

現実的クォーク質量における2+1フレーバー 格子QCD

筑波大学計算科学研究センター

藏増嘉伸

April 24, 2008

内容

§0. 格子 QCD とは

§1. 格子 QCD 研究の歴史と PACS-CS プロジェクトの位置づけ

§2. PACS-CS プロジェクトの成果

§3. まとめと今後の目標

§0. 格子QCDとは

QCDを第一原理とする数値的手法を用いた強い相互作用の非摂動的な研究

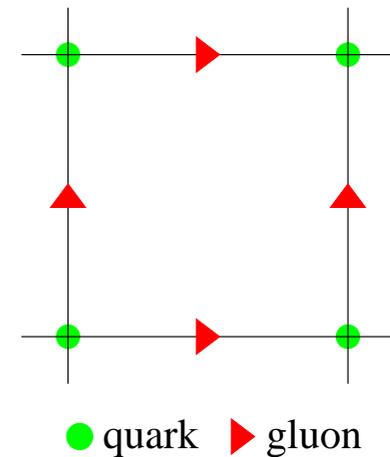
Green関数

$$\langle \mathcal{O}[U_\mu, q, \bar{q}] \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}U_\mu \mathcal{D}q \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{O}[U_\mu, q, \bar{q}] e^{-S_g[U_\mu] - \sum_{x,y} \bar{q}(x) D[U_\mu, m_q](x,y) q(y)}$$

4次元時空を差分化

汎関数積分をモンテカルロ法によって数値的に実行

$$\langle \mathcal{O}[U_\mu, q, \bar{q}] \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{O}[U_\mu^{(i)}, q^{(i)}, \bar{q}^{(i)}]$$



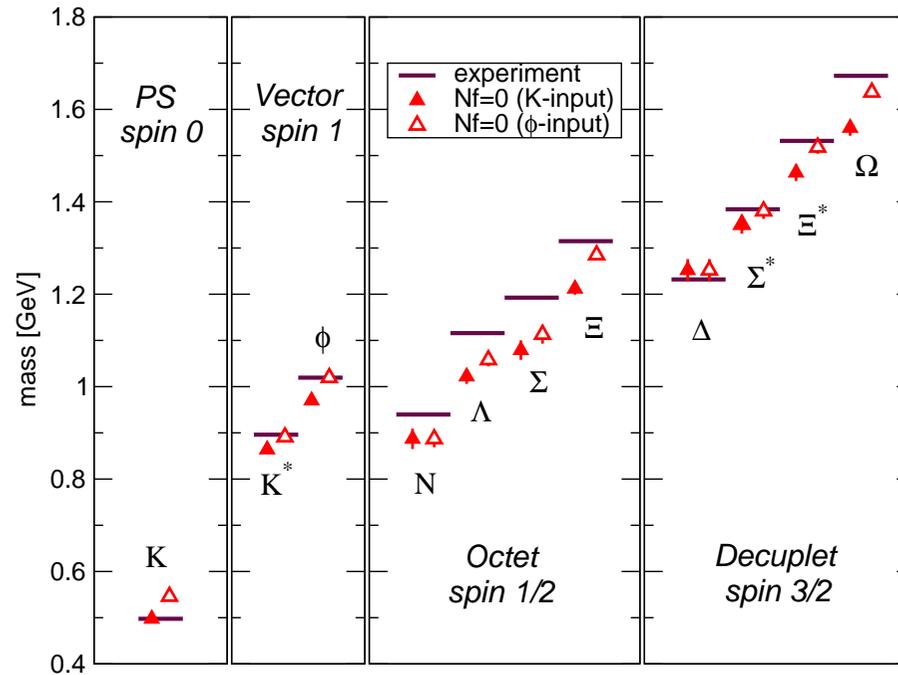
§1. 格子QCD研究の歴史とPACS-CSプロジェクトの位置づけ

マイルストーン

- 1981 格子QCDによる最初のハドロン質量計算 (Hamber-Parisi)
格子QCDによる第一原理計算の可能性を示唆
- 1996~2000 クエンチ近似によるハドロン質量の精密計算 (CP-PACS)
クエンチ近似の限界を示す
- 2000~ 2+1 フレーバー格子QCDの創始 (MILC, CP-PACS/JLQCD)
第一原理計算へ向けて踏み出す

