

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 22 日現在

機関番号：15401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540276

研究課題名(和文) 格子QCD理論におけるオーバーラップフェルミオンソルバーの前処理に関する研究

研究課題名(英文) Preconditioning for overlap fermions in Lattice QCD

研究代表者

石川 健一 (Ishikawa, Ken-Ichi)

広島大学・理学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：60334041

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：本研究ではカイラル対称性を保持した格子QCD計算手法の改良を目的としオーバーラップ演算子による格子QCD計算手法の改良について研究した。オーバーラップ演算子の5次元ドメインウォール演算子によるクォーク伝搬関数の計算手法の改良のため逐次緩和法前処理による加速について調べ、総演算量の増加のため求解に至る実行時間の減少は実現できなかった。モンテカルロ法の加速のための再重み付けによる加速を調べ、オーバーラップ演算子核におけるゼロ固有値のため困難であると分かった。シュレーディンガー汎関数法でのドメインウォール演算子の実現方法について研究した。メビウスドメインウォール演算子についてツリー近似で構築できた。

研究成果の概要(英文)：I investigated the numerical algorithms on the lattice overlap fermion to accelerate the Monte Carlo simulations for the lattice QCD with lattice chiral symmetry. The successive over relaxation for the quark propagator solver with the domain wall fermion matrix was investigated. The time to obtain the solution was not reduced because of the increase of total numerical operations. The Hybrid Monte Carlo algorithms with the combination of the molecular dynamics with less accurate chiral symmetry and the re-weighting method to exact chiral symmetry was investigated. The appearance of the near zero mode in the kernel operator of the overlap operator prevented the re-weighting method to work well. To avoid the appearance of the near zero mode, I investigated the Schroedinger functional scheme with the domain wall fermions. The Mebius domain wall fermions in the SF scheme was constructed at the tree level.

研究分野：素粒子(理論)

キーワード：素粒子(理論) 格子QCD カイラル対称性 数値計算

1. 研究開始当初の背景

低エネルギーでのハドロンの物理にはカイラル対称性が重要な役割を果たしている。ハドロン物理を第一原理から計算できる格子量子色力学 (格子 QCD) の手法が質量スペクトルの計算などに成功を収めているが、カイラル対称性を保持した計算は計算コストが大きい、スペクトル以外の物理量に対する応用の進展は遅い状況が続いている。そのため、カイラル対称性を保持した格子 QCD 計算手法の改良が世界的に急務となっている。

格子 QCD 計算で最も計算コストが高い部分はクォーク伝搬関数の計算部分である。ここでは、格子上のクォーク作用から導出されるクォーク演算子を係数行列とする大規模連立方程式の数値解法が必要となる。カイラル対称性を保持したクォーク作用にはオーバーラップ型作用とそれと数学的には同等な 5 次元ドメインウォール型作用がある。5 次元ドメインウォール型作用が計算コストの観点から有利であるとされ、世界的にもドメインウォール型作用を用いた格子 QCD 計算が盛んとなってきている。しかしながら、上述したように通常のウィルソン型作用に比べ計算コストが 10 倍程度増加してしまう。

5 次元ドメインウォール型作用を用いたクォーク伝搬関数の計算が高速化できると格子 QCD 計算のワークフローの高速化につながるため、5 次元ドメインウォール型の演算子を係数行列とする大規模連立方程式の数値解法を高速化することが重要となってきている。

2. 研究の目的

上述の背景に基づき、本研究では格子 QCD における格子カイラル対称性をもつ作用によるクォーク伝搬関数の計算手法の改良を目的とした。

特に、格子カイラル対称性をもつ演算子として、5 次元ドメインウォール型演算子による伝搬関数の計算手法の改良を目的とした。

また当初より研究対象を広げ、格子 QCD 計算全体を加速することを目的とし、厳密なカイラル対称性を緩和することで計算コストを抑えるようなハイブリッドモンテカルロ法の加速についても研究した。

