

変形された *Domain-wall* 演算子について

金森 逸作（理研）

2026/09/07 離散的手法による場と時空のダイナミクス 2026



Outline

- Introduction
- (Möbuis) Domain-wall fermion
- 変形版と数値的なテスト
- 変形版を使ったシミュレーションに向けて

格子上でのフェルミオン

- ダブラー、カイラル対称性を保つには工夫が必要
- Domain-wall フェルミオン：5次元的な定式化で（ほぼ）厳密にカイラル対称性を保つ
5次元方向の大きさ $N_s \rightarrow \infty$ で overlap フェルミオンになる（Ginsparg-Wilson 関係式を満たす）
- 小さな N_s でカイラル対称性の破れが小さい方が嬉しい
Möbius Domain-wall フェルミオン
Domain-wall フェルミオンを用いた格子 QCD シミュレーションの主流

格子上でのフェルミオン

- ダブラー、カイラル対称性を保つには工夫が必要
- Domain-wall フェルミオン：5次元的な定式化で（ほぼ）厳密にカイラル対称性を保つ
5次元方向の大きさ $N_s \rightarrow \infty$ で overlap フェルミオンになる（Ginsparg-Wilson 関係式を満たす）
- 小さな N_s でカイラル対称性の破れが小さい方が嬉しい
Möbius Domain-wall フェルミオン
Domain-wall フェルミオンを用いた格子 QCD シミュレーションの主流

今日の話：Möbius Domain-wall フェルミオンを、さらに改良しようという話です

格子上でのフェルミオン

- ダブラー、カイラル対称性を保つには工夫が必要
- Domain-wall フェルミオン：5次元的な定式化で（ほぼ）厳密にカイラル対称性を保つ
5次元方向の大きさ $N_s \rightarrow \infty$ で overlap フェルミオンになる（Ginsparg-Wilson 関係式を満たす）
- 小さな N_s でカイラル対称性の破れが小さい方が嬉しい
Möbius Domain-wall フェルミオン
Domain-wall フェルミオンを用いた格子 QCD シミュレーションの主流

今日の話：Möbius Domain-wall フェルミオンを、さらに改良しようという話です

- 改良版のアイディア（Observable 向け）：H. Neff, arXiv:1501.04950, arXiv:2605.29377
- 数値実験：W-L.Chen, I.K., H.Matsufuru, H.Neff, ICCSA2025 Workshops, doi 10.1007/978-3-031-97606-3_5 / arXiv:2602.14454

格子上でのフェルミオン

- ダブラー、カイラル対称性を保つには工夫が必要
- Domain-wall フェルミオン：5次元的な定式化で（ほぼ）厳密にカイラル対称性を保つ
5次元方向の大きさ $N_s \rightarrow \infty$ で overlap フェルミオンになる（Ginsparg-Wilson 関係式を満たす）
- 小さな N_s でカイラル対称性の破れが小さい方が嬉しい
Möbius Domain-wall フェルミオン
Domain-wall フェルミオンを用いた格子 QCD シミュレーションの主流

今日の話：Möbius Domain-wall フェルミオンを、さらに改良しようという話です

- 改良版のアイディア（Observable 向け）：H. Neff, arXiv:1501.04950, arXiv:2605.29377
- 数値実験：W-L.Chen, I.K., H.Matsufuru, H.Neff, ICCSA2025 Workshops, doi
10.1007/978-3-031-97606-3_5 / arXiv:2602.14454

⇒Observable 向け（測定）だけでなく、配位生成に使う Action にこの改良版を組み込みたい

R. C. Brower, H. Neff and K. Orginos, Comput. Phys. Commun. 220 (2017), 1-19 [arXiv:1206:5214]

$$D(m) = \begin{pmatrix} D_+^{(1)} & D_-^{(1)} P_- & 0 & \dots & 0 & -m D_-^{(1)} P_+ \\ D_-^{(2)} P_+ & D_+^{(2)} & D_-^{(2)} P_- & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_-^{(3)} P_+ & D_+^{(3)} & D_-^{(3)} P_- & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & & D_-^{(N_s-1)} P_+ & D_+^{(N_s-1)} & D_-^{(N_s-1)} P_- \\ -m D_-^{(N_s)} P_- & 0 & \dots & 0 & D_-^{(N_s)} P_+ & D_+^{(N_s)} P_+ \end{pmatrix},$$

where

$$D_+^{(s)} = b_s D_W(-M_0) + 1, \quad D_-^{(s)} = c_s D_W(-M_0) - 1, \quad P_{\pm} = (1 \pm \gamma_5)/2$$

