

物理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

based on PRD79(2009)034503, arXiv:0905.962

May 14, 2009

内容

§0. 格子QCDとは

§1. CP-PACS/JLQCDプロジェクトとは

§2. PACS-CSプロジェクト

§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研究

強い相互作用

自然界を支配する4つの基本的な力のひとつ

重力、電磁力、強い力、弱い力

クォーク・グルーオンが基本的自由度

原子核 \supset 核子 \supset クォーク・グルーオン \supset 未知の粒子

非摂動的研究

空間3次元+時間1次元を離散化(4次元格子)

クォーク・グルーオンをのせてモンテカルロシミュレーション

目的

クォーク・グルーオンを自由度とした第一原理計算によって
より大きなスケールとより小さなスケールの物理を探る

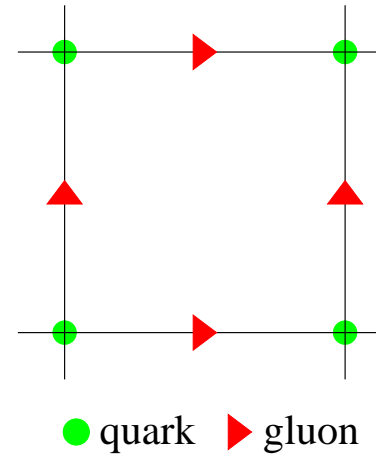
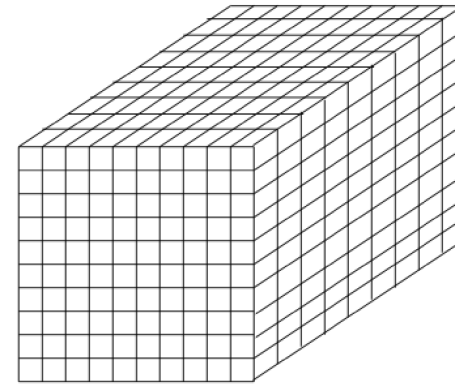
格子QCDのセットアップ

数個のパラメータ

4次元体積 : $V = N_x \times N_y \times N_z \times N_t$
格子間隔 : a
クォーク質量 : m_u, m_d, m_s

