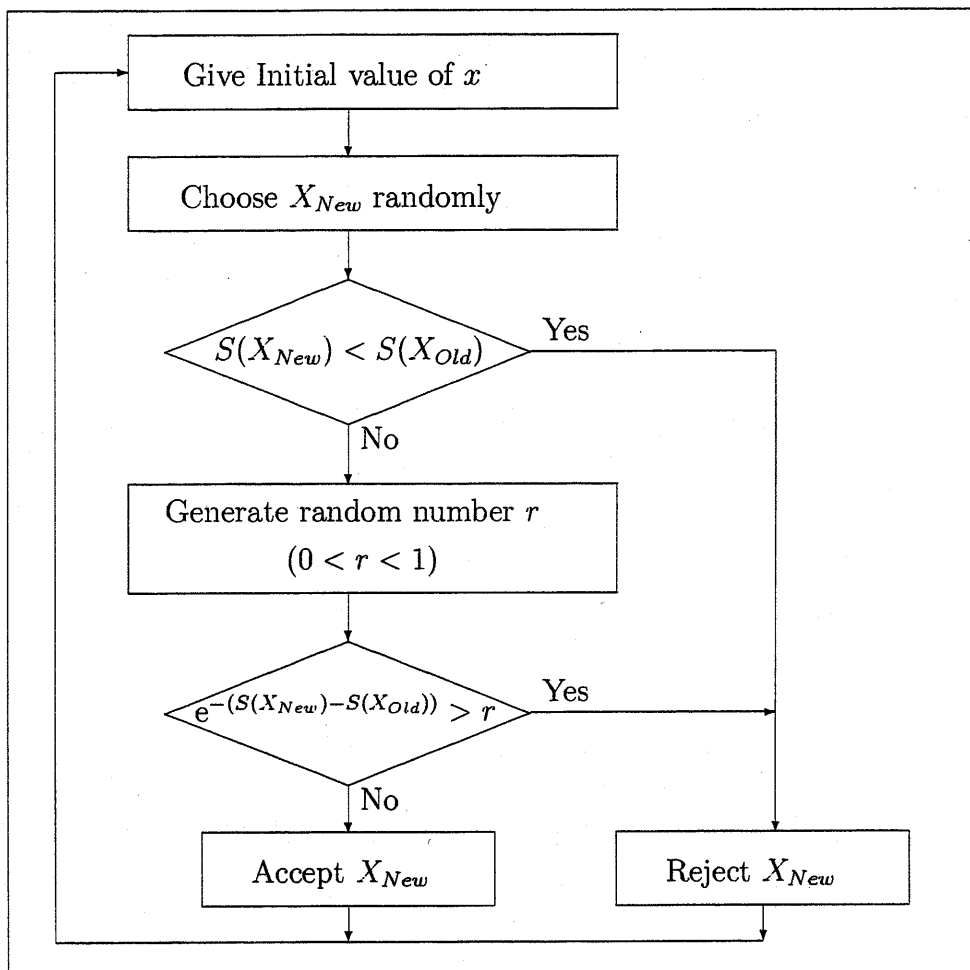
とおける。すなわち

$$P(A)e^{S(A)} = P(B)e^{S(B)} \quad (17)$$

となる。これは、この量が一定でなければならないということを意味しているので、これを $P(A)e^{S(A)} = C$ とおけば、

$$P(A) = Ce^{-S(A)} \quad (18)$$

が得られる。もちろん $S(A) < S(B)$ の場合も同様である。



B.3 一次元量子力学

量子力学にたいするモンテカルロ計算の最も簡単な例として、一次元の量子力学を取り上げる [12]. ラグランジアン L の量子力学系の分配関数 Z は、ファインマンの径路積分で下記のように書きあらわすことができる.

$$\begin{aligned}
 Z &= \int \mathcal{D}x e^{\frac{i}{\hbar} \int dt L}, \\
 L &= \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x), \\
 \mathcal{D}x &= \lim_{n \rightarrow \infty} dx_1 dx_2 \dots dx_n.
 \end{aligned} \tag{19}$$

これをユークリッド空間で考えると,

$$\begin{aligned}
 t &\rightarrow -i\tau, \\
 L &\rightarrow -\frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x) = -H, \\
 Z &\rightarrow \int \mathcal{D}x e^{-S/\hbar},
 \end{aligned} \tag{20}$$

となる. ここで,

$$S = \int d\tau H \tag{21}$$

である. しかし数値計算上では $\lim_{n \rightarrow \infty}$ の連続極限を取ることはできず、有限個の $x(t)$ についての積分になる. すなわち,

$$\begin{aligned}
 Z &\simeq \int dx_1 dx_2 \dots dx_{n-1} e^{-S/\hbar}, \\
 S &= \sum_j a \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{a} \right)^2 + V(x_j) \right],
 \end{aligned} \tag{22}$$

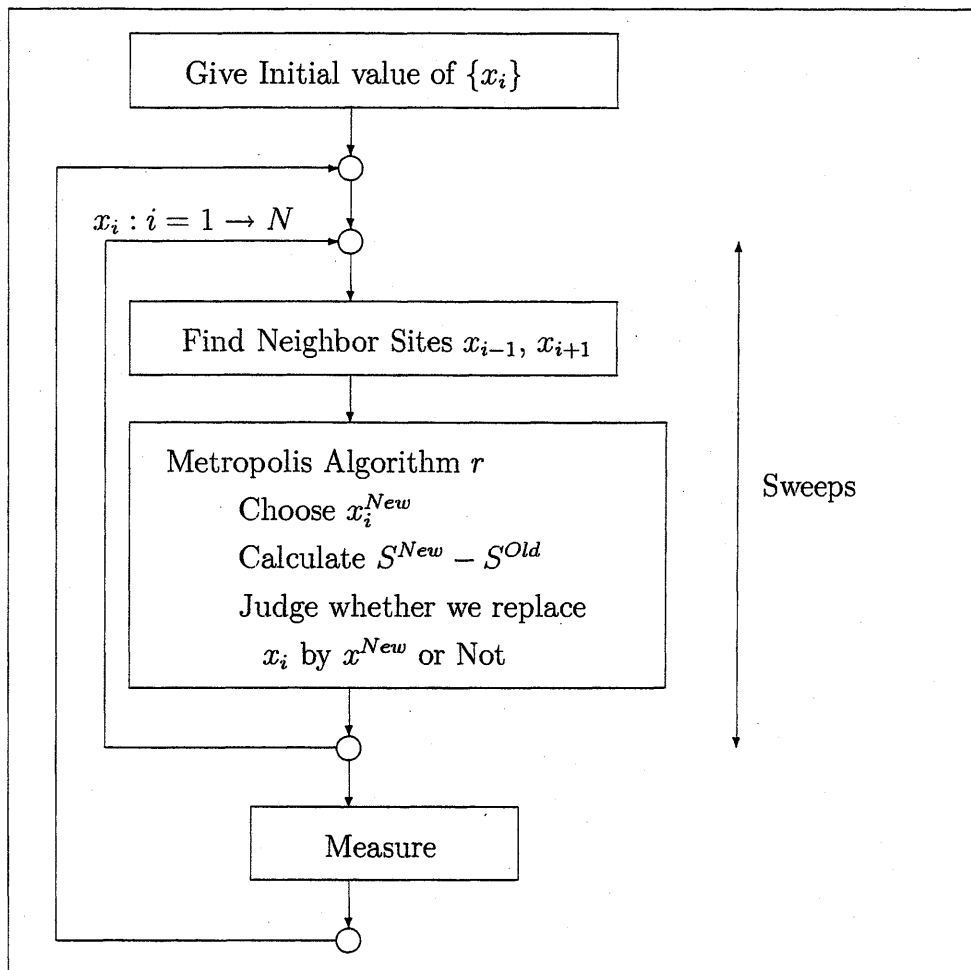
という多重積分である. ただしここで $x_j = x(\tau_j)$ とした.