- m : 質量、 b_s, c_s : パラメータ (今日の話では s によらない)
- $D_W(-M_0)$: Wilson フェルミオンの Dirac 演算子, ここでは質量をマイナスで大きく取っている ($-M_0 < 0$)

R. C. Brower, H. Neff and K. Orginos, Comput. Phys. Commun. 220 (2017), 1-19 [arXiv:1206:5214]

この先、 $b_1 = b_2 = \dots = b$, $c_1 = c_2 = \dots = c$ とする

$LD(m)R = F \text{diag}(D_{\text{overlap}}^{(N_s)}(m), 0, \dots, 0)$ になる L, R, F を探すと、

$$D_{\text{overlap}}^{(N_s)}(m) = \left[\mathcal{P}^\dagger D(m_{PV})^{-1} D(m) \mathcal{P} \right]_{11} = \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} \gamma_5 \text{sgn}^{(N_s)}(H_K)$$

ここで、

近似的な符号関数: $\text{sgn}^{(N_s)}(x) = \tanh(N_s \tanh^{-1}(x))$

メビウス変換したカーネル: $H_K = \gamma_5 \frac{(b+c)D_W(-M_0)}{2 + (b-c)D_W(-M_0)}$

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} P_- & P_+ & 0 & \dots \\ 0 & P_- & P_+ & 0 \dots \\ 0 & & \ddots & \\ P_+ & 0 & \dots & P_- \end{pmatrix}, \quad \mathcal{P}^\dagger \mathcal{P} = 1$$

Pauli-Villars mass: $m_{PV} = 1$

$$\langle q_x \bar{q}_y \rangle = [\mathcal{P}^\dagger [D(m)^{-1} D(m_{PV})]_{xy} \mathcal{P}]_{11} = (P_- \quad 0 \quad \dots \quad 0 \quad P_+) [D(m)^{-1}]_{xz} \begin{pmatrix} D_-^{(1)} P_+ \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ D_-^{(L_s)} P_- \end{pmatrix}_{zy}$$

シミュレーション

source vector を $\vec{b} = (\phi_y, 0, \dots, 0)^T$ とする

$\Rightarrow \mathcal{P}^\dagger D^{-1}(m) D(m_{PV}) \mathcal{P} \vec{b}$ の1成分目があればよい

$\Rightarrow D(m) \mathcal{P} \vec{x} = D(m_{PV}) \mathcal{P} \vec{b}$ を $\vec{x}$ について解いて、その1成分目を抜き出せばよい
(実際には $\vec{X} \equiv \mathcal{P} x$ について解いて、 $\vec{x} = \mathcal{P}^\dagger \vec{X}$)

$\Rightarrow$ 2点関数を組み合わせて物理量の情報を得る

H. Neff, arXiv:1501.04950, arXiv:2605.29377

$$D_{\alpha}(m) = \begin{pmatrix} D_+^{(1)}(P_- + \alpha P_+) & \alpha D_-^{(1)} P_- & 0 & \dots & 0 & -m D_-^{(1)} P_+ \\ \alpha D_-^{(2)} P_+ & \alpha D_+^{(2)} & \alpha D_-^{(2)} P_- & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \alpha D_-^{(3)} P_+ & \alpha D_+^{(3)} & \alpha D_-^{(3)} P_- & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & & \alpha D_-^{(N_s-1)} P_+ & \alpha D_+^{(N_s-1)} & \alpha D_-^{(N_s-1)} P_- \\ -m D_-^{(N_s)} P_- & 0 & \dots & 0 & \alpha D_-^{(N_s)} P_+ & D_+^{(N_s)}(P_+ + \alpha P_-) \end{pmatrix},$$