クエンチ近似におけるハドロン質量 (CP-PACS)

クエンチ近似以外の系統誤差をコントロール



実験値とのズレは最大で10%程度 ⇒ 非常に良い近似

なぜクエンチ近似を超える計算が必要か？

なぜクエンチ近似を超える計算が必要か？

クエンチ近似は第一原理計算ではない

なぜクエンチ近似を超える計算が必要か？

クエンチ近似は第一原理計算ではない

- 第一原理計算とは
系統誤差が評価できる(コントロールできる), 且つ評価することに意味がある
⇒ 実験と同じ
- モデル計算とは
系統誤差を評価できない
⇒ 予言能力がない(クエンチ近似の誤差は実験と比較しなければわからない)

第一原理計算とモデル計算はサイエンスとして全く別次元

第一原理計算 (系統誤差のコントロール) の重要性

- 実験不可能なことを格子QCDシミュレーションで予言
有限温度・有限密度 ⇒ 次世代スパコンでの主要物理ターゲットの一つ
- 新しい物理の探索
既知の理論からのズレを実験的に検証することは有力な方法
⇒ 理論計算の系統誤差を精確に評価できることが条件

格子QCDにおける系統誤差

1. 有限体積効果

⇒ 体積を大きくする

2. 有限格子間隔効果

⇒ 格子間隔を小さくする

3. クエンチ近似

CP-PACS/JLQCD プロジェクト

⇒ 2+1 フレーバー (アップ・ダウン・ストレンジ) シミュレーション

4. クォーク質量に関する外挿

PACS-CS プロジェクト

⇒ 現実世界におけるクォーク質量 (physical point) でのシミュレーション

§2. PACS-CS 共同研究体制

Parallel Array Computer System for Computational Sciences

2560 ノード, 14.3TF ピーク, 5.12TB メモリ

2006 年 7 月 1 日筑波大学計算科学研究センターにおいて稼働開始



共同研究者

物理側:

青木, 石井, 石塚, 加堂, 金谷, 藏増, 佐々木, 谷口, 宇川, 浮田, 吉江
石川, 大川
出淵

(筑波大)
(広島大)
(金沢大)

計算機科学側:

朴, 佐藤, 高橋, 建部, 櫻井, 多田野

(筑波大)

§3. PACS-CS プロジェクトの成果

- 領域分割HMC(DDHMC)アルゴリズムによる計算コスト削減
- physical point近傍で期待される特徴的なクォーク質量依存性の確認
- ハドロン質量の実験値との比較