3. 研究の方法

クォーク伝搬関数の計算には 5 次元ドメインウォール型演算子を係数行列とする大規模連立方程式を解く必要がある。大規模連立方程式の解法には反復法が用いられる。この反

復法を改良・加速する手法の一つに前処理法の適用がある。本研究では、5 次元ドメインウォール型演算子に対する前処理手法として逐次緩和法を前処理として実装しその効果を調べた。

5 次元ドメインウォール型演算子を D とすると、解くべき連立方程式は、

$$Dx = b,$$

である。 x, b は五次元格子座標をもつ場ベクトルである。演算子 D は非エルミート行列であるため連立方程式解法の一つである共役勾配法 (CG 法) が適用できるように次の様に変形する。

$$D^\dagger Dx = D^\dagger b.$$

新しい連立方程式を

$$Ay = D^\dagger b, \quad A = D^\dagger D,$$

とし、係数行列 A に対する前処理法を考える。

この係数行列 A をもつ方程式は正規化方程式と呼ばれ、この行列に対する逐次緩和法はまだ調査されていないので本研究で調べることとした。

連立方程式の高速化に加えて、ハイブリッドモンテカルロ法 (HMC 法) の加速についても考察した。HMC 法内では前述のクォーク伝搬関数の計算が大量に計算される。その中で最もクォーク伝搬関数が計算される部分は分子動力学法の部分である。

HMC 法が正しく成立する条件としては京全体のエネルギーを表すハミルトニアンが保存するように分子動力学法で力学変数を時間発展させる必要がある。分子動力学法全体でカイラル対称性を厳密に保つと全体の計算コストが膨大になるので、ここの部分のカイラル対称性を緩和し計算コストを削減することを考えた。一方、モンテカルロ法のアンサンブルが厳密なカイラル対称性を保つためには、モンテカルロ法の重みを、緩和されたカイラル対称性に基づくものから、厳密なカイラル対称性に基づくものに変形しなくてはならない。このようなモンテカルロ法の重みを後付で変更する手法の一つに、再重み付け法がある。本研究では、この HMC 法の分子動力学部分のカイラル対称性を緩和し、再重み付け手法を用いて厳密なカイラル対称性を回復する手法について研究した。

格子カイラル対称性の存在と、ゲージ場のトポロジーの間にある理論的關係から、オーバーラップ型フェルミオン演算子の核演算子に近ゼロ固有値が現れることが知られている。また、上述の HMC 法加速の研究過程において、厳密な格子カイラル対称性を課す場合、上記の HMC 法の力学発展中に、近ゼロ固有値が出現し再重み付けが有効に働かなくなることが分かった。そこで、カイラル対称性をソフトに破ることで近ゼロ固有値の

出現を抑え、HMC 法が再重み付け法により加速できないか考察した。この手法を探究するに当たり、カイラル対称性を時空の境界条件によって破る可能性に注目し、時空の時間方向にディリクレ型境界条件を課す、シュレーディンガー汎関数法におけるドメインウォール演算子の構成法について研究した。

時間境界を設けるシュレーディンガー汎関数法ではこの時間方向ディリクレ境界条件がカイラル対称性を破ることが知られている。内部の時間でカイラル対称性は保たれている。このため全時空ではカイラル対称性は破れているといえ、近ゼロ固有値の出現がないと考えられる。一方、ドメインウォール型演算子をシュレーディンガー汎関数法に適用する研究はまだ、あまり行われておらず、ツリーレベルの解析がリュッシャーと武田により行われているのみである。より厳密なカイラル対称性を持つメビウスドメインウォールフェルミオン演算子に対する、シュレーディンガー汎関数法の定式化について武田の方法を拡張することを試みた。

4. 研究成果

逐次緩和法による連立方程式反復法の加速については、5次元ドメインウォール型演算子 D の形から、エルミート演算子を構成するために 2 乗の形 $A = D^\dagger D$ をとる必要がある。このエルミート演算子に対して逐次緩和法を適用したが、格子点の連結の広がり方が 2 格子点離れるため、逐次緩和法の前、後方代入演算の演算量が 2 倍に増えることが分かった (**図 1: 黄色色の点の連結部**)。