- 質量 m を含まない項を変形 (概ね α 倍) : $\alpha < 1$ で m を大きくすると類似な効果を期待
- $\alpha = 1$ でもとに戻る
- $D_{\alpha}(m)\mathcal{P} = D_{\alpha=1}(m)\mathcal{P}A$, $A = \text{diag}(1, \alpha, \dots, \alpha)$

$$D_{\alpha}(m)\mathcal{P} = D_{\alpha=1}(m)\mathcal{P}A, \quad A = \text{diag}(1, \alpha, \dots, \alpha)$$

解きたい方程式

$D(m)\mathcal{P}\vec{x} = D(m_{PV})\mathcal{P}\vec{b}$, $\vec{b} = (*, 0, \dots, 0)^T$ を $\vec{x}$ について解いて、その 1 成分目が欲しい

変形版

右辺は変わらない

$$D_{\alpha}(m_{PV})\mathcal{P}\vec{b} = D_{\alpha=1}(m_{PV})\mathcal{P}A\vec{b} = D_{\alpha=1}(m_{PV})\mathcal{P}\vec{b}$$

左辺は $\vec{x}$ が $A\vec{x}$ になる

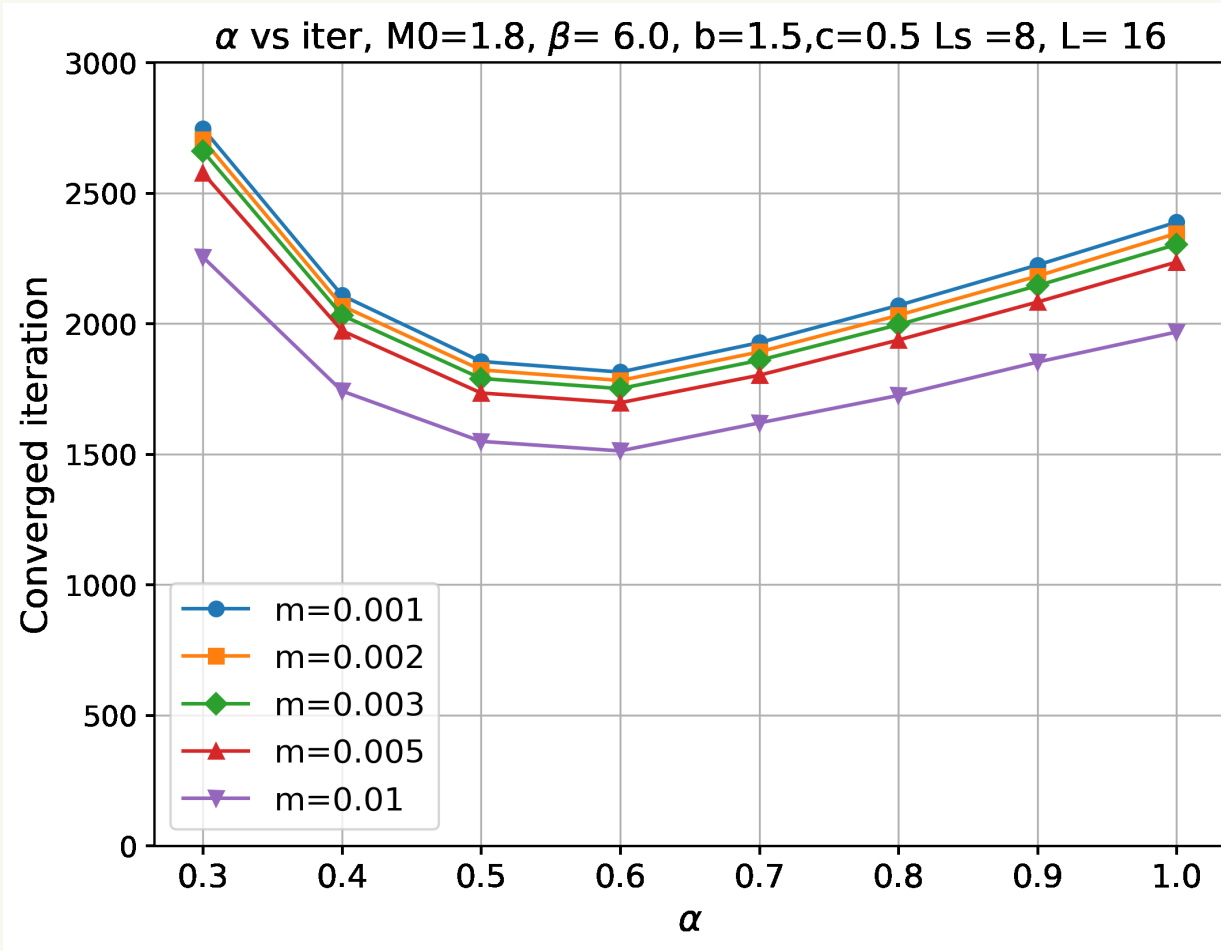
$$D_{\alpha}(m)\mathcal{P}\vec{x} = D_{\alpha=1}(m)\mathcal{P}A\vec{x}$$

