

格子QCDシミュレーションにおける固有値問題

松古 栄夫 (hideo.matsufuru@kek.jp)

<http://suchix.kek.jp/~matufuru/>



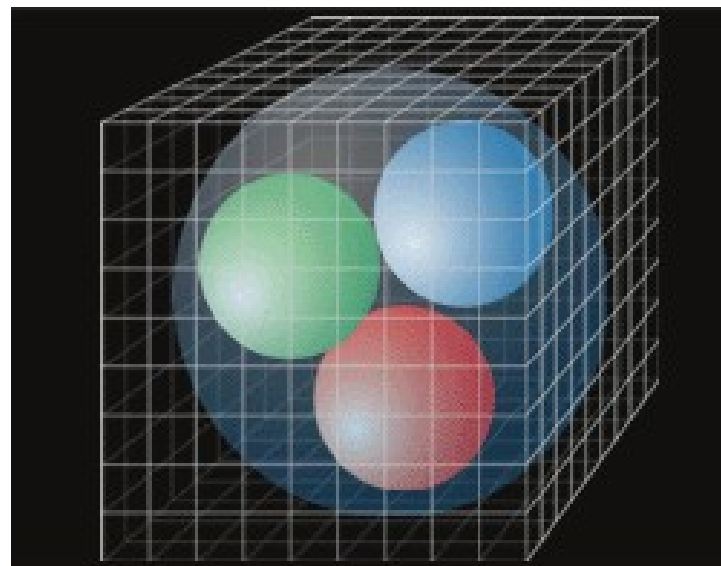
High Energy Accelerator Research Organization (KEK)

2009年11月21-22日 特異値・固有値合同ワークショップ



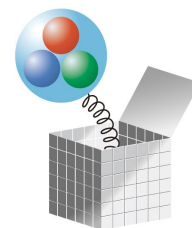
目次

- 格子QCDとは
- 格子QCDで扱う行列
- 格子QCDにおける固有値問題
- 応用例
 - 観測量としての固有モード
 - 計算の高速化
 - 測定量の改良
- まとめ



紹介する結果はほとんど JLQCD Collaborationによるもの

<http://jlqcd.kek.jp/>





JLQCD-TWQCD Collaboration: Members



KEK: T. Aoyama, S. Hashimoto, T. Kaneko,
H. Matsufuru, J. Noaki, N. Yamada, H. Ikeda

Tsukuba: S. Aoki, N. Ishizuka, K. Kanaya,
Y. Kuramashi, Y. Taniguchi, A. Ukawa,
T. Yoshie, T. Yamazaki, K. Takeda

Nagoya: H. Fukaya

Osaka: T. Onogi, E. Shintani, H. Ohki

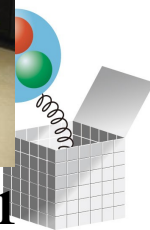
Hiroshima: K.-I. Ishikawa, M. Okawa

Taipei (TWQCD): T.W. Chiu, T.H. Hsieh, K. Ogawa

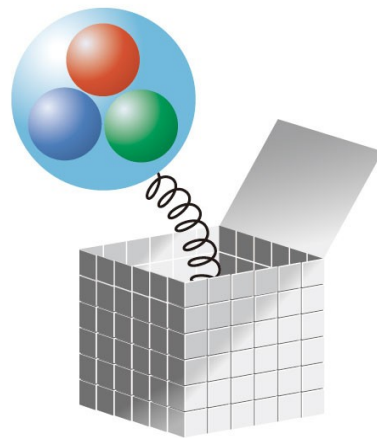
IBM Blue Gene/L@KEK



Hitachi SR11000@KEK



格子QCDとは

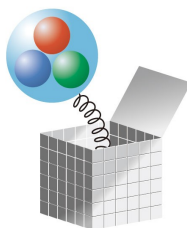
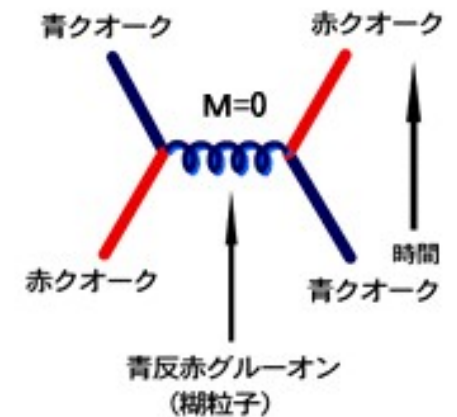
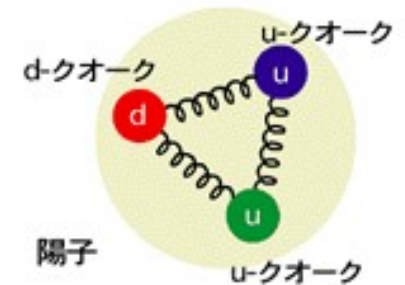




QCDと格子QCDシミュレーション

QCD(量子色力学): 「強い相互作用」の基礎理論

- 陽子や中性子(ハドロン)を構成するクォークの間に働く
- クォークは「色」の自由度を持つ
- 「色」の変化 \Leftrightarrow 相互作用 (グルーオン場が媒介)
- 長距離で結合の強さが増大 (QEDとの違い)
⇒ 解析的に解けない (摂動論が使えない)
- 非摂動的手法が必要
→ 格子QCDに基づく数値シミュレーション

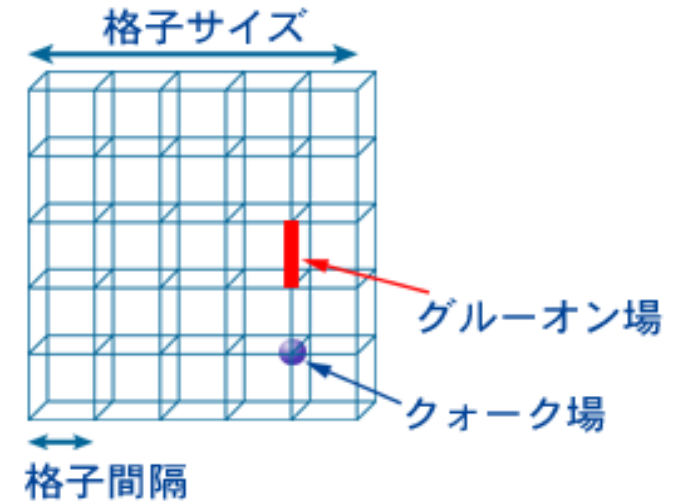




QCDと格子QCDシミュレーション

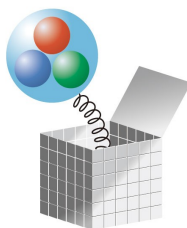
格子QCD: 格子時空上の場の理論 (K.G.Wilson, 1974)