表 2 に示したフローチャートに従えば, 前節で述べたモンテカルロシミュレーション (MC) の手法を使って, 式 (22) を評価することができる.

ここで, 作用のほとんどの部分は $S^{(\text{new})}$ と $S^{(\text{old})}$ で変わっていないので, 作用の差,

$$S^{\text{new}} - S^{\text{old}} = S(\dots x_i^{(\text{new})} \dots) - S(\dots x_j^{(\text{old})} \dots)$$

を計算する際に, 作用の全ての部分を計算し直す必要はないという点は重要である. 全ての x_i を更新する一回の手続きを 1 スウィープ (sweep) と呼ぶ. 図 11 では, 平衡状態から遠く離れた配位 (コンフィギュレーション) x_i が, どのくらい早く平衡状態に達するかを示している. 図 12 は極小点が 2 つ存在する ダブルウェル型ポテンシャルの場合の典型的な配位を表している.



B.4 格子QCDのラグランジアン

格子QCDではユークリッド空間を4次元の格子で近似し、そのサイト(頂点)上及びリンク(辺)上にそれぞれ、クォークとグルーオンがあると考える(図13)。QCDラグランジアンは径路積分の積分測度は、各サイト上のフェルミオン ψ_n 、アンチフェルミオン $\bar{\psi}_n$ 及びリンク上のゲージ場 U_{nm} を用いて以下のように書き表せる

$$DU D\bar{\psi} D\psi \rightarrow \Pi dU_{nm} \Pi d\bar{\psi}_n d\psi_n. \quad (24)$$

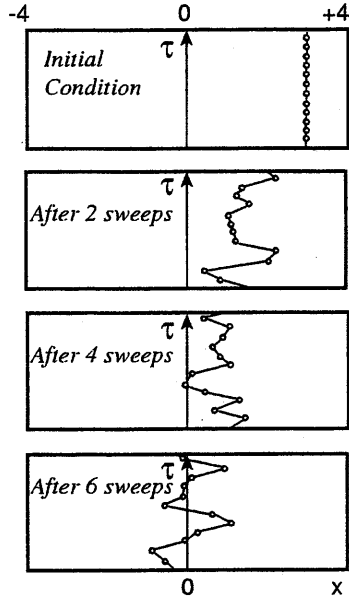


図 11:

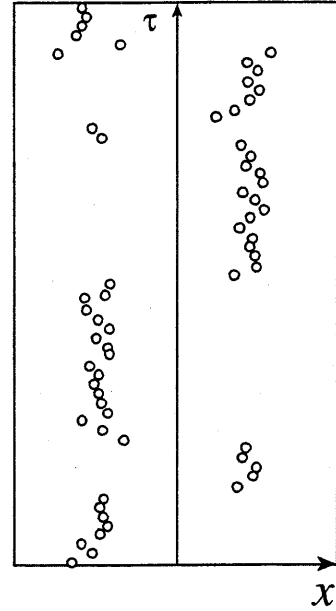


図 12:

Wilson は格子上の作用を次のように与えた [13, 14].

$$\begin{aligned}
 S &= S_G + S_F, \\
 S_G &= \beta \sum_{\text{plaq}} \left\{ 1 - \frac{1}{N} \text{Tr}(U_{ij} U_{jk} U_{kl} U_{li}) \right\}, \\
 \beta &= \frac{2N}{g^2}, \quad U_{ij} \in SU(N) \\
 S_F &= \sum_{i,j} \bar{\psi}_i W(i,j) \psi_j,
 \end{aligned} \tag{25}$$

フェルミオン行列 $W(i,j)$ は

$$W(i,j) = I - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \{ (1 - \gamma_\mu) U_{ij} \delta_{i+\hat{\mu},j} + (1 + \gamma_\mu) U_{ij} \delta_{i-\hat{\mu},j} \}$$

である。ここで、 U のカラーの添字 (4次元空間の添字 i, j をカラーの足と混乱しないように) 及び $\psi, \bar{\psi}$ のカラー、フレーバー、ディラックの添字は省略した。グルーオンを表すリンク変数 U 、クォークを表すサイト変数 ψ は、格子サイズを a として、連続理論での場の変数と次のように

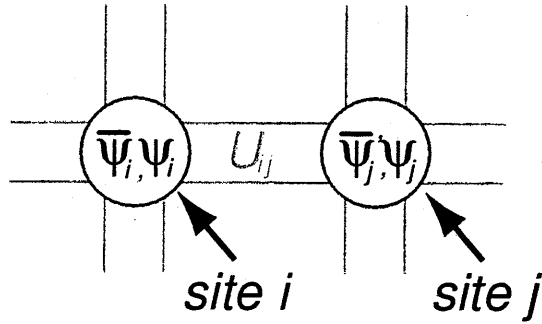


図 13:

関係づけられる.

$$\begin{aligned}
 U_{n,n+\hat{\mu}} &= e^{igaA_{\mu}(na)}, \\
 \psi_n &= \sqrt{\frac{a^3}{2\kappa}}\psi(na).
 \end{aligned}
 \tag{27}$$

これらの関係式を用いて, S_G, S_F の“古典的”な連続極限 $a \rightarrow 0$ がお馴染みの QCD の作用になることは容易に確かめられる。

$$\begin{aligned}
 \lim_{a \rightarrow 0} S_G &= \frac{1}{2} \int d^4x \text{Tr}\{F_{\mu\nu}^2\}, \\
 \lim_{a \rightarrow 0} S_F &= - \int d^4x \{m\bar{\psi}(x)\psi(x) + \bar{\psi}(x)\gamma_{\mu}(\partial_{\mu} + igA_{\mu})\psi(x)\}.
 \end{aligned}
 \tag{28}$$

ここでホッピングパラメータ κ を

$$\kappa = \frac{1}{8 + 2ma}
 \tag{29}$$

と置いた。

格子上のゲージ変換は連続理論の場合と比べて簡単で、

$$\begin{aligned}
 \psi_n &\rightarrow \omega_n \psi_n, \\
 \bar{\psi}_n &\rightarrow \bar{\psi}_n \omega_n^{\dagger}, \\
 U_{nm} &\rightarrow \omega_n U_{nm} \omega_m^{\dagger}, \\
 U_{nm}, \omega_n &\in SU(N).
 \end{aligned}
 \tag{30}$$

