



分野5 研究開発課題(1)

「格子QCDによる物理点での バリオン間相互作用の決定」

筑波大学・計算科学研究センター
理化学研究所・計算科学研究機構
藏増 嘉伸



Outline

- §1. はじめに
- §2. 課題の概要
 - 蔵増班と核力(初田)班
- §3. H24年度の進捗
- §4. H25年度の計画
- §5. まとめ

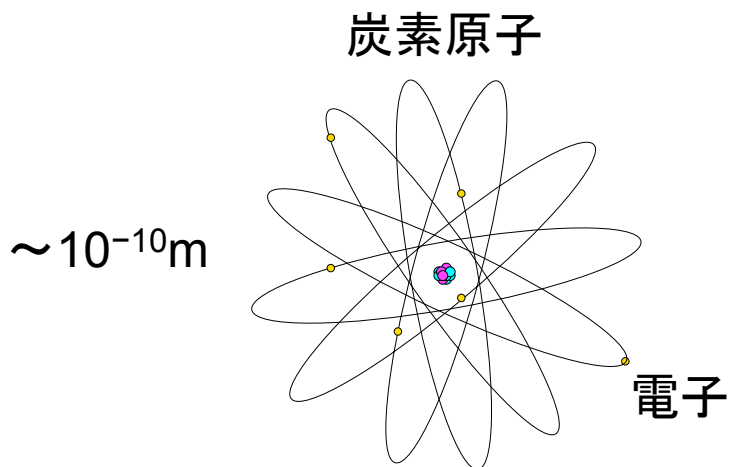


§1. はじめに



電磁相互作用による化学結合

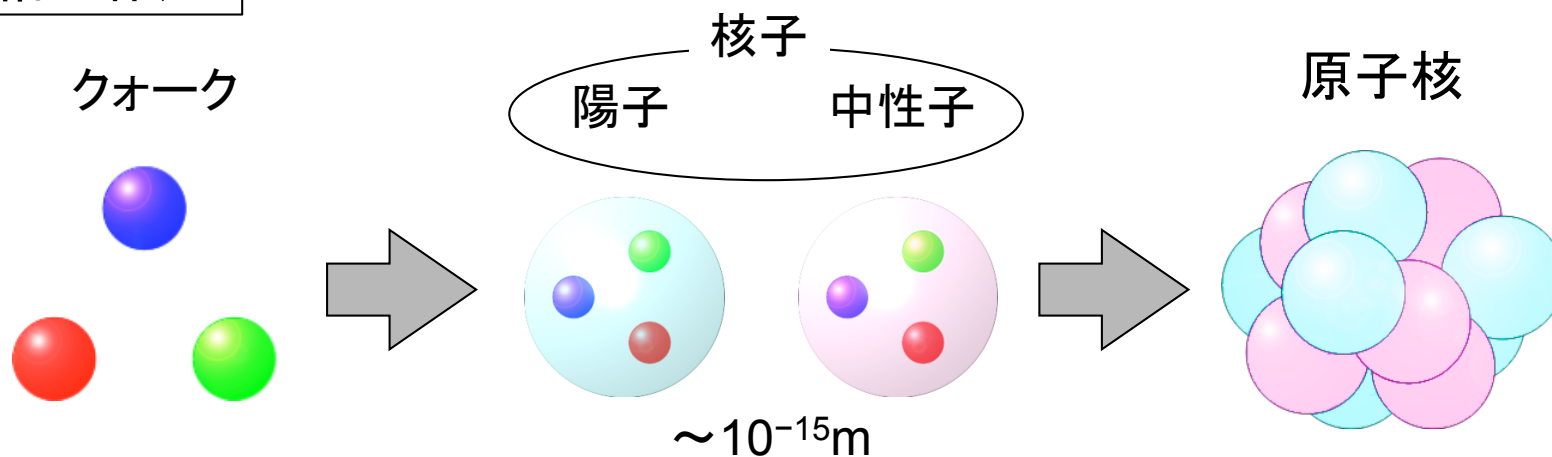
※重力の効果は無視できるほど小さい



ダイヤモンド結晶構造



強い相互作用





格子QCD



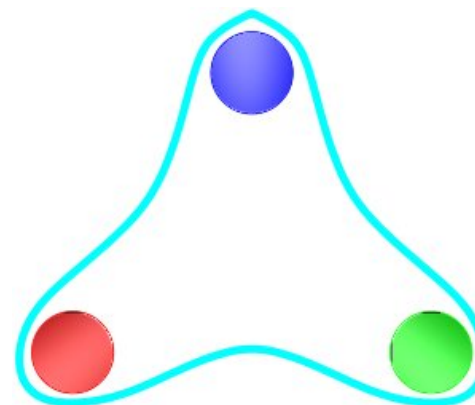
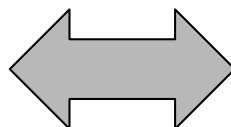
QCD Lagrangian = 第一原理

$$\mathcal{L} = \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \sum_{q=u,d,s,c,b,t} \bar{q} [\gamma_{\mu} (\partial_{\mu} - ig A_{\mu}) + m_q] q$$

結合定数 g とクォーク質量 m_q はフリーパラメータ



短距離
漸近自由性



長距離
閉じ込め

力の強さが大きく摂動計算では本質がわからない

⇒ 第一原理に基づいた非摂動的数値計算によって定量的に解析



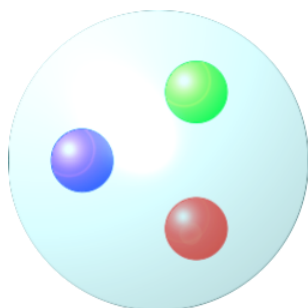
ハドロン(複合粒子群の総称)



10⁻¹⁵mの世界

ハドロン

バリオン

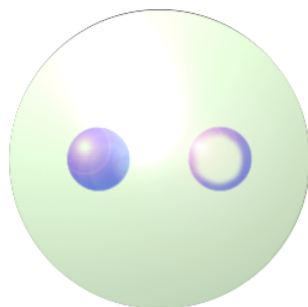


原子核を構成

p(陽子), n(中性子),

$\Delta, \Lambda, \Sigma, \Sigma^*, \Xi, \Xi^*, \Omega, \Lambda_c, \Xi_c, \Lambda_c, \dots$

メソン



$\pi, K, K^*, \rho, \omega, \eta, \phi, a, b, f, D, B, \dots$

湯川秀樹博士が予言



数値計算手法(1)



