

jh180042-NAH

高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と有限密度2カラーQCDの相図の決定

飯田圭 (高知大学)

概要 原子核のダイナミクスを記述する基礎理論であるQCDは、高密度下での性質がよくわかっていない。一方、2カラーQCDは、有限密度系でも符号問題を生じない上、現実のQCDと近い性質をもつ。我々はこの系に着目し、高密度領域で発現が予想されている超流動相を含め、相状態について、第一原理計算からの知見を得る。当研究課題においては、ゼロ密度で確立したモンテカルロ法を高密度下でも適用できるように拡張したコードを開発し、プログラムのチューニング、および相図の決定を行う。前期に得られた成果は、低温・有限密度下において、超流動性を特徴づけるダイクォークの源を導入した作用で配位を作成し、密度増加に伴う超流動相転移の概要を得たことである。また、ダイクォークの生成に関連すると考えられているインスタントン(トポロジカルな構造をもったグルーオンの配位)に着目し、インスタントン密度を与えるトポロジカル電荷分布を測定し、その有限密度下での挙動を調べた。後期においては、データのパラメータ数・統計数を増やすことにより、超流動相転移の相図について、新しい知見を得た。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

京都大学学術情報メディアセンター
大阪大学サイバーメディアセンター

(2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

飯田圭：グループの統括，ジョブの実行。
石黒克也：コード開発，グループ内サーバーの構築・管理。
伊藤悦子：研究の統括，コード開発及びチューニング，ジョブの実行と解析，成果の発表。
李東奎：ジョブの実行と解析，成果の発表。

2. 研究の目的と意義

SU(3)ゲージ理論で書かれる量子色力学(QCD)は、物質を構成する基本要素であるクォーク・グルーオンのダイナミクスを記述す

る基本理論である。我々は、ゲージ対称性の自由度を一つ落とした模型である「SU(2)ゲージ理論(2カラーQCD)の有限温度・有限密度系」を、近似を全く使わない第一原理計算で調べる。そして、その相図の決定、さらには各相における系の性質を解明し、現実の有限温度・有限密度QCDに対する知見を得る事が目標である。

なかでも今年度は、

【目的 i】 計算機科学分野として、今までモンテカルロ計算が困難であった「低温・高密度領域」まで適用可能な計算コードのチューニングと計算方法(アルゴリズム等)の改良

【目的 ii】 計算科学分野として、第一原理計算による有限温度・有限密度における相図の決定を目標とする。

核力などの強い力が支配的な系のミクロな振る舞いを記述するQCDは、第一原理計算である格子シミュレーションによる数値的研究により、ハドロン(核子や中間子)の質

量の再現や、有限温度相転移の定性的・定量的振る舞いの解明において成功をおさめてきた。しかしながら、これらの成功は、物質が存在することによる有限密度効果を無視できる場合に限定されている。有限密度下における QCD は、中性子星や加速器実験において現実に存在する物理系を記述するものであるが、理論的な理解はもとより、現象論的性質も未だよく分かっていない。その主な理由は、上記の第一原理計算である格子シミュレーションには、有限密度にすると「符号問題」という本質的な困難があり、未だに完全な定式化がないためである。そこで、符号問題のない SU(2)理論を考え、計算法を工夫することで高密度領域まで系統的に調べることで、有限温度・有限密度 QCD の定性的な理解を得るのが本研究の目標である。

これまでに、先駆的な格子計算による研究や有効模型を用いた研究から、大雑把に図 1 の様な 2 カラー QCD の相図が描けるものと予想されていた。

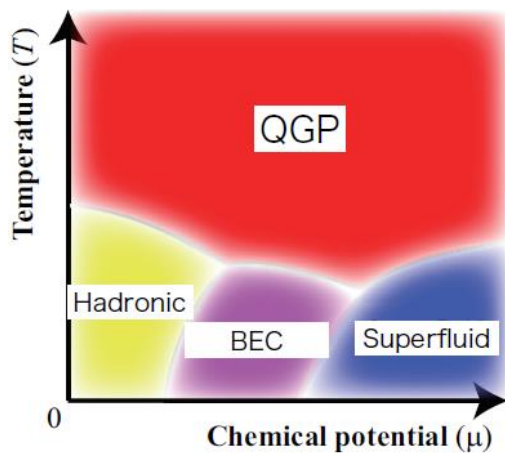


図 1：有限温度・密度 2 カラー QCD の相構造予想図。

- (1) クォーク・グルーオンプラズマ (QGP) 相 (閉じ込めなし, ダイクォーク凝縮なし)
- (2) ハドロン相 (閉じ込めあり, ダイクォーク凝縮なし)
- (3) ボース・アインシュタイン凝縮 (BEC) 相 (閉じ込めあり, ダイクォーク凝縮あり)