で与えられる。この変換に対して、 $U_{ij}U_{jk}\cdots U_{ni}$ や、 $\bar{\psi}_i U_{ij}U_{jk}\cdots U_{mn}\psi_n$ といった量は不変に保たれる。従って作用 (25) はもちろんゲージ不変である。連続極限 $a \rightarrow 0$ をとると、上のゲージ変換の表式が、

$$\begin{aligned}\psi(x) &\rightarrow \omega(x)\psi(x), \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}(x)\omega(x)^\dagger, \\ A_\mu(x) &\rightarrow \omega(x)A_\mu(x)\omega(x)^\dagger + \frac{i}{g}(\partial_\mu\omega(x))\omega(x)^\dagger,\end{aligned}\quad (31)$$

に対応することがわかる。

読者はぜひ一度は自分自身で (28) を確かめてみることを勧める。それには、例えば文献 [14] の付録が参考になるであろう。この計算を通して、フェルミオン部分は実はもっと一般的な形

$$W = cI - \kappa \sum_{\mu} \{(r - \gamma_{\mu})U_{ij}\delta_{i+\hat{\mu},j} + (r + \gamma_{\mu})U_{ij}^\dagger\delta_{i-\hat{\mu},j}\}, \quad (32)$$

$$\kappa = \frac{c}{8r + 2ma}.$$

を取ることが出来ることに気がつくであろう。ここで r は Wilson 項と呼ばれる項である。

また、空間方向の格子間隔 a_s は必ずしも時間方向の格子間隔 a_t と同じである必要はないということにも気づくことと思う。このような $a_s \neq a_t$ の格子は非等方格子 (Asymmetric Lattice) と呼ばれ、有限温度のシミュレーションの際に重要となる。非等方格子の古典的な連続極限は

$$1 - \frac{1}{2N} \text{Tr}(UUUU) \rightarrow \begin{array}{ll} a_t^4 \beta \text{Tr}(F_{kl}^2) & \text{空間方向プラケット} \\ a_t^2 a_s^2 \text{Tr}(F_{it}^2) & \text{時間方向プラケット}, \end{array} \quad (34)$$

$$\psi = \sqrt{\frac{a_1}{2\kappa_t}} \psi(na).$$

で与えられ、このときホッピングパラメータも 2 種類の格子間隔に対応して、

$$\begin{aligned}\kappa_t &= \frac{1}{2ma_t + (2 + 6a_t/a_s)r}, \\ \kappa_s &= \frac{1}{2ma_s + (2a_s/a_t + 6)r},\end{aligned}\quad (36)$$

の 2 種類となる。

ここで、連続極限では消えてしまう Wilson 項がなぜ必要なのか不思議に思うかもしれない。これはフェルミオンを取り入れた格子ゲージ理論の、おそらくは、最も重要でありかつ最も難しい問題であろう [16, 17]。この問題の議論は非常に奥が深く、別の紙面を割くことが必要となるので、ここでは S_F は $r=0$ ならば、対角化可能であることを指摘するに留め、これ以上はこの問題に深入りしないこととする [18, 19]。

$r=0$ と置くと、フェルミオンの作用は

$$S_F = 2ma\bar{\psi}_n\psi_n + \sum_{\mu} \{\bar{\psi}_n\gamma_{\mu}U_{n,n+\hat{\mu}}\psi_{n+\hat{\mu}} - \bar{\psi}_{n+\hat{\mu}}\gamma_{\mu}U_{n+\hat{\mu},n}\psi_n\}. \quad (37)$$

となる。ここで、 c を $2ma$ とおいた。次の様な局所ユニタリー変換を考える。

$$\psi_n = T_n\chi_n, \bar{\psi}_n = \bar{\chi}_nT_n^{\dagger}, \quad (38)$$

$$T_n = (\gamma_1)^{n_1}(\gamma_2)^{n_2}(\gamma_3)^{n_3}(\gamma_4)^{n_4}, \quad (39)$$

$$n = (n_1, n_2, n_3, n_4). \quad (40)$$

これらを用いて、次のような関係を容易に確かめることができる。

$$\begin{aligned} & \bar{\psi}_n\gamma_1\psi_{n+\hat{1}} \\ &= \bar{\chi}_n(\gamma_4)^{n_4}(\gamma_3)^{n_3}(\gamma_2)^{n_2}(\gamma_1)^{n_1}\gamma_1(\gamma_1)^{n_1+1}(\gamma_2)^{n_2}(\gamma_3)^{n_3}(\gamma_4)^{n_4}\chi_{n+\hat{1}} \\ &= \bar{\chi}_n\chi_{n+\hat{1}}, \end{aligned}$$

$$\bar{\psi}_n\gamma_2\psi_{n+\hat{2}} = (-1)^{n_1}\bar{\chi}_n\chi_{n+\hat{2}},$$

$$\bar{\psi}_n\gamma_3\psi_{n+\hat{3}} = (-1)^{n_1+n_2}\bar{\chi}_n\chi_{n+\hat{3}},$$

$$\bar{\psi}_n\gamma_4\psi_{n+\hat{4}} = (-1)^{n_1+n_2+n_3}\bar{\chi}_n\chi_{n+\hat{4}},$$

そしてフェルミオンの作用 S_F は

$$S_F = 2ma\bar{\chi}_n\chi_n + \sum_{\mu} \eta_{\mu}(n)\{\bar{\chi}_nU_{n,n+\hat{\mu}}\bar{\chi}_{n+\hat{\mu}} + \bar{\chi}_{n+\hat{\mu}}U_{n+\hat{\mu},n}\chi_n\}. \quad (44)$$

となる。ここで $\eta_{\mu}(n)$ は

$$\eta_{\mu}(n) = \begin{cases} 1 & (\mu=1), & (-1)^{n_1} & (\mu=2), \\ (-1)^{n_1+n_2} & (\mu=3), & (-1)^{n_1+n_2+n_3} & (\mu=4). \end{cases} \quad (45)$$

である。驚くべきことに、式 (44) には、 γ 行列が存在しない！ χ はディラックのインデックス空間で本質的には 1 つの要素しかない。このフェルミオ

ン作用は KS フェルミオン (Kogut-Susskind Fermion、Staggerd Fermion) と呼ばれている。この作用はカイラル対称性について議論するときには便利であるが、ハドロンの波動関数は複雑な物となる。つまり、波動関数は格子状で局所的ではなく、ハイパーキューブの 16 点上に存在するクォークから構成されることとなる。詳しくは参考文献 [20] を参照されたい。

B.5 フェルミオンの入っていない格子ゲージ理論

量子力学でも統計力学でも、物理量の測定は対応するオペレーター O の期待値

$$\langle O \rangle = \frac{\int DU O e^{-S}}{\int DU e^{-S}} \quad (46)$$

を取ることを意味する。ここで S は系の作用である。モンテカルロシミュレーションでは、場の量の配位 (コンフィギュレーション) $\{U\}$ は $\exp(-S(U))$ に比例した確率で生成される。従って、次のように単純に平均を取るだけで、上式の e^{-S} を重みとした O の期待値が求まることになる。

$$\langle O \rangle = \sum_k O^{(k)} / \sum_k 1 \quad (47)$$

ここで、 $O^{(k)}$ は k 番目の配位でのオペレーター O の値である。

B.5.1 Wilson ループと Polyakov 線

ゲージ理論では、物理量はゲージ不変な量であるべきである[†]。ダイナミカルクォークを考慮しない場合、最も簡単なゲージ不変量は Wilson ループ W 、と Polyakov 線 L である。SU(N) ゲージ理論でこれらの量は以下のように定義される。

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{N} \text{Tr}(U_{ij} U_{jk} \dots U_{li}), \\ L &= \frac{1}{N} \text{Tr}(U_{12} U_{23} \dots U_{n-1n}). \end{aligned} \quad (48)$$

係数 N なしで定義されていることもあるので注意が必要である。

[†]近年、プロパゲーターなどゲージに依存する量の重要性が指摘され、測定が試みられている。この場合、もちろんゲージを固定して期待値を取る必要がある。格子ゲージ理論は、ゲージを固定せずに量子化を行える唯一の定式化であるが、ゲージを固定することもできる。

Wilson ループと Polyakov 線の物理的な意味について簡単に考えてみよう.