基本自由度はクォーク・グルーオン

クォーク : サイト上
グルーオン : リンク上



モンテカルロ積分

Green 関数

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

差分化された4次元時空上で汎関数積分をモンテカルロ法によって数値的に実行

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

統計誤差は $1/\sqrt{N}$ で減少

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

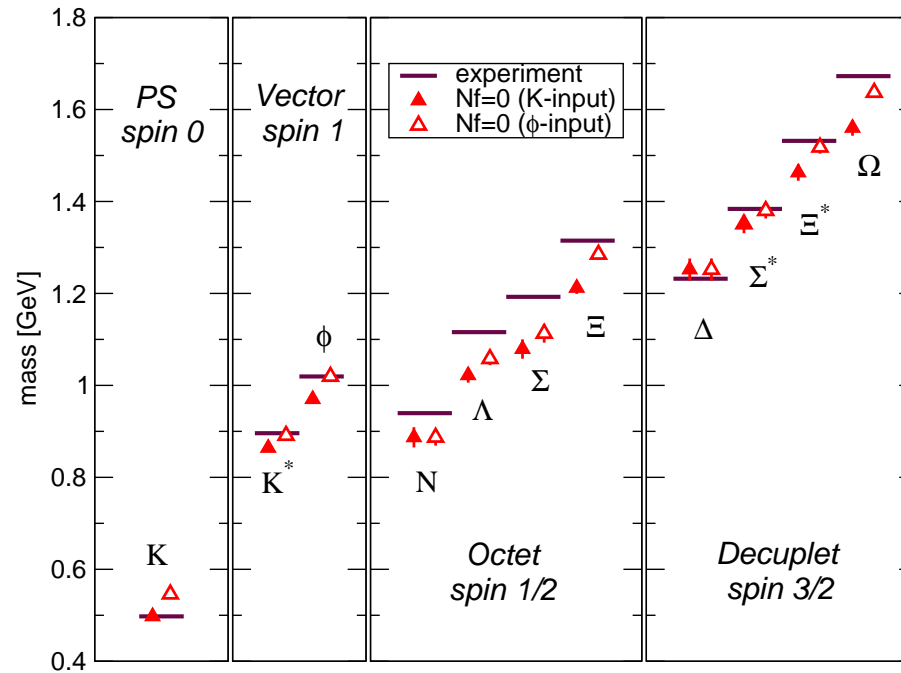
§2. CP-PACS/JLQCDプロジェクトとは

年譜

- 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 (CP-PACS/JLQCD, MILC)
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？

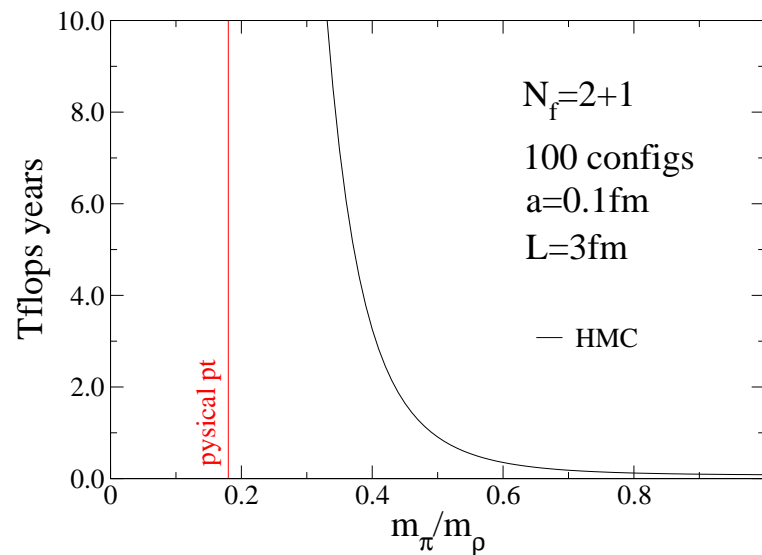
クエンチ近似は第一原理計算ではない

- 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

§2. PACS-CSプロジェクト

物理的クォーク質量 (physical point) におけるシミュレーション



CP-PACS/JLQCD プロジェクトでは $m_\pi/m_\rho \gtrsim 0.6$

⇒ いかにかこの困難を克服したか？

なぜ物理点でのシミュレーションが必要なのか？

§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



T2K-Tsukuba

Tsukuba-Tokyo-Kyoto open supercomputer alliance

648 ノード, 95.4TF ピーク, 20.7TB メモリ

2008年6月2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, 石塚, 加堂, 金谷, 藏増, 滑川, 谷口, 宇川, 浮田, 山崎, 吉江
石川, 清水, 大川
出淵

(筑波大)
(広島大)
(BNL)

計算機科学側:

朴, 佐藤, 高橋, 建部, 櫻井, 多田野

(筑波大)

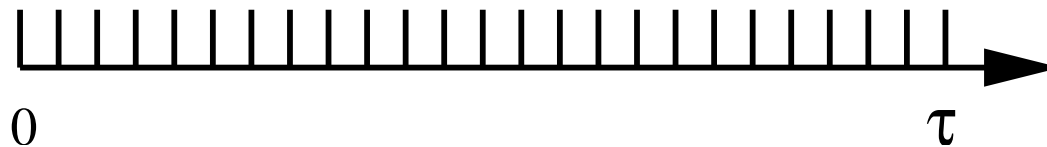
領域分割HMC(DDHMC)アルゴリズム

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

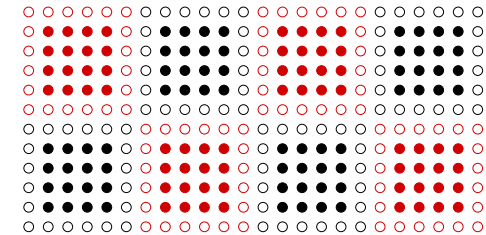
$$\begin{aligned}\frac{d}{d\tau}U_\mu(x) &= P_\mu(x)U_\mu(x) \\ \frac{d}{d\tau}P_\mu(x) &= -F_g(x, \mu) - F_q(x, \mu)\end{aligned}$$