(4) 超流動相 (閉じ込めなし, ダイクォーク凝縮あり)

相図を確定し、各相の性質を調べるべく、これまで格子 QCD 計算で広く用いられているハイブリッドモンテカルロ法を用いる。この手法の有効性は、理論の作用が実数かつ正になる場合にのみ成り立つ確率解釈に依拠している。しかし、一般的な SU(Nc)理論に対しては、有限密度下で作用が複素数となる、いわゆる「符号問題」が生じる。この問題を回避するために、現実の QCD と近い性質を持つ SU(2) 2 フレーバー理論を考える。それでもなお、高密度領域でシミュレーションが進まなくなるという問題が生じるが、作用にクォーク・反クォークの対称性を破る「ダイクォーク源」を加えることでこの問題を回避することに成功した。この際、ダイクォーク源を取り扱うために、ハイブリッドモンテカルロ法からラショナルハイブリッドモンテカルロ法に拡張した。この計算方法の有効性を調べ、チューニング等を実行することで、今後同様の問題を持つ様々な分野に活用できると期待される。

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

当拠点は、現在素粒子・原子核分野の格子 QCD 計算で用いられているベクトル型計算機とスカラー型計算機の双方を有しており、それらを用いて全体の計算実効性能と汎用性を高めることは大変重要である。実際、双方で有効な並列計算コードを開発し、計算法の有効性を調べた。

また、広い範囲での温度・密度面上での相図の決定に際しては、一つ一つの計算のコストが高い上、温度、密度などのシミュレーションパラメータが必然的に多くなる。従って、効率よくインパクトのある成果を得るにあたり、当拠点が有する多数の計算機ノードを並行して使うことが必要であった。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

該当せず。

5. 今年度の研究成果の詳細

●学術的成果（今年度前期）

今年度前期は、低温かつ有限密度のシミュレーション（格子サイズ 16^4 ）を高密度領域まで実行し、図 1 の予想図のうち、ゼロ密度で非閉じ込めが起こる温度を T_d とすると、温度が約 $T_d/2$ で一定のラインに沿った相構造を調べることから始めた。特に「高密度になると低温でも閉じ込めのない相が現れるか?」「超流動的な相でインスタントン電荷等のトポロジカルな量は存在するか?」など、非摂動的な振る舞いを第一原理計算により調べた。これまでに有効模型の研究から (Rapp et al., 1998), インスタントンが QGP 相との間の相転移温度や質量ギャップに大きな影響を与えることが示唆されており、この研究は中性子星の内部構造の理解にも重要となりうる。

低温のシミュレーションは非常に計算コストが高く、決定的な結果を得るのに必要な統計数の配位データを貯めるには 2 年間ほど必要となる。今回、シミュレーションを実行する上で有効なパラメータサーチとコードのチューニングを行いつつ、相図に関する予備的な知見を得た。具体的には、一組の格子結合定数 (β) とクォーク質量パラメータ (κ) の値を用いて、温度が約 $T_d/2$ の場合において数点のクォーク化学ポテンシャル (μ) を導入したモンテカルロ計算を実行し、ゲージ配位を生成した。 μ が大きい領域では、一つの μ に対してダイクォーク源 (j) の大きさを変化させながら計算した。その予備的結果を、図 2 に示す。観測量としては、閉じ込めを特徴づけるポリヤコフープ、超流動性を特徴づけるダイクォーク凝縮をとった。ダイクォーク凝縮の値は j の値に強く依存する。そこで、再重み付け法を用いて小さい j に対