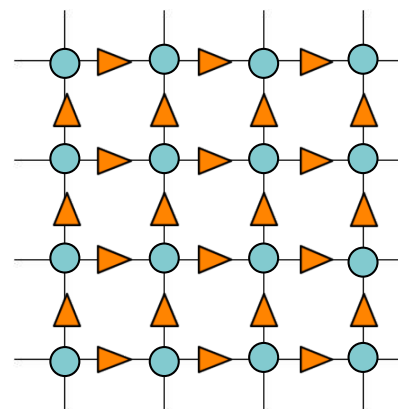
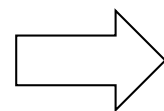
4次元(空間3次元+時間1次元)連続理論における経路積分

$$\langle \mathcal{O}[A_\mu, q, \bar{q}] \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}q \mathcal{D}\bar{q} \mathcal{O}[A_\mu, q, \bar{q}] \exp \left\{ - \int d^4x \mathcal{L}[A_\mu, q, \bar{q}] \right\}$$

QCD Lagrangian

統計力学における分配関数との類似性 ⇒ モンテカルロ法

計算機にのせるために自由度を有限化 ⇒ 4次元時空を離散化(4次元格子)



$q(x)$: クォーク場
 $A_\mu(x)$: ゲージ場

● $q(n)$: クォーク場
▲ $U_\mu(n)$: SU(3)リンク変数



数値計算手法(2)



4次元格子上における経路積分

$$\langle \mathcal{O}[U_\mu, q, \bar{q}] \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{n,\mu} dU_\mu dq d\bar{q} \mathcal{O}[U_\mu, q, \bar{q}] \exp \left\{ - \sum_n \mathcal{L}_{\text{latt}}[U_\mu, q, \bar{q}] \right\}$$

統計性からクォーク場はグラスマン数(反可換) \Rightarrow 解析的に積分

$$\langle \bar{\mathcal{O}}[U_\mu] \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{n,\mu} dU_\mu \bar{\mathcal{O}}[U_\mu] \exp \left\{ - S_{\text{latt}}^{\text{eff}}[U_\mu] \right\}$$

物理演算子の期待値はゲージ配位に関する平均

$$\langle \bar{\mathcal{O}}[U_\mu] \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{\mathcal{O}}[U_\mu^{(i)}] + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$$

統計誤差

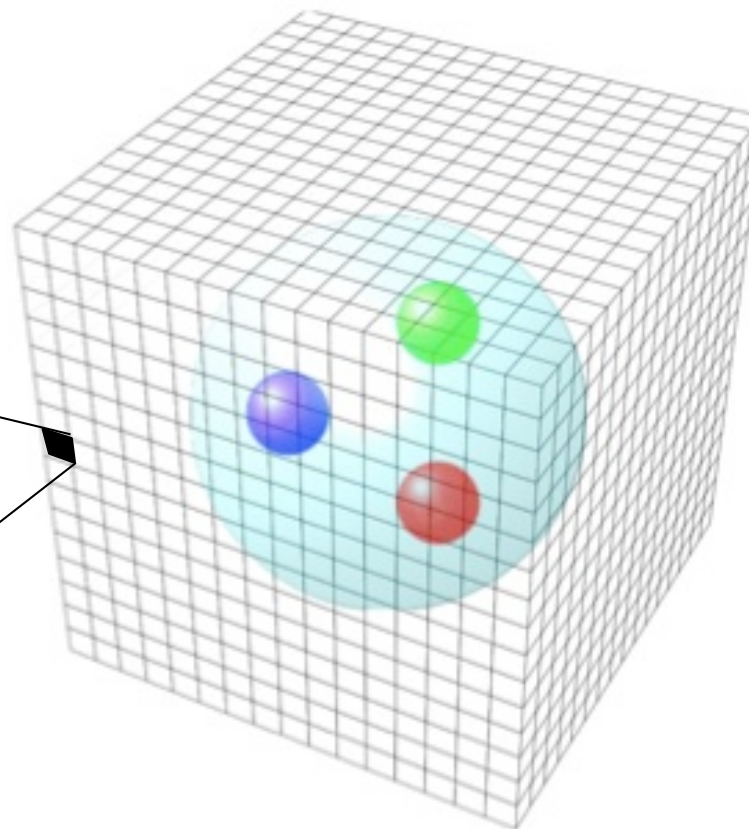
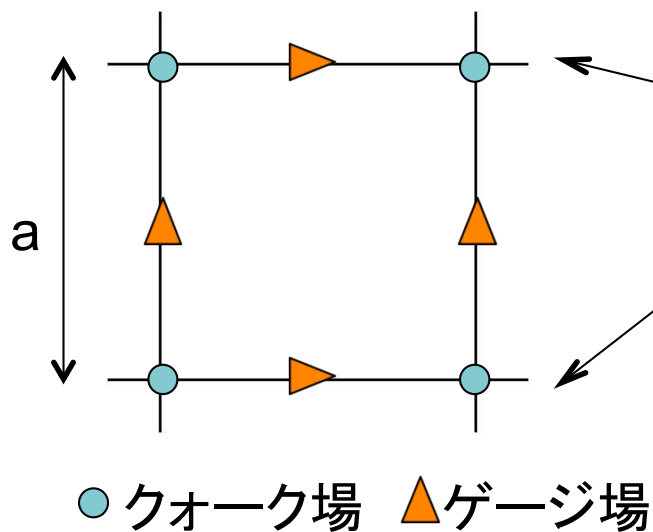


物理的パラメータ



数少ないパラメータ

- 4次元体積: $V = N_X \cdot N_Y \cdot N_Z \cdot N_T$
- 格子間隔: a (結合定数 g の関数)
- クォーク質量: m_u, m_d, m_s, \dots





§2. 課題概要(藏増班)



◆ 物理点での1+1+1フレーバー格子QCDシミュレーション

- u,d,sクォーク質量の決定と基本物理量の測定
電磁相互作用とu-dクォーク質量差の導入
- 既知の共鳴状態の解析と新しいクォーク複合系の探索
- 軽原子核の直接構成

◆ メンバー

石川健一(広島大), 石塚成人(筑波大), 谷口裕介(筑波大), 浮田尚哉(筑波大), 山崎剛(名古屋大), 滑川裕介(筑波大)

◆ 役割分担

- K computer向けコード最適化: 石川
- 共用開始前各種テスト: 石川, 浮田
- ゲージ配位生成: 浮田, 滑川
- 基本物理量測定: 浮田, 滑川
- 共鳴状態・新奇クォーク複合系: 石塚
- 軽原子核構成: 山崎

◆ 定例meeting

課題1メンバー全員による情報交換・進捗状況報告を2週間に一回開催



課題概要(核力班)



◆ 物理点でのバリオン間有効相互作用の決定

- 現実的核力の決定
- 現実的ハイペロン力の決定
- 3体力の解明
- Exotic hadron候補

H-dibaryon, X(3872), Z(4430), Θ^+ , $\Lambda(1405)$, etc.