F_q の評価には $D^{-1}[U_\mu, m_q]$ の計算が必要

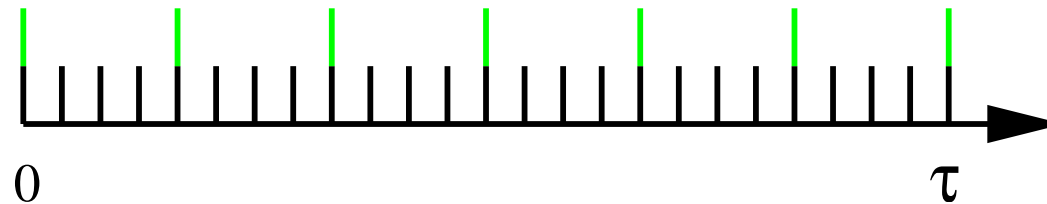


領域分割に基づいた階層的なハミルトン方程式の積分

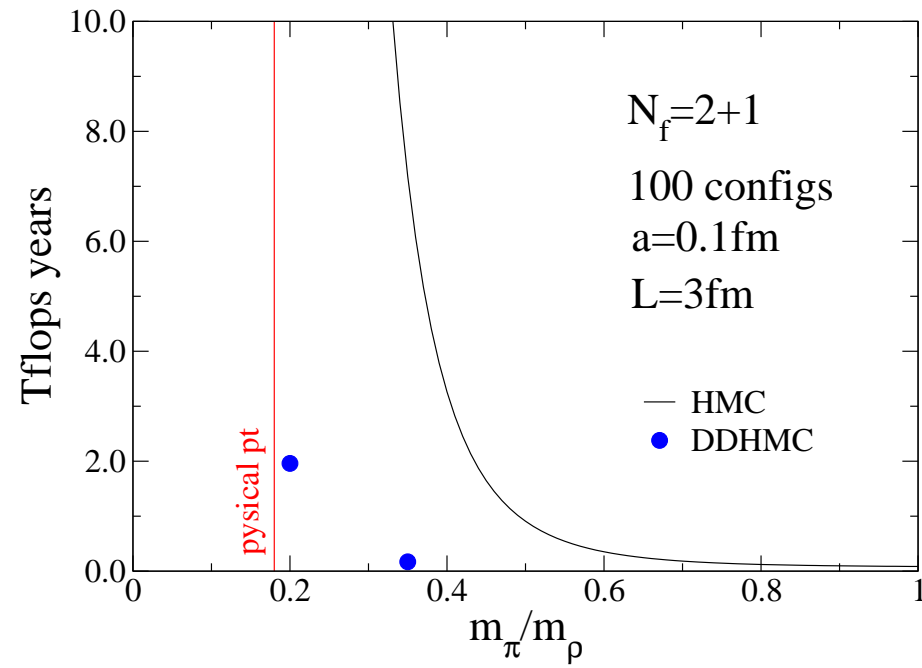
1. $F_q \rightarrow F_q^{UV}$ (領域内) + F_q^{IR} (領域外) に分割
 計算コスト: $F_q \approx F_q^{IR} \gg F_q^{UV}$



2. $\delta\tau^{UV} \|F_q^{UV}\| \sim \delta\tau^{IR} \|F_q^{IR}\|$ を満たすようにステップサイズを選択
 $\|F_q^{UV}\| : \|F_q^{IR}\| \approx 4 : 1 \Rightarrow \delta\tau^{UV} : \delta\tau^{IR} \approx 1 : 4$