- グルーオン場: リンク上の 3×3 複素行列
 - クォーク場: サイト上のグラスマン数
(計算機上で扱えないので手で積分)
- 経路積分量子化 \rightarrow 統計力学系と同じ形
 - **モンテカルロ法によるシミュレーション**



QCDを非摂動的に扱う唯一の一般的方法

- QCDの構造: 真空状態、カイラル対称性と閉じ込め
- 標準理論の精密な予言: 新しい物理を探すために必要 (LHCで見付かる?)
- 有限温度・密度での相構造、状態方程式 \rightarrow 宇宙物理
- 核力の計算 \rightarrow 原子核物理
- QCD以外の場の理論 \rightarrow 新しい物理の候補
- 超対称性を格子に乗せる試み





格子QCDシミュレーション

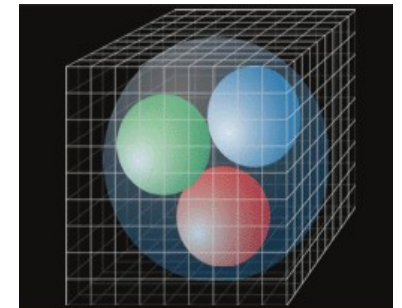
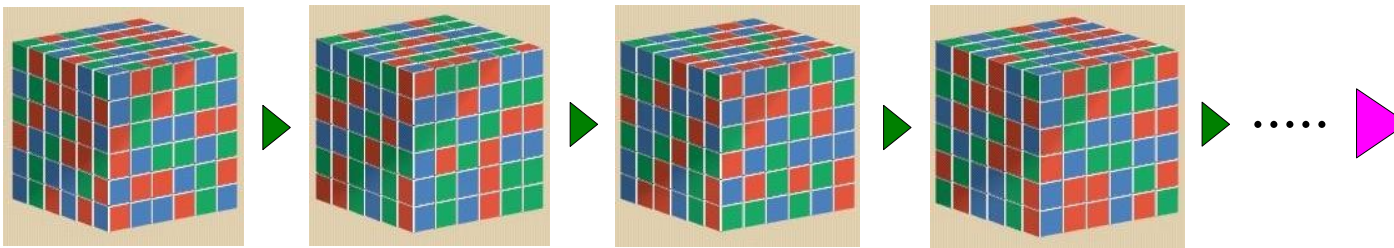
- 物理量の期待値:

$$\langle O \rangle = \int \frac{DU D\phi^\dagger D\phi}{\int DU D\phi^\dagger D\phi} O[U] \exp[-S_G[U] - \phi^\dagger D^{-1}[U]\phi]$$

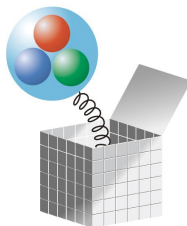
グルーオン場 U , 擬クォーク場 ϕ の配位についての積分

擬クォーク場の有効作用 (この D の逆を解くのに時間かかる)

モンテカルロ法: グルーオン場の配位 $\{U\}$ (と擬クォーク場 ϕ) を $\exp[-S_G[U] - \phi^\dagger D^{-1}[U]\phi]$ の確率で生成



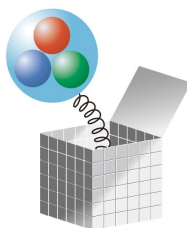
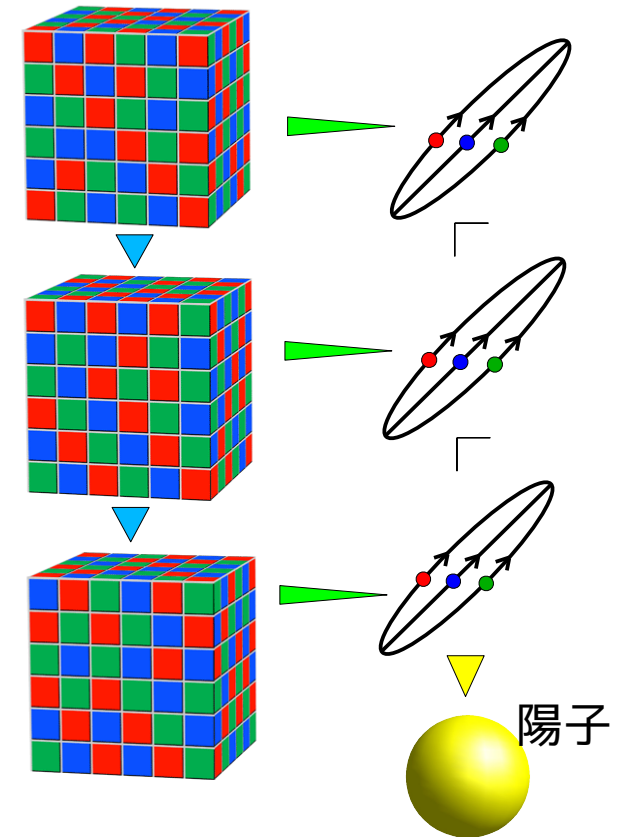
- グルーオン場の「配位」: 分子動学的に作る
- 各ステップでクォーク場に対する線形問題を解く必要



