TSUBAME 共同利用 平成 23 年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 ： TSUBAME2 GPU による $\eta-\eta'$ 中間子質量の計算
英文 ： $\eta-\eta'$ masses using TSUBAME2 GPU

利用課題責任者 石塚成人
Naruhito Ishizuka

所属 筑波大学 数理物質系
Division of Physics, Faculty of pure and applied sciences,
University of Tsukuba
URL : http://www.ph.tsukuba.ac.jp

邦文抄録（300 字程度）

強い相互作用を記述する量子色力学（QCD）では、ゲージ場のトポロジーに関連して興味深い現象が予言されている。その予言のひとつとして、フレーバー一重項擬スカラー中間子の質量の起源がある。本研究ではこの現象を理論的に第一原理から理解するため、格子QCDの方法を用いて $\eta-\eta'$ 中間子系の質量の計算を計算した。PACS-CS による$\beta=1.90$, $c_{sw}=1.715$, $\kappa_{ud}=0.13770$, $\kappa_s=0.13640$ のゲージ配位約 500 個を用いて計算を行った。中間子演算子として 4 種類を組み合わせ4×4の大きさの二点相関関数行列を計算し、その固有値からηとη'中間子質量を導出した。4×4相関行列からのシグナルは統計的に不十分であったが、そのサブセットの2×2相関行列からは予備的な値を得た。

英文抄録（100 words 程度）

The strong interaction among hadrons is described by Quantum Chromodynamics(QCD) in theoretical particle physics. There are several interesting phenomena related to the non-trivial topological configuration of the gauge field of QCD. One of them is the origin of the flavor-singlet meson mass. In this work we explore the flavor-singlet $\eta-\eta'$ meson masses. We employ ~500 configurations generated by the PACS-CS collaboration at $\beta=1.90$, $c_{sw}=1.715$, $\kappa_{ud}=0.13770$, $\kappa_s=0.13640$. Four types of interpolating operator for the singlet meson are combined to form a 4×4 two-point correlation matrix from which we extract the masses of η and η' mesons. Although we could not extract a clear signal from the 4×4 correlation matrix, we obtain a preliminary result from the reduced 2×2 correlation matrix.

Keywords: 5つ程度
格子QCD、大規模連立方程式、GPU による数値計算

背景と目的

強い相互作用を記述する量子色力学（QCD）では、ゲージ場のトポロジーに関連して興味深い現象が予言されている。その一つとしてフレーバー一重項擬スカラー中間子（ η' 中間子）の質量の起源がある。QCD では、この中間子が余分な質量をゲージ場のトポロジーの寄与により獲得し、そのため他の擬スカラー中間子より大きい質量をもつ事が予言されている。本研究ではこの現象を理論的に第一原理から理解するため、格子QCDの方法を用いて$\eta-\eta'$ 中間子系の質量の計算を目的とする。

$\eta-\eta'$ 中間子系の質量の計算にはフレーバー1 重項粒子に特有な非連結ダイアグラムと呼ばれる、クォークペアが生成した時空点と消滅した時空点が分離したダイアグラムの寄与がある。この分離したループの時間相関が、量子的に存在する背景ゲージ場の非自明なトポロジー配位の揺らぎに呼応して質量を生成すると考えられている（図 1）。

中間子質量はこの二点相関関数 $C(y,x)$ の関数形から以下のように決定される。

$$\sum_{\vec{y}} C(y,x) \xrightarrow[|y_0-x_0|\to\infty]{} Ae^{-m|y_0-x_0|},$$

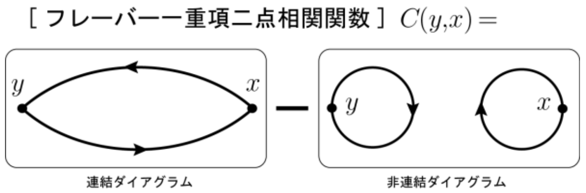

図 1 フレーバー一重項二点相関関数の計算に現れるダイアグラム。線はクォークの伝搬を表す。

ここで、x, y は4次元時空点で4次元格子上に離散化されている。2 点相関関数の点 x と点 y の間の時刻間隔 $|y_0 - x_0|$ を十分離したときの指数減衰の重みmがこのチャンネルに現れる基底状態の中間子質量に対応する。ここで、終点 y において空間座標 $\vec{y}$ についての総和があるが、これはこのチャンネルに現れる状態をゼロ運動量に射影し静止質量を得るために必要な操作である。一般的にこの二点相関関数を計算することで様々な粒子の質量を計算することができる。しかしながら、$\eta - \eta'$ 中間子状態については以下のように非連結ダイアグラムが計算を難しくしている。