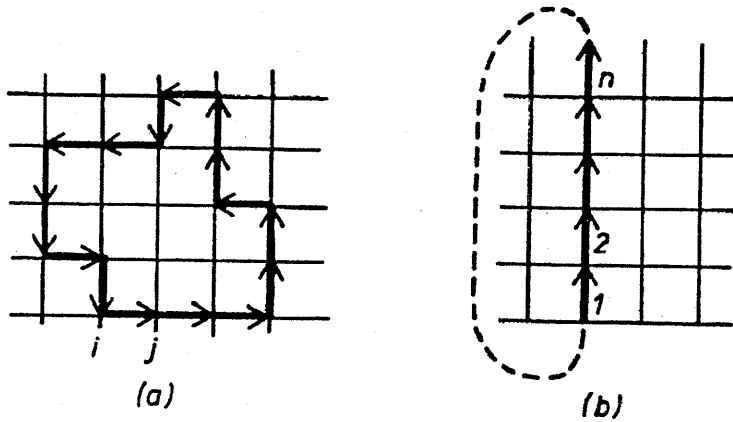


図 14:

図 14 にあるように、全てのリンク変数が同じ値ならば (コールド状態と呼ばれる)、Polyakov 線は $\langle L \rangle = 1$, でありもし完全にランダムなら、 $\langle L \rangle = 0$ となる. Polyakov 線の期待値は閉じ込め相では 0 である.

ゲージ場の外部源, $j_\mu = g\delta^3(x_\mu - x_\mu(t))$ が系に加えられたとする. このとき系の全エネルギーは

$$i \int d^4x j_\mu A_\mu = ig \int dx_\mu A_\mu \quad (49)$$

だけ増加し、作用は

$$e^{-S_G} \rightarrow e^{-ig \int dx_\mu A_\mu - S_G} = e^{igaA_n} e^{igaA_{n-1}} \dots e^{igaA_1} e^{-S_G} \quad (50)$$

と変化する. 従って、 $L \times T$ の Wilson ループの期待値を計算すれば、ゲージ場の空間的に固定された外部源間のポテンシャル、すなわち、無限に重いクォーク間のポテンシャル

$$\begin{aligned} \langle \text{Tr}(\square) \rangle &= \frac{Z \text{ with } \square}{Z} \\ &= e^{-TV(L)} \end{aligned} \quad (51)$$

を評価することができる。

図 15 に Bali による Wilson ループの測定から得られた重いクォークのポテンシャルの形状についての結果をしめす [15]。

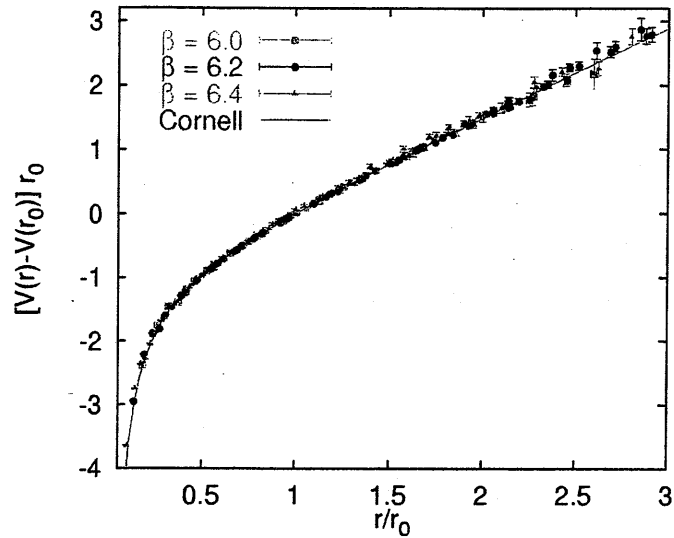


図 15:

B.5.2 β の関数としての格子間隔 a

図 16 は Creutz による有名な弦張力 σ の $\beta (= 2N/g^2)$ 依存性の MC 計算の測定結果である [22]。これから $a^2\sigma$ の急激な減少、つまり、格子間隔 a は β の増加に対して、非常に早く変化することがわかる。この傾向は摂動論、及び強結合展開の両方から理解できる。次元解析から、

$$m = \frac{1}{a} F(g) \quad (52)$$

と書ける。ここで、 m は質量の次元をもったある物理量である。物理量は理論のカットオフ (格子 QCD では π/a) にはよらないはずであるから、

$$\frac{d}{da} m = 0. \quad (53)$$

式 (52) を式 (53) に代入して

$$F = a \frac{dF}{da} = a \frac{dg}{da} \frac{dF}{dg} = -\beta(g) \frac{dF}{dg}. \quad (54)$$

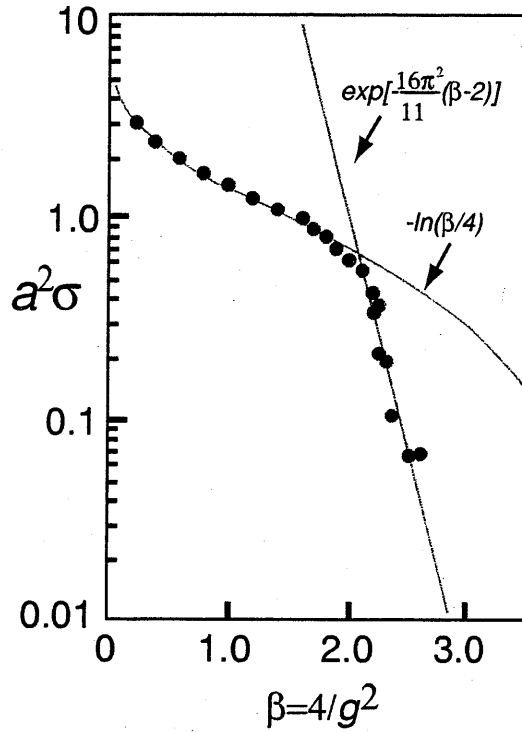


図 16:

が得られる。ここで、 $\beta(g)$ は繰り込み群の β 関数 (これは結合定数 $\beta = 2N/g^2$ と何の関係もない) であり、

$$\beta = -\beta_0 g^3 - \beta_1 g^5 + \dots \quad (55)$$

である。ここで、 β 関数の高次項を無視すると、

$$F = cf(g) \quad \text{or} \quad m = \frac{c}{a} f(g). \quad (56)$$

ここで、 c は定数であり $f(g)$ は

$$f(g) = \exp\left(-\frac{1}{2\beta_0 g^2}\right) \left(\frac{1}{\beta_0 g^2}\right)^{\frac{\beta_1}{2\beta_0^2}} \quad (57)$$