$\Rightarrow \vec{x}$ の代わりに $A\vec{x}$ が求まるが、 $(A\vec{x} \text{ の第 1 成分 }) = (\vec{x} \text{ の第 1 成分 })$ なので欲しい物が得られる

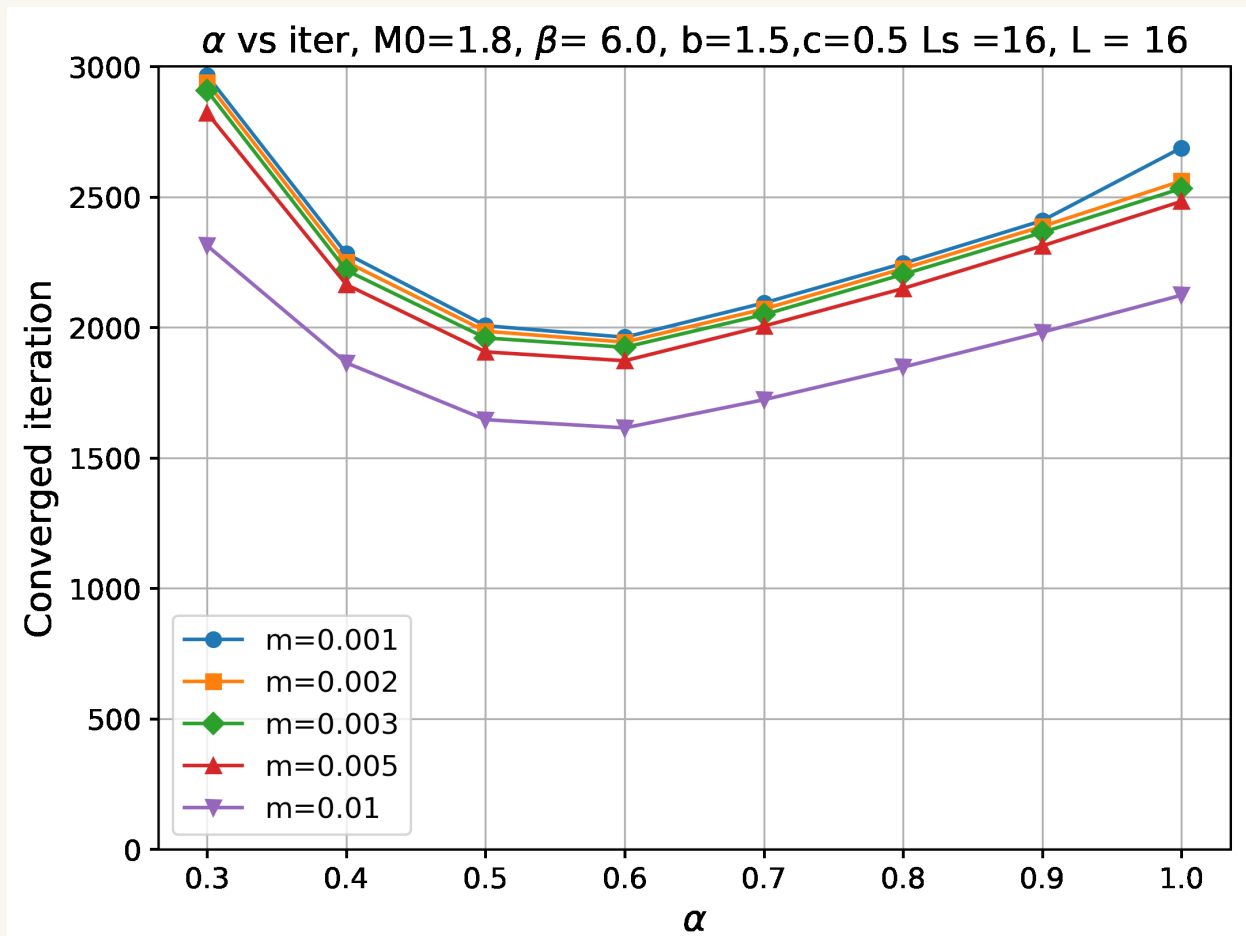
D を D_{α} に置き換えても、2 点関数は変わらない

Numerical test (smearing なし)

W-L.Chen, I.K., H.Matsufuru, H.Neff, ICCSA2025 Workshops, doi 10.1007/978-3-031-97606-3_5 / arXiv:2602.14454



