

課題名 (タイトル) :

格子 QCD を用いた素粒子現象論の研究

利用者氏名 : ○新谷 栄悟*、出淵 卓**、藏増 嘉伸*

所属 :

*計算科学研究機構 連続系場の理論研究グループ

**理研 BNL 研究センター 計算科学研究グループ

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

本研究では、素粒子標準模型を超えた新しい物理モデルに必要とされる低エネルギー物理現象および対応する物理量の格子 QCD を用いた第一原理計算を目的とする。このプロジェクトではバリオン数の破れ、CP 対称性の破れ、ミューオン $g-2$ に関連した物理量の高精度計算に注目する。

宇宙初期状態の理論的解明に向けて、高エネルギー領域における対称性の破れや粒子状態の理論的理解は重要となる。超対称性理論や大統一理論 (GUT) はバリオン数の破れ、CP 対称性の破れを予想して、現在の粒子反粒子の非均等性やクォーク質量階層性を説明できるとされる。ただし、その理論予想の検証には超高エネルギー実験を必要とするため、欧州原子核研究機構が運用している LHC 実験や、今後の実験計画においても直接的に実現することは困難であると考えられている。そこで、別のアプローチとして、実験精度の限りなく高めた高強度実験が各国の研究機関で計画立案されている。その実験計画で注目されているのが、陽子崩壊過程の観測や、電気双極子モーメントの測定、ミューオン $g-2$ の高精度測定である。

陽子崩壊や電気双極子モーメントは現時点では観測されていないため実験的な上限値のみがあたえられる。幾つかの理論予想はその上限値を超えた近傍に新しい物理現象の可能性を示唆している (例えば陽子崩壊では、実験的に課せられている陽子の平均寿命の下限值 10^{34} 年以上に対して理論では 10^{34-35} 年が理論範囲となっている)。実験的な存在範囲は理論モデルパラメータ領域を制限する上で重要となるため、実験精度を拡張して更なる予想範囲を押し上げることは、理論モデルのパラメータを制限して、将来的に観測されるであろう新粒子の存在領域を確定していくうえで重要となる。ただし、理論予想の詳細には幾つかのエネ

ルギースケールにおける計算結果を必要として、その内訳に幾つかの系統誤差が含まれることが理論予想の信頼性にとって問題となる。特に、核子が関連した物理量には核力を扱う QCD を厳密に扱う必要があるが、それは非摂動効果となるため理論計算の扱いは電磁力と異なり非常に難しい。そのため、現在の陽子崩壊や電気双極子モーメントの理論予想には QCD を起源とする系統誤差が依然大きいと考えられる。そこで、本研究では核子に関連した物理量を格子 QCD を用いて厳密的に扱って、新しい物理を記述する理論モデルの予想範囲の信頼性の高い定量的評価を目的とする。

近年の理論的發展により、ミューオン $g-2$ における実験値と標準模型の差が明らかになりつつあり、それが新しい物理現象の徴候と考えられる。現在、米国フェルミ国立研究所では関連した高精度実験が進められており、関連した理論計算も活発化している。特に格子 QCD 分野では、ミューオン $g-2$ の理論計算に含まれる QCD 効果の厳密計算が各グループで進められている。ミューオン $g-2$ 計算では標準模型における厳密値が求められるが、現時点の評価ではハドロン物理が関連する非摂動効果に対して、モデル依存性による系統誤差が大きく残っている。現在、実験値と標準模型における理論値とはおおよそ 3 シグマで差が見られるが、両方の誤差が依然として大きい。これらの誤差には統計誤差のほかに理論計算、特に QCD 効果が関連した系統誤差も大きく関与している。格子 QCD はこの系統誤差を取り除くことが可能であるため、素粒子物理ではこの計算結果が注目されている。

2. 具体的な利用内容、計算方法

本研究ではモンテカルロ積分を用いた数値的経路積分を実行することで上記の物理量を統計量として有意に評価することを目的としている。格子 QCD で導かれる物理量は統計平均量に誤差を含んだ形で確率的に