二点相関関数 $C(y,x)$ の計算ではクォーク伝搬関数を計算して組み合わせる。クォークの伝搬に対応する線は大規模連立方程式の解に対応する。図1の左側の連結ダイアグラムにおける点 x から点 y への線は連立方程式に現れる係数行列の逆行列の(y,x) 成分に対応する。格子QCDにおいて一般的な格子の大きさは$32^3 \times 64$程度であるので、係数行列の次元は内部自由度も含めて 2500 万次元となり全ての x, y について逆行列の成分を求めることは、現在の最先端の計算機を用いても不可能である。

幸い連結ダイアグラムに関しては始点 x について数点求めるのみで良いため、連立方程式の右辺ベクトルを数本用意して各配位毎に数回連立方程式を解くことで必要な (y,x) 成分が得られる。

一方、非連結ダイアグラムに関しては、点 y において点 y から点 y へ伝搬する成分が必要なため逆行列の全ての (y,y) 成分、もしくは各時刻の空間和が必要となる。対角成分のみを厳密に求める有効な方法はなく、モンテカルロ法で対角和をとる方法がとられている。対角和をモンテカルロ法で見積もる方法においても、やはり連立方程式をモンテカルロの試行回数分だけ解く必要があるため、このような非連結ダイアグラムを含む計算は非常にコストのかかる計算となっている。

本研究では Tsubame2 の GPU を利用した高速な連立方程式ソルバーを用いてこの非連結ダイアグラムを含む物理的にも重要な $\eta - \eta'$ 中間子系の質量の計算を行った。

概要

格子QCD計算において最も時間がかかるのはクォーク伝搬関数を求めるための大規模連立方程式の解法である。本計算では以下の連立方程式を解く。

$$Dx = b, \tag{1}$$

$$\begin{aligned} D^{a,b}_{\alpha,\beta(n,m)} &= \delta^{a,b}\delta_{\alpha,\beta}\delta_{(n,m)} - \kappa F^{a,c}_{\alpha,\gamma}(n) \\ &\times \sum_{\mu=1}^{4}\Big[U_\mu^{c,b}(n)\big(1+\gamma_\mu\big)_{\gamma,\beta}\delta_{(n+\hat{\mu},m)} \\ &\quad + \big(U_\mu^{c,b}(m)\big)^{*}\big(1+\gamma_\mu\big)_{\gamma,\beta}\delta_{(n-\hat{\mu},m)}\Big], \end{aligned} \tag{2}$$

ここで、x, b はカラーとスピン、および 4 次元格子点番号を添え字に持つ複素ベクトル。a, b, cはカラーの自由度1～3を表し、α, β, γ はスピンの自由度1～4を表し、n, m は 4 次元時空格子点番号を表す。$U_\mu^{c,b}(n)$ は下字リンク場と呼ばれ3×3ユニタリー行列の4元ベクトル場である。

TSUBAME2 において連立方程式(1)は 4 次元時空の x, y 方向で MPI 並列できるように実装されている。各ノードの GPU は、ノード内の格子点のうち x 方向をさらに分割した領域を担当するように実装した。GPU は Nvidia による CUDA 言語を用いて実装した。CPU コードは Fortran90 言語を用いた。

GPU アーキテクチャでは単精度による計算が非常に高速なため、式(1)に対する前処理として式(1)を単精度で解くソルバーを実装し、倍精度の解は CPU による反復改良を行うことで、単精度計算による GPU の計算時間がほぼ90%以上を占めるようにしつつ倍精度の解が得られるように実装した。