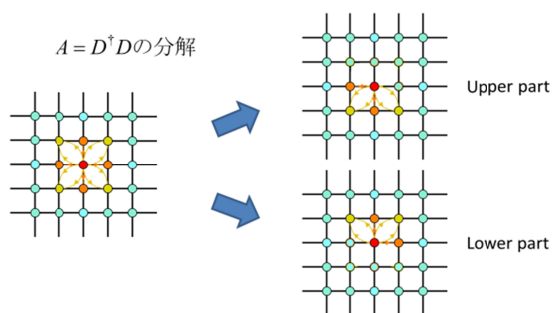


図 1 演算子 A の構造と前方後方部分への分解

反復法全体の求解までの反復数は、前処理を適用すると適用前に比べて 3/4 と減少した (**図 2 上: 黒線 = 従来法、赤と青の線 = 逐次緩和法前処理付**) が、実行時間としては 7/6 倍になった (**図 2 下**)。本手法では計算速度の加速はできないことが分かった [学会発表 5]。

クォーク伝搬関数の計算法の加速に代わり、HMC 法全体を加速することに方針を変更し、HMC 法内でカイラル対称性を厳密に保持しなくてもよい部分とカイラル対称性を厳密にする部分に分けることができる再重み付

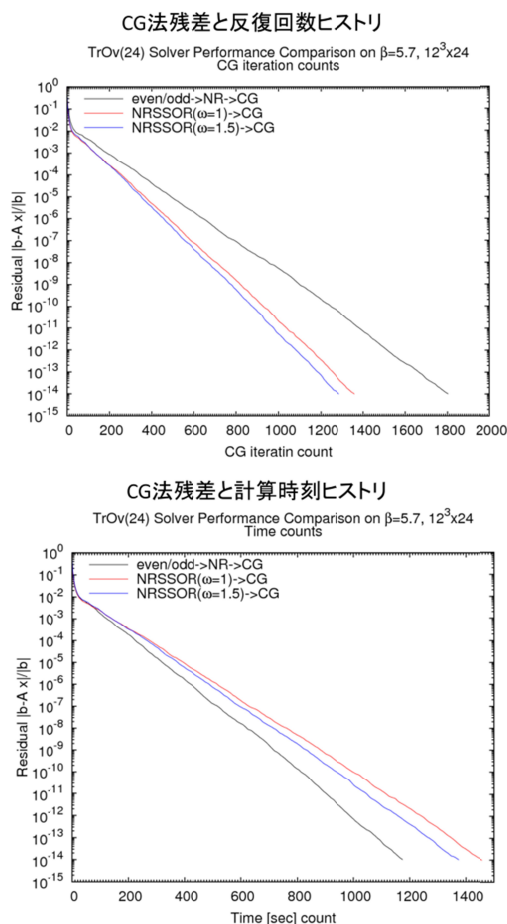


図 2 残差と反復回数(上図)、計算時刻(下図)の履歴

け法について調べた。この方法では、再重み付けの部分で、オーバーラップ演算子の核演算子にゼロに近い値を持つ固有値が現れることが分かった (**図 3 上: 配位番号 1 と 2 に小さい固有値 (黒丸、青丸) が表れている**)。このため再重み付け因子の値が 1 から大きく外れ、再重み付け法が有効に働かなくなることが分かった (**図 3 下: 配位番号 1 と 2 に小さな重み付け因子 (赤三角) が表れている**)。この近ゼロ固有値の出現は、分子動力学中での演算子と厳密なカイラル対称性を持つ演算子の乖離にもとづく現象であると考えられる [発表論文 2, 学会発表 4]。