求めることになるため真の解を含む領域を求めるためには、正確な統計誤差解釈と十分な統計量が重要である。格子 QCD 計算では、クォーク質量が小さくなるに従って、統計的な揺らぎが大きくなる上、クォーク伝搬関数を求める際にも膨大な計算時間が必要となる。そのため計算アルゴリズムの改良を随時行っていく必要があると考えている。

本利用では all-mode-averaging (AMA) アルゴリズムの成果をもとに、効率的な計算のための準備的なチューニングを行った。アルゴリズム及び大規模疎行列の逆計算に関連したパラメータのチューニングによって計算コスト面では従来の方法と比べて 5 倍から 10 倍の減少が今後見込まれる。

本プロジェクトでは物理的なパイ中間子、K 中間子を含んだゲージ配位を主に用いた。2つの軽いクォークと1つのストレンジクォークを動的に含んだゲージ配位は、筑波大学のメンバーを中心とした PACS グループによって用意されているので、これらのゲージ配位の上で相関関数を計算した。格子サイズは 96^4 、格子間隔は 0.12 fm、物理的な格子サイズは 10 fm^3 である。物理的なパイ中間子を扱うことができるためカイラル外挿における余計なパラメータチューニングの手間を省くことができる。

格子 QCD において最も多く行う計算は大規模疎行列の逆演算である。この逆行列はフェルミオン伝搬関数として考え、フェルミオン作用にあるディラック演算子を時空間及びスピノール・カラー量子数を行列要素としてもつ。そのため格子 QCD 計算で必要となる行列要素数は膨大な数に上る。例えば、1つの格子パラメータに対して格子サイズ $243 \times 64 \times 16 \times 12 = 169,869,312$ の要素を持った行列及びベクトル演算を扱わなければならない。従ってメモリ制限や CPU 性能の制限などから、共役勾配法 (CG 法) や双共役勾配法 (BiCG 法) と呼ばれる試行回数ごとに計算精度を上げる方法がよく採用される。CG 法のメリットは、疎行列であればメモリや CPU 演算を大幅に減らして求めたい精度を効率よく得られる点である。本研究では更なる性能改善のためにスペクトラム分解の観点からアルゴリズム改善を図っていく。CG 法を行うための計算コストが物理量の計算に必要な大部分を占めているので、この部分のアルゴリズム開発は特に本研究において要求される統計精度を達成するためには大き

な役割を果たすことになる。計算性能の改善方法として、例えばエルミート化したディラック演算子の低固有モードのスペクトラル分解とそれを用いた前処理は CG 法の性能改善に非常に大きな貢献を果たすことが知られている。また、近似的なディラックモードの重ね合わせを前処理に用いる deflation 法も有効である。一般的な傾向としてクォーク質量が小さいほど低固有モードが多く現れるため、CG 法の収束が非常遅くなる。deflation 法などの応用によって、カイラル極限近傍の計算には、CG 法の前段階で取り除く前処理が重要となる。

加えて、効率的な物理量計算を行うため AMA アルゴリズムを採用した。このアルゴリズムは、低精度モードと高精度モードの逆行列を組み合わせ、引き算によってバイアスを含まない手法である。低精度モードが持つ格子上の対称性 (例えば並進対称性) を用いることで、低精度計算を多数行って統計平均したものに置き換える方法である。低精度計算コストは高精度計算と比べると 10 分の 1 以下となる。この方法の優れた点は、近似解と正確な解の相関が強ければ、統計精度として高精度解を多数行った結果と同程度の結果が低コストで得られる点である。近似解の計算コストは小さいので、結果的には全計算コストを劇的に減らすことが可能である。

2点関数や3点関数の計算では、とくにクォーク質量が小さい領域では、その誤差が顕著になるが、AMA アルゴリズムを用いた高精度計算によって、その領域における詳細な振る舞いが解明できる。本利用では、2つの異なる格子サイズの上で物理点上のパイ中間子を用いて幾つかのパラメータをテストした。

3. 結果

まず、FX100 上におけるプログラムコードの最適化を行った。これまで利用してきた共通ライブラリ “CPS” では FX100 における実行性能が 1% 程度であったので、SIMD 命令セットをプログラムコードに挿入して、ディラック演算子部分の行列・ベクトル積演算を最適化した。さらに、メモリ上ベクトルのアクセスを効率化するために、ゲージ場に対応する変数の配置を変換してメモリアccessを効率化した。その結果、実行性能として 8% 程度を達成することができた。

計算プログラムのチューニングのあと、固有値ベク

トルの計算を行った。10 fm³ 格子上でランチョスアルゴリズムとチェビシェフ加速法を実行して倍精度計算の 380 個の固有値と固有値ベクトルを正確に求めた。すべての固有値ベクトルは、ゲージ配位ごとに求めてディスクに保存した。固有値ベクトル計算には 256 ノード (8192 コア) を用いて 3.2 時間必要とする。保存した固有値ベクトルは CG 法における前処理として利用可能である。ディスク容量の制限から 15 ゲージ配位の固有値ベクトルを求めることができた。ロード I/O は 1 配位ごとに 50 分必要とする。CG 法では、疎行列の逆計算の収束条件として 10⁻⁸ を採用した場合、380 個の低固有値モードによる前処理ありとなして比較すると、なしの場合おおよそ 30,000-50,000 の反復回数が、前処理ありでは 5,000 程度に収まっている。結果的に 6 倍から 10 倍の時間短縮につながった。図 1 で示すように最も小さい固有値と 380 個取り除いた後の固有値とでは大きさとして 100 倍ほどの開きがある。この開きが CG 法における条件数にかかわり、その結果、前処理による反復回数の大幅な減少につながった。