◆ メンバー

初田哲男(東大/理研), 石井理修(筑波大), 佐々木健志(筑波大), 土井琢身(理研), 根村英克(筑波大), 村野啓子(理研)

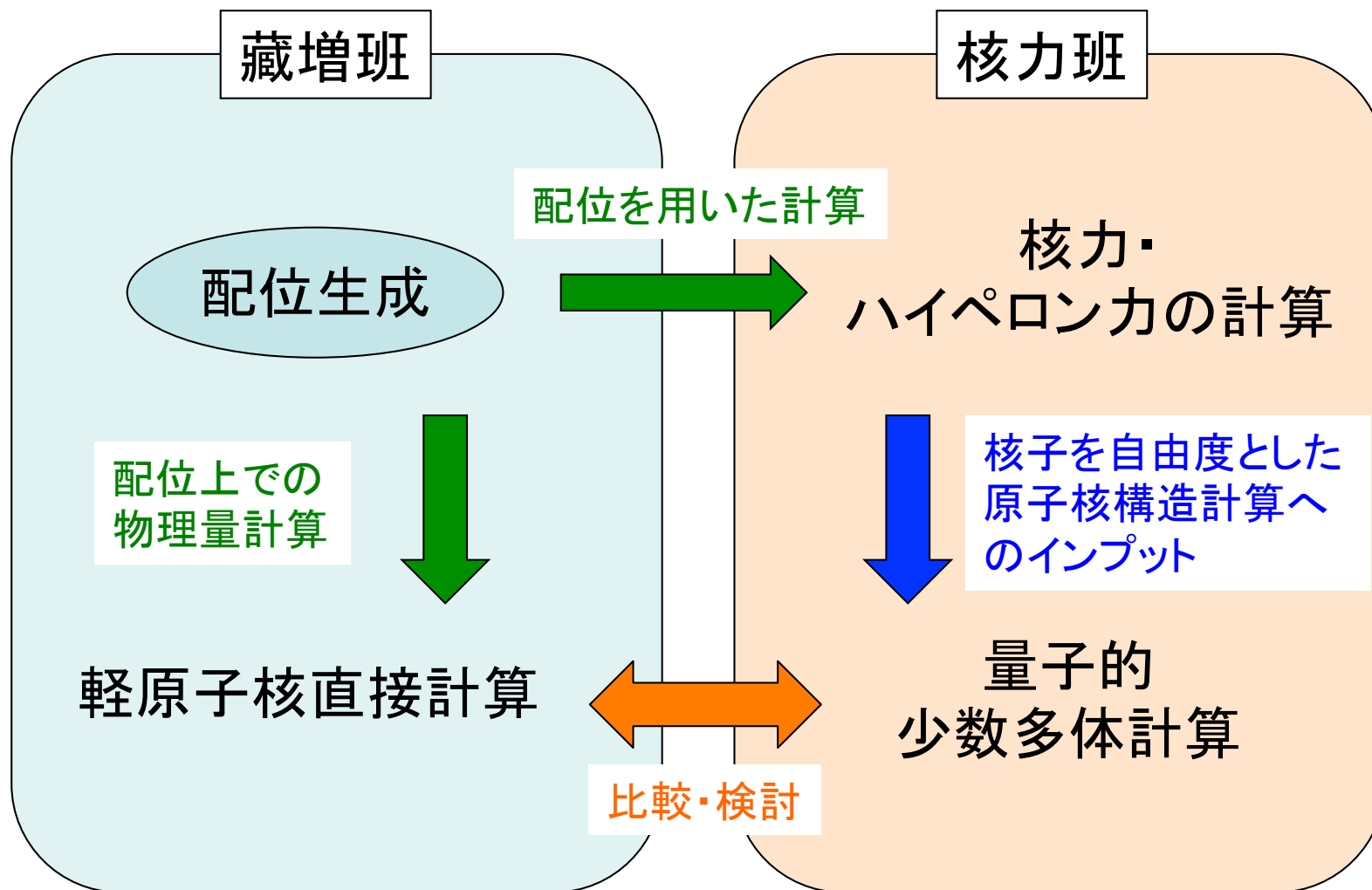
◆ 役割分担

- 核力: 石井, 村野
- ハイペロン力: 根村, 佐々木, 井上
- 3体力: 土井

	中心力・テンソル力 (偶パリティ)	奇パリティ核力 LS力	3体力
核力	優先度大		
ハイペロン力			



両班の連携のコアパート

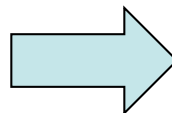




チューニング状況



[A] ハイブリッドモンテカルロ法
(分子動力学法の一つ)に
よる配位生成



[B] 各配位上での物理量および
核力・ハイペロン力計算

- 計算コストの主要部分
 - 大規模疎行列に対する線形方程式を倍精度で“ひたすら”解く
$$Dx^{(i)}=b^{(i)}$$
 - Dは $12 \cdot V$ ($\sim 10^9$)次元の複素非エルミート正方行列
 - 各行には51個の非ゼロ要素しかない
 - 要求B/F値: 約2.1(DP)
 - [A]でのコストは約80%, [B]ほぼ100%
- チューニング状況
 - 線形方程式求解部分(精度混合型nested BiCGStab)に注力
 - Weak scaling: 92%(16ノード \Rightarrow 12288ノード)
 - 実行効率: 25%