である。それゆえ

$$a = \frac{c}{m} f(g) = \frac{1}{\Lambda} f(g). \quad (58)$$

となる。式 (52)-(55) から式 (57) の導出は読者の皆さんへの宿題である。
 β 関数の係数 β_0, β_1 は摂動論で求まっている [23].

$$\begin{aligned}\beta_0 &= \frac{1}{(4\pi)^2} \left(\frac{11}{3} N_c - \frac{2}{3} N_f \right), \\ \beta_1 &= \frac{1}{(4\pi)^4} \left(\frac{34}{3} N_c^2 - \frac{10}{3} N_c N_f - \frac{N_c^2 - 1}{N_c} N_f \right).\end{aligned}\quad (59)$$

図 17 は $f(g)$ の振舞を示している。

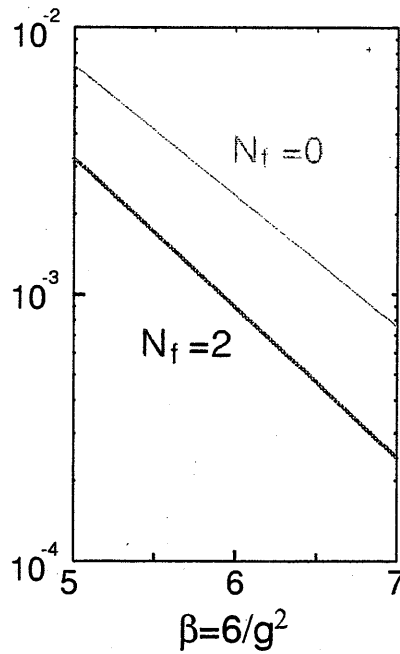


図 17:

次に強結合展開から a の振舞について調べてみよう。ここで必要な公式は

$$\begin{aligned}\int dU &= 1, \\ \int dU (U)_{\alpha\beta} &= \int dU (U^\dagger)_{\alpha\beta} = 0, \\ \int dU (U)_{\alpha\beta} (U^\dagger)_{\gamma\delta} &= \frac{1}{2} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}.\end{aligned}\quad (60)$$

以上の群上の積分を用いると、

$$\int \mathcal{D}U \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \right) \times \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \right) = 0 \quad (61)$$

$$\begin{aligned} \int dU_a dU_b \left(\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \right)^{U_a} \times \left(\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \right)^{U_b} \\ = \frac{1}{2} \left(\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \right) \end{aligned} \quad (62)$$

から、

$$e^{-S_G} = C \Pi e^{\frac{1}{2} \beta \text{Tr} U U U U} = C(1 + \beta \text{Tr} U U U U + \dots). \quad (63)$$

と変型でき、

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}U \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \right) e^{-S_G} \\ = \int \mathcal{D}U \left(\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \right) \times \left(\frac{\beta}{2} \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \right) \times \dots \times \left(\frac{\beta}{2} \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \right) \\ = \left(\frac{\beta}{4} \right)^g \end{aligned} \quad (64)$$

が得られる。

ここから容易に $N_t \times N_l$ Wilson ループの期待値を

$$\langle W \rangle \simeq \left(\frac{\beta}{4} \right)^{N_t N_l} = e^{-\frac{T L}{a^2} \log \frac{4}{\beta}}, \quad (65)$$

と見積ることができる。式 (65) から

$$V(L) = \sigma L, \quad \sigma = \frac{1}{a^2} \log \frac{4}{\beta}, \quad (66)$$

が得られる。弦張力 σ は β には依存しない。従って格子間距離は、

$$a \sim \sqrt{\log 4/\beta}, \quad (67)$$

と振舞うはずである。

これまでの議論から、 β が大きいときには a は小さい、つまり、連続極限の近くを意味するということが判った。それならば、なぜもつとずつと大きい β でモンテカルロ計算を行わないのであろうか？ 残念なことに、格子の数は有限である。従って、もし a が非常に小さいとすると、格子全体の大きさも小さいことになる (図 18)。格子間距離はハドロン物理

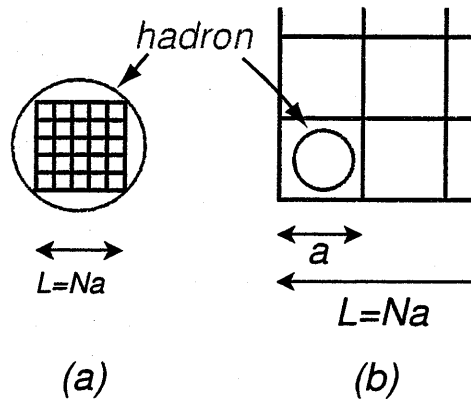


図 18:

を記述するのに充分小さくなくてはならないが、格子全体の大きさの方はとうぜんハドロンのサイズよりも大きくなければならない。意味のある結果を得るために、この2つの条件を満たすような β の領域で計算を行う必要がある。

B.6 ダイナミカルフェルミオンを考慮した格子ゲージ理論

経路積分においてフェルミオン場はグラスマン数、つまり、反交換する c 数で表される [24].

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_i \psi_k + \psi_k \bar{\psi}_i &= \delta_{ik}, \\ \bar{\psi}_i \bar{\psi}_k + \bar{\psi}_k \bar{\psi}_i &= 0, \\ \psi_i \psi_k + \psi_k \psi_i &= 0. \end{aligned} \quad (68)$$

Berezin [25]によれば、グラスマン数の積分規則は次のように与えられる。

$$\begin{aligned}\int d\bar{\psi}_i &= \int d\psi_i = 0, \\ \int \bar{\psi}_i d\bar{\psi}_i &= \int \psi_i d\psi_i = 1.\end{aligned}\quad (69)$$

これらの関係式から、容易に

$$\int \exp\left(\sum_{i,j=1}^2 \bar{\psi}_i A_{ij} \psi_j\right) d\bar{\psi}_1 d\psi_1 d\bar{\psi}_2 d\psi_2 = A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21} = \det A. \quad (70)$$

等が導かれる。一般的な公式は Matthews-Salam 公式

$$\begin{aligned}\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\bar{\psi} A \psi} &= \det A, \\ \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi (\bar{\psi}_i \psi_j) e^{-\bar{\psi} A \psi} &= (A^{-1})_{ji} \det A, \\ \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi (\bar{\psi}_i \psi_j \bar{\psi}_k \psi_l) e^{-\bar{\psi} A \psi} &= \{(A^{-1})_{ji}(A^{-1})_{lk} - (A^{-1})_{jk}(A^{-1})_{li}\} \det A\end{aligned}\quad (71)$$

として知られている。従って、フェルミオンの自由度で積分をすると、

$$\begin{aligned}Z &= \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_G - \bar{\psi} W \psi} = \int \mathcal{D}U \det W e^{-S_G}, \\ \langle \bar{\psi}_i \psi_j \rangle &= \int \mathcal{D}U (W^{-1})_{ji} \det W e^{-S_G}, \dots\end{aligned}\quad (72)$$