するダイクォーク凝縮の値を計算した。図 2 では、 $j=0.001-0.04$ にとった。

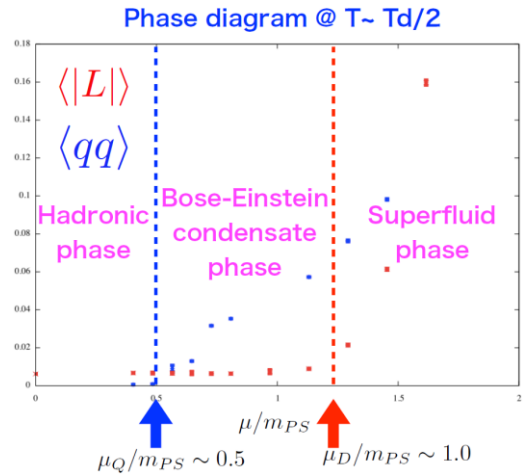


図 2：低温 2 カラー QCD の有限密度相図の予備的結果。赤はポリヤコフープ、青はダイクォーク凝縮、 m_{PS} は擬スカラー中間子の質量。

図 2 においては、ダイクォーク凝縮がゼロ近傍から有意に大きくなる密度（対応する化学ポテンシャルは μ_Q ）、ポリヤコフープがゼロ近傍から有意に大きくなる密度（対応する化学ポテンシャルは μ_D ）が描かれており、これらの密度を境界として現れる 3 つの領域はそれぞれ、図 1 中にあるハドロン相、BEC 相、超流動相と同定することができる（ただし、後期には再考した）。特に μ_Q を境とする相転移は明確なものである。これは、低密度側で可能であったダイクォーク源なしのモンテカルロ計算が μ_Q をこえると破たんすることとも無矛盾である。

それぞれの相の性質を調べるのに、まずクォーク数密度を測定した。その結果、BEC 相および超流動相においてはクォーク数密度が生じ、その値は、超流動相において、理想フェルミ気体の場合に近い値となることが示された。これは、弱結合 BCS 理論から期待される振る舞いであり、相図に現れた「超流動相」はまさに BCS 相というにふさわしい状態にあることがわかった。

次に、グラディエントフロー法によりインスタントン電荷を測定し、特に高密度領域で非自明な値を取りうるかを調べた。その予備的結果を図3に示す。

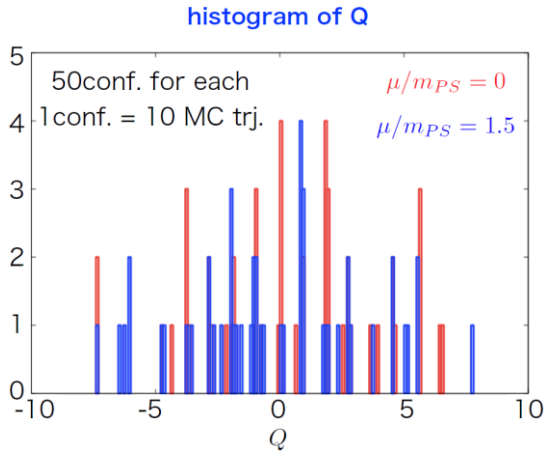


図3：低温2カラーQCDのトポロジカル電荷分布の予備的結果。赤はゼロ密度（ハドロン相）、青は超流動相での分布。

大変興味深いことに、トポロジカル電荷分布の幅（トポロジカル感受率）、すなわちインスタントンの密度は、ハドロン相でも超流動相でも統計誤差の範囲で一致する。この振る舞いはこれまで知られておらず、ダイクォークギャップの大きさに影響するインスタントンの振る舞いについて新しい知見を与えた。格子結合定数（温度）を変えても同様の傾向が現れるか否か、確認する必要がある。

●学術的成果（今年度後期）

今年度後期においては、まず相図の見直しを行った。一つには、温度スケールを与えるのに前期に用いた T_d のかわりに、ゼロ化学ポテンシャルにおけるカイラル相転移温度 T_c を用いる点、もう一つは、図1の超流動相についての再整理を行う点である。

T_c 決定の予備的結果を図4に示す。カイラル感受率のピークをもつ β の値（ $\beta=0.9$, $N_t=10$ ）が T_c に対応する。この温度スケール