§3. H24年度進捗状況



※昨年度の本シンポで報告した計画に対する達成度

◆ 藏増班

- ☑ 共用開始前はゲージ配位生成のための各種テスト
- ☑ 共用開始後はゲージ配位を生成開始
⇒ 並行して基本物理量測定・軽い安定原子核の構成

◆ 核力(初田)班

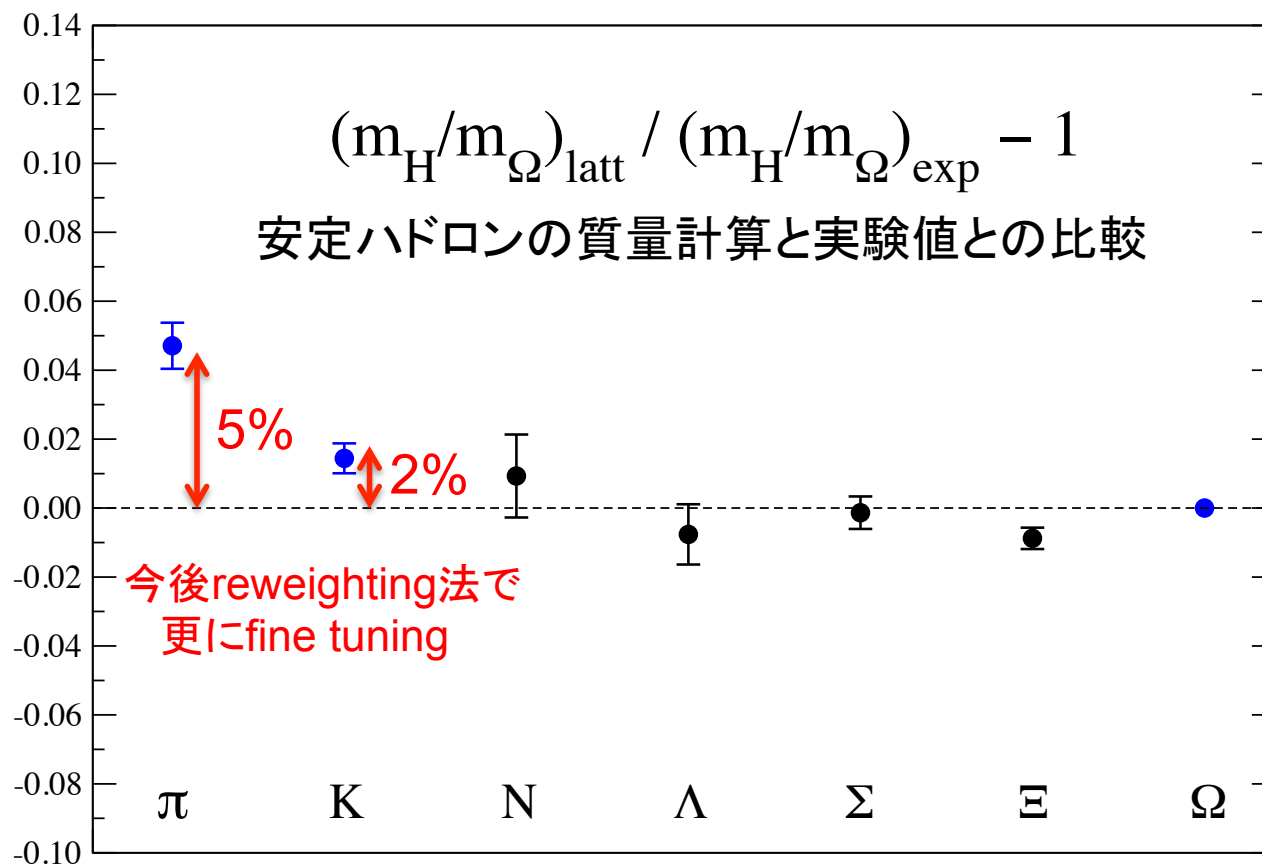
- ☑ 共用開始前は2体・3体バリオン間力計算のためのコードの高度化と実証テスト
- ☐ 共用開始後は生成されたゲージ配位を用いて中心力・テンソル力を含めた2体バリオン間力の系統的計算を開始



ゲージ配位生成と基本物理量測定



- ハイブリッドモンテカルロ法によるゲージ配位生成(H25年度も継続)
2+1フレーバー($m_u=m_d \neq m_s$)QCD
格子サイズ: 96^4 , 格子間隔: $\sim 0.1\text{fm}$
- 数%の範囲内での物理点へチューニング済



preliminary

physical input
 m_π, m_K, m_Ω
↓
 $m_u=m_d, m_s, a$



1+1+1フレーバー-QCD+QED



PACS-CS 12

アイソスピン対称性の破れ

- 電磁相互作用

$$Q_u = +2/3e, Q_d = Q_s = -1/3e, e = \sqrt{4\pi/137}$$

- u-dクォーク質量差

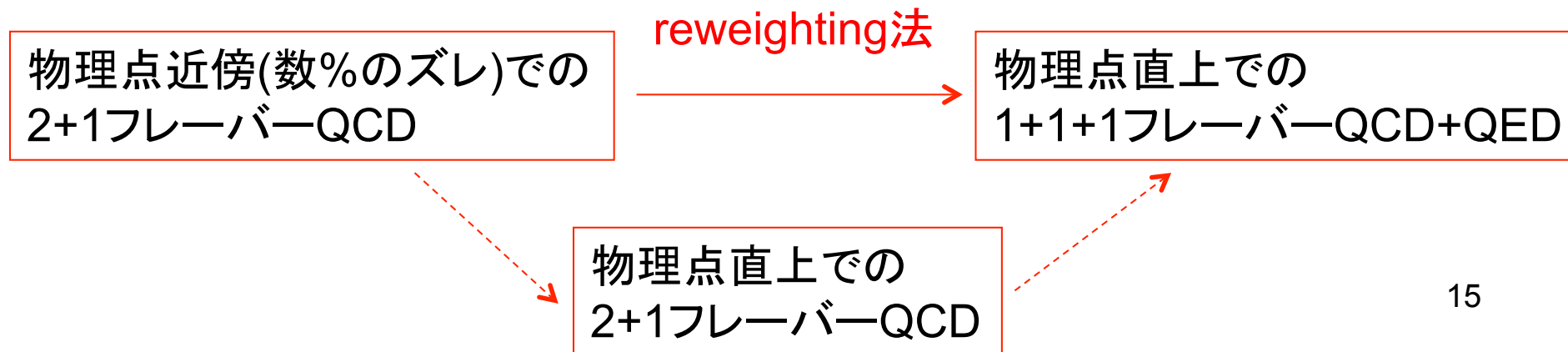
$$m_u = m_d \neq m_s \text{ (2+1フレーバー)} \Rightarrow m_u \neq m_d \neq m_s \text{ (1+1+1フレーバー)}$$