となる。ここで問題となるのは $\det W$ の扱いである。

もっとも簡単な方法はいわゆるクエンチ近似で、行列式 $\det W$ を

$$\det W = 1 \quad (73)$$

と捨ててしまうやり方である。後に見るように式 (73) は、クォークループを無視することに相当する。実際 OZI 則の破れは小さく、クエンチ近似の根拠となるバレンスクォーク描象はそれほど悪い近似ではない。この近似のもとで測定されたハドロンの質量や磁気モーメントは、ある程度満足できる結果である [26]-[30]。

しかし、これが本当に“良い”近似であるかどうかは慎重に考えなければいけない問題である。換言すれば、 $\det W$ がゲージ場の配位 (コンフィギュレーション) に与える影響が実際どの程度であるかをきちんと評価する必要がある。

クォークループを考慮に入れるために、いくつかの方法が提案されている,

B.6.1 ホッピングパラメータ展開 (HOPE) [31]

W が

$$W = I - \kappa M \quad (74)$$

と書けることから、 $S_{E,F}$ と W^{-1} を形式的に κ で展開する.

$$S_{E,F} = -\log \det W = -\text{Tr} \log(I - \kappa M) = \sum_l \frac{\kappa^l}{l} \text{Tr} M^l, \quad (75)$$

$$W^{-1} = \sum \kappa^l M^l. \quad (76)$$

ここで M は隣のサイトと繋ぐクロネッカーデルタを含んでいるので、 M^k が長さ k の閉じたループになっているときだけ、 $\text{Tr} M^l \neq 0$ となることは容易に確かめることができる.

B.6.2 擬フェルミオン法 [32, 33]

この方法は次のような期待値計算に基づいている. いま、フェルミオン場 ψ と同じ自由度 (Dirac, カラー, フレーバー, サイト) を持つ新しいボソン場 ϕ を導入し、

$$\begin{aligned} S_\phi &= \langle \chi | \chi \rangle, \\ | \chi \rangle &= W | \phi \rangle, \end{aligned}$$

での平均、

$$\bar{O} = \frac{\int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi \, O \, e^{-S_\phi}}{\int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi \, e^{-S_\phi}}, \quad (77)$$

を考えることにする. このとき演算子として $O = |\phi\rangle\langle\chi|$ の期待値をとれば、 W^{-1} が得られる. すなわち式 (77) で

$$\bar{O} = \overline{|\phi\rangle\langle\chi|} \quad (78)$$

を計算すればフェルミオン逆行列 W^{-1} が求まる. このようなボソン場 ϕ は擬フェルミオン場と呼ばれる.

式 (77) の積分は MC 計算で評価することができ、このとき W^{-1} の全ての要素を一度に求めることができる。

メトロポリスアルゴリズムの中でゲージを更新するためには

$$\delta S = \delta S_G + \delta S_{E.F.} \quad (79)$$

を求める必要があるが、ゲージ配位の小さな変化に対しては、 W^{-1} を使って

$$\delta S_{E.F.} = -\text{Tr}(W^{-1}\delta W) \quad (80)$$

で評価することができる。

B.6.3 Hybrid Monte Carlo (HMC) 法

複数のフレーバーが存在するとき、すなわち

$$S_F = \sum_f \bar{\psi}^{(f)} \Delta^{(f)} \psi^{(f)} \quad (81)$$

であれば、分配関数 Z は

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_G - S_F} = \int \mathcal{D}U \prod_f \det \Delta^{(f)} e^{-S_G} \quad (82)$$

で与えられる。 u 、 d の 2 つのクォークだけがあり、それらの質量が等しい場合には

$$\prod_f \det \Delta^{(f)} = (\det \Delta)^2 = \det \Delta^\dagger \det \Delta = \det \Delta^\dagger \Delta \quad (83)$$

である。ただしここで、

$$\det \Delta^\dagger = \det \gamma_5 \Delta \gamma_5 = \det \Delta \quad (84)$$

という関係式を使った^{||}。

擬フェルミオン法の時のように、 $\psi(x)$ と同じ自由度を持つボソン場 $\phi(x)$ を使って

$$Z = \int \mathcal{D}U \det \Delta^\dagger \Delta e^{-S_G} = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi e^{\phi^\dagger (\Delta^\dagger \Delta)^{-1} \phi} e^{-S_G} \quad (85)$$

^{||}この関係式は化学ポテンシャルがあるときは成立しない

と書き直す。ここで $A_\mu^a(x)$ と同じ自由度を持つ補助場 $\pi_\mu^a(x)$ ($a = 1, 2, \dots, N_c^2 - 1$) を導入して, $\int \mathcal{D}\pi e^{-\frac{1}{2}\pi^2} = 1$ を積分に挿入すれば,

$$Z = \int \mathcal{D}\phi^\dagger \mathcal{D}\phi \int \mathcal{D}\pi \mathcal{D}U e^{-H} \quad (86)$$

と書き直すことができる。ただしここで H は

$$H \equiv \frac{1}{2}\pi^2 + \phi^\dagger (\Delta^\dagger \Delta)^{-1} \phi + S_G \quad (87)$$

である。Hybrid Monte Carlo 法では、(86) 式を以下のようにして評価していく。

$$\chi \equiv (\Delta^\dagger)^{-1} \phi \quad (88)$$

とすれば、

$$e^{-\phi^\dagger (\Delta^\dagger \Delta)^{-1} \phi} = e^{-\chi^\dagger \chi} \quad (89)$$

なので、ガウス分布をする $\chi(x)$ を生成し、 $\phi(x) = \Delta^\dagger \chi$ より $\phi(x)$ を計算する。こうして得られた ϕ を外場のように考えて、

$$(A_\mu, \pi) \rightarrow (A'_\mu, \pi') \quad (90)$$

と次々と新しい場を Metropolis アルゴリズムによって生成して、 U, π の積分 (86) を計算していく。

Metropolis アルゴリズムでは、accept/reject される新しい変数の作り方には特に制限はない。ただし、(90) は逆も同じ割合で作られなければならない (詳細釣合)。

そこで、次のような方法で新しい変数 (A'_μ, π') を生成することにする。

$$\begin{aligned} \dot{A}_\mu(x) &= \frac{\partial H}{\partial \pi_\mu(x)} \\ \dot{\pi}_\mu(x) &= -\frac{\partial H}{\partial A_\mu(x)} \end{aligned} \quad (91)$$

ここで、 $\dot{A}, \dot{\pi}$ は、仮想的な時間 τ についての微分である。(91) 式を計算し、 $\tau = 0$ からある τ の時の値を求めてそれを (A'_μ, π') とし、Metropolis の accept/reject チェックをかける。

(91) を単純に差分化すれば

$$A(\tau + \Delta\tau) = A(\tau)\Delta\tau + F_1(\pi) \quad (92)$$

$$\pi(\tau + \Delta\tau) = \pi(\tau)\Delta\tau + F_2(A) \quad (93)$$

ただし

$$F_1(\pi) \equiv \frac{\partial H}{\partial \pi_\mu(x)} \quad (94)$$

$$F_2(A, \pi) \equiv -\frac{\partial H}{\partial A_\mu(x)} \quad (95)$$

古典的な正準方程式は可逆なので、詳細釣り合いは数値誤差の範囲で満たされるはずである。HMC法では $A(0), \pi(0)$ からスタートし、

$$A\left(\frac{1}{2}\Delta\tau\right) \rightarrow \pi(\Delta\tau) \rightarrow A\left(\frac{3}{2}\Delta\tau\right) \dots$$