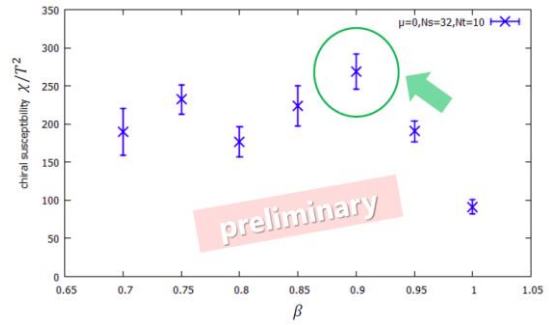


図4：カイラル感受率の β 依存性の予備的結果。

の決定法は T_d より明瞭な定義を与える。さらにグラディエントフロー法を用いて、 β と格子間隔の関係を与える「スケール設定関数」を導出し、格子サイズ 16^4 、 $\beta=0.8$ は $0.43T_c$ に相当することを見出した（ただし、まだスケール設定が完全には終わっていないため温度の数値は暫定的である）。

次にもう一つの相図について、図1では非閉じ込めの場合のみを想定していた「超流動相」について大幅な見直しを行った。超流動相の定義は、ダイクォーク凝縮が有限値をもつ場合とし、BEC相を含めて超流動相と再定義した。具体的には、(1)QGP相、(2)ハドロン相は図1と全く同様であるが、それ以外の部分を以下のように定義した。

(3)超流動相（ダイクォーク凝縮あり）

(3-1) BEC相（図1と同様）

(3-2) BCS相（閉じ込め、フェルミ面出現）

(3-3) BCS相（非閉じ込め、フェルミ面出現）

これらの相の温度・密度面での位置関係は、本研究の結果（後述）から図5のようであると予想できる。

この再定義に基づき、後期は図2の相図に関するデータを増やし、その結果を図6に示した。まず、ダイクォーク凝縮(青)に注目すると、計算不安定性が現れる $\mu/m_{PS} \sim 0.5$ 付近からダイクォーク凝縮の真空期待値がゼロではなくなり、超流動性が現れることはわかっていたが、データのパラメータ数・統計数を増やし、この臨界点付近のスケール

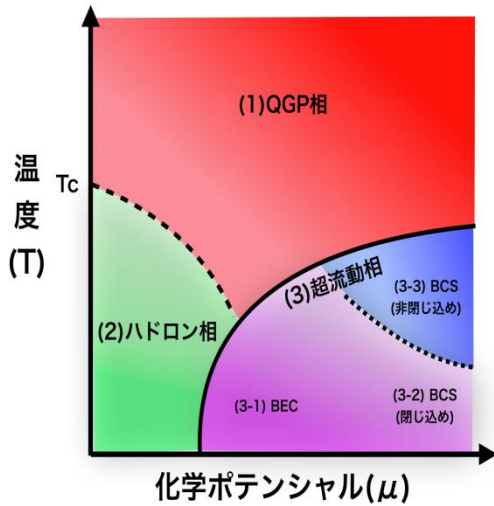


図5：有限温度・密度2カラーQCDの相構造予想図（図1の改訂版）。

則を調べた。その結果、カイラル摂動論とよばれる有効理論の予測と無矛盾であることもわかった。

さらに、ポリヤコフープ(赤)は、非常に高密度領域になるとその値がゼロからずれ、一見「非閉じ込め」となることがわかっていて、新たにポリヤコフープの感受率を調べると $\mu/m_{PS}=1.45$ 付近でピークをもつことがわかった。一方で、このような高密度領域でダイクォーク凝縮(青)の振る舞いを、 $j \rightarrow 0$ の極限をとって調べたところ、ポリヤコフープ感受率のピークより若干低密度の $\mu/m_{PS}=1.29$ 付近でピークをもち、より高密度領域では値が小さくなることがわかった。このダイクォーク凝縮の振る舞いは、格子単位で記述した化学ポテンシャルが格子間隔と同じくらいになる ($a\mu \sim 1$) と、クォークのプロパゲータの中で化学ポテンシャル項が支配的になり、クォークが重くなって動けなくなる状況になることによるアーティファクトと考えられる。したがって、図2において予備的に「超流動相」と同定していた領域のうち、 $\mu/m_{PS}=1.29$ をこえた領域については「アーティファクト相」と同定するのが妥当であり、より低密度側はクォーク数密度の振

