

現実的なクォーク質量を用いた 格子 QCD シミュレーションが切り拓く物理

加堂 大輔、滑川 裕介、浮田 尚哉

所属 筑波大学計算科学研究センター

メールアドレス kadoh, namekawa, ukita@ccs.tsukuba.ac.jp

概要

本研究では、2+1 フレーバーの格子 QCD シミュレーションにより、強い相互作用の非摂動的現象を定量的に明らかにすることを旨とする。我々は、アルゴリズムとして領域分割されたハイブリッドモンテカルロ法を用いることで、HMC アルゴリズムの分子動力学部分にマルチタイムスケールを導入した。これにより、これまで難しいとされてきた現実に近い軽いクォーク質量 6MeV でのシミュレーションに成功した。得られたスペクトルは、QCD の低エネルギー有効理論から予測されるカイラルログの振る舞いを示し、誤差の範囲内で実験値をよく再現している。本研究によって現実のクォーク質量でシミュレーションを行う道が開けた。

1 はじめに

素粒子標準模型の一部である QCD は、低エネルギー領域でクォークの閉じ込め等の非摂動的現象をもたらす強い相互作用を記述すると考えられているが、紙と鉛筆による伝統的な解析法でその性質を調べることは難しい。定量的な解析には、格子 QCD に基づく数値シミュレーションが有効である。特に、現実と同じクォーク質量において数値計算を行う事は、崩壊・散乱過程や原子核の組成等における QCD 効果を精密に理解する上で非常に重要である。ここでは、現実のクォーク質量での計算を目指す我々の研究の進展状況について報告する [1]。

2 アルゴリズムの発展

現実のクォーク質量での格子 QCD には、膨大なコストが必要となる。従来用いられるハイブリッドモンテカルロ (HMC) 法では、計算コストは次の経験則で評価される [2]。

$$\text{cost} = C \left(\frac{\text{独立な配位数}}{1000} \right) \cdot \left(\frac{m_\pi/m_\rho}{0.6} \right)^{-6} \cdot \left(\frac{L}{3\text{fm}} \right)^5 \cdot \left(\frac{a^{-1}}{2\text{GeV}} \right)^7 \text{Tflops} \cdot \text{years}$$

パイオン質量 m_π を軽くする毎に 6 乗で計算コストが増大する (図 1 の実線参照)。従って、現実のクォーク質量を用いたシミュレーションには、実効 10Tflops の計算機を用いても数十年の時間が必要となる。

この現状を打破する解決案として、まず領域分割されたハイブリッドモンテカルロ (DD-HMC) 法が挙げられる [3]。格子を領域分割し、近距離力と遠距離力を分離する事で、マルチタイムスケールの分子動力学法が自然に適用できる。DD-HMC 法の採用により、計算速度は約 10 倍になる。また、格子 QCD で最も計算時間がかかるクォーク行列の逆行列計算に対して、SAP (Schwarz alternating procedure) 及び SSOR を単精度で施し、その後、GCR を倍精度で使用する [3]。こ

の操作により、例えば $m_\pi/m_\rho = 0.35$ の場合、広く用いられている even/odd 前処理した倍精度 BiCGStab2 に比べ、4 倍の計算速度を達成している。また、SSE を活用することで、更に 2 倍の速度が得られる。これらの方法により、従来の方法に比べ、実測値で数十倍の性能向上が得られた (図 1 の赤印参照)。クォーク質量を下げると、性能向上比は更に増加する。

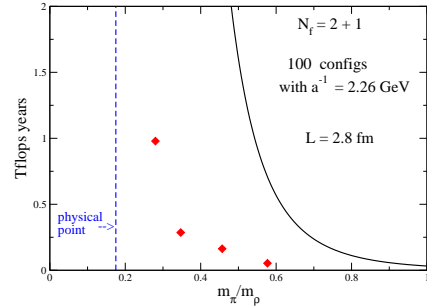


図 1. パイオン質量 (横軸) と計算コスト (縦軸) の関係。従来の HMC アルゴリズムの計算コストを実線で、新しい DD-HMC アルゴリズムの計算コストを赤印で示した。

3 $N_f = 2 + 1$ QCD シミュレーション

我々の研究以前には、従来の HMC 法による Iwasaki ゲージ作用と $O(a)$ 改良された Wilson クォーク作用を用いた $N_f = 2 + 1$ 格子 QCD シミュレーションが、CP-PACS+JLQCD により行われていた [4]。主要な計算機として CP-PACS、HITACHI SR8000 と地球シミュレーターを使用していた。その際、体積は $(La)^3 = (2\text{fm})^3$ 、クォーク質量は、 $m_\pi = 600\text{MeV}$ 、 $m_\pi/m_\rho = 0.6$ に対応する値までしか下げられなかった [4]。

一方、現在では前述のアルゴリズムの発展及び計算機の性能向上により、現実の $m_\pi = 135\text{MeV}$ でのシミュレーションが可能になりつつある。シミュレーションパラメーターは、格子サイズ $L^3 \times T = 32^3 \times 64$ 、格子間隔

$a = 0.9\text{fm}$ ($\beta = 1.90$)、体積 $(La)^3 = (2.9\text{fm})^3$ 、他は表 1 参照。筑波大学計算科学研究センターのクラスター計算機 PACS-CS(2560 ノード、ピーク性能 14.3Tflops) の 7×256 ノードを一年間使用し、 $m_\pi = 208\text{MeV}$ 、 $m_\pi/m_\rho = 0.22$ まで到達できた。現在、 $m_\pi = 135\text{MeV}$ を計画中である。尚、この研究で生成した配位は、ILDG [5] を通じ世界に公開する。