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

自然な疑問

非物理的な重いクォーク質量でシミュレーションを行ない、物理点まで外挿すれば良いのでは？

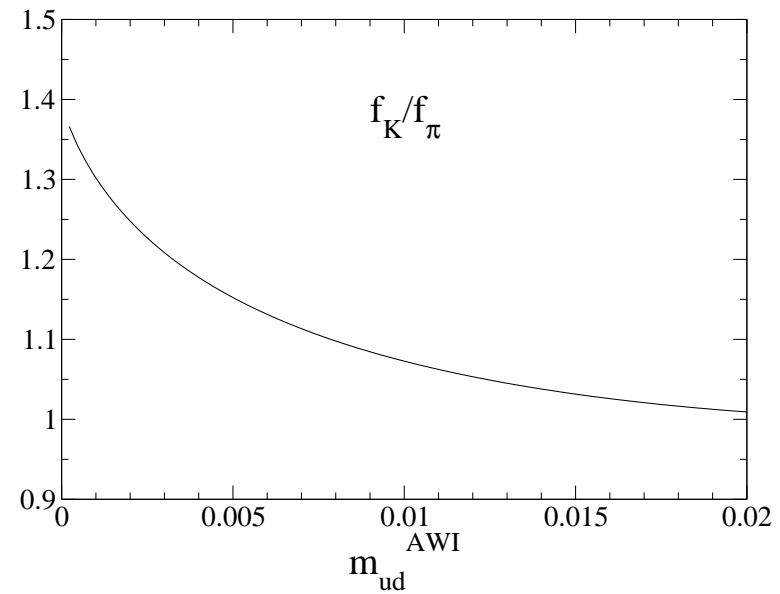
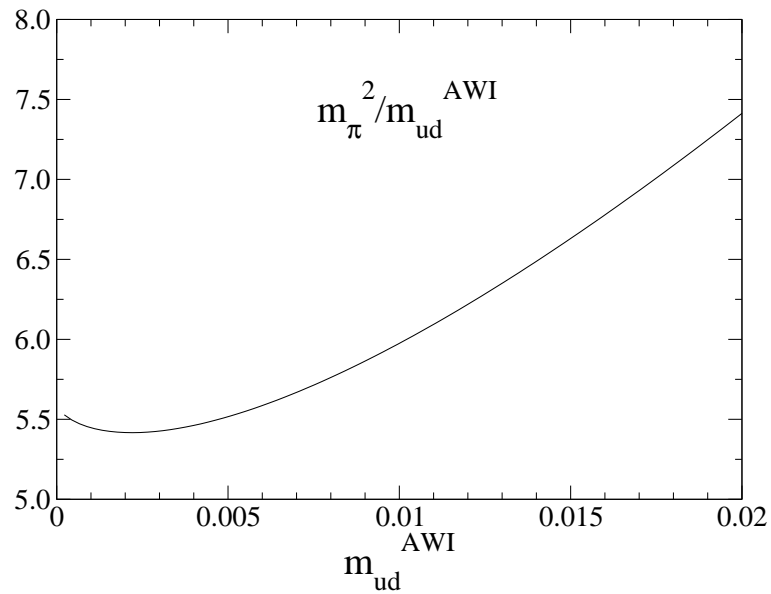
自然な疑問

非物理的な重いクォーク質量でシミュレーションを行ない、物理点まで外挿すれば良いのでは？

カイラル摂動論を用いた外挿は現在最もポピュラーな方法

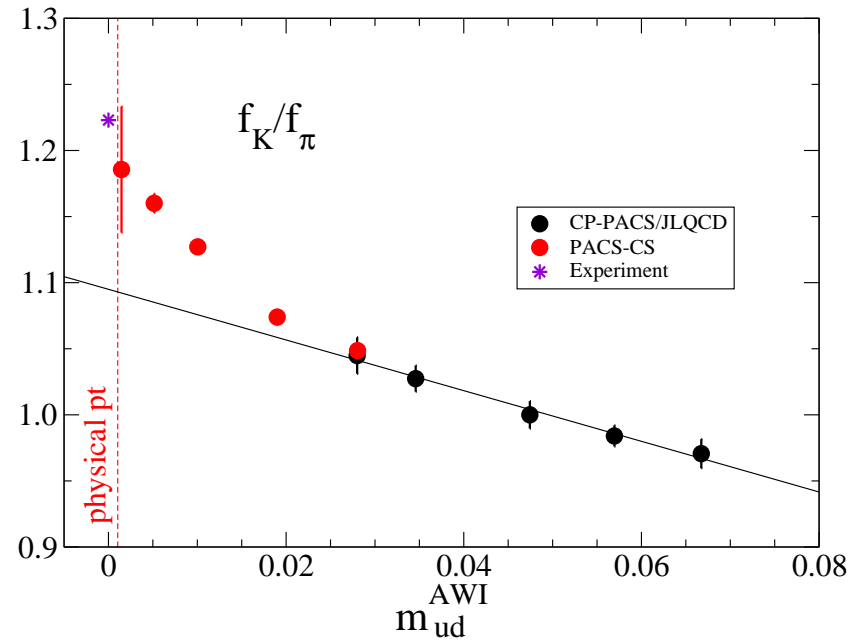
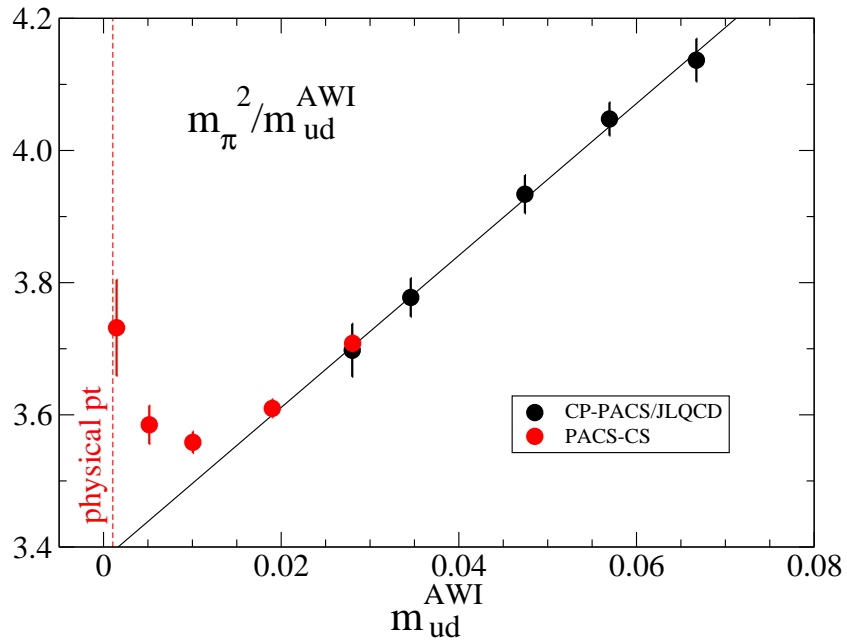
メソン系に対するカイラル摂動論の適用