る舞いからBCS相(ただし当初想定していた非閉じ込めの状態ではなく、あくまで閉じ込められた状態)と同定するのが妥当であることがわかった。

なお、図6の超流動相において、BEC相・BCS相間の変化は相転移ではなくクロスオーバーであるため、両相を分ける密度は一意的には決まらないが、目安を与えることは可能である。例えば、クォーク数密度がBEC相では理想フェルミ気体の値より有意に下回るが、 $\mu/m_{PS}=0.73$ 付近で理想気体の振る舞いにほぼ一致しはじめることに着目することにより、目安として $\mu/m_{PS}=0.73$ が「BEC・BCSの相転移点」と決めておくのは一つの有益な方法である。

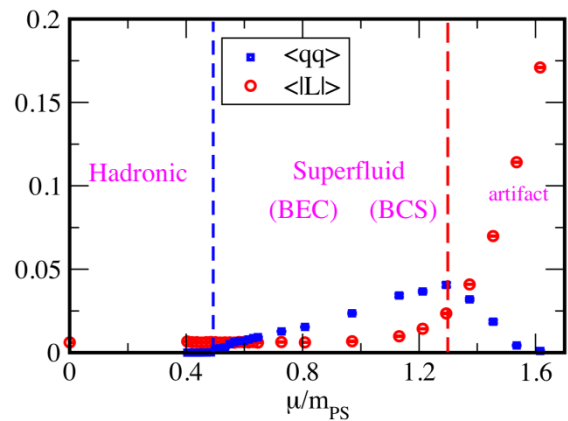


図6：低温2カラーQCDの有限密度相図（図2の改訂版）。温度は $T=0.43T_c$ 。

後期の大きな成果としてもう一つ挙げられるのは、トポロジカル感受率の密度・温度依存性である。まず、 $T=0.43T_c$ において前期に得られた図3より詳細な密度依存性を図7に示す。この図から、トポロジカル感受率はハドロン・BEC・BCSのいずれの相でも誤差の範囲でほぼ一定であることがわかる。

この振る舞いがより高温でも見られるかを確認するべく、図8に、格子サイズ $32^3 \times 8$ で新たに測定した結果を示す。これは、暫定的には $T=0.87T_c$ に相当する。このときポリ

ヤコフープの値が大きくなるにつれて感受率が小さくなるという結果が得られた。この $T=0.87T_c$ で有限密度領域の相構造を調べると、超流動性の秩序変数であるダイクォーク凝縮がどの密度領域でもゼロとなり、高密度領域において、ハドロン相から QGP 相へ転移していることがわかった。つまり、トポロジカル感受率の密度依存性は、たとえ T_c より低い温度であっても、その密度領域に現れる相構造に強く依存しているという知見を得た。

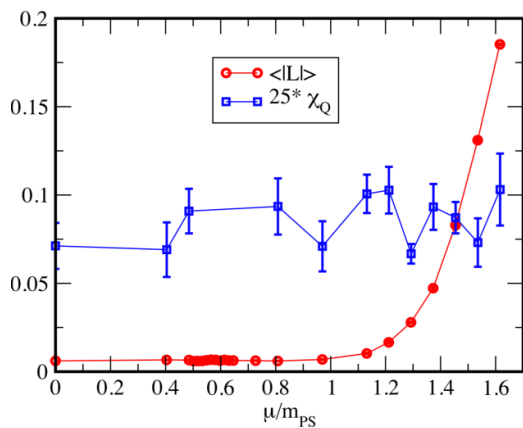


図 7 : $T=0.43T_c$ でのポリヤコフープ(赤)とトポロジカル感受率(青)の密度依存性。

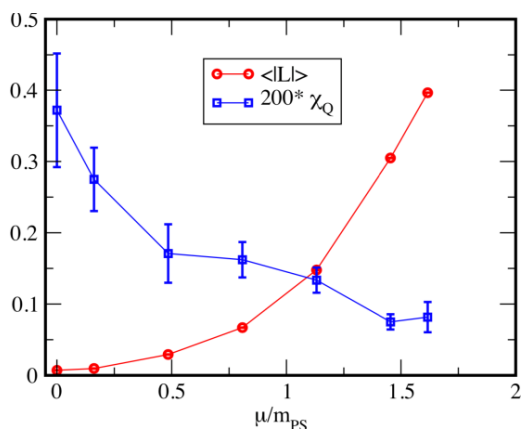


図 8 : $T=0.87T_c$ でのポリヤコフープ(赤)とトポロジカル感受率(青)の密度依存性。

●計算コードの改良

今年度前期は、有限密度におけるダイクォーク

ク源入りの配位生成コードの改良を行った。具体的には、ダイクォーク源を入れた場合の既存のハイブリッドモンテカルロコードを、独自に開発したラショナルハイブリッドモンテカルロ法に基づくコードに改良した。