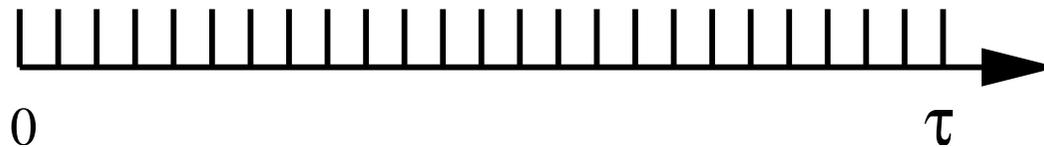
領域分割HMC(DDHMC)アルゴリズム

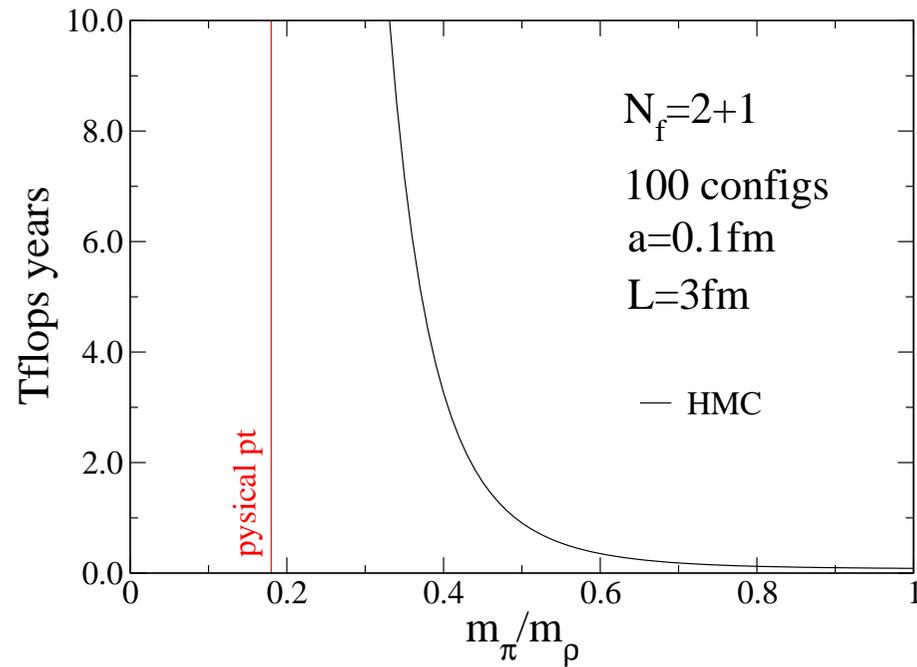
従来のHMCアルゴリズム (CP-PACS/JLQCD プロジェクト)

最も計算コストを要する部分 = 分子動力学におけるハミルトン方程式の積分

$$\begin{aligned}\frac{d}{d\tau}U_\mu(x) &= P_\mu(x)U_\mu(x) \\ \frac{d}{d\tau}P_\mu(x) &= -F_g(x, \mu) - F_q(x, \mu)\end{aligned}$$

F_q の評価には $D^{-1}[U_\mu, m_q]$ の計算が必要





近い将来 physical point に到達することは不可能
 CP-PACS/JLQCD プロジェクトでは $m_\pi/m_\rho \gtrsim 0.6$
 ⇒ アルゴリズム改良の必要性

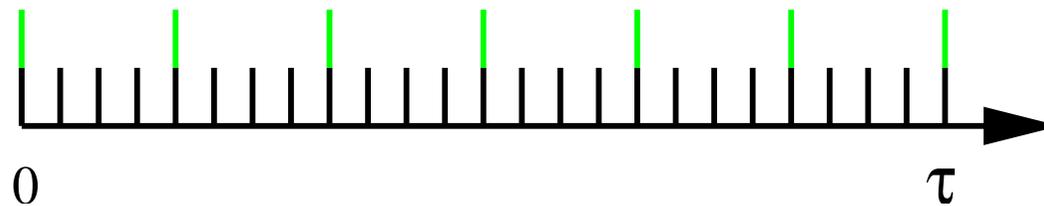
領域 (体積 $\approx (1\text{fm})^4$) 分割に基づいた階層的なハミルトン方程式の積分

1. $F_q \rightarrow F_q^{\text{UV}}$ (領域内) + F_q^{IR} (領域外) に分割

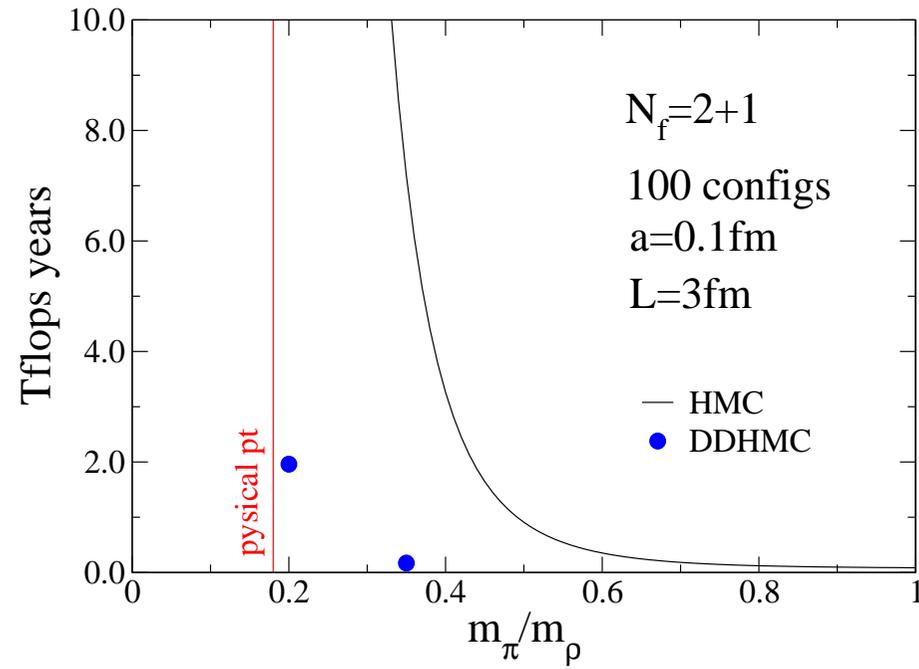
計算コスト: $F_q \approx F_q^{\text{IR}} \gg F_q^{\text{UV}}$

2. $\delta\tau^{\text{UV}} \|F_q^{\text{UV}}\| \sim \delta\tau^{\text{IR}} \|F_q^{\text{IR}}\|$ を満たすようにステップサイズを選択

$\|F_q^{\text{UV}}\| : \|F_q^{\text{IR}}\| \approx 4 : 1 \Rightarrow \delta\tau^{\text{UV}} : \delta\tau^{\text{IR}} \approx 1 : 4$



計算コストの重い F_q^{IR} の計算頻度を少なくできる

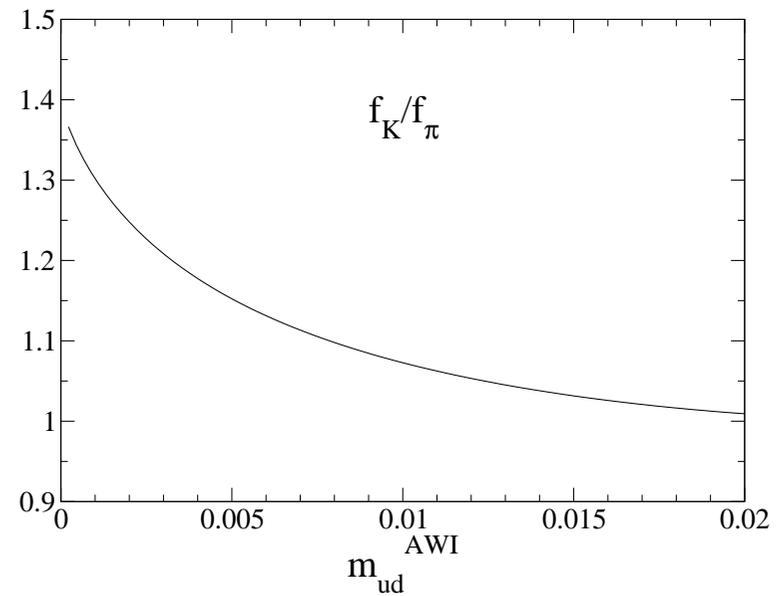
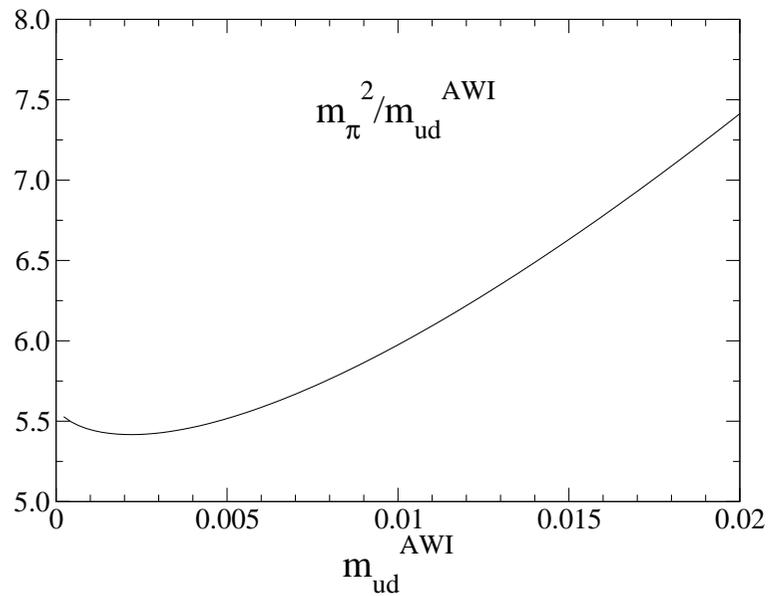


劇的なコストダウン

⇒ physical pointのシミュレーションが可能

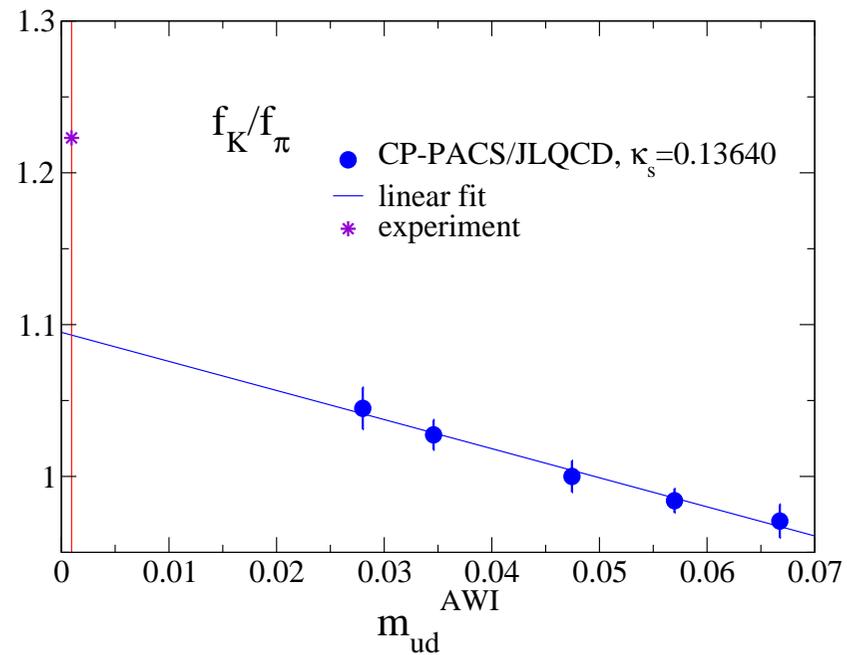
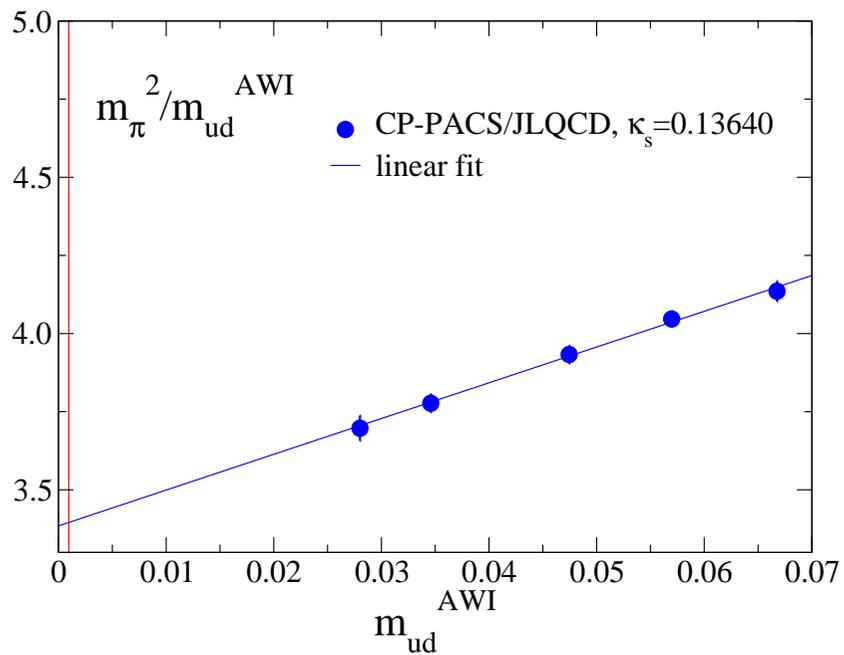
physical point 近傍で期待される特徴的なクォーク質量依存性

Amorós-Bijnens-Talavera, 01



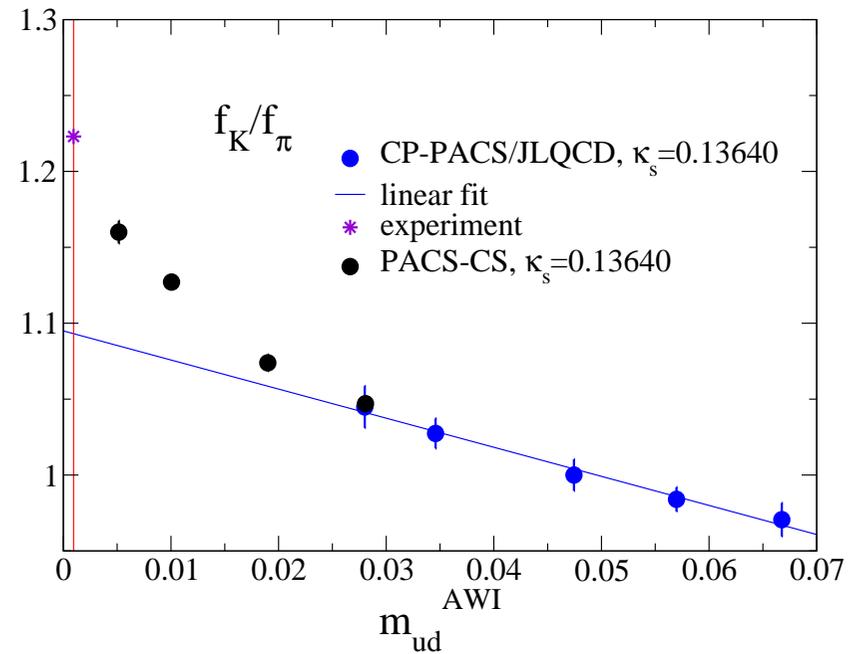
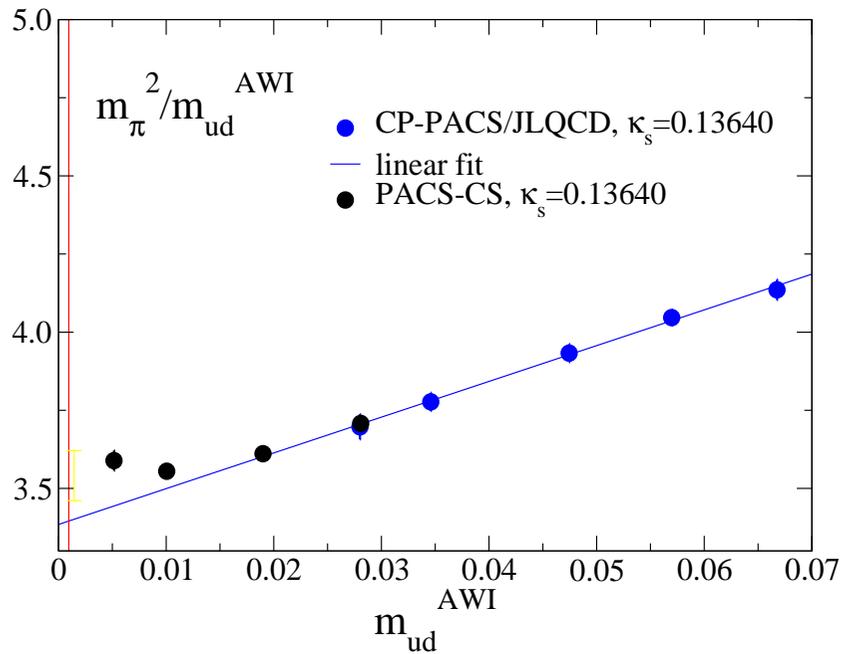
カイラル対称性から対数関数による曲率が理論的に期待される

従来のCP-PACS/JLQCDプロジェクトの結果



直線的振舞い(クォーク質量の一次関数)

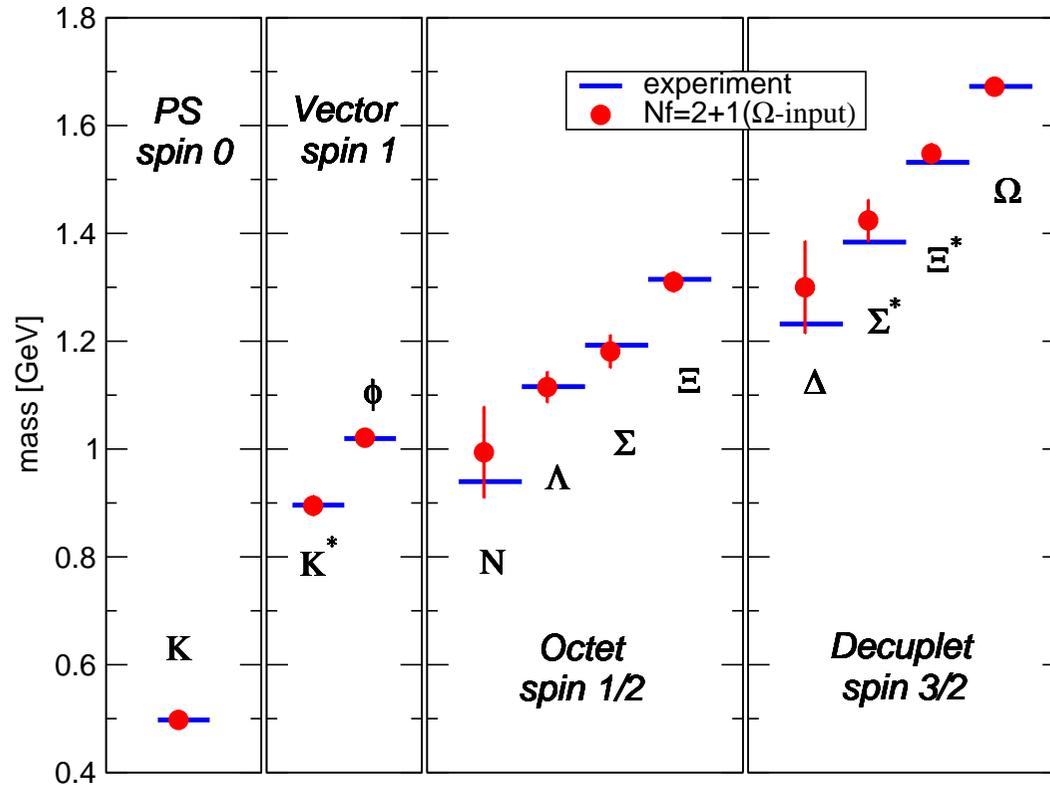
PACS-CS プロジェクトの結果



カイラル対称性から期待される曲率を確認

⇒ 外挿の難しさ / physical point でのシュミレーションが強く望まれる

ハドロン質量の実験値との比較



期待以上の一致具合 (有限体積・格子間隔効果のコントロールは未完全)

§4. まとめと今後の目標

まとめ

- DDHMC アルゴリズムによる physical point でのシミュレーションが可能
- カイラル対称性から理論的に期待される特徴的なクォーク質量依存性を確認
- ハドロン質量の計算結果は実験値と予想以上の一致具合

今後の目標

ピーク性能	マシン	物理的ターゲット
<1TF 級	CP-PACS	2+1 フレーバー QCD シミュレーション創始
10TF 級	PACS-CS	physical pt でのシミュレーション達成 (現在実行中)
100TF 級	T2K	ハドロン一体問題の解決 (系統誤差のコントロール) QCD の基本パラメータの決定
10PF 級	次世代機	高温・高密度下のシミュレーション 元素合成などの多体問題