$N_s = 8$



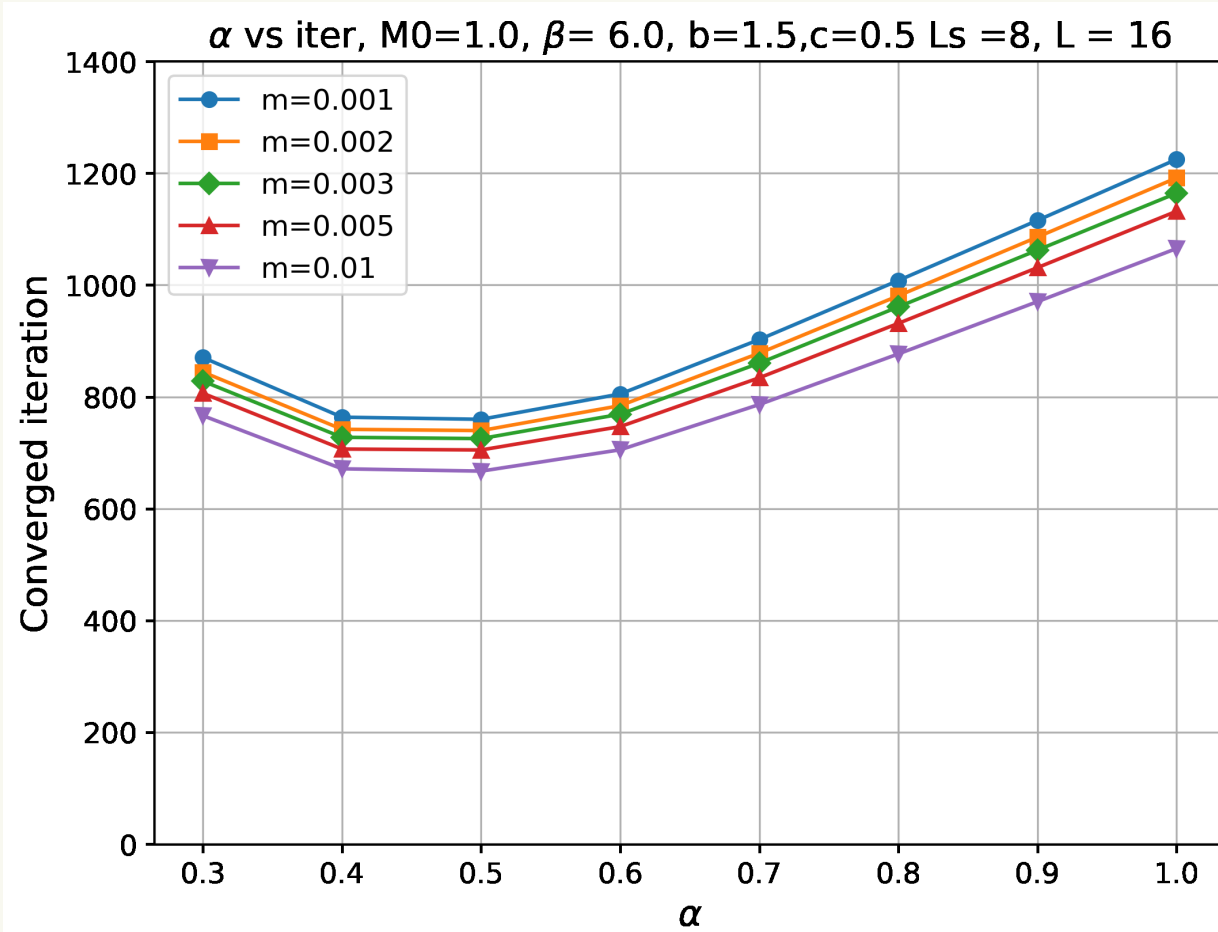
$N_s = 16$

16^4 lattice