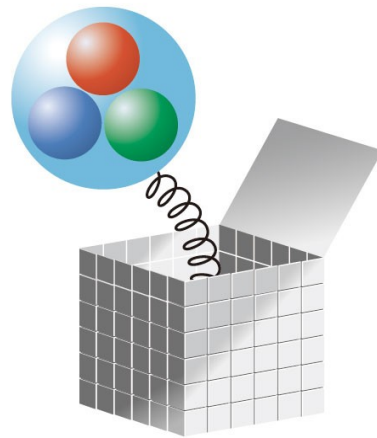


格子QCDシミュレーション

- 生成したグルーオン場の配位を使って、物理量を計算
 - 例：クォークの伝播関数 (D^{-1}) からハドロンの相関関数を構成
 - 統計平均→物理量の期待値
- 効果的なシミュレーションのためには、
 - グルーオン場の配位の効率的生成
 - クォークの伝搬関数の高速計算(線形問題)
 - 効果的な測定 (配位データの有効利用)が必要



格子QCDで扱う行列





格子QCDの行列

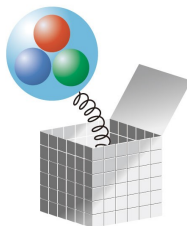
計算時間のほとんどは、線形方程式 $Dx=b$ を解いている

- x, b は $N=3(\text{カラー}) \times 4(\text{スピン}) \times \text{サイト}$ (例えば 16^4) の自由度を持つ複素ベクトル [$N \sim O(10^6-10^8)$]
- Krylov部分空間法

フェルミオン演算子 $D : N \times N$ 巨大行列 (メモリに載せるのは U)

- Wilson演算子
 - シンプルな構造、カイラル対称性は連続極限で回復
 - 計算コストは比較的低い
- オーバーラップ演算子 (我々のメインターゲット)
 - 格子上の厳密なカイラル対称性を持つ
 - 計算コスト高: Wilson演算子を $O(100)$ 回かける必要

カイラル対称性はQCDの性質を理解するために非常に重要な対称性





Wilson演算子

- D は $N \times N$ の巨大疎行列

3x3複素行列: リンク変数 $\in \text{SU}(3)$
(グルーオン場の情報)

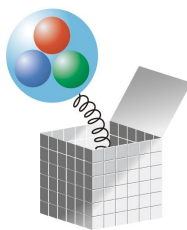
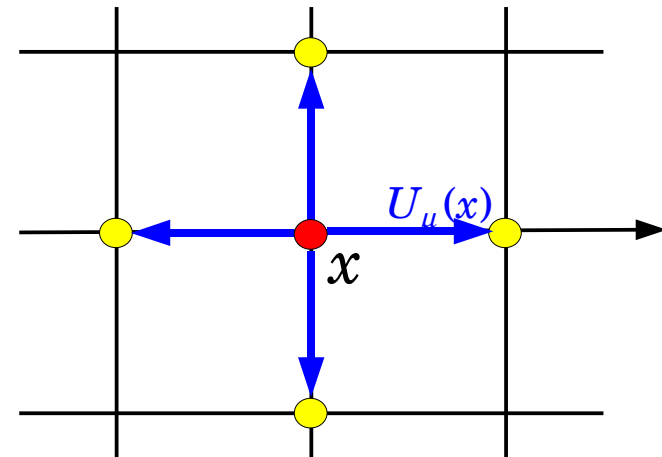
$$D_{x,y} = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} \{ (1 - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta_{x+\hat{\mu},y} + (1 + \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x - \hat{\mu}) \delta_{x-\hat{\mu},y} \}$$

↑
対角成分

↑
+ μ 方向の隣接サイトとの結合

↑
- μ 方向の隣接サイトとの結合

- κ は質量に関するパラメター





オーバーラップ演算子

格子上的厳密なカイラル対称性をもつ

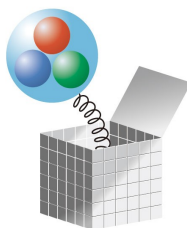
$$D = \frac{1}{Ra} [1 + \gamma_5 \text{sign}(H_W(-m_0))] \quad (\text{質量ゼロの場合})$$

H_W は Wilson 演算子

- 計算量大: Wilson 演算子の O(100) 倍
- 近似式で符号関数を評価

$$\text{sign}(H_W) = \frac{H_W}{\sqrt{H_W^2}} = H_W \left(p_0 + \sum_{l=1}^N \frac{p_l}{H_W^2 + q_l} \right)$$

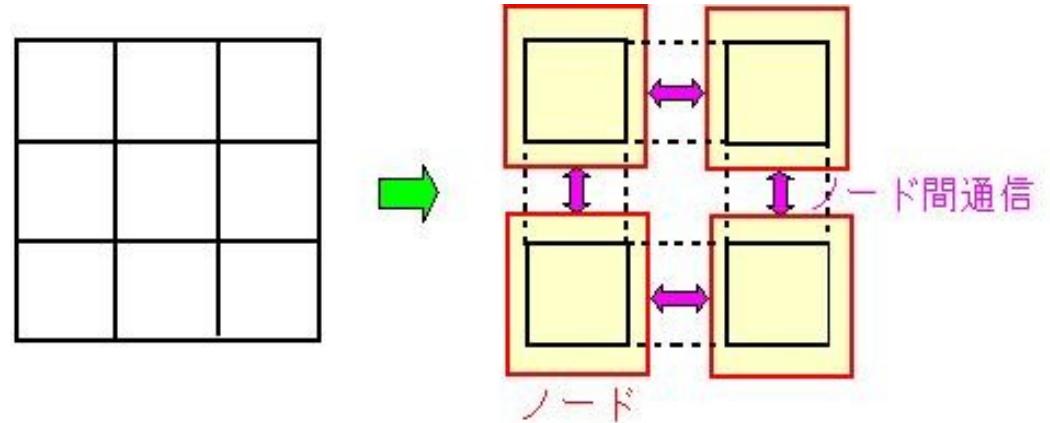
- $(H_W^2 + q_l)^{-1}$ ($l=1, \dots, N \sim 20$) を解く必要:
マルチシフト・ソルバー
- H_W の小さい固有モードの射影による高速化
 - 固有値、固有ベクトルを求める必要 (後述)