ゲージ配位は、PACS-CS collaboration[1] により生成された格子サイズ $32^3 \times 64$ の $\beta = 1.90$, $c_{sw} = 1.715$, $\kappa_{ud} = 0.13770$, $\kappa_s = 0.13640$ の 550 配位を用いて計算を行った。この計算は 550 配位中、206 配位の計算は TSUBAME2 で行い、残りの配位の計算

は筑波大学の T2K と東京大学の T2K で分担して計算した。ここで κ_{ud} はアップとダウンクォークの質量に関するパラメータで κ_s はストレンジクォーク質量に関するパラメータである。 κ は小さいとクォーク質量が大きくなる。

$\eta-\eta'$ 中間子系の質量の計算に必要な 2 点相関関数は、連結ダイアグラムについては始点の時刻を 4 点取り、非連結ダイアグラムの計算にはZ_2ノイズ法を用い各配位について 10 回のノイズによる平均でトレース（空間和）を評価した。中間子演算子にはフレーバーの組み合わせと波動関数の組み合わせそれぞれに 2 種類用意し、合計で 4 種類の演算子による次の4×4相関関数行列を計算した。

$$C_{ij}(t) \equiv \sum_{\vec{y}} \left[\langle O_i^\dagger(y) O_j(x)\rangle\right], \tag{3}$$

$$O_1(x) = \bar{n}(x)\gamma_5 n(x), \tag{4}$$

$$O_2(x) = \overline{\phi n}(x)\gamma_5 \phi n(x), \tag{5}$$

$$O_3(x) = \bar{s}(x)\gamma_5 s(x)\,, \tag{6}$$

$$O_4(x) = \overline{\varphi s}(x)\gamma_5 \varphi s(x), \tag{7}$$

$$\phi n(x) = \sum_{\vec{y}} \phi(\vec{x}-\vec{y}) n(\vec{y},x_0) \tag{8}$$

$$\varphi s(x) = \sum_{\vec{y}} \varphi(\vec{x}-\vec{y}) s(\vec{y},x_0) \tag{9}$$

$$\phi(\vec{x}) = Ae^{-B|\vec{x}|}, \tag{10}$$

$$\varphi(\vec{x}) = A'e^{-B'|\vec{x}|}. \tag{11}$$

ここで、$n(x)$ と $s(x)$ はそれぞれ、アップダウンクォーク演算子とストレンジクォーク演算子である。式(3)にてこれらの演算子を縮約すると図 1 のように連結グラフと非連結グラフが現れる。式(10),(11)はクォーク演算子を改良する波動関数である。 $A = A' = 1.2,\ B = 0.09,\ B' = 0.21$ を用いた。

プログラムは MPI-4 並列で実行し、各ノードの GPU を2つ用いた。CPU は各ノードの 2 コアを使用した。

結果および考察

図 2〜図 3 に二点相関関数の図を示す。縦軸は相関関数の大きさ、横軸は時間間隔 $t = |y_0 - x_0|$ である。 図 2 では 4×4相関行列を対角化した時間相関を表し 4 つの固有値からこの相関関数に含まれる