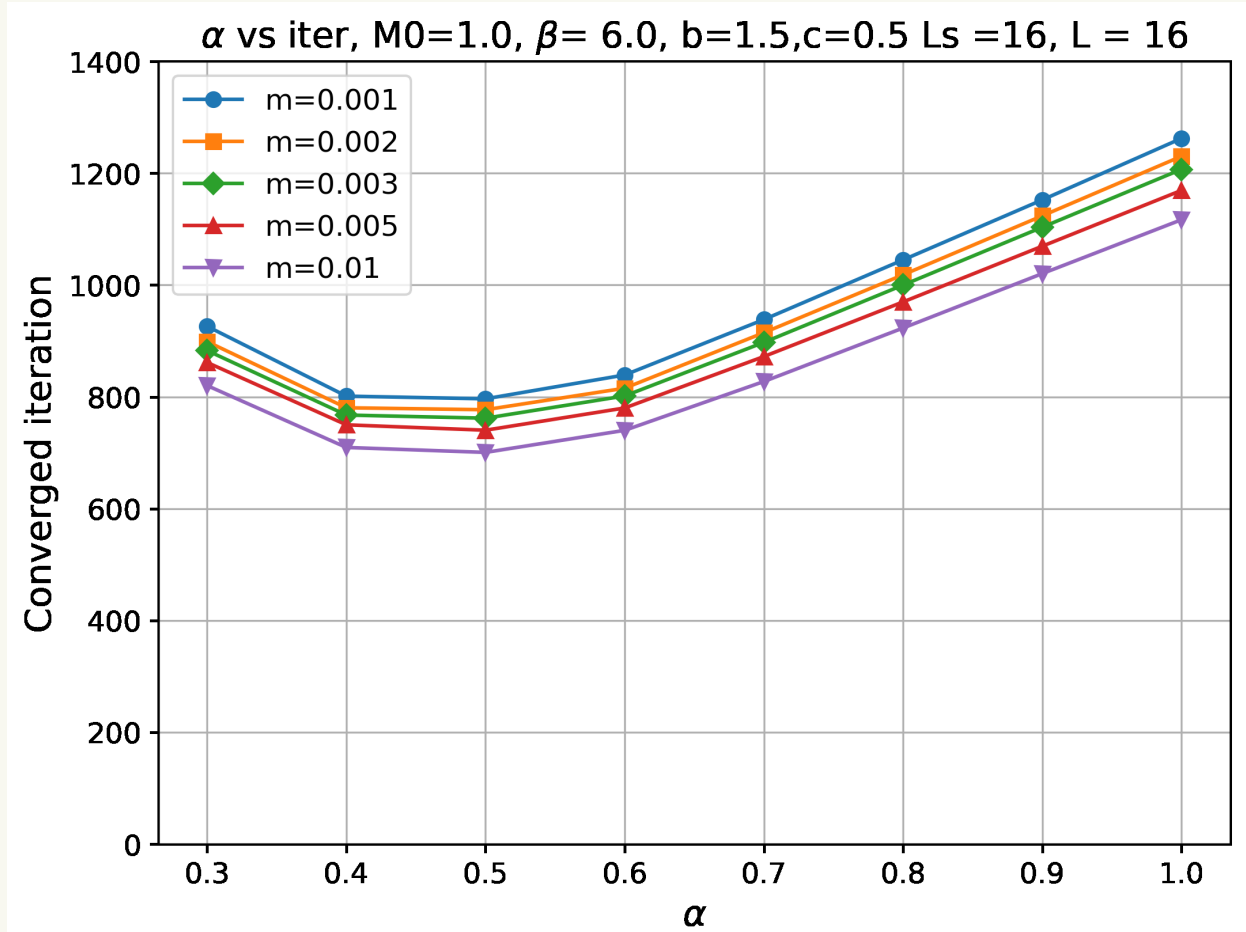
$\alpha < 1$ で、baseline ($\alpha = 1$) よりソルバーの反復数が減少: $\alpha \sim 0.6$ 付近が極小