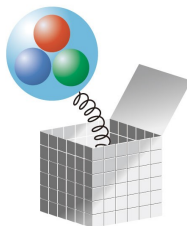


並列化

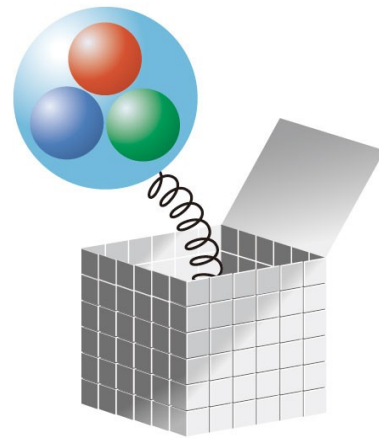
- 格子を分割
→ ノード内演算 + ノード間通信



- 例: 24x24x24x48 格子 / 2x8x8x8 ノード (Blue Gene@KEK)
 - Wilson演算子の演算1回あたり
 - ノード内演算: 934K Flop
 - ノード間通信: 138KB
- 現実的な計算のためには、並列化は不可欠
 - 超並列 (Blue Gene, etc)
 - ファットノード並列 (T2K, etc) → 領域分割など
 - メニーコア (GPGPU, etc) → ボード間の並列化をどうする？



格子QCDにおける固有値問題





固有値・固有ベクトルが必要な局面

クォークの演算子に対する固有値問題

- 観測量

固有値、固有モードそのものが重要な物理

- スペクトルとカイラル対称性の破れ
- 固有ベクトルの局在と有限格子間隔で現れる相構造

- 高速化

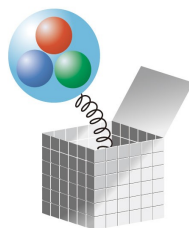
ゲージ場の配位の生成、伝搬関数の計算のスピードアップ

- 低モード前処理
- オーバーラップ演算子の特異性の除去
- Wilson演算子の負の固有値モード

- 測定量のシグナルの改良

限られたゲージ場の配位数で、測定量の精度を上げる

- 低モード平均 (low mode averaging)
- All-to-all 伝搬関数 Cf. 大野さんのトーク





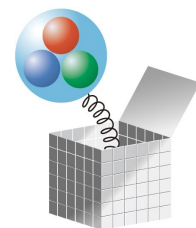
固有値ソルバー

よく使われるアルゴリズム

- **Implicitly Restarted Arnoldi/Lanczos**
 - ARPACKを使っているグループが多い
- **共役勾配法 (+直交化): Hermite の場合** (Kalkreuter & Simma, 1996)
- **Chebyshev多項式による加速**
 - Chebyshev多項式が $[-1,1]$ の中でほぼゼロ、外で急激に増大することを利用 — 求めたい領域の固有値が大きくなるように変換する
(H.Neff et al., 2001)
- **並列化と相性の良いアルゴリズムが必要**

我々はHermite化した行列に IRL+Chebyshev加速 を適用

- CG法も検討中
- これまであまり気合いをいれて高速化していないので、
良いアルゴリズムがあったら教えてください





固有値ソルバーの例

例: オーバーラップ演算子の固有値計算

- $H=\gamma_5 D$ はエルミート (H の固有モードから D の固有モードを構成可)

- $16^3 \times 32$ lattice, on BG/L 512 node (2.7TFlops peak)

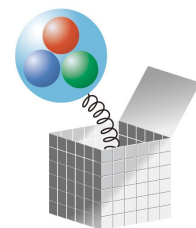
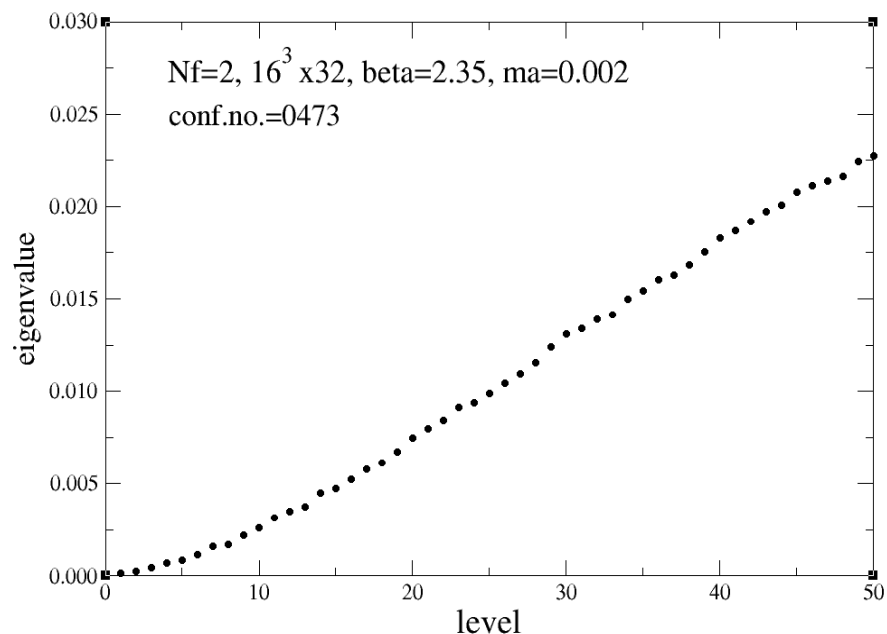
- IR-Lanczos のサイズ: 60+30
- Chebyshev多項式の次数: 40x2
- 収束条件: 10^{-11}

反復回数 5 で収束

30min/配位, 3M回の D_W mult

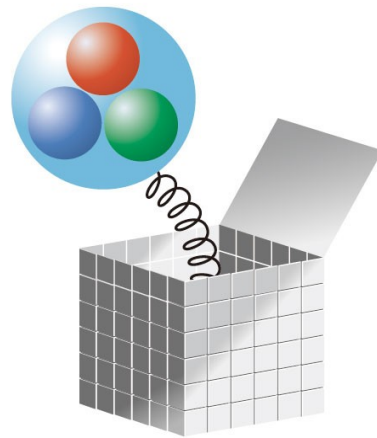
- Wilson演算子についても固有モードを求める必要

- オーバーラップ演算子の特異性の除去と高速化
- Monte Carlo法 (分子動力学)の各ステップで実行
- 1回あたり 13 sec, 1 配位(1-2 hours)あたり約60回 call



応用例

- 観測量として
- 計算の高速化
- 測定量の改良





カイラル対称性の破れ

「真空」の構造 — 単純な「からっぽ」ではない！

- 「カイラル対称性」が自発的に破れた状態

Nambu & Jona-Lasinio, 1961 (2008年 Nobel 賞!)

