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 による非連結グラフ計算の改良と $\eta-\eta'$ 中間子質量の計算
英文 ： Improvements of disconnected diagrams and $\eta-\eta'$ 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 $\eta-\eta'$ 中間子系の質量を計算した。TUBAME2 を用いた前課題においては統計精度が問題であることが分かった。本課題では統計を増やすとともに、計算の比較的簡単なクォーク質量の重いところでの計算を行い計算手法の改良方法への基礎固めを行った。前課題から引き継いだパラメータにおいては統計を倍にしたが統計精度の問題が残った。一方、クォーク質量の重いところでの計算では統計の問題が無いことが分かった。2クォーク質量でのηとη'中間子質量の予備的な値を得た。

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 our previous work for $\eta-\eta'$ masses with TSUBAME2 we found that the statistics was insufficient to extract the precise meson masses. To overcome this we extend and double the statistics of the previous calculation and add a new calculation at a heavier quark mass to explore the improvement of our method. We find that the doubled statistics is still insufficient, while it is sufficient at the heavier quark mass. We obtain preliminary results for the meson masses at two quark masses.

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。

我々は前課題において $\eta-\eta'$ 中間子系の質量の計算を TSUBAME2 を用いて計算した。その結果は十分なものではなく、統計を増やす必要があった。そのため、本課題では統計を増やすとともに、新たに前回よりも計算の簡単なクォーク質量の少し重いところにおいても$\eta-\eta'$中間子系の計算を行うこととした。統計の問題を解決したのちに$\eta-\eta'$中間子系の計算方法の改良として、中間子演算子の選定について評価していく方針とした。

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。

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

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

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、$\alpha,\ \beta,\ \gamma$ 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。$U^{c,b}_{\mu}(n)$ 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。これは前課題で使用したコードと同一である。

ゲージ配位は、PACS-CS collaboration[1] により生成された格子サイズ $32^3\times64$ の (A) $\beta=1.90,$ $c_{sw}=1.715,$ $\kappa_{ud}=0.13770,$ $\kappa_s=0.13640$ の 1047 配位、および、(B) $\beta=1.90,$ $c_{sw}=1.715,$ $\kappa_{ud}=0.13745,$ $\kappa_s=0.13640$ の 284 配位を用いて計算を行った。(A)の計算については 1047 配位中、703 配位での計算を TSUBAME2 で行い、残りの配位で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。前課題での計算は(A)のパラメータで 550 配位であったので、(A)の統計は倍に増えたことになる。(B)は前課題にはない新たなパラメータでの計算である。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。(B)のパラメータではクォーク質量が(A)より重い計算であり、計算時間や統計について(A)より少ない時間で我々の方法を評価できると考える。

$\eta-\eta'$ 中間子系の質量の計算に必要な 2 点相関関数は、前課題と同様に、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4×4相関関数行列を計算した。

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 1～図 4 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 1,図 2 は軽いクォーク質量 $\kappa_{ud}=0.13770$ での計算結果、図 3,図 4 は重いクォーク質量 $\kappa_{ud}=0.13754$ での計算結果である。図 1, 図 3 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 4 つの量子状態の時間相関が引き出されている。図 2, 図 4 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 1, 図 3 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）の弁別ができていないことが分かる。これはこの計算に用いた演算子のセットが 4 つの状態を区別できるほどの独立性や重なりを持っていないためと考えられる。また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 2, 図 4 では 2 つの固有値が得られているが、この計算に用いた2×2行列に含まれる演算子はお互いに独立性が良いためである。