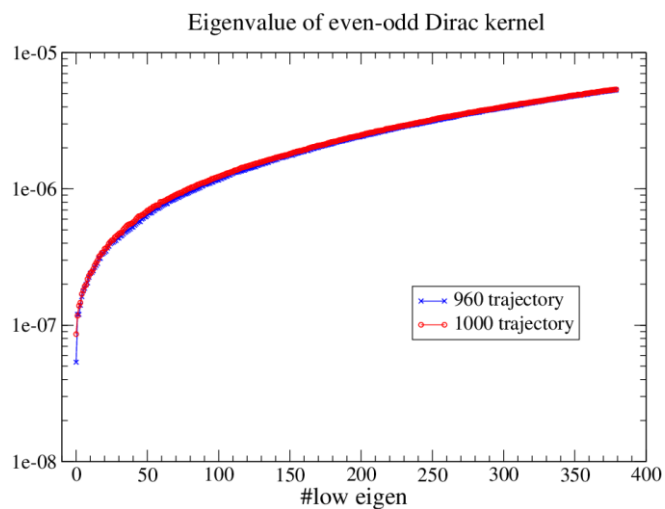


図 1 : 10fm³ 格子における低固有値の分布。シンボルの違いは 2 つの異なるゲージ配位上の結果を示している。

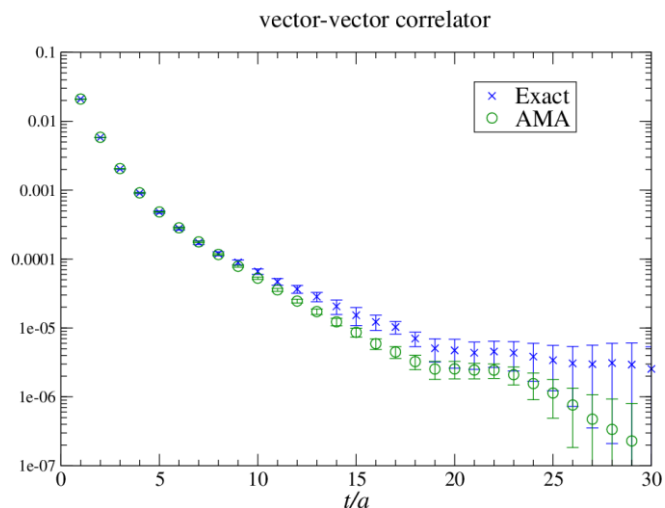


図 2 : 10fm³ 格子におけるベクトル型 2 点関数の比較。

AMA 法のパラメータチューニングについてテスト計算の結果を図 2 に示す。ここでは、CG 反復回数を 600 に固定して近似解を求めた。ソース点の数は 32 個、ゲージ配位数は 10 である。AMA 法での誤差の減少が顕著に表れていることが分かる。t/a=10 に関して相対誤差の比は 0.32 であった。相関を考慮しない理想的な値 0.25 に近いことから、十分な減少率と考えてよい。今後はこのパラメータを用いることにする。近似解を求めるために要した時間は、厳密解を求める時間と比べておおよそ 1/5-1/6 であったことから、AMA 法によって 5 倍強の効率化が得られた。

4. まとめ

本利用では、プログラムコードのチューニング及び AMA 法のパラメータ選定を行った。前処理のための固有値ベクトルの計算を実行して 15 配位について、380 個求めることができた。このデータは今後の計算のために重要となる。また、CG 反復回数を 600 に固定して AMA 法における近似解を求めた結果、統計誤差の減少が期待通り得ることができた。

5. 今後の計画・展望

今後は本利用で求めた固有値ベクトルと AMA パラメータを利用して、本格的な物理量の計算に移行していきたい。ソース点について、更に個数を増やした計算を実行してミュオン粒子 g-2 の計算や核子計算について応用する計画である。この計算によって、誤差を 1% まで減らした結果を得ることが期待できる。

6. 利用がなかった場合の理由

後期から利用を開始して、その前半では主にプログラムコードの最適化に時間を要したため、本格的な利用は後半から始めた。固有値計算に注目して進めていたが、256 ノードの待ち時間の増大から、すべての利用時間を使い切ることができなかった。

平成 27 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

1. E. Shintani, R. Arthur, T. Blum, T. Izubuchi, C. Jung and C. Lehner, “Covariant approximation averaging”, Phys.Rev. D91, 114511(2015), arXiv:1402.0244[hep-lat].
2. Eigo Shintani, Thomas Blum, Taku Izubuchi, Amarjit Soni, “Neutron and proton electric dipole moments from $N_f=2+1$ domain-wall fermion lattice QCD”, arXiv:1512.00566.

【国際会議などの予稿集、proceeding】

なし

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. “Improved Estimate of Proton Lifetime in lattice QCD”, Brookhaven Forum 2015, October 7—9, 2015, BNL, USA.
2. “Proton Decay and other BSM in the lattice”, INT Program INT-15-3, Intersections of BSM Phenomenology and QCD for New Physics Searches, September 14 - October 23, 2015, Seattle, USA.
3. “Electric polarizability and magnetic moment in external electric field”, High precision QCD at low energy, Aug 02 -- Aug 22, 2015, Benasque, Spain.
4. “Error reduction using the covariant approximation averaging”, EPS-HEP2015, 22 July – 29 July 2015, Vienna, Austria.
5. “High statistic analysis of nucleon form factors and charges in lattice QCD”, Lattice 2015, 14 July – 18 July 2015, Kobe, Japan.
6. “High statistic analysis of nucleon form factor in lattice QCD”, NSTAR2015, 25 May – 28 May, 2015, Osaka University, Osaka.
7. “Matrix Element With Baryon Number Violation in Lattice QCD”, International Workshop of Baryon & Lepton Number violation, April 26 – April 30, 2015, University of Amherst, MA, USA.

【その他（プレスリリース、学術会議以外の一般向けの講演など）】

なし