Numerical test (smearing あり)

W-L.Chen, I.K., H.Matsufuru, H.Neff, ICCSA2025 Workshops, doi 10.1007/978-3-031-97606-3_5 / arXiv:2602.14454



$N_s = 8$



$N_s = 16$

16^4 lattice

$\alpha < 1$ で、baseline ($\alpha = 1$) よりソルバーの反復数が減少: $\alpha \sim 0.5$ 付近が極小

配位生成に使えるか？

ここまでの話：第 1 成分がのみが必要な 2 点関数

- $\det(D^\dagger D) = \int d\phi \exp[-\phi^\dagger (D^\dagger D)^{-1} \phi]$ として評価 (pseudo fermion action)
- 解きたいのは $D\vec{X} = \vec{\phi}$: $\vec{\phi}$ も $\vec{X}$ も全 N_s 成分必要

⇒ (そのままでは) 使えない

配位生成に使えるか？

ここまでの話：第 1 成分がのみが必要な 2 点関数

- $\det(D^\dagger D) = \int d\phi \exp[-\phi^\dagger (D^\dagger D)^{-1} \phi]$ として評価 (pseudo fermion action)
- 解きたいのは $D\vec{X} = \vec{\phi}$: $\vec{\phi}$ も $\vec{X}$ も全 N_s 成分必要

⇒ (そのままでは) 使えない

$D_{\alpha} \vec{X} = \vec{\phi}$ を解けば良いように作用を変更できないか？

$$D_{\alpha}(m)\mathcal{P} = D_{\alpha=1}(m)\mathcal{P}A, \quad D_{\alpha=1}(m) = D(m), \quad A = \text{diag}(1, \alpha, \dots, \alpha)$$
$$\det[D_{\alpha}(m)] = ?$$

$$D_{\alpha}(m)\mathcal{P} = D_{\alpha=1}(m)\mathcal{P}A, \quad D_{\alpha=1}(m) = D(m), \quad A = \text{diag}(1, \alpha, \dots, \alpha)$$
$$\det[D_{\alpha}(m)] = ?$$

- $\det(\mathcal{P}) = 1$
- $\det(A) = \text{constant}$

$$\Rightarrow \det(D_{\alpha}(m)) = \text{constant} \times \det(D_{\alpha=1}(m))$$

変形版を用いた作用

$$D_{\alpha}(m)\mathcal{P} = D_{\alpha=1}(m)\mathcal{P}A, \quad D_{\alpha=1}(m) = D(m), \quad A = \text{diag}(1, \alpha, \dots, \alpha)$$
$$\det[D_{\alpha}(m)] = ?$$

- $\det(\mathcal{P}) = 1$
- $\det(A) = \text{constatnt}$

$$\Rightarrow \det(D_{\alpha}(m)) = \text{constant} \times \det(D_{\alpha=1}(m))$$

実際に使う fermion determinant

$$\det \left[\frac{D^{\dagger}(m)D(m)}{D^{\dagger}(m_{PV})D(m_{PV})} \right] = \det \left[\frac{D_{\alpha}^{\dagger}(m)D_{\alpha}(m)}{D_{\alpha}^{\dagger}(m_{PV})D_{\alpha}(m_{PV})} \right]$$

定数部分は分子分母で打ち消す: psuedo fermio action に変形版を用いても、fermion determinant は変わらない

まとめ

- Möbius Domain-wall フェルミオンの変形
(observable の計算に必要な)2 点間数の計算の高速化
- フェルミオン作用に同じ変形を施しても、fermion determinant は変わらない

展望

- 変形したフェルミオン作用を用いた配位生成 (HMC) も高速化できるはず
 - 確実：ソルバーが速くなる
 - 確実：MD step の force は小さくなる
 - 期待：自己相関まで含めたトータルの高速化
ソルバーの反復数減少 ~ MD Force の抑制 ~ トポロジカルセクター間の遷移促進？
 - 物理的な理解：うまくいくアルゴリズムは物理の特徴を捉えているはず