図 9 に示すように、 μ_Q をこえた密度領域では、ダイクォーク源のないハイブリッドモンテカルロコードは小さな MC ステップ幅でも生成できなかったが、ラショナルハイブリッドモンテカルロ法を用いることにより、配位生成が実行可能となった。

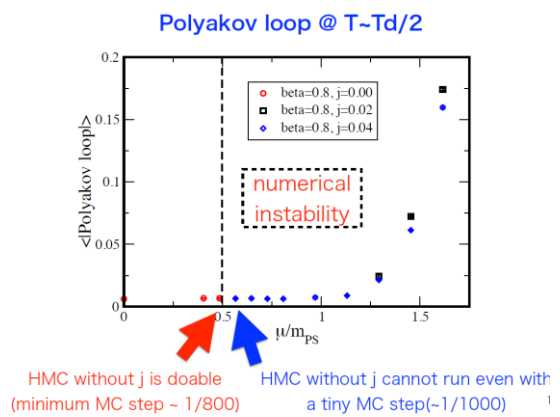


図 9 : ポリヤコフープの密度依存性。赤はダイクォーク源なし、青・黒はダイクォーク源がある作用を用いた配位生成の結果。

さらに、グラディエントフロー法のチューニングについては、大阪大学サイバーメディアセンターの GPU チャレンジ制度を活用した。グラディエントフロー法は、トポロジカル電荷分布の測定に用いた。これは今後の課題であるエネルギー運動量テンソル(熱力学量や輸送係数)の測定にも役立つ。今回のチューニングでは、OpenACC を使用して Fortran で書かれたコードにディレクティブコマンドを挿入することにより GPU で動くようにしていただき、結果として、SX-ACE と比較して、約 100 倍スピードアップすることがわかった(詳細は表 1 のとおり)。

	SX-ACE (元コード)	OCTOPUS GPU ノード群 (チューニング後)
Nmdc=100	3316 秒	37.11 秒
Nmdc=10	335 秒	4.89 秒

表 1 : チューニング前後の計算時間の比較。

コマンド挿入ではなく, CUDA でコーディングする方法を用いれば, さらに高速化できる可能性がある。

今年度後期においては, ラショナルハイブリッドモンテカルロ法のコードのチューニングを, 大阪大学サイバーメディアセンターのチューニング支援に依頼中である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

●スケール設定 (論文執筆中)

いろいろな密度・温度で 2 カラー QCD の相図を明らかにするべく, 物理量の温度依存性や密度依存性を調べる際には, つねに実行中の格子計算における「理論の赤外 (長波長) 領域のスケールが何か」ということに注意しなければならない。今回の格子シミュレーションにおいては,

- (1) クォークの質量
- (2) 温度
- (3) クォーク化学ポテンシャル
- (4) 閉じ込めスケール (Λ_{QCD})
- (5) 格子の大きさ

の 5 つのスケールが存在しており, (4) 以外はシミュレーション実行時に指定するパラメータにより調整できる。そのため, これらの関係に留意し, 物理的に意味のあるパラメータ値を取る必要がある。

ゼロ化学ポテンシャル中の計算 ($\beta=0.50, 0.60, 0.70, 0.75, 0.80, 0.85, 0.90, 0.95, 1.00$ に対しては格子サイズ $16^3 \times 32$, 統計数約 3000 HMC trj.; $\beta=1.05, 1.10$ に対して

は格子サイズ $24^3 \times 48$, 統計数 4000–6000 HMC trj.) を行い, 格子上のパラメータと物理的な格子間隔やクォーク質量との対応をつけ, 格子の大きさと温度の対応, 裸の質量と繰り込んだ質量の対応を得た。予備的結果は昨年度の JHPCN 萌芽型共同研究課題中で得られ, 今年度はさらに精度を高めて最終的な結果を得つつ, 成果を論文にまとめているところである。