Amorós-Bijnens-Talavera, 01



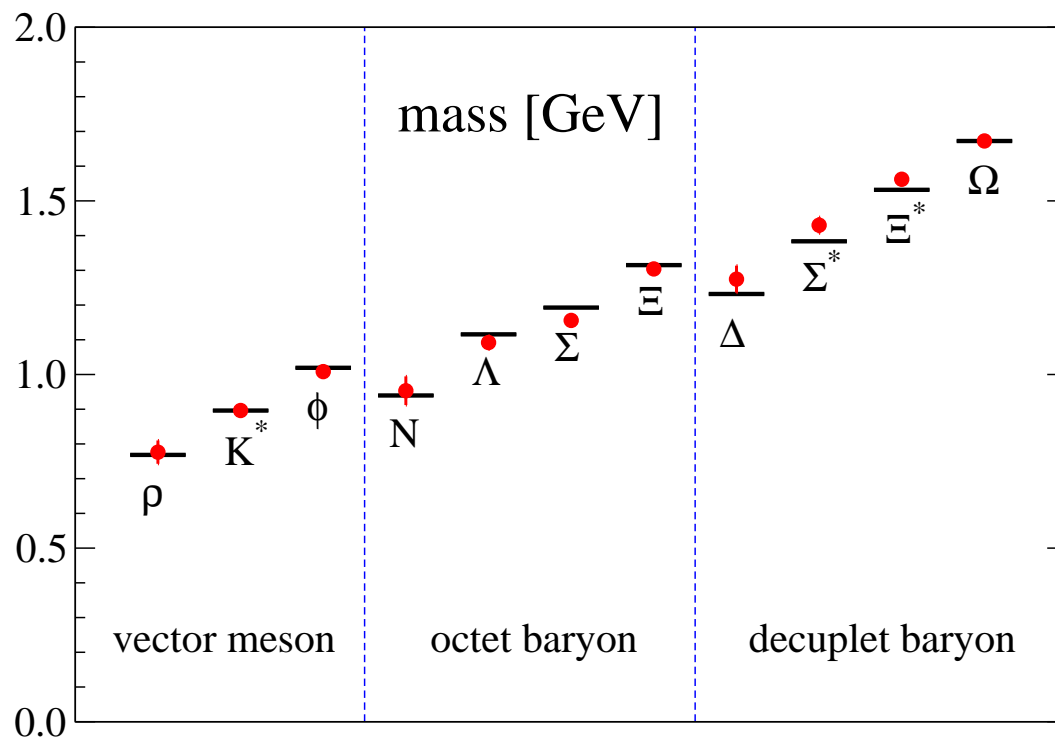
カイラル対称性から対数関数による曲率が理論的に期待される

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
 ⇒ 実際にカイラル摂動論に基づくフィットも可能

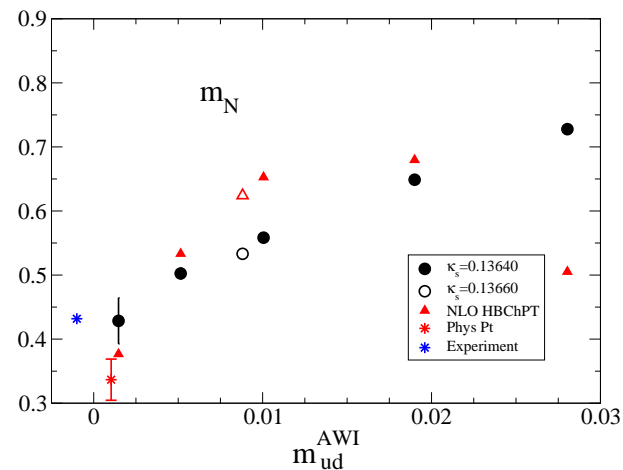
ハドロン質量の実験値との比較



数%の範囲内での一致 (有限体積・格子間隔効果のコントロールは未完全)

カイラル摂動論を用いた外挿法の問題点

- 対数的クォーク質量依存性を精確にトレースすることの難しさ
- カイラル摂動論はすべての物理量に対して有効というわけではない



- 現実世界の粒子崩壊が非物理的クォーク質量では禁止される

現在の課題

クォーク質量の fine-tuning

Reweighting 法

$$\langle \mathcal{O} \rangle_m \Rightarrow \langle \mathcal{O} \rangle_{m'}$$

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{O} \rangle_{m'} &= \int \mathcal{D}U \mathcal{O} e^{-S[m']} / \int \mathcal{D}U e^{-S[m']} \\ &= \int \mathcal{D}U \mathcal{O} e^{-S[m] - (S[m'] - S[m])} / \int \mathcal{D}U e^{-S[m] - (S[m'] - S[m])} \\ &= \int \mathcal{D}U \mathcal{O} e^{-S[m] - \Delta} / \int \mathcal{D}U e^{-S[m] - \Delta} \\ &= \langle \mathcal{O} e^{-\Delta} \rangle_m / \langle e^{-\Delta} \rangle_m\end{aligned}$$

アップ-ダウンクォーク質量差を導入することも可能

§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
- Reweighting 法によるクォーク質量の fine-tuning

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実現
100TF 級	T2K	ハドロン一体問題の解決 (QCD のパラメータの決定) 軽い原子核の構成
10PF 級	次世代機	高温・高密度下のシミュレーション 核子の多体問題