あるいは

$$\pi\left(\frac{1}{2}\Delta\tau\right) \rightarrow A(\Delta\tau) \rightarrow \pi\left(\frac{3}{2}\Delta\tau\right) \dots$$

というように交互に計算していく Leap Flog (かえる飛び) 法を使って、さらにこれをより正確に満たすようにしている。最初の場合なら

$$A\left(\frac{1}{2}\Delta\tau\right) = A(0) + F_1(\pi(0))\frac{\Delta\tau}{2} \quad (96)$$

$$\pi(\Delta\tau) = \pi(0) + F_2\left(A\left(\frac{1}{2}\Delta\tau\right)\right)\Delta\tau$$

$$A\left(\frac{3}{2}\Delta\tau\right) = A\left(\frac{1}{2}\Delta\tau\right) + F_1(\pi(\Delta\tau))\Delta\tau$$

...

$$\pi(N\Delta\tau) = \pi\left((N-1)\Delta\tau\right) + F_2\left(A\left((N-\frac{1}{2})\Delta\tau\right)\right)\Delta\tau$$

$$A(N\Delta\tau) = A\left((N-\frac{1}{2})\Delta\tau\right) + F_1(\pi(N\Delta\tau))\frac{\Delta\tau}{2} \quad (97)$$

というふうになる。式(93)は単純なオイラー法による差分なので、 $O(\Delta^2)$ の誤差を持つが、式(97)は $(A(N\Delta\tau), \pi(N\Delta\tau))$ からスタートして $\Delta\tau$ を $-\Delta\tau$ とすれば可逆なので、Metropolisアルゴリズムには誤差は入らない。

B.7 高温・高密度の世界

高温・高密度のクォークとグルーオンの系は温度が0で通常の密度の状態の系とはまったく異なる振舞いを示すことが予想されている。より詳

しい議論は, [36]–[39] を参照。低温かつ低化学ポテンシャルの通常の状態では, クォークとグルーオンはハドロンの中に閉じ込められている。

もしハドロンのスペクトルが、

$$\rho(m) = Ce^{m/T_0}, \quad (98)$$

というふうにエネルギーとともに指数関数的に増加しているならば, 分配関数はある温度 T_0 で発散してしまう。すなわち,

$$\int dm \rho(m) e^{-m/T} = \infty \quad \text{if } T > T_0. \quad (99)$$

こうして Hagedorn の提唱した有名な極限温度の考えに行きつく。これに対して Cabibbo と Parisi は, 分配関数のこの破綻は必ずしも極限温度を意味しているのではなく, むしろ, 相転移が起こっていることを意味しているということを示した [40]。

Kislinger と Morley はグルーオンの自己エネルギーのダイアグラムを計算し, 有限温度ではグルーオンが質量を持つことを見出した [41]。グルーオンが重くなれば, グルーオンが媒介する長距離力は閉じ込め力とは異なったものとなる可能性がある

Freedman と McLerran の詳細な解析の後に, たくさんの摂動計算がなされてきた [41]–[49]。しかしながら, グルーオンの磁気質量についての議論はいまだに決着が付いてはいないようである [47]–[49], [50]。

Collins と Perry は非常に高密度ではハドロンはお互いに重なり合い, 重なったハドロンの中でクォークは自由に動くだろうと予測した (図 21c) [51]。

McLerran, Svetitsky, Kuti, Polonyi, Szlachanyi [52, 53], によってなされたダイナミカルクォークを考慮に入れない SU(2) Yang–Mills 理論の MC 計算は, 数値計算で初めて, 閉じ込め相から非閉じ込め相への 2 次相転移の兆候を示した。Bielefeld 大学と Illinois 大学のグループは有限温度のグルーオン物質の MC 計算を詳細に行った。SU(3) Yang–Mills 理論に対しては, $T = 150 - 200$ MeV で一次相転移が起こり, 高温ではグルーオンが自由気体として振舞うことが観測された。さらに相転移温度あたりで, カイラル対称性の破れが回復しているのも観測された。現状については [54] を参照されたい。

このような極限状態での QCD の研究は, 決して理論家の楽しみや娯楽でのみなされているわけではない。高エネルギー重イオン衝突においては, 高温・高密度状態が制御された実験環境で作り出されることが期待さ

れている。このような実験から得られるデータを理解するために、クォーク-グルーオン系のモデルを発展させ研究する必要がある。格子 QCD の MC シミュレーションは、このような解析に対して、最も基礎的な情報を与えることであろう。

ハドロン物質の研究をするためには、計算の中にクォークループを取り入れることが重要である。なぜなら、遮蔽 (screening) が起こった世界では、クォークループは決定的に重要な役割を担うはずだからである。クォーク対の生成・消滅を考慮にいれると、長距離力の性質は全然違ったものになってしまうはずである。理論的には、ゲージ場のみの計算で観測されていた相転移は、クォーク対発生の影響によって見えなくなってしまうだろうと予想されていた [55, 56]。ダイナミカルクォークが存在すると Polyakov 線はもはや閉じ込め非閉じ込め相転移に対する良い秩序パラメータではない。これは数学的には、ゲージ場のみのときには Z_3 対称性が成り立っているが、クォーク場が存在するときには理論が Z_3 対称性を満たさなくなるためであり、物理的にはクォーク対の生成のために、重いクォークのペアーを遠くまで引き離すことが可能になるからである。

B.8 格子上の熱力学量

QCD の熱力学について研究する場合、基本的な出発点は分配関数

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta(H-\mu N)}) \quad (100)$$

である。ここで、同じ記号 β を今までとは違った意味で使っていることに注意して欲しい。ここでは、 β は $1/T$ であり、結合定数 $2N/g^2$ とは関係ない。分配関数は場の量 U や ψ に対して、ボソンは時間方向に周期的、フェルミオンは反周期的な境界条件を課して、

$$Z = \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\int_0^\beta d\tau \int d^3x (L+\mu n)} \quad (101)$$

のように書き直せる。式 (101) の証明は参考文献 [37] を参照されたい。

系の状態変数は温度 T と化学ポテンシャル μ である。格子上にこれらをどのように導入すればいいのであろうか? 式 (101) から時間方向の格子サイズは丁度

$$\beta = N_t a_t \quad (102)$$

となる。つまり、温度の高い系の MC シミュレーションは t 方向のサイズの小さな格子を使った計算に相当するのである。

化学ポテンシャルは、連続理論のときと同じように作用に次のような項

$$\mu\bar{\psi}\gamma_4\psi. \quad (103)$$

を付け加えることで導入できそうに思われるが、Hansenfratz と Karsch によれば、この形の化学ポテンシャルでは自由クォークのエネルギー密度が発散してしまう。

連続理論のラグランジアン形式では、化学ポテンシャルは、

$$L_F = \bar{\psi}[\partial_k\gamma_k + (\partial_4 + \mu)\gamma_4 + m]\psi \quad (104)$$