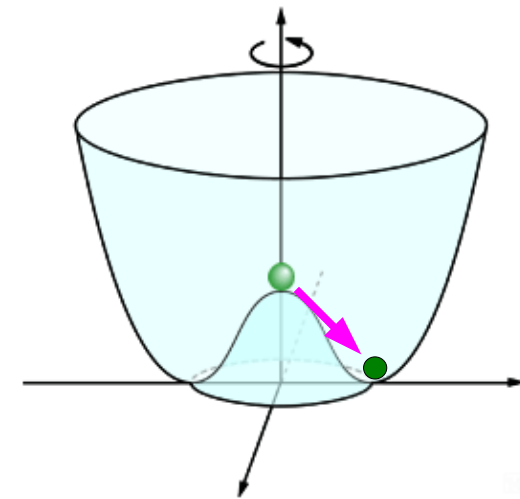
- 右回りと左回りのクォークが独立に振る舞う対称性
- クォークの質量がゼロのとき成り立つ (実際は小さな質量→ほぼ成立)
- 自発的破れ: 系の基底状態が対称性の破れた状態
- クォーク凝縮 → クォークに「有効質量」を与える (陽子、中性子の質量の98%)



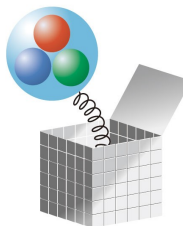
- Banks-Casher関係式 (Banks & Casher, 1980)

$$\Sigma = \langle \bar{q}q \rangle = \lim_{m \rightarrow 0} \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\pi \rho(0)}{V}$$

$$\rho(\lambda) = \sum_k \langle \delta(\lambda - \lambda_k) \rangle : \text{spectral density of } D$$



- クォーク演算子のゼロ付近のモード \Leftrightarrow クォーク凝縮
- ゼロ付近の固有値分布によりカイラル対称性の破れを探る



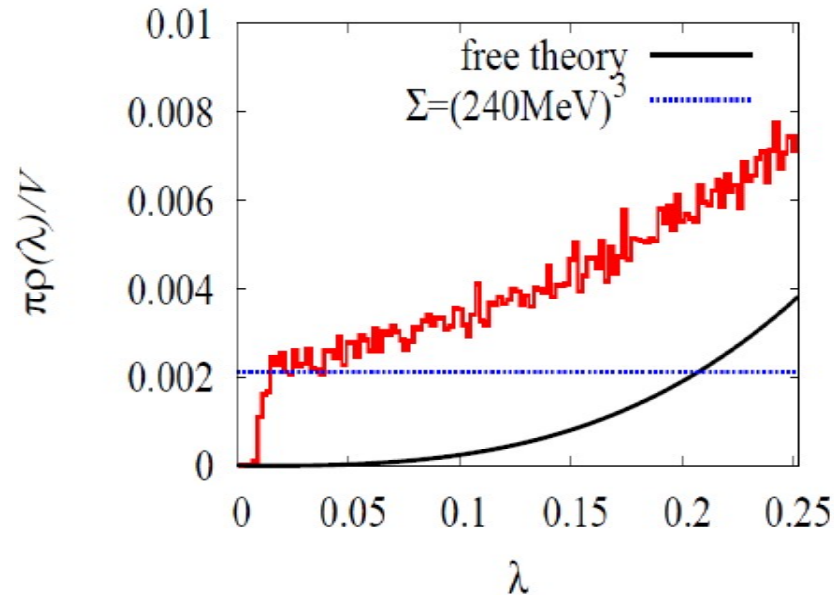
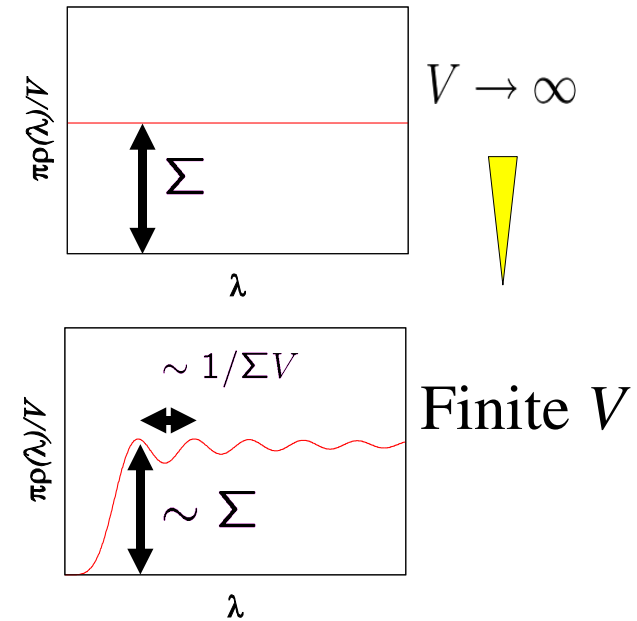


カイラル対称性の破れ

格子QCDシミュレーションで検証

JLQCD and TWQCD Collab., 2007

- 有限体積 ϵ -regime: $1/\Lambda_{QCD} \ll L \ll 1/m_\pi$
 - 低エネルギー有効理論
 - ランダム行列理論
- との比較

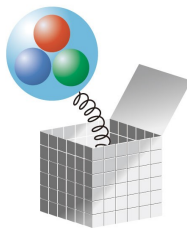


数値計算の結果: 固有値密度分布

JLQCD-TWQCD, 2007

- $N_f=2, 16^3 \times 32, a=0.11 \text{ fm}$
- $m \sim 3 \text{ MeV}$

$$\Sigma^{\overline{MS}}(2 \text{ GeV}) = (251 \pm 7(\text{stat}) \pm 11(\text{syst}) \text{ MeV})^3$$



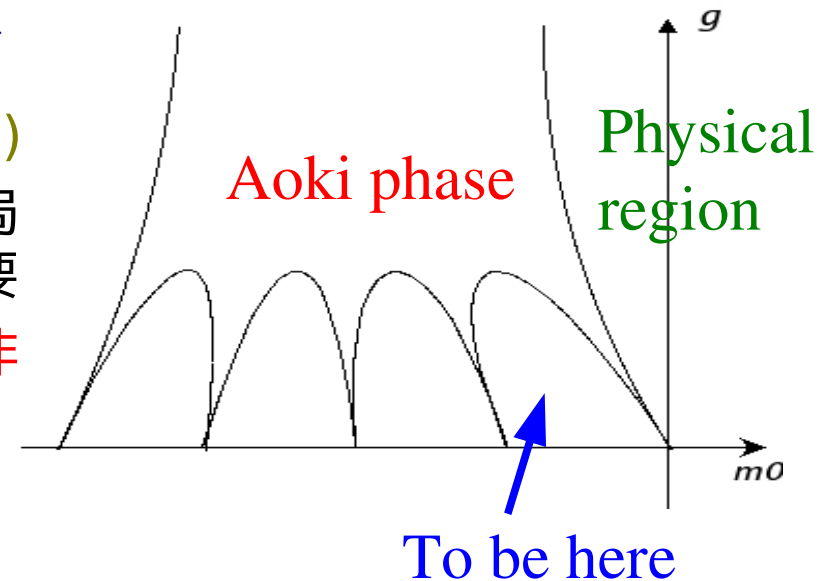


低周波数モードの局在と格子特有の相構造

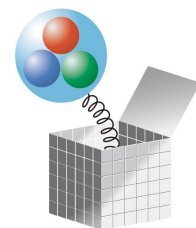
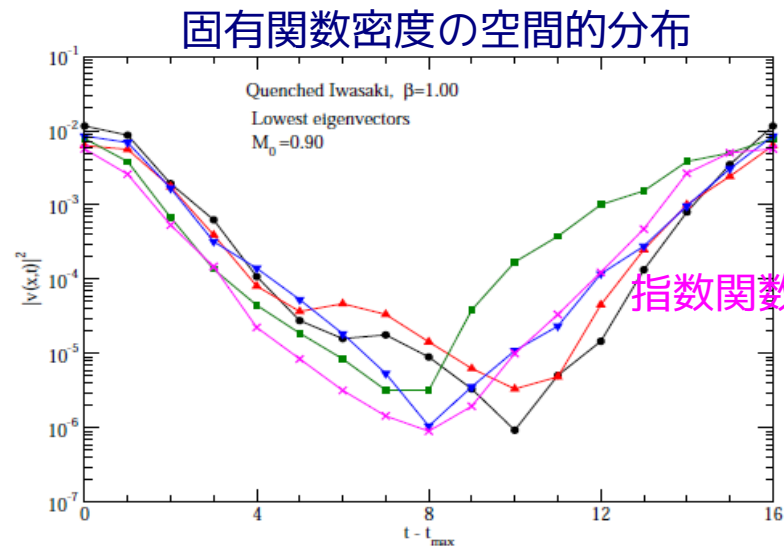
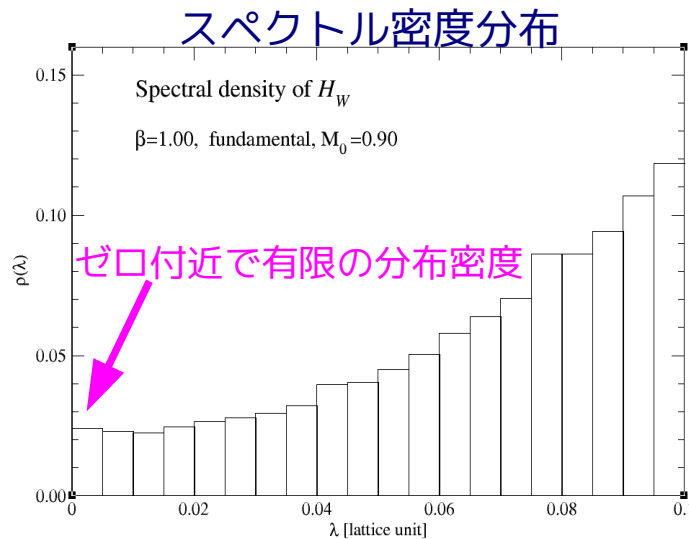
青木相： Wilson演算子では、有限の格子間隔で、連続理論のQCDにはない相構造が出現

(S.Aoki, 1984)

- オーバーラップ演算子が正しく定義される（局所的）ためには、青木相の外にすることが必要
- 青木相では、ゼロ付近のモードの固有関数が非局所的 (Golterman-Shamir, 2003)
- Cf. 物性理論のAnderson局在



Wilson演算子の固有モードを求めて検証 (SU(2)の場合)





オーバーラップ演算子の特異性の改良

オーバーラップ演算子

$$D(m) = \left(M_0 + \frac{m}{2}\right) + \left(M_0 - \frac{m}{2}\right) \gamma_5 \text{sign}(H_W)$$

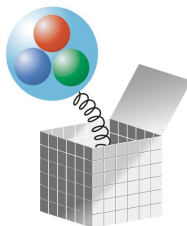
質量 m の場合
 $M_0=1.6$

H_W はWilson演算子

- H_W の固有値がゼロになるところで不連続
- 近似式で符号関数を評価

$$\text{sign}(H_W) = \frac{H_W}{\sqrt{H_W^2}} = H_W \left(p_0 + \sum_{l=1}^N \frac{p_l}{H_W^2 + q_l} \right)$$

- $(H_W^2 + q_l)^{-1}$ ($l=1, \dots, N \sim 20$) はシフトソルバーで解く
- H_W の小さい固有モードが現れると近似の次数を上げる必要
- H_W のゼロに近い固有モードの射影による改良
 - 固有値、固有ベクトルを求める必要





Overlap operator

Zolotarev's Rational approximation

$$\text{sign}(H_W) = \frac{H_W}{\sqrt{H_W^2}} = H_W \left(p_0 + \sum_{l=1}^N \frac{p_l}{H_W^2 + q_l} \right)$$

- $|\lambda|$ (eigenmode of H_W) $\in [\lambda_{thrs}, \lambda_{max}]$ での近似
- λ_{thrs} が小さいほど大きな N が必要

近似の精度: $\sim \exp(-\lambda_{thrs} N)$

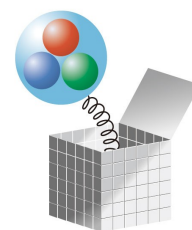
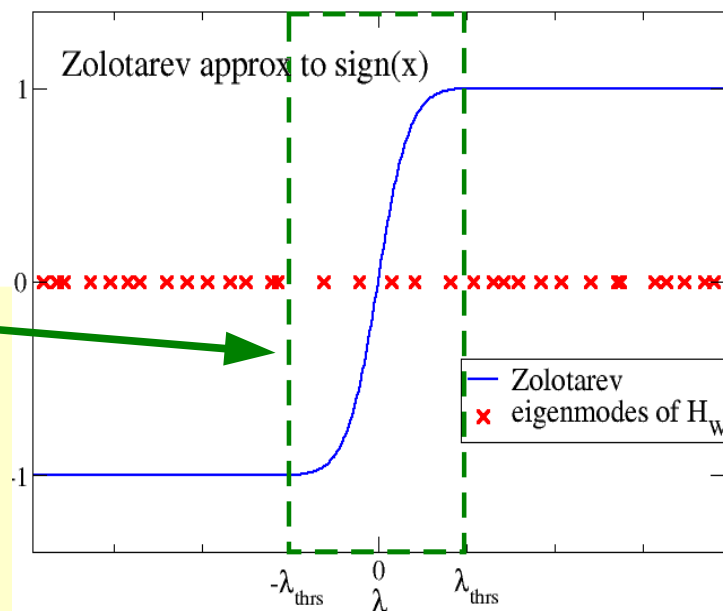
- H_W の λ_{thrs} 以下の固有モード求めて陽に扱う

--コストは低モードの密度で決まる

($\lambda_{thrs}=0.045$, $N=10$ in this work)

- 現在は IR-Lanczos+Chebyshev加速
- 求める固有値は数個
- 分子動力学の各ステップで必要
- 1回あたり 13 sec, 1 配位(1-2 hours)あたり約60回 call

全体のコストの数分の1 → 改良したい





Low-mode averaging

ハドロンの相関関数の計算

- クォークの伝搬関数：線形方程式を解く $D_{ov}(x,y)S_q(y,z)=\delta(x,z)$

- 低固有値モードと高固有値モードの寄与に分解

$$D_{ov}v_j = \lambda_j v_j$$
$$S_q(x,y) = \sum_{j=1}^{N_{ev}} \frac{v_j(x)v_j^\dagger(y)}{\lambda_j + m} + S_q^{high}(x,y)$$

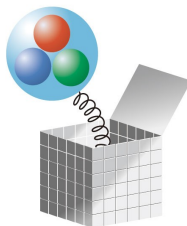
- メソン相関関数の場合：

$$C(t) = C^{HH}(t) + C^{HL}(t) + C^{LH}(t) + C^{LL}(t) \text{ averaging}$$

- 低固有値モードを求めておけば、ソース点の位置について、全てのサイト
トで和を取れる (平行移動に対する対称性)

“Low-mode averaging” (DeGrand, 2004; Giusti et al., 2004)

- 低固有値モードが重要な場合は多い
- 高固有値モード：ノイズ法で和を取る → 「All-to-all 伝搬関数」

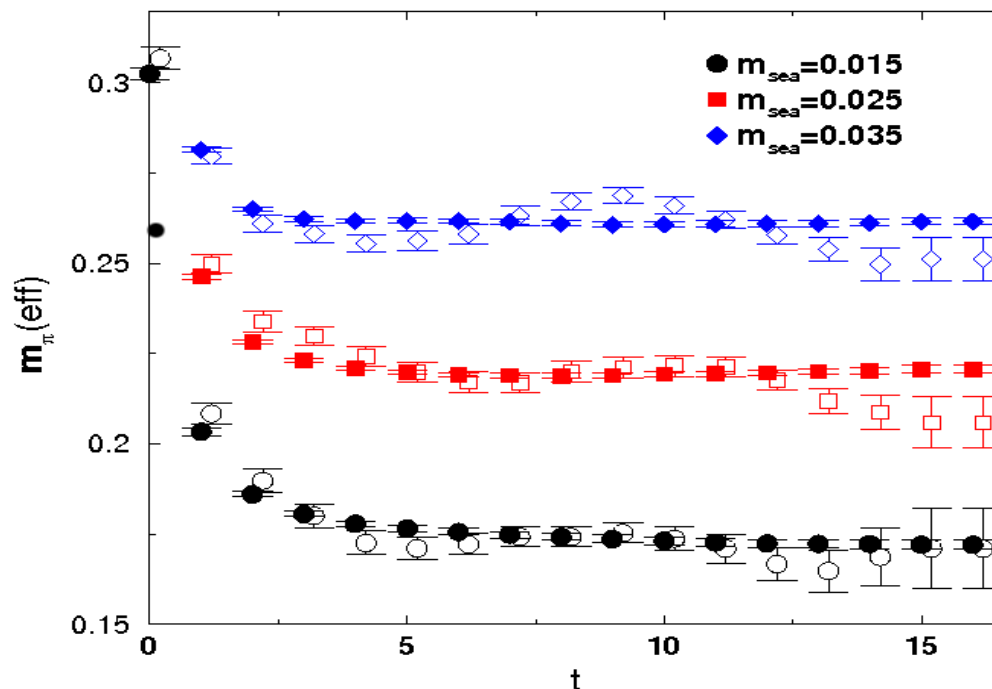




Low-mode averaging

Low-mode averaging の例 (JLQCD Collaboration)

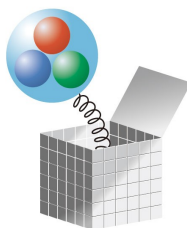
- 50 ペア(対で現れる)の固有モードを求めておく(重要な観測量)
- ソルバーの前処理にも利用(8倍の高速化)
- Low-mode averaging (DeGrand, 2004, Giusti et al., 2004)
 - 低モードについて、ソースの位置について足し上げ



Meson correlator with overlap fermions

- Open symbols: w/o LMA
- Filled symbols: with LMA

JLQCD Collaboration,
 $N_f=2$, $a=0.12\text{fm}$, $Q=0$
3 smallest $m_{\text{sea}}=m_{\text{val}}$.