Physical input:

$$m_{\pi^+}(ud), m_{K^0}(ds), m_{K^+}(us), m_{\Omega^-}(sss)$$

Output:

$$m_u, m_d, m_s, a(\text{格子間隔}), m_n - m_p, \dots$$





Reweighting法



Simulation parameter: m
Target parameter: m'

$$\langle \mathcal{O}[m] \rangle_m \Rightarrow \langle \mathcal{O}[m'] \rangle_{m'}$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}[m'] \rangle_{m'} &= \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{O}[m'] e^{-S[m']}}{\int \mathcal{D}U e^{-S[m']}} \\ &= \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{O}[m'] e^{-S[m] - (S[m'] - S[m])}}{\int \mathcal{D}U e^{-S[m] - (S[m'] - S[m])}} \\ &= \frac{\int \mathcal{D}U \mathcal{O}[m'] e^{-S[m] - \Delta[m', m]}}{\int \mathcal{D}U e^{-S[m] - \Delta[m', m]}} \\ &= \frac{\langle \mathcal{O}[m'] e^{-\Delta[m', m]} \rangle_m}{\langle e^{-\Delta[m', m]} \rangle_m} \end{aligned}$$

パラメータ m で生成したゲージ配位を使ってパラメータ m' での期待値を計算することが可能

※等式変形だが現実問題として補正が小さい方がよい

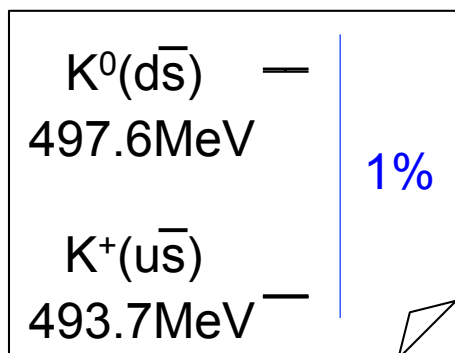


T2Kでの先行研究

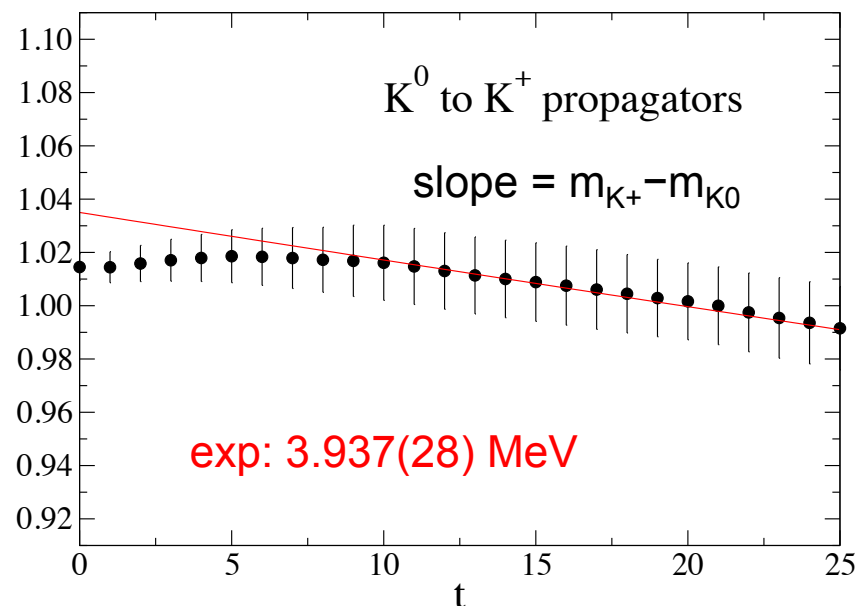


PACS-CS 12

電磁相互作用 + u-dクォーク質量差
⇒ $m_{K^0}(ds)$ と $m_{K^+}(us)$ の差



lattice size = $32^3 \times 64$, $a \sim 0.1$ fm



$$\frac{\langle K^0(t)K^0(0) \rangle}{\langle K^+(t)K^+(0) \rangle} \simeq Z \underbrace{\left(1 - (m_{K^0} - m_{K^+})t \right)}_{\text{much smaller than 1}}$$

much smaller than 1

Fit結果4.54(1.09) MeVは実験値3.937(28) MeVと誤差の範囲で一致



T2Kでの先行研究(2)



PACS-CS 12

Physical input:

$$m_{\pi^+}(ud)=139.7(15.5) \text{ [MeV]}$$

$$\text{exp: } 139.6 \text{ [MeV]}$$

$$m_{K^0}(ds)=497.6(8.1) \text{ [MeV]}$$

$$\text{exp: } 497.6 \text{ [MeV]}$$

$$m_{K^+}(us)=492.4(8.1) \text{ [MeV]}$$

$$\text{exp: } 493.7 \text{ [MeV]}$$

$$m_{\Omega}(sss)\text{は実験値に固定}$$

$$\text{exp: } 1672.5 \text{ [MeV]}$$

クォーク質量(MSbar scheme at $\mu=2 \text{ GeV}$):