スケール設定についての自己評価としては, 当初目標の約 8 割を達成したと考えている。 β と格子間隔の関係, T_c の最終決定が課題として残っている。

●有限密度・低温 2 カラー QCD (論文執筆中)
前章で述べた相図やインスタントン電荷 (格子サイズ $16^4, 32^3 \times 8$ で測定) に関する成果を論文にまとめているところである。すでに, ジョブの実行・解析が終了しているため, 自己評価としては, 当初目標の約 9 割を達成したと考えている。

●計算時間の詳細

今年度に入り 6 ヶ月経過した時点での使用状況 (10 月 1 日現在) をまとめる。利用計算施設ごとに配分いただいたノード時間数と, 実際に使用したノード時間数の割合は, 以下の通りである。

京大計算機資源

Cray XC40 通年 (タイプ A1) :

配分 (138,240 ノード時間積) のうち
46.7% 使用。

Cray XC40 集中 (タイプ A) :

配分 (43,008 ノード時間積) のうち
45.3% 使用。

阪大計算機資源

SX-ACE :

配分 (34,200 ノード時間積) のうち

51.1%使用。

OCTOPUS・汎用CPUノード：

配分(100,961ノード時間積)のうち
27.1%使用。

今年度後期で、残りの計算資源を使い切った。

●今後の展望

温度が $0.43T_c$ の場合に描かれた2カラーQCDの相図を高温領域に拡張する。そのためにまず、ダイクォーク凝縮が消失する温度を化学ポテンシャルの関数として求める。超流動相においては、この温度は超流動転移温度とみなすことができるが、さらにBCS理論に従えば、ゼロ温度でのダイクォークのギャップエネルギーを見積もることができる。

また、図6、図7で得られた結果の「さらに低温」または「有限体積効果」を調べる。そのためにまず、大きな格子体積(32^4)のもとで配位データを生成する。生成した配位データは来年度以降、「ハドロンの質量スペクトルの密度依存性」、「ハドロロン間相互作用」の解析に使用する予定である。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

なし。

(2) 国際会議プロシーディングス

E. Itou, K. Iida, and T.-G. Lee, "Topology of two-color QCD at low temperature and high density," [Proceedings of Science \(The 36th Annual International Symposium on Lattice Field Theory\)](#), PoS(LATTICE2018)168, 7 pp.

(3) 国際会議発表

E. Itou (口頭発表), "Phase diagram of

two-color QCD at finite temperature and density using exact algorithm", Long-term workshop "New Frontiers in QCD 2018 - Confinement, Phase Transition, Hadrons, and Hadron Interactions - ", Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University (Kyoto, Japan), June 5, 2018.

E. Itou (口頭発表), K. Iida, and T.-G. Lee, "Topology of two-color QCD at low temperature and high density", The 36th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2018), Michigan State University (East Lansing, MI, USA), July 26, 2018.

(4) 国内会議発表

伊藤悦子 (ポスター発表) : 「高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と有限密度2カラーQCDの相図の決定」, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)第10回シンポジウム, THE GRAND HALL (品川), 2018年7月12日.

伊藤悦子 (ポスター発表) : 「有限密度系におけるトポロジー」, 基研研究会「素粒子物理学の進展2018」, 京都大学 基礎物理学研究所 (京都), 2018年8月9日.

伊藤悦子 (口頭発表), 飯田圭, 李東奎 : 「低温高密度領域における2カラーQCDの相構造」, 日本物理学会2018年秋季大会, 信州大学 (松本), 2018年9月16日.

伊藤悦子 (口頭発表) : 「有限温度・有限密度2カラーQCDの相図と超流動性の解明」, 平成30年度大阪大学サイバーメディアセンター公募型利用制度成果報告会, 大阪大学サイバーメディアセンター (吹田), 2019年3月5日.

李東奎 (口頭発表), 伊藤悦子, 飯田圭, :「2
カラーQCD のカイラル相転移温度と低温高
密度領域の相図の決定」, 日本物理学会第 74
回年次大会, 九州大学 (伊都), 2019 年 3 月
15 日。

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

なし。