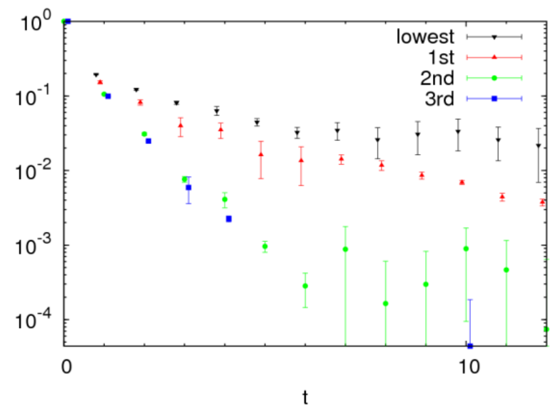

図 2. 対角化後の 4×4 行列二点相関関数（$\kappa_{ud} = 0.13770$）。

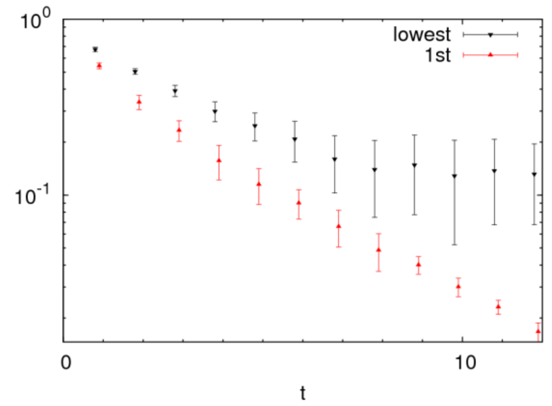

図 3. 対角化後の 2×2 行列二点相関関数（$\kappa_{ud} = 0.13770$）。

4 つの量子状態の時間相関が引き出されている。図 3 は4×4相関行列のうち、$\eta-\eta'$ 状態に重なりが大きいと思われる、2×2の大きさの部分行列から相関行列を作成し、その固有値から 2 つの量子状態の時間相関を見たものである。

図 2 から、質量の重い 2 つの状態(相関の減衰の速いもの：緑と青の点)の弁別がうまくできていないことが分かる。したがって、これらの固有値の弁別が不十分なため、残りの 2 つの固有値にも影響があると考える。一方、図 3 では 2 つの固有値が得られている。

理想的には相関関数は指数関数的減衰をしながら、統計誤差が徐々に増加していく振る舞いが期待される。図 2 では分離できた赤と黒のデータについても期待される振舞いからの乖離が見られる。図 3 では時刻 4 から 5 までは期待される振る舞いを示すがそれ以降は励起状態（赤の点）の統計誤差の振る舞いが期待と外れている。以上のように、相関関数の振る舞いが期待さ

れる振る舞いではないため、結果は統計的に不十分な計算である可能性がある。

$\eta-\eta'$ 系状態は、この相関関数に現れる最も減衰の遅いものが η に対応し、その次に減衰の遅いものが η' に対応する。$\eta-\eta'$ 系質量はこの減衰の速さをフィッティングすることで決めることができる。当初予定であった 4×4 相関行列からの質量の導出は上述したように固有値の弁別がうまくいっておらず、統計を増やすとともに演算子の基底の取り方や数を（式(10),(11)の選び方を）増やす必要があると考える。

予備的な値であるが 2×2 行列の相関関数から得られたデータを指数関数でフィットし得た質量を表 1 に示す。誤差は統計誤差のみを表す。$\eta-\eta'$ 系の質量の階層性は再現できているが、上記で述べたような系統的な誤差があると考えられる。また統計誤差が η' 質量に対しては 2 割もあるので、統計を上げる必要がある。

	$\kappa_{ud}=0.13770$ $\kappa_s=0.13640$	実験値
η	0.616(53)	0.547853(24)
η'	1.05(24)	0.95778(6)

表 1 η と η' の質量。単位は[GeV]。格子間隔 a の値は $a^{-1}=2.17$ [GeV]を用いた。実験値は文献[2]より引用した。両質量の導出には時刻範囲 [2~5]を用いた。

まとめ、今後の課題

今回計算したクォーク質量の軽いところ（$\kappa_{ud}=0.13770$）での計算は統計的にまだ不十分である。また、4×4 相関行列を使った計算は演算子セットの選定に問題があるようである。本課題では TSUBAME2 の計算機と他サイトの計算機を用いたゲージ配位数、約 500 セットを使った計算結果が得られた。TSUBAME2 の GPU を用いた計算は非常に効果的であった。今後は統計数を増やすとともに、比較的計算やシグナルの良いクォーク質量の重いところにおいても、ここで行った計算手法の妥当性について系統的および高精度の計算を行いたい。

参考文献

[1] PACS-CS Collaboration, S. Aoki *et al.*, Phys. Rev. D 79, 034503 (2009), Phys. Rev. D 81, 074503 (2010).

[2] Particle Data Group (PDG), [http://pdg.lbl.gov/]