近ゼロ固有値の出現はカイラル対称性とゲージ場のトポロジーに関連する現象である。カイラル対称性をソフトに破ることで近ゼロ固有値の出現を回避できる可能性があることに着目し、シュレーディンガー汎関数法によるドメインウォール演算子の性質について調べた。特に、メビウスドメインウォール演算子のシュレーディンガー汎関数法への適用をツリーレベルで定式化することができた [発表論文 1, 学会発表 1,2,3]。今後、シュレーディンガー法において前述の再重み付け法が有効かどうか確認していきたい。

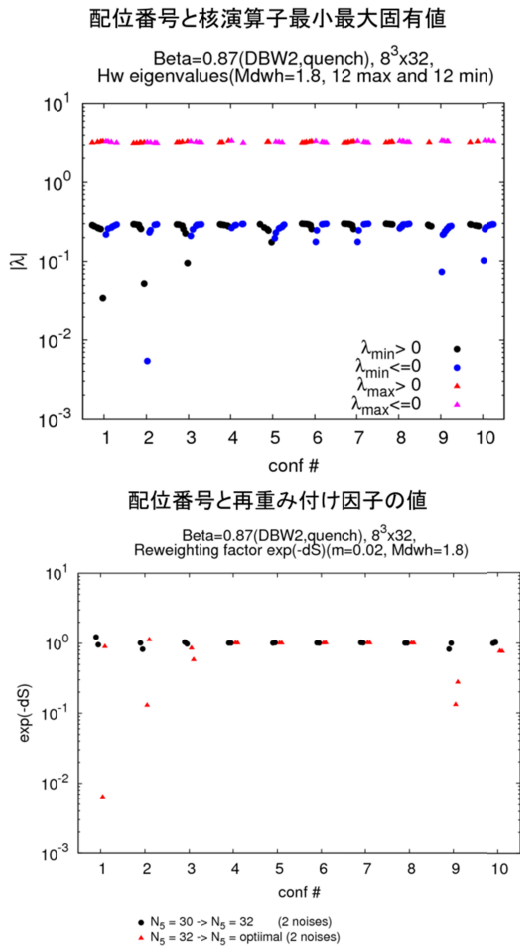


図3 ゲージ配位番号と核演算子固有値(上图)、重み付け因子値(下图)

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 2件)

1. Y. Murakami and K.I. Ishikawa, "A construction of the Schrodinger Functional for Mebius Domain Wall Fermions", Proceedings of Science, PoS(LATTICE2014)331, 査読無, 2015, 331 1-7.
2. K.I. Ishikawa, "Testing reweighting method for truncated Overlap fermions", Proceedings of Science, PoS(LATTICE 2013)026, 査読無, 2014, 026 1-7.

[学会発表](計 5件)

1. Ken-ichi Ishikawa and Yuko Murakami, "Mebius domainwall fermion with the Schroedinger functional scheme", Mini-workshop on QCD, 2014年11月24日, Institute of Physics, Academia Sinica (Taiwan).
2. 村上祐子, 石川健一, 「Mebius Domain Wall Fermion における Schroedinger 汎関数法の構成についての研究」, 日本物理学会 2014年秋季大会, 2014年9月18日,

佐賀大学(佐賀県・佐賀市).

3. Y. Murakami and K.I. Ishikawa, "A construction of the Schrodinger Functional for Mebius Domain Wall Fermions", The 32nd International Symposium on Lattice Field Theory LATTICE2014, 2014年6月27日, NewYork (USA).

4. K.I. Ishikawa, "Testing reweighting method for truncated Overlap fermions", The 31st International Symposium on Lattice Field Theory LATTICE2013, 2013年7月29日, Mainz (Germany).

5. Ken-Ichi Ishikawa, "Testing SSOR preconditioner for Domainwall/Overlap normal equations", Symposium: Quarks to Universe in Computational Science (QUCS2012), 2012年12月13日, 奈良県新公会堂.

6. 研究組織

(1)研究代表者

石川 健一 (Ken-Ichi Ishikawa)
 広島大学・大学院理学研究科・准教授
 研究者番号: 60334041

(2)研究分担者

()

研究者番号:

(3)連携研究者

()

研究者番号: