

jh180053-NAJ

ドメインウォールフェルミオンを用いた格子 QCD による中間子質量生成機構の研究

関口 宗男 (国士舘大学)

概要 強い相互作用の基本原理解である量子色力学(QCD)を用いて、カイラル相転移付近での中間子の構造及び質量の変化を研究することにより物質の質量の起源を明らかにすることを目的としている。大阪大学サイバーメディアセンターのスーパーコンピュータ SX-ACE で動作する QCD のカイラル相転移を数値シミュレーションするプログラムの開発を進めている。今年度は、ゼロ温度のシミュレーションによりカイラル対称性に関係する $a_1(1260)$ 中間子の構造を確定した。この研究を基盤として、QCD 真空の相転移のメカニズムを明らかにするための準備的な数値シミュレーションを実施した。カイラル相転移に関係した π 中間子、 ρ 中間子、バレンス σ 中間子の質量の変化を捉えることができた。現行のコードを軽いクォーク質量を計算できるように改良し、さらに動的クォークによるシミュレーション・コードの開発をすれば QCD のカイラル相転移の解明に近づくことができる。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

大阪大学

(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

- ・ 関口宗男 (国士舘大学) 代表
研究統括・理論的考察・データの分析
- ・ 若山将征 (大阪大学) 副代表
プログラム開発・演算の実行。データ解析
- ・ 国広悌二 (京都大学)
理論的考察
- ・ 室谷心 (松本大学)
演算の実行・データ分析
- ・ 中村純 (大阪大学)
アルゴリズム・プログラム開発
- ・ 野中千穂 (名古屋大学)
演算の実行・データ分析
- ・ 村上祐子 (国士舘大学)
アルゴリズム・プログラム開発

・ 和田浩明 (国士舘大学)

プログラム開発・演算の実行

2. 研究の目的と意義

物質の質量生成メカニズムを解明するために強い相互作用の基本原理解である量子色力学(QCD)を用いて、カイラル相転移付近での中間子の構造及び質量の変化を研究し、質量の起源を明らかにすることを目的とする。カイラル対称性が自発的に破れることにより QCD 真空の相転移が起こる。このメカニズムにより物質(核子)の質量の 98%が生み出されると考えられている。この相転移はビッグバン直後の超高温の状態から宇宙の温度が下がる時に起こり、その後現在のような宇宙が生成されたと考えられている。有限温度では、カイラル対称性の自発的破れは部分的に回復し、相転移は臨界温度で起こると期待される。図 1 のように、QCD に基づく有効理論によると臨界温度以上ではカイラル対称性において対を成す中間子(カイラル・パートナー： π 中間子と σ 中間子及び ρ 中間子と a_1 中間子)の質量は縮退すると予想されており [1]、QCD に基づく有限温度のシミュレー

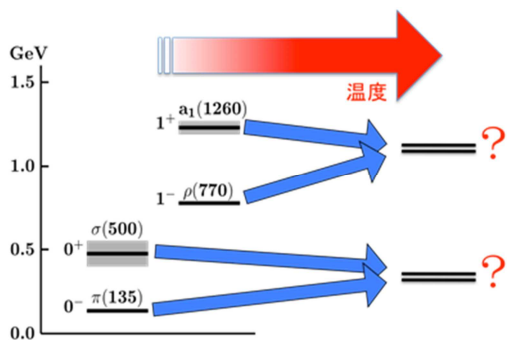


図 1 各中間子の質量の温度依存性(予想図)

シオンによってカイラル相転移が起こる臨界温度付近でのカイラル・パートナーの質量変化を調べることは QCD 真空のカイラル相転移を理解する上で重要な課題である。これらの研究では、QCD を低エネルギー領域で解法する必要があるが、強い相互作用の強結合性のために摂動論を使用することができない。そのため離散化した時空間上にクォーク及びグルーオンを定義した格子 QCD による非摂動論的計算を実行することになる。この方法による計算はスーパーコンピュータによる大規模な数値シミュレーションが必要である。

最終的には現実的なクォーク質量を用いて有限温度におけるカイラル相転移付近での中間子の構造と質量の変化を数値シミュレーションすることを目標としている。この目標を達成するためにカイラル対称性を近似的に持ち現実に近い質量のクォークによるループ・グラフを取り入れた計算(ダイナミカル・クォーク)を高速に処理するコードを開発することが重要課題である。現在のスーパーコンピュータの能力ではこれらの要求すべてを同時に達成するのは難しく、現実的なクォーク質量での計算を可能にするためのコードの改良も重要な研究課題である。

有限温度における QCD の臨界温度付近での現象は次世代の高エネルギー原子核実験によるクォーク・グルーオン・プラズマ生成により明らかにされることが期待されてい

る。2021 年以降の CERN における高輝度化された LHC 実験や米国 LBL における sPHENIX 実験により検証される可能性がある。

またカイラル・パートナーである 4 つの中間子のうち σ 中間子と a_1 中間子はその構成等がゼロ温度でも明確でない状況であり、我々の研究の過程で、この中間子に関してゼロ温度の構造及び質量を明らかにすることになる。また、中間子に関して正確なデータが得られているのはゼロ温度での実験であり、開発したコードによるゼロ温度でのシミュレーションが実験データを再現しているかどうかが開発したコードの信頼性のひとつの指標となる。

本年度は、次の 3 点を目標として研究を遂行している。第 1 に、昨年度及び今年度の大阪大学サイバーメディアセンターの SX-ACE を用いた数値シミュレーションにより得られるゼロ温度での a_1 中間子の構造及び質量に関しての結果を論文にまとめる。第 2 に有限温度における重いクォークでのクエンチ近似による数値シミュレーションを実施し、カイラル相転移付近でのカイラル・パートナーに属する中間子の質量の変化を求める。第 3 に現実的なクォーク質量でのシミュレーションを目指して、SX-ACE 上でコードの開発を行う。

QCD 真空の相転移の研究は質量の起源を解き明かすという自然科学における学術的根本的な課題に答えを与えるという意義がある。また、最終的に予定している計算は、スーパーコンピュータの性能限界への挑戦という計算科学上の意義もある。

[1] T.Hatsuda and T. Kunihiro, Phys. Rept 247 (1994) 221.

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

今回の有限温度での研究では、格子上で近似的にカイラル対称性を持つドメインウォールフェルミオン (DWF) 作用のひとつであ

る Truncated overlap フェルミオン (TOF) 作用を用いて、中間子の相関関数の計算を行なった。TOF 作用はカイラル対称性を尊重しているという点でウィルソンフェルミオン作用よりも優れているが、欠点は多大な計算機資源を要することである。相関関数の計算では、大規模線形方程式を解く部分が最も時間がかかる。時空間の格子サイズを $16 \times 16 \times 16 \times 16$ とすると、ウィルソン作用の場合、 $(3 \times 4 \times 16 \times 16 \times 16 \times 16)$ 次の正方行列に対する線形方程式を解く必要がある。DWF 作用はウィルソン作用を構成要素に 5 次元方向に拡張した形をしており、さらに逆行列が入れ子構造になっている。そのため、5 次元方向の格子サイズを N_5 とすると、 $(3 \times 4 \times 16 \times 16 \times 16 \times N_5)$ 次の正方行列に対する線形方程式を解いた後に、さらにもう一度、同じサイズの方程式を解く必要がある。今回の計算では、 $N_5=32$ としたので、およそ 2500 万次の正方行列となる。このため、DWF 作用が提唱された後も、実際の数値計算が難しかった。このコードはベクトル化に向いているため SX-ACE でのコード開発及びシミュレーションの実行が適していると判断している。また、参加研究者は大阪大学の SX-ACE (SX-8 及び SX-9 等も含む) でのコードの開発及びシミュレーションの経験を有することも大阪大学を拠点とすることが最適であると判断した理由である。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

本研究は昨年度萌芽研究課題番号 EX17706 として実施したゼロ温度用に開発した TOF 作用を用いた格子 QCD コードとそれによるシミュレーションを発展させたものである。我々は、公開されている格子 QCD 用の汎用コードである Lattice Tool Kit Fortran 90 (LTKf90) を元に TOF 作用のコード開発を行なった。大規模線形方程式を解く部分は双共役勾配法 (Bi-CG 法) を用いた。そして、ベクトル型計算機である SX-ACE に合わせ、プログラム

全体のチューニングを行い、ベクトル化率 99.8% を達成した。さらに、「2017 年度第 1 回性能チューニングプログラム」に申請し、大阪大学サイバーメディアセンターの協力を得ることで、約 1.2 倍の高速化の実現に至った。

本研究コード作成に使用している格子 QCD 用の汎用公開コードである LTKf90 の開発者や計算科学に詳しい研究者、有限温度 QCD を専門とする研究者が集い、参加の研究者のほとんどが SX-ACE でのコード開発及びシミュレーションの経験を持ち、かつ拠点である大阪大学サイバーメディアセンターの協力を得ることで初めて実現ができた。その点で当拠点公募型共同研究として実施した意義は大きい。

昨年度の成果は、TOF 作用を使用することにより近似的にカイラル対称性を持つ枠組みをコードに組み入れたことにある。TOP 作用はウィルソンフェルミオン作用からのコード移行が簡単にできるため SX-ACE でのコード開発の時間を大幅に退縮することができた。ゼロ温度で π 中間子、 ρ 中間子のシミュレーションを実施して、先行研究を再現しているためコードが信頼できることを確認した (表 1)。

表 1 π 中間子の質量 (m_π) と ρ 中間子の質量 (m_ρ) の比の比較 (m_{fa} はクォーク質量)

	m_{fa}	m_π / m_ρ
Our results	0.06	0.652 (3)
Blum et al. [2]	0.06	0.65 (2)
Our results	0.04	0.584 (2)
Blum et al. [2]	0.04	0.58 (3)

さらに最近ゼロ温度の実験で同じチャンネルに過剰に共鳴状態が存在している a_1 中間子の質量の数値シミュレーションを実施した。 a_1 中間子に関してはシミュレーションが今年度までかかっているため、今年度の成

果として報告する。我々の研究ではゼロ温度の計算結果が現在の素粒子実験で観測されている中間子の物理的な質量を意味する。また、有限温度でのシミュレーション結果は现阶段では比較する実験データはないが、今後の高エネルギー原子核実験での測定される可能性が高い。

[2] T. Blum et al., Phys. Rev. D69 (2004) 074502.

5. 今年度の研究成果の詳細

今年度前半は、格子上で近似的にカイラル対称性を持つ TOF 作用を採用した格子 QCD シミュレーションを実施した。それまで研究グループで採用してきたウィルソンフェルミオン作用はカイラル対称性を顕に破っており、その欠点を解消するため、今回の研究ではカイラル対称性を持つフェルミオンで構成される TOF 作用によるプログラムを開発した。第 1 段階としてゼロ温度における π 中間子及び ρ 中間子の質量が再現できることをシミュレーションして昨年度確認した。さらに昨年度は、このコードを用いて、 ρ 中間子のカイラル・パートナーである a_1 中間子 (アイソスピン 1 の軸性ベクトル中間子) のシミュレーションをして、その構成と質量を検討した。さらに今年度は物理的な結果を確定するためシミュレーションを継続して

実施して、全データを解析した。

カイラル対称性の自発的な破れに関係している中間子のなかで a_1 中間子は、その構成や質量が確定していない中間子である。クォーク模型で説明できるよりも多くの状態が実験により確認されている。少なくとも $a_1(1260)$ 、 $a_1(1420)$ 、 $a_1(1640)$ の状態が実験的に存在している [4]。これらが如何なる状態かを確定することはハドロン分光学の重要な課題である。有限温度の物理を考える上でも a_1 中間子として、どのようなオペレーターが適当なのかを決定するためにゼロ温度での a_1 中間子の構成を明確にすることは意

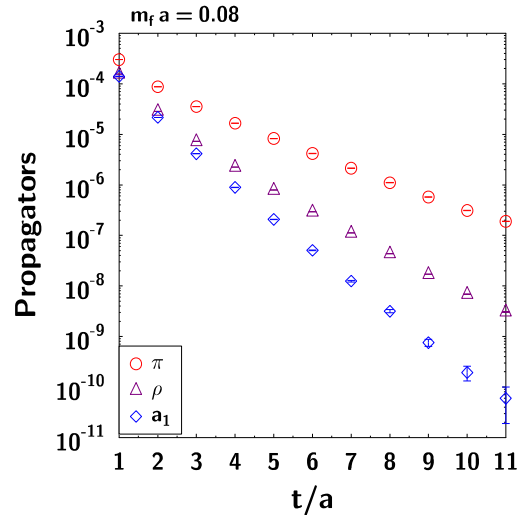


図 2 中間子相関関数の時間依存性

義がある。

今回のシミュレーションでは、時間の格子サイズを 24、空間の格子サイズを $8 \times 8 \times 8$ とした。カイラル対称性を近似的に実現するための 5 次元目の格子サイズを 32 とし、5 次元の質量を $m_5=1.65$ とした。ゲージ結合定数を指定する β を 5.7 とした。 a_1 中間子は u クォークと d クォークから構成される 2 体のオペレーターで記述した。3 種類のクォーク質量 m_f として 3 種の値でシミュレーションを実施した。格子サイズは $a=0.190(2)$ fm、クォーク質量は、 $m_f a=0.08, 0.06, 0.04$ とした。クォーク質量それぞれにつきゲージ配位数は、それぞれ 3000、3000、7964 を使用した。これらの結果が、図 2、図 3、図 4 である。

今回のシミュレーションはオペレーターを 2 体に限り、かつクエンチ近似であることから、 a_1 中間子が u クォークと d クォークの 2 体から構成されるときに実験を再現できるかを検討することが可能である。クォーク質量としてはやや重いため粗い近似とも言えるが、 a_1 中間子が π ρ 中間子に崩壊するチャンネルが開く直前まで高精度のシミュレーションすることを目指した。崩壊に関しては、格子 QCD による標準的な計算手法が確立していないので、信頼できる方法による確実なアプローチによってシミュレーションを実施

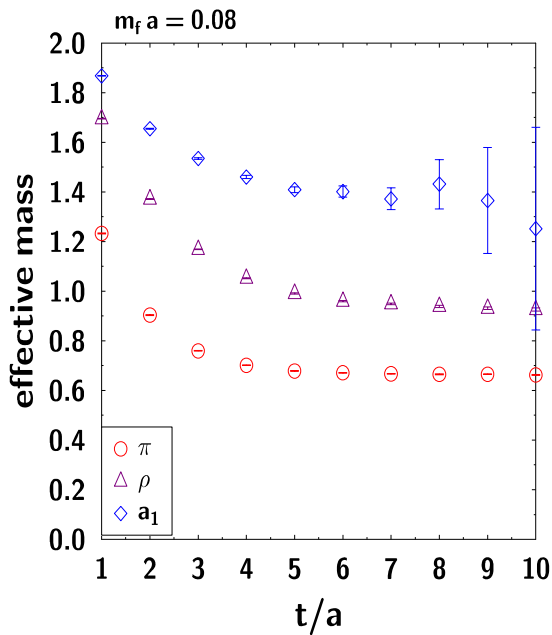


図3 中間子有効質量の時間依存性

したことになる。

我々の結果 (表 2) は $a_1(1260)$ の中間子の実験値を再現している。このことから $a_1(1260)$ は u クォークと d クォークによるクォークと反クォークの結合状態であると確定できる。

さらにクォーク模型の結果を使うと、 $a_1(1420)$ 中間子はクォークと反クォークの結合状態では説明できないエキゾチックな状態となり、 $a_1(1640)$ は a_1 中間子の第 1 励起状態という結論が得られた。 $a_1(1640)$ については、現在の我々のデータを試験的に解析すると a_1 中間子の第 1 励起状態が存在することを示唆する結果が得られている。この点に関しては来年度にさらにデータを蓄積して、 a_1 中間子に関する総合的な研究として論文にまとめる予定である。 $a_1(1260)$ 中間子に関しての結果については、短い論文にまとめて現在投稿中[3]である。

表 2 a_1 中間子の質量

	Our result	実験値[4]
質量	1272 (45) MeV	1230 (40) MeV

今年度後半は TOF 作用を用いた有限温度の

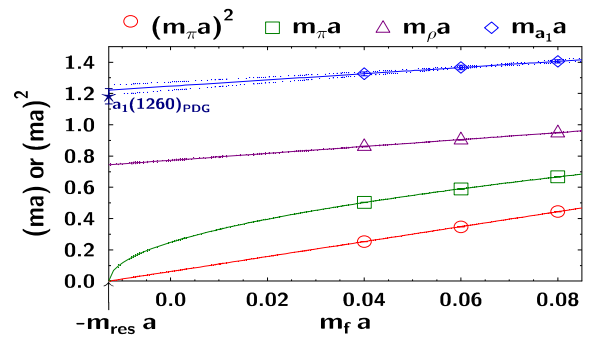


図4 π 、 ρ 、 a_1 中間子質量のクォーク質量依存性

シミュレーションを実施した。これは最終的な目標である物質の質量の起源と解き明かすためへの準備的なシミュレーションである。我々のシミュレーションを実現するためには、コードに 2 つの特性を持たせる必要がある。第 1 は格子カイラル対称性を持つクォーク作用のコードの作成で、これは昨年度に完成し、大阪大学サイバーメディアセンターの協力によりチューニングを実施し最適化された。第 2 としては、軽いクォーク質量を計算できるように改良することである。この点に関しては今年度はコードの完成には至らなかった。そのため今年度の有限温度の計算は現実のクォーク質量よりも重いクォークによるテスト計算となった。そのため π 中間子も現実的な質量よりも重い計算になっている。今回のシミュレーションでは、クエンチ近似を使用しているが、最終的にはクォークのループを含む動的クォークによるシミュレーション (ダイナミカル・クォークによるフル QCD のシミュレーション) を実施する計画である。そのため今回の σ 中間子はグラフの 1 部のみを取り上げた計算になっている。 σ 中間子はダイアグラムで言うと二つの部分からなり、一つは結合ダイアグラム、もう一つは非結合ダイアグラムと呼ばれている。非結合ダイアグラムはクォークのループの寄与が主になるためクエンチ近似では正しく評価できない。これらのグラフはどちら

も真空と同じ量子数を持つためシグナルを真空と分離する必要があり、非常に多くの統計量が必要となる。結合ダイアグラムのみを取り上げた場合をバレンス σ 中間子と呼んでいる。今回のシミュレーションに関してはクエンチ近似を用いているので非結合グラフは正しく計算できない。そのためバレンス σ 中間子を計算となっている。その他の π 中間子、 ρ 中間子は結合ダイアグラムだけで構成されているので、このような問題は生じない。

今回ゲージ場としては Iwasaki ゲージ作用を採用、クォークには TOF 作用を採用し、時間の格子サイズを 4、空間の格子サイズに関して $16 \times 16 \times 16$ の格子を使った。カイラル対称性を格子上で近似的に成立させるために導入している 5 次元方向の格子は 32、5 次元方向の質量を $M_s=1.65$ とした。 π 中間子と ρ 中間子の質量の比が 0.80 になるところをゼロ温度として各温度での π 中間子、 ρ 中間子、バレンス σ 中間子の質量を求めた (図 5)。このシミュレーションの目的は TOF 作用のコードで有限温度でのテスト計算であり、現在のコードでどれだけの計算量になるか等をテストすることが目的であり、まだ中間子の質量は実際の値よりもかなり重い。中間子の質量はゼロ温度から臨界温度付近までは変化はあまりなく、臨界温度を超えると上昇する。その後各中間子質量は高温で同一値に近づく傾向があることが分かった。特にカイラル・パートナーである π 中間子と ρ 中間子は縮退している。このことは中間子質量が重くてもカイラル相転移に関する知見を引き出すことができた可能性がある。今回のシミュレーションでは、 a_1 中間子についても計算を実施しているが、誤差が大きかった。なぜ a_1 中間子だけがシグナルな不明瞭になったかを現在検討している。この結果は 2019 年 6 月の国際会議 Lattice2019 で発表を予定している。

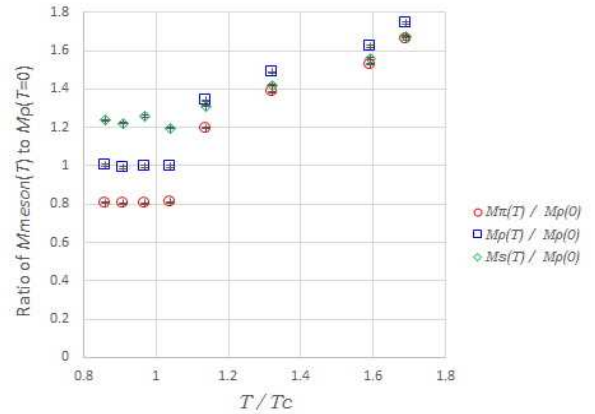


図 5 各中間子質量の温度依存性

(M_s はバレンス σ 中間子の質量を表す。格子サイズは温度に依存している。縦軸各中間子の質量と ρ 中間子のゼロ温度質量との比、横軸が温度 T と臨界温度 T_c との比、 $T_c=275\text{MeV}$ 。)

DWF 作用には種類があり、今年度のシミュレーションは昨年度 SX-ACE で開発した TOF 作用を使用した。この作用を用いたゼロ温度での研究を基盤として QCD 真空の相転移が起きることを数値実験として明らかにする準備を進めている。TOF 作用でさらに軽いクォーク質量でのシミュレーションを実施するためのコード開発を SX-ACE 上で実施した。さらに別の DWF 作用のコードをワークステーション上で開発した。このコードは、メビウス DWF 作用と Schrödinger functional (SF) スキーム [5] を用いたコードで、今年度 SX-ACE に移植したが、テスト計算には至らなかった。

[3] Y. Murakami, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi, M. Wakayama, H. Wada, “Nature of a_1 meson in lattice quantum chromodynamics studied using chiral fermions” The European Physical Journal Plus (投稿中).

[4] Particle data group, Phys. Rev. D98 (2018) 030001.

[5] Y. Murakami and K. Ishikawa, Inter. J.

Mod. Phys A33 (2018) 1850012.

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

昨年度のゼロ温度での数値シミュレーションの結果を高精度にするために研究の進捗が少し遅れたが、実施計画において予定していた有限温度でのシミュレーションは年度末までに終了することができた。1 月になってからであるが、現状の TOF 作用についてのコードをさらに高速化することについて大阪大学サイバーメディアセンターに検討をお願いした。高速化は今年度に完成することができていなかったが、次年度には活用可能となると期待している。また、我々のコードはパラメーター並列を使用しているが、次年度はよりコードの効率的な並列化に関しての検討を進める。

SX-ACE 上で、現在の数値シミュレーションよりも軽い質量のクォークが計算可能にするコードの開発を今年度末より開始した。現在使用している TOF コードは格子 QCD 汎用コード LTK90 の一部を使用している。その中に実装されているフェルミオンを計算するプログラムが計算速度を本質的に決定している。この部分にハーゼンブッシュの質量前処理法を使用することで軽いクォークでの計算を可能にする予定である。これとは別にワークステーション上でメビウス DWF 作用と SF スキームを用いたクォークを計算する別のコードが完成しているのので、これを SX-ACE 上に移植した。SX-ACE での最適化等は来年度に持ち越すことになった。SF スキームのコードの完成及び軽いクォーク質量のコード開発着手は今年度の実施計画にはなかったが、目的達成に重要な課題であるため取り組んだ。

昨年度より取り組んでいる a_1 中間子の研究については第 1 励起状態を明確に捕らえる可能性が出てきたため、さらにシミュレーションを進める予定である。格子 QCD を用いた研究で励起状態に関して実験と比較できる結

果を出しているシミュレーションはあまり例がなく、ハドロン分光学にとっても第 1 原理からのアプローチとして重要な研究テーマである。

今年度の後半から大阪大学サイバーメディアセンターの協力により大阪大学サイバーメディアセンター伊達准教授との共同研究を開始することができることになり、JHPCN として相応しい研究体制を整えることができた。このことにより、より高速なコードの作成、各計算機に対する最適化で成果を挙げるのが可能になると考えている。今後 GPU マシンでのコード開発を予定しているが、今年度参加研究者には経験を持つ者がいないために特に期待している。

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

1. Y. Murakami, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi, M. Wakayama, H. Wada, “Nature of a_1 meson in lattice quantum chromodynamics studied using chiral fermions” The European Physical Journal Plus (投稿中).

(2) 国際会議プロシーディングス

1. Y. Murakami, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi, M. Wakayama, H. Wada, “Mass of a_1 meson from lattice QCD with the truncated domain wall fermion” JPS Conference Proceedings (in press)[査読有り]

(3) 国際会議発表

1. T. Kunihiro, Y. Murakami, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi, M. Wakayama, H. Wada, “Chiral Symmetry and meson properties at finite temperature- A numerical experiment”, YKIS2018b Symposium on Recent Developments in Quark-Hadron Sciences (2018 年 6 月).
2. Y. Murakami, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, M. Sekiguchi, M. Wakayama, H. Wada, “Mass of a_1 meson from lattice QCD with the truncated

domain wall fermion”, 8th International Conference on Quarks and Nuclear Physics (2018 年 11 月).

(4) 国内会議発表

1. 若山将征、国広悌二、室谷心、村上祐子、中村純、野中千穂、関口宗男、和田浩明、
「格子 QCD によるスカラー中間子の研究」、
平成 29 年度 SX-ACE@RCNP 成果報告会、大阪大学、
2018 年 4 月 (口頭発表).

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)

1. 若山将征、「SX-ACE を用いた格子 QCD による軸性ベクトル中間子による質量計算」、
サイバーメディア HPC ジャーナル、大阪大学サイバーメディアセンター、No. 8 (2018) 51-54.