All-to-all 伝搬関数

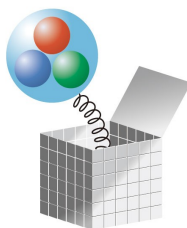
- 高モードについても、ノイズ法によって全てのサイトの和を取る
Foley et al., 2005
 - 各点で 1 or -1 の値のランダムな場に対するクォークの伝搬関数

$$\bar{Q} = \bar{Q}_0 + \bar{Q}P_1, \quad \text{Low mode と high mode に分解}$$

$$\bar{Q}_0(x, y) = \sum_{i=1}^{N_{\text{ev}}} \frac{1}{\lambda_i} v^{(i)}(x) \otimes v^{(i)\dagger}(y), \quad \text{Low mode 部分は固有ベクトルから}$$

$$(\bar{Q}P_1)(x, y) = \frac{1}{N_r} \sum_r \sum_j \psi_{[r]}^{(j)}(x) \otimes \eta_{[r]}^{(j)\dagger}(y), \quad \text{High mode 部分はノイズ法}$$

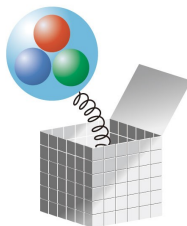
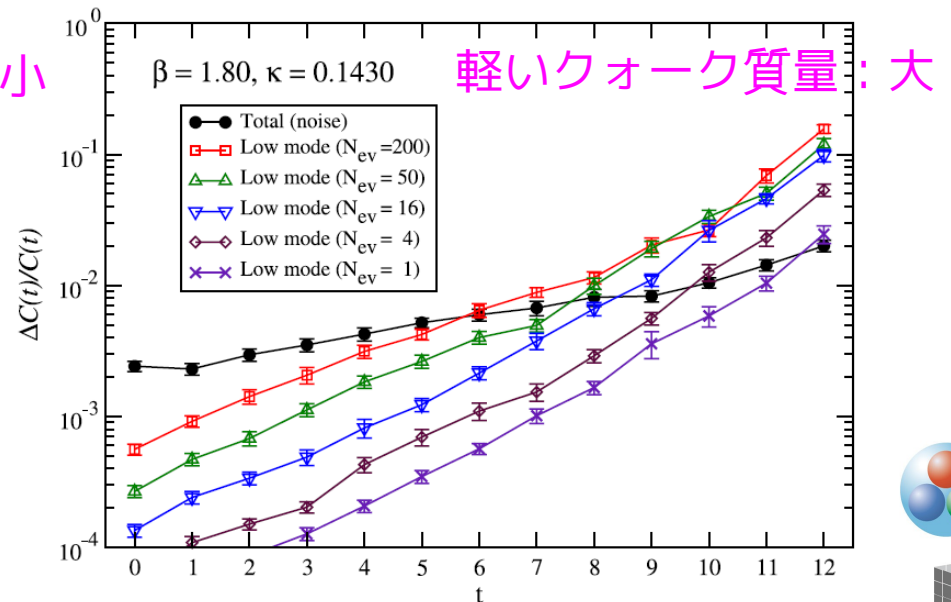
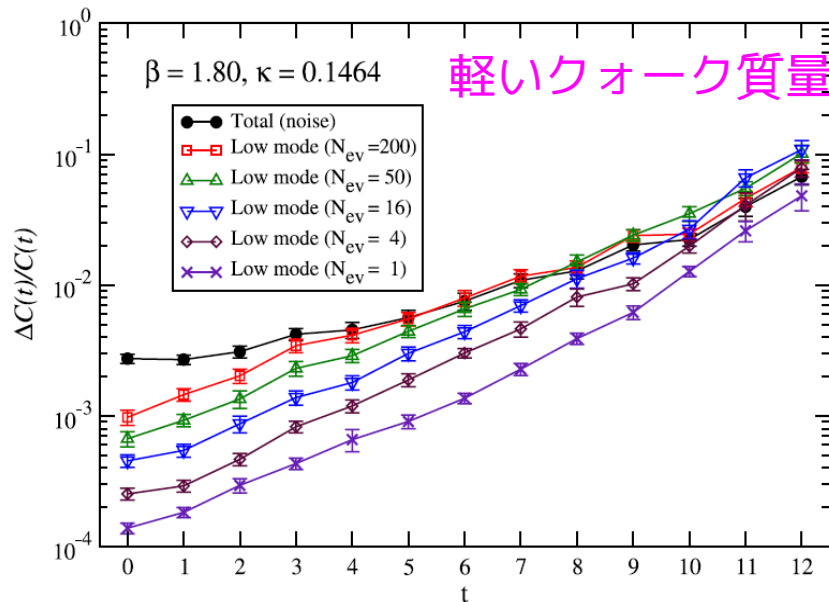
↑ ↑
1 or -1 の値の (r 番目の) ランダム場
ランダム場をソースとして解いた伝搬関数





All-to-all 伝搬関数

- 例：重いクォークを含むメソンの相関関数
 - 重いクォークは静的（無限に重い） → 計算は軽い
 - 軽いクォークはWilson演算子で記述 → all-to-all伝搬関数
Negishi, HM, Onogi, 2007; Ohki, HM, Onogi, 2008
 - All-to-all伝搬関数を使うとシグナルは改善
 - 統計揺らぎはトータルの伝搬関数より速く増大する
 - いつでも有効とは限らない





まとめ

- 格子QCDでは固有値問題の高速なアルゴリズムが必要
 - 低固有モードは重要な観測量
 - 計算の高速化、特異性の除去
 - 観測量のシグナルの改良
- 大規模並列化に適したアルゴリズムが必要
 - Implicitly restarted Arnoldi/Lanczos
 - Conjugate Gradient
 - 良いアルゴリズムがあれば教えてください