κ_{ud}	κ_s	$m_\pi[\text{MeV}]$	MD time	$\frac{\text{time}[\text{h}]}{\text{traj.}[\tau]}$
0.13727	0.13640	591(2)	2000	0.5
0.13754		426(2)	2500	1.3
0.13770		307(2)	2000	1.6
0.13781		208(8)	470	8.0
0.13754	0.13660	405(2)	1500	1.0

表 1. シミュレーションパラメーター

3.1 カイラル有効理論との比較

我々の目標は、現実の $m_\pi = 135\text{MeV}$ でのシミュレーションであるが、PACS-CS においてパイオン質量を十分下げることによって、カイラル有効理論との比較が可能になった。パイオン質量の十分軽い領域では、カイラルログと呼ばれる対数的な振舞い、

$$\frac{m_\pi^2}{m_{ud}} \propto 1 + \alpha m_{ud} \ln m_{ud} + \beta m_{ud} + \dots,$$

を持つことが、カイラル有効理論によって予想されている。実際、重いパイオン質量の CP-PACS+JLQCD データではカイラルログは見られないが、軽いパイオン質量の PACS-CS データでその曲りが見えつつある (図 2)。

我々は、カイラル有効理論を用いて、 m_π, m_K を実験値まで外挿し、QCD の基本パラメーターであるクォーク質量 $m_{ud}^{\text{phys}}, m_s^{\text{phys}}$ を決定した。

$$m_{ud}^{\text{phys}}(\overline{\text{MS}}, \mu = 2\text{GeV}) = 2.4(2)\text{MeV},$$

$$m_s^{\text{phys}}(\overline{\text{MS}}, \mu = 2\text{GeV}) = 69(5)\text{MeV}.$$

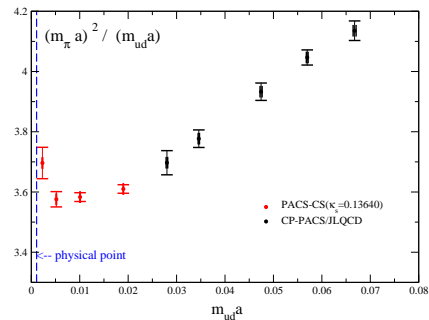


図 2. パイオン質量に対するクォーク質量依存性。

3.2 ハドロンスペクトル

ハドロンスペクトルを格子 QCD 計算によって再現することは、QCD が強い相互作用を記述する理論である事を示す最も基本的な要請である。我々の用いた

格子サイズは十分大きく、メソンのみならずバリオンも計算できる。カイラル外挿の結果は、実験値を再現している (図 3)。

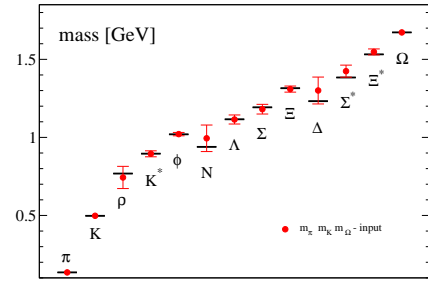


図 3. 軽いハドロンスペクトラム。実験値 (黒線) 及び計算結果 (赤印) の比較。

4 将来の展望

クォーク質量と並び、重要な標準模型の基本パラメーターとして、カビボ-小林-益川 (CKM) 行列要素が挙げられる。標準模型で現実世界を記述し得るか、それとも標準模型を越える新しい理論が必要かを判定するためには、高精度で CKM 行列要素を決定する必要がある。ただし、実験結果から CKM 行列要素を引き出す際、ハドロンに関する不定性が障害となる。特に、 $B_0 - \bar{B}_0$ 混合に関しては、実験精度は約 1% であるのに対し、ハドロンの不定性に起因する誤差は 10% と非常に大きい。不定性を実験精度と同程度 (1%) にするためには、 $a = 0.05 - 0.02\text{fm}$ が必要になる。この計算には現在の 20-100 倍の計算資源が要求され、次世代スーパーコンピュータにより、初めて計算可能になる。

また、より空間体積の大きい $La > 5\text{fm}$ のシミュレーションが可能になれば、格子 QCD を用いて、ハドロンの崩壊現象を詳細に解析できる。特に、 $N' \rightarrow N\pi$ 等原子核実験では解明しづらい過程が興味深い。格子 QCD により、素粒子物理のみならず、原子核の分野にもブレークスルーをもたらせる可能性がある。こちらの計算も、現在の 20 倍以上の計算資源が必要であり、現有計算資源での実行は難しい。ペタフロップス級の計算機が待ち望まれる。

参考文献

- [1] N. Ukita; D. Kadoh, Lattice2007 parallel talks
- [2] CP-PACS and JLQCD Collab, Nucl. Phys. B (Proc.Suppl.) **106** 195 (2002)
- [3] M. Lüscher, JHEP **0305** 052 (2003); Comput. Phys. Commun. **156** 209 (2004); *ibid.* **165** 199 (2005)
- [4] CP-PACS Collab, hep-lat/0704.193
- [5] <http://www.lqcd.org/ildg/>