というかたちで現れる。これから、クォークの伝搬関数は

$$\frac{1}{p^2 + (p_4 - i\mu)^2 + m^2} \quad (105)$$

に比例する形になる。運動量表示した格子上の自由クォークの作用は

$$S_F = \int \mathcal{D}p \bar{\psi}_p W(p) \psi_p, \\ W(p) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^4 \left[1 - \kappa \sum_{\mu=1}^4 \{(1 - \gamma_\mu)e^{ip_\mu a} + (1 + \gamma_\mu)e^{-ip_\mu a}\} \right], \quad (106)$$

である。ここで、 p_4 を $p_4 - i\mu$ と置き換えれば、

$$W(p) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^4 \left[1 - \kappa \sum_{l=1}^3 \{(1 - \gamma_s)e^{ip_l a} + (1 + \gamma_s)e^{-ip_l a}\} \right. \\ \left. - \kappa e^{\mu a}(1 - \gamma_4)e^{ip_4 a} - \kappa e^{-\mu a}(1 + \gamma_4)e^{-ip_4 a} \right]. \quad (107)$$

が得られる。結局、時間方向のホッピングパラメータを $\kappa \exp(+\mu)$, $\kappa \exp(-\mu)$ に変えることで、化学ポテンシャルを導入することができる。

エネルギー密度 ϵ , 数密度 n は、

$$Z = e^{-\beta(\epsilon - \mu n)V}, \\ V = (N_l a_s)^3, \quad (108)$$

より、

$$\epsilon = \frac{1}{V} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \right) \log Z|_V, \\ n = \frac{1}{\beta V} \frac{\partial}{\partial \mu} \log Z|_V, \quad (109)$$

と定義される。ここで,

$$\frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{1}{N_t} \frac{\partial}{\partial a_t} \quad (110)$$

である。 $\log Z$ をどのような変数で微分した場合であっても、

$$(\log Z)' = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi (-S'_G - S'_F) e^{-S} \quad (111)$$

というふうに S_G, S_F からくる2つの項からの寄与の合計となるので、2つの項はそれぞれグルーオンセクター及びクォークセクターからの寄与とみなせる。

以下にこのセクションを理解するために必要な参考文献を上げる。

参考文献

- [1] G. Parisi, Frascati preprint, LNF-84/4(P) *Prolegomena to any future computer evaluation of the QCD a Mass Spectrm.*
- [2] J. B. Kogut, Rev. Mod. Phys. **55**, 775 (1983).
- [3] J. M. Drouffe, C. Itzykson, Phys. Rep. **38**, 133 (1978).
- [4] M. Creutz, L. Jacobs, C. Rebbi, Phys. Rep. **C95**, 201 (1983).
- [5] P. Hasenfratz, CERN preprint, TH13737.
- [6] I. Montvay, DESY preprint, DESY 83-001.
- [7] C. Rebbi, *Lattice Gauge Theories and MC Simulations*, World Sci. Pub.
- [8] E. Marinari, Acta Phys. Pol. **B15**, 291 (1984).
- [9] H. Zatz, Phys. Rep. **C88**, 349 (1982).
- [10] F. James, CERN Yellow Report 68-15, *Monte Carlo Phase Space.*
- [11] N. Metropolis et al., J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [12] M. Creutz, B. Freedman, Ann. Phys. **132** 427, (1981).
- [13] K. Wilson, Phys. Rev. **D10**, 2445 (1974).

- [14] K. Wilson, in *New Phenomena in Subnuclear Physics*, ed. by A. Zichichi, Plenum Press, 1977.
- [15] Gunnar S. Bali, Phys.Rept.**343**,1-136 (2001)
- [16] L. H. Karsten, J. Smit, Nucl. Phys. **B183**, 103 (1981).
- [17] H. B. Nielsen, M. Ninomiya, Nucl Phys. **B185**, 20 (1981).
- [18] N. Kawamoto, J. Smit, Nucl. Phys. **B192**, 100 (1981).
- [19] L. Susskind, Phys. Rev. **D16**, 3031 (1977).
- [20] H. Kluberg-Stern, A. Morel, U. Napoly, B. Petersson, Saclay preprin, Dph. G. SPT/83/29.
- [21] J. D. Stack, Phys. Rev. **D27**, 412 (1983).
- [22] M. Creutz, Phys. Rev. **D21**, 2308 (1980).
- [23] C. Itzykson, J. B. Zuber, *Quantum Field Theory*, McGraw Hill, 1980, Cz.12.2.3.
- [24] See, for example. L. D. Faddeev, in *Method in Field Theory* , North Holland, 1976.
- [25] F. A. Brezin, *Method of Second Quantization*, Academic Press, 1966.
- [26] H. Hamber, G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **47**, 1792 (1981); Phys. Rev. **D27**, 208 (1983).
- [27] E. Marinari, G. Parisi, C. Rebbi, Phys. Rev. Lett. **47**, 1795 (1981).
- [28] D. Weingarten, Phys. Lett. **109B**, 57 (1982); Nucl. Phys. **B215**, 1 (1983).
- [29] F. Fucito et al., Nucl. Phys. **B210** (FS6), 314 (1982).
- [30] G. Martinelli, G. Parisi, R. Petronisio, F. Rapuano, Phys. Rev. Lett. **49**, 1076 (1982).
- [31] I. O. Stametescu, Phys. Rev. **D25**, 1130 (1982).

- [32] F. Fucito, E. Marinari, G. Parisi, Nucl. Phys. **B180**, 369 (1981).
- [33] E. Marinari, G. Parisi, C. Rebbi, Nucl. Phys. **B190** (FS3), 734 (1981).
- [34] D. Gallaway, A. Rahman, Phys. Rev. Lett. **49**, 613, (1982).
- [35] J. Polonyi, H. W. Wyld, Phys. Rev. Lett. **51**, 2257 (1983).
- [36] H. Satz, Phys. Rep. **88**, 349 (1982).
- [37] D. J. Gross, R. D. Pisarski, L. G. Yaffe, Rev. Mod. Phys. **53**, 43 (1981).
- [38] Quark Matter
- [39] M. Muller, Goethe University preprint, UFTP 125/83.
- [40] N. Cabbibo, G. Parisi, Phys. Lett. **59B**, 67 (1975).
- [41] M. B. Kisslinger, P. D. Morley, Phys. Rev. **D13**, 2765 (1976).
- [42] B. A. Freedman, L. D. McLerran, Phys. Rev. **D16**, 1130 (1977).
- [43] V. Baluni, Phys. Rev. **D17**, 2092 (1978).
- [44] J. I. Kapsta, Nucl. Phys. **B148**, 461 (1979).
- [45] S. Kiguchi, Prog. Theor. Phys. **63**, 146 (1980).
- [46] M. Midorikawa, Prog. Theor. Phys. **67**, 661 (1982).
- [47] K. Kajantie., J. Kapusta, Phys. Lett. **110B**, 299 (1982).
- [48] T. Furusawa, K. Kikkawa, Phys. Lett. **128B**, 218 (1983).
- [49] H. A. Weldon, Phys. Rev. **D26**, 1394 (1982).
- [50] A. Nakamura, I. Pushkina, T. Saito and S. Sakai, Phys. Lett. **B549**,133 (2002).
- [51] J. Collins, M. Perry, Phys. Rev. Lett. **34**, 135 (1975),