$$m_u=2.57(26)(07) \text{ [MeV]}$$

$$m_d=3.68(29)(10) \text{ [MeV]}$$

$$m_s=83.60(58)(2.23) \text{ [MeV]}$$

課題: QCD+QEDシミュレーションでは大きな有限体積効果が予想される

π 中間子(140MeV)@QCD \Leftrightarrow フォトン(質量ゼロ)@QED

\Rightarrow 京を用いたより大きな格子サイズ 96^4 でのシミュレーション
核力・ハイペロン力の計算にも利用可能



原子核の直接構成

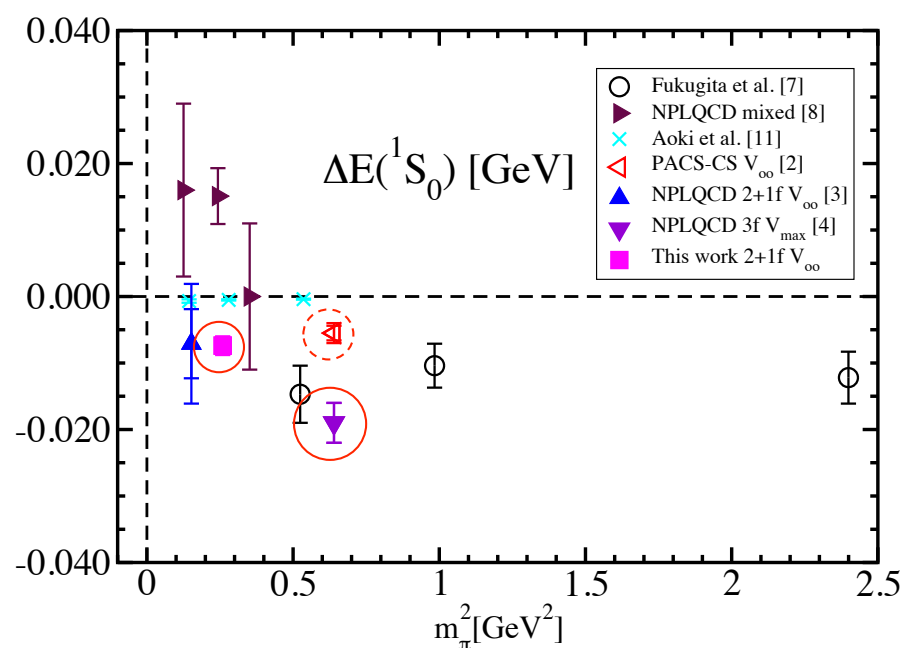
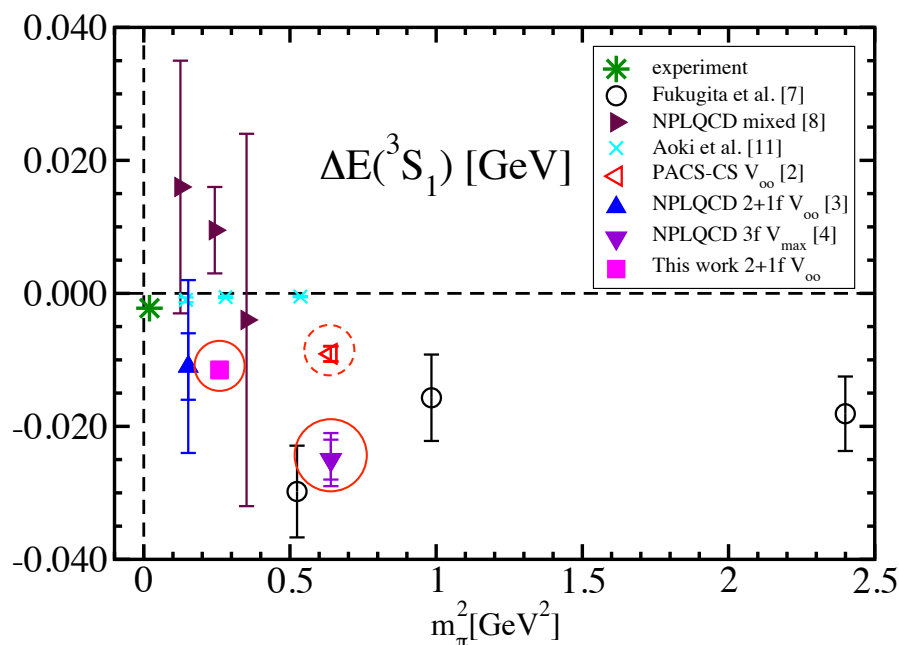


K computer

Yamazaki-YK-Ukawa 12

2+1フレーバーQCD, $m_\pi=0.5$ GeV, $m_N=1.32$ GeV

	4He	3He	NN(3S1)	NN(1S0)
束縛エネルギー [MeV]	43(12)(8)	20.3(4.0)(2.0)	11.5(1.1)(0.6)	7.4(1.3)(0.6)
実験値 [MeV]	28.3	7.72	2.22	0



$|\Delta E(^3S_1)| > |\Delta E(^1S_0)| \Rightarrow$ 質量を軽くして行くと(先に) 1S_0 の束縛が解ける？



核力計算の進捗状況



- ◆ 現実的核力の決定
負パリティおよびスピン軌道力の計算
- ◆ 現実的ハイペロン力
結合チャンネルハイペロン力 ($S=-1, -2, -3, -4$)
- ◆ Exotic hadron候補
フレーバーSU(3)極限におけるH-dibaryonのクォーク質量依存性
- ◆ 3体力
直線配置による近距離斥力の導出

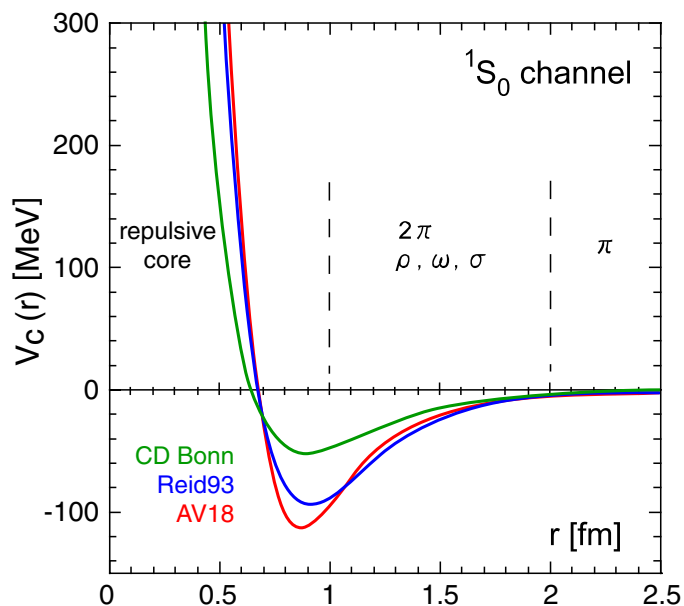
「京」向けコードの高度化を行いつつ、
「京」以外で重いクォーク質量を使ったベンチマーク的計算が進行中



核子間ポテンシャル



現象論的モデル

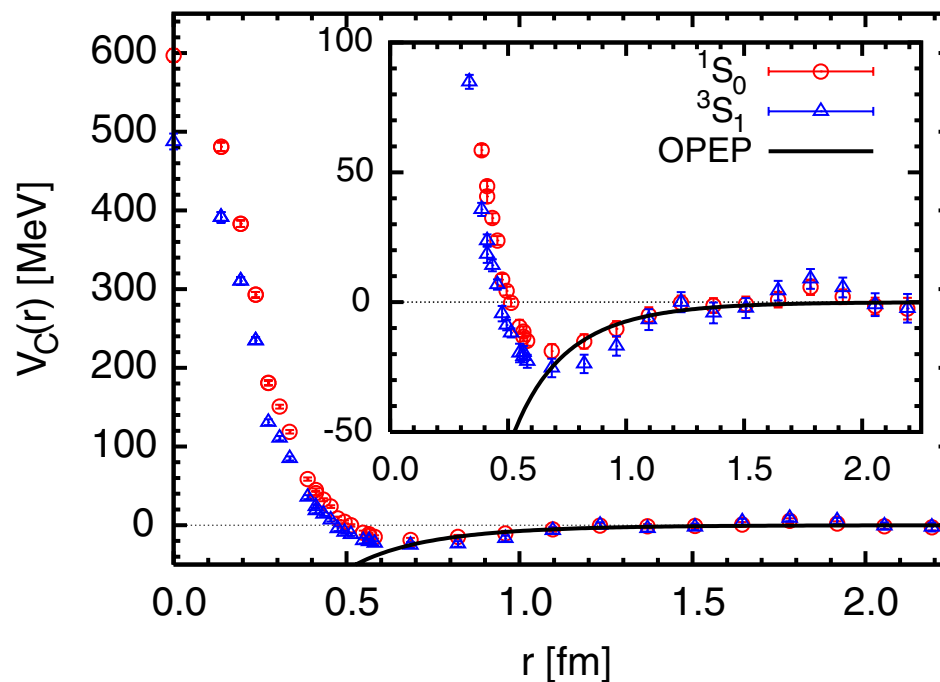


Ishii-Aoki-Hatsuda 07

based on equal-time BS amplitude

$$\varphi_E(\mathbf{r}) = \langle 0 | N(\mathbf{x} + \mathbf{r}, 0) N(\mathbf{x}, 0) | 6q, E \rangle$$

クエンチ近似, $m_N = 1.34 \text{ GeV}$



$$V_C(r) = E + \frac{1}{2\mu} \frac{\vec{\nabla}^2 \phi(r)}{\phi(r)}$$

格子QCDによる波動関数計算 ⇒ ポテンシャルの決定



核力の決定

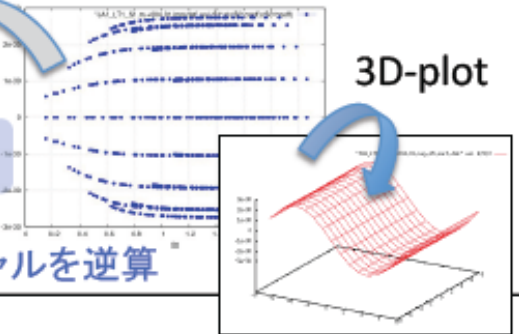


負パリティ及びスピン軌道力の計算 (NN間)

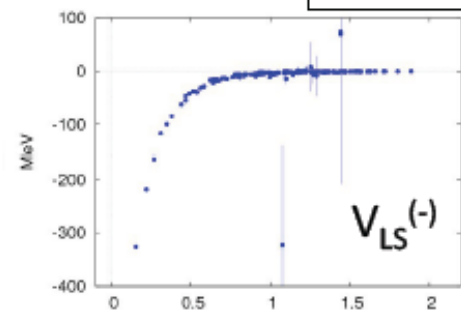
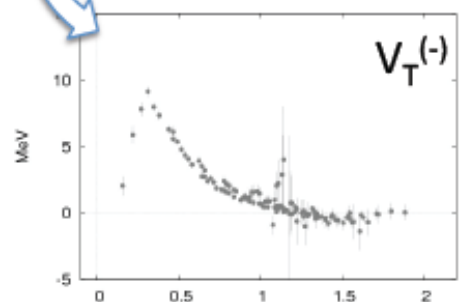
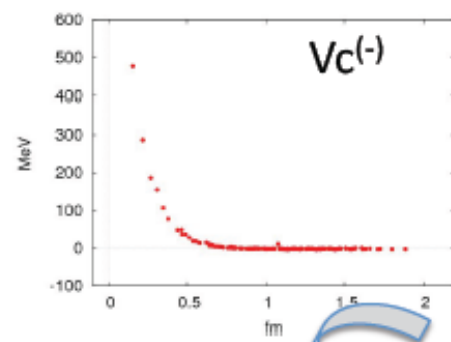
3P0
J=1 (A1) L=1 (T1) (imaginary part)

格子QCDから 各NBS波動関数を計算

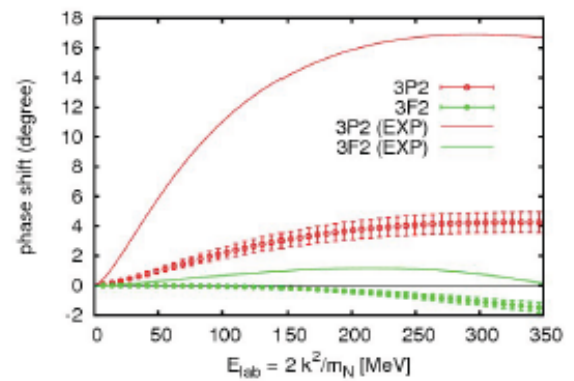
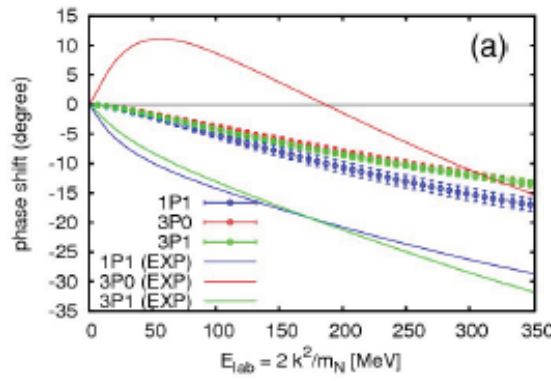
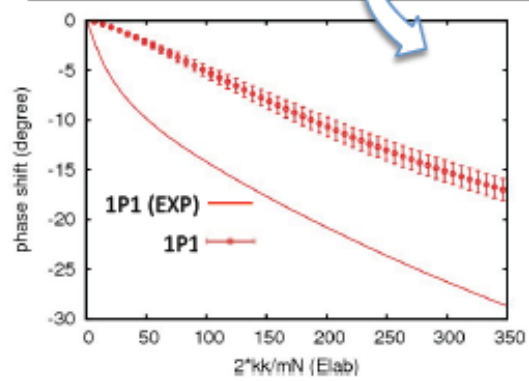
$$\left(\frac{\nabla^2}{2m} + E\right) \psi^{3P0}(\vec{r}) = V_C^{(-)} \psi^{3P0}(\vec{r}) + V_T^{(-)} S_{12} \psi^{3P0}(\vec{r}) + V_{LS}^{(-)} \vec{L} \cdot \vec{S} \psi^{3P0}(\vec{r})$$



波動関数からポテンシャルを逆算



得られたポテンシャルを使って Schrodinger eq を解いて位相差計算



定性的な振る舞いは一致。実験値との差はクォーク質量が重いことが原因 $m_\pi \approx 1.1\text{GeV}$, $m_N \approx 2.2\text{GeV}$



ハイペロン力とH-dibaryon状態

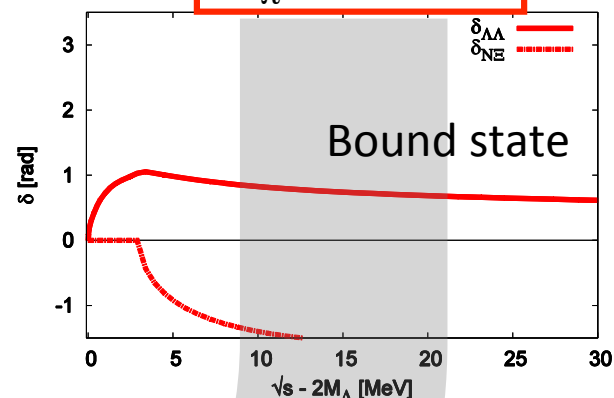


- ◆ フレーバーSU(3)でのバリオン間有効相互作用の計算
- ◆ バリオン間相互作用のフレーバー依存性の解明
 - 近距離斥力の起源に迫る
 - クォーク間のパウリ排他律との関連性
 - H-dibaryon状態(フレーバー1重項)
 - パウリ排他律に関する重要な情報

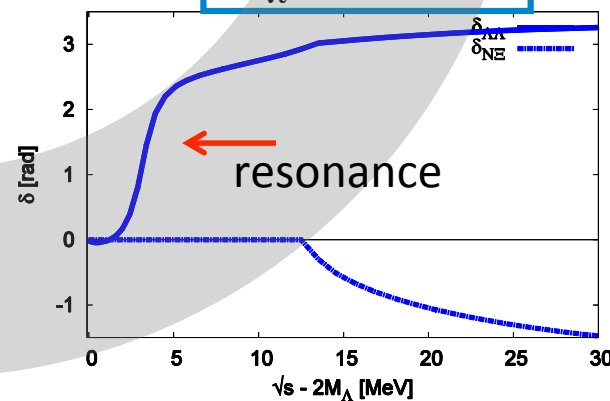
H-ダイバリオン状態の研究

⇔ バリオン系におけるクォークの役割を知る手掛かり

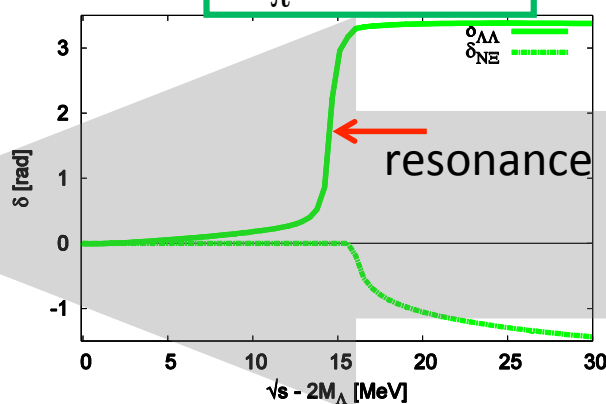
$m_\pi = 700\text{MeV}$



$m_\pi = 570\text{MeV}$



$m_\pi = 410\text{MeV}$



物理点
 $m_\pi = 135\text{MeV}$

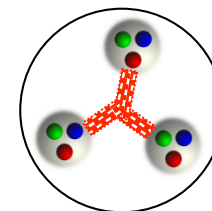
$\Lambda\Lambda$ 散乱位相差とH-dibaryon状態のクォーク質量依存性



3体力



- 3体力: 現代原子核物理における最重要課題の一つ
 - 原子核の束縛エネルギー
 - 高密度物質の状態方程式・中性子星の物理
 - 超新星爆発・元素合成



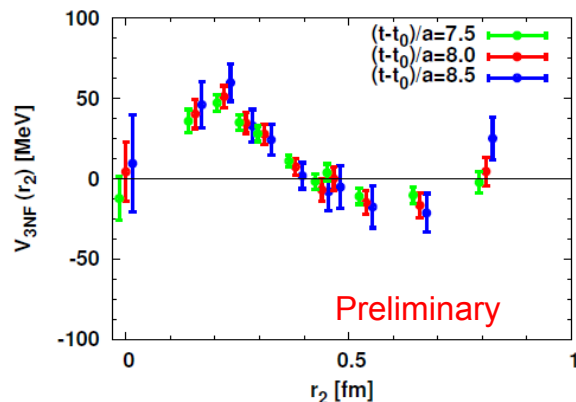
- 格子QCDでの「挑戦」: 極めて大きな計算コスト
 - ブレイクスルーを達成(2012)! [unified contraction algorithm]
 - Wick縮約とカラー・スピノル縮約を統一的に扱うアルゴリズムの開発

• 劇的な速度向上: $\times 192$ for ${}^3\text{H}/{}^3\text{He}$, $\times 20736$ for ${}^4\text{He}$, $\times 10^{11}$ for ${}^8\text{Be}$

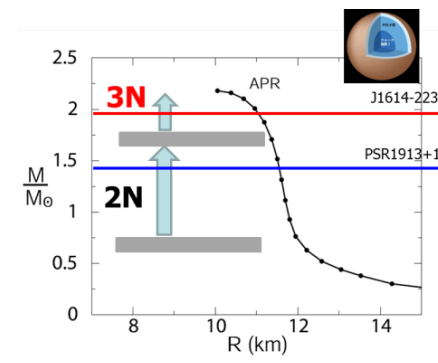
T.Do, M.Endres, arXiv:1205.0585, CPC184(2013)117

- 格子計算:

三重陽子
直線配位
 $m_\pi = 1.1\text{GeV}$



近距離で
斥力3体力!



T.Do, et al. PTP127(2012)723
+ t-dep method updates



§4. H25年度の計画



重点課題追加配分枠申請が認められたとすると、、、

◆ 藏増班

- H25年度中に目標とする5000分子動力学時間の統計を得ることが可能
- 更にreweighting法を用いて1+1+1フレーバーQCD+QEDシミュレーションを実行 ⇒ u, d, sクォーク質量の決定

◆ 核力(初田)班

- 保存されたゲージ配位を用いて2体バリオン間力の系統的計算を実行
最初は中心力・テンソル力に注力



BACKUP