クォーク質量の軽い計算（図 1, 図 2）では相関の指

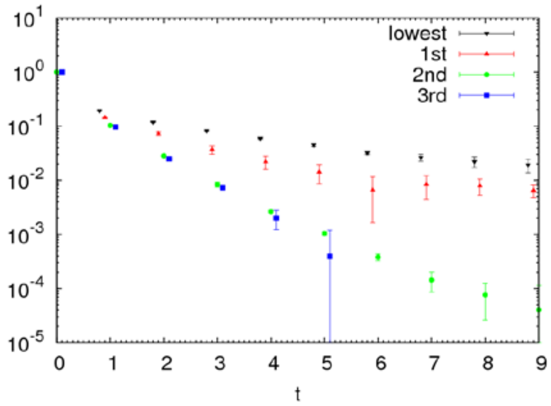

図　1. 対角化後の 4×4 行列二点相関関数（$\kappa_{ud}=0.13770$）。

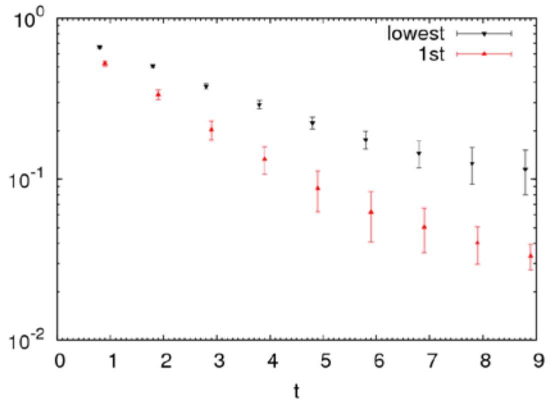

図　2. 対角化後の 2×2 行列二点相関関数（$\kappa_{ud}=0.13770$）。

数関数的な減衰が時刻 6 まで得られているがその先で少し減衰が緩和している。これは、前回の統計よりも良い振る舞いであり、統計を倍増した効果が表れている。しかしながら、時刻 6 以降、誤差が小さくなっており、期待される誤差の振る舞いではないため、今回の計算も統計的に不十分な計算である可能性がある。一方、クォーク質量の重い計算（図 3,図 4）では指数関数的減衰が時刻 6 を超えて続いており、統計誤差も時刻とともに増えており、モンテカルロ計算で予想される振る舞いに従っているため、統計的には十分なサンプルがとれている。

$\eta-\eta'$ 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、演算子の既定の取り方や数を増やす必要があると考える。

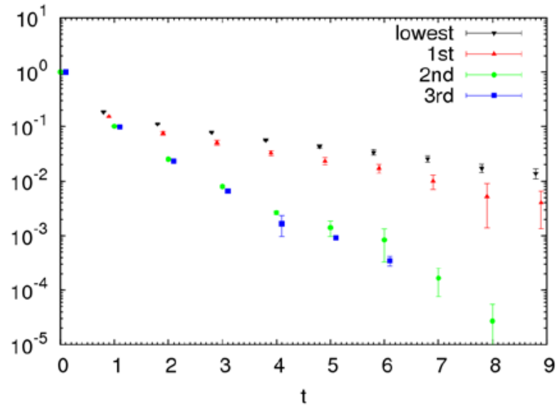

図　3. 対角化後の 4×4 行列二点相関関数（$\kappa_{ud}=0.13754$）。

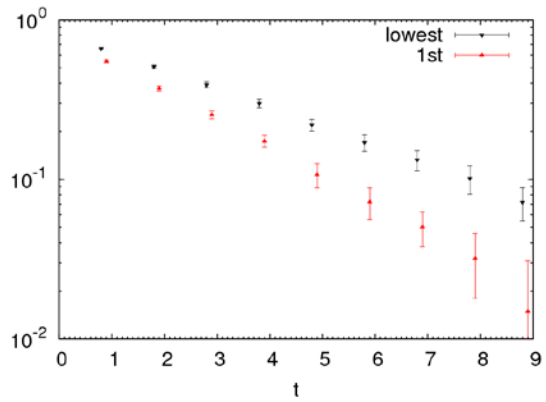

図　4. 対角化後の 2×2 行列二点相関関数（$\kappa_{ud}=0.13754$）。

	$\kappa_{ud}=0.13745$ $\kappa_s=0.13640$	$\kappa_{ud}=0.13770$ $\kappa_s=0.13640$	実験値
η	0.593(44)	0.597(41)	0.547853(24)
η'	0.850(68)	1.00(15)	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。両質量の導出にはすべて時刻範囲 [2~5]を用いた。

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。質量の軽い $\kappa_{ud}=$

0.13770 での計算は統計を倍増したため、統計誤差は前課題より改良されているが、η' 質量には依然として 1 割の統計誤差がある。クォーク質量依存性を詳細に調べるためには統計誤差のさらなる削減が必要である。

まとめ、今後の課題

クォーク質量の重いところ（$\kappa_{ud} = 0.13754$）での計算は統計的に問題がないが、演算子セットの選定が残る課題となる。クォーク質量の重いところで、様々なセットを用いた比較計算を行い演算子セットの最適化を行ない、系統および統計誤差を抑えることが今後の課題である。

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/]