

jh190029-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。今年度得られた成果としては、ダイクォーク同士が重なり合った BCS 相においてさえ非自明なインスタントン配位 (トポロジカルな構造をもったグルーオンの配位) が生成されるという新規な性質を確認し、さらに、ハドロン相中にも有限密度の物質状態が存在することを発見した。また、カラーフラックスチューブの密度依存性に関して、予備的な成果を得るとともに、超流動密度を調べるために必要なスペクトル関数の推定方法として、近年機械学習の分野から発展してきた「スパースモデリング法」を QCD 相関関数に用いる予備的研究も行った。

### 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

#### (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，成果の発表。

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原子核のダイナミクスを記述する基本理論である。我々は、QCD の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。その際、これを可能とする計算コードの

開発を行い、それを用いて、相図の決定と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。

特に今年度は、超流動性の現れる高密度領域におけるハドロン性の性質解明に注力する。具体的には、

【目的 i】ハドロン質量の密度依存性の解明

【目的 ii】ハドロン間相互作用の密度依存性の解明と HAL QCD 法の拡張

【目的 iii】有限温度・有限密度 2 カラー QCD の相図の決定と BCS 関係式によるダイクォーク・ギャップの導出

を目標とし、ハドロン性の質量の密度変化、相互作用の密度依存性の定性的な理解を得つつ、既存の計算方法を発展させ、中性子星内部などの有限密度系で実現されている高密度領域でのハドロン性の性質に対して新しい知見を得る。

核力などの強い力が支配的な系のマイクロ

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、現実のハドロン質量の再現や、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見捨てる場合に限られている。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の物理系として存在しているにもかかわらず、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、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。

昨年度までに我々が行なった格子計算による研究や有効模型を用いた研究から、2カラーQCD では大雑把に図 1 の様な相図が描けるものと解明されつつある。

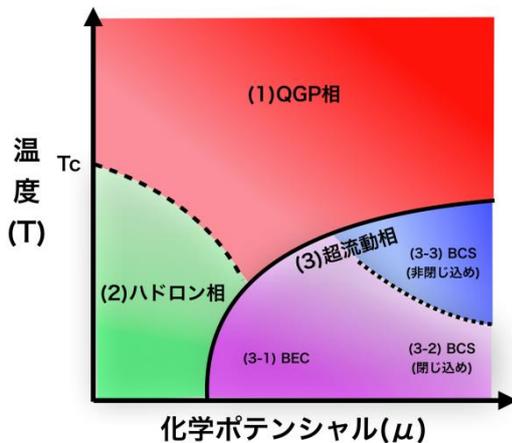


図 1：有限温度・密度 2 カラーQCD の相構造予想図。縦軸は温度，横軸はクォーク化学ポテンシャル。

- (1) クォーク・グルーオン・プラズマ (QGP) 相 (閉じ込めなし，カイラル対称性が回復，ダイクォーク凝縮もなし)
- (2) ハドロン相 (閉じ込めあり，カイラル対称性の自発的破れ，ダイクォーク凝縮なし)
- (3) 超流動相 (ダイクォーク凝縮あり)  
超流動相は，  
(3-1) 低密度領域にボーズ・アインシュタイン

凝縮 (BEC) 相

(3-2) 高密度・低温領域に BCS 相 (閉じ込めあり)

(3-3) 高密度・中間温度領域に BCS 相 (閉じ込めなし)

の 3 つの相または状態に分類されると有効模型の研究から予言されている。

しかしながら，

●それぞれの相転移の次数は 1 次なのか，2 次なのか，それともクロスオーバーでしか起こらないのか？

●有限密度領域に出現する超流動相中のクォーク・ハドロンの振る舞いはどう変化し，どう特徴付けられるか？

が未だ明らかになっていない。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事で，現実の有限温度・有限密度 QCD の定性的な理解を得るのが本研究の大きな目標である。

### 3. 当拠点公募型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，計算方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

2017 年度は、萌芽型共同研究課題に採択され、コード開発や手法の実行可能性について調べた。

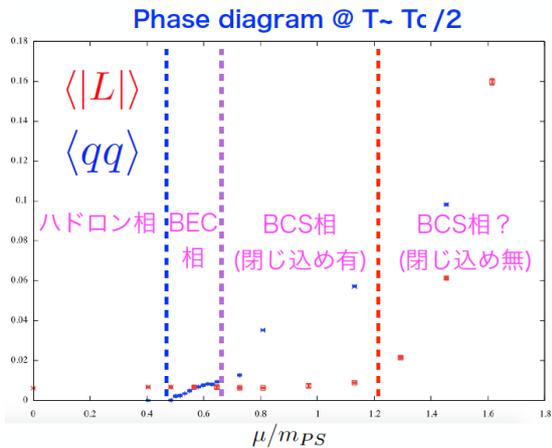


図 2：低温 2 カラー QCD の有限密度相図。  
赤はポリヤコフープ，青はダイクォーク凝縮， $m_{PS}$  は擬スカラーメソンの質量を表す。

2018 年度は、ゼロ密度での QGP/ハドロン相転移温度 ( $T_c$ ) をリファレンスとして、 $T_c/2$  の温度に対応する  $N_t=16$  ( $N_t$  は温度方向の長さ) と、 $T_c$  より少し下の温度に対応する  $N_t=8$  で実現される相の  $\mu$  依存性を調べた。この際、相図決定では、秩序変数としてポリヤコフープ、ダイクォーク凝縮、クォーク数密度を用いた。さらに、各相でのトポロジカル電荷も測定した。その結果、 $N_t=16$  の低温では、「ハドロン相」「BEC 相」「閉じ込めのある BCS 相」「閉じ込めのない BCS 相」が存在することがわかった (図 2)。(註：その後、最後の相は格子化によるアーティファクト相であることが判明し、出版済みの論文においては、その旨が反映されている。)

さらに、それより高い温度に対応する  $N_t=8$  では、「ハドロン相」と「QGP 相」のみで、高密度領域でも QGP 相となっていることがわかった。(つまり図 1 の相図の QGP/BCS 相転移は、高い  $\mu$  でも  $T_c$  より下にある。)

また、この 2 つの温度でトポロジカル電荷

の  $\mu$  依存性が全く異なることを示し、高密度領域で実現される相の違いと関係する事を明らかにした。

コード開発とチューニングに関しては、これまでに

- 配位生成に用いるモンテカルロ法の MPI コードの開発  
(3 種類： $\mu=0$ 、 $\mu \neq 0$  かつ  $j=0$ 、 $\mu \neq 0$  かつ  $j \neq 0$  ( $j$  はダイクォーク源のパラメータ))  
(いずれも最大で 2048MPI 並列まで実行可能)

- SU(2) ゲージ理論における複合粒子 (メソン) の質量スペクトルの測定コードの開発

- トポロジカル電荷の測定に用いるグラディエントフロー法のコード開発とチューニング

(GPU 用のコードとして、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、SX-ACE と比較して、約 100 倍高速化できた。)

- 秩序変数 (ポリヤコフープ、カイラル凝縮、ダイクォーク凝縮、クォーク数密度) の測定コードの開発

- ダイクォーク凝縮の測定において、ダイクォーク源のパラメータ ( $j$ ) に関する新しい再重み付け法の提案と実行

の 5 点を中心に成果をあげた。

#### 5. 今年度の研究成果の詳細

##### ●概要

昨年度は、2 つの温度で実現される相の  $\mu$  依存性を調べ、さらに、各相でのトポロジカル電荷も測定し、予備的な結果を得たが、今年度は、上で得られた結果を詳細に調べ上げて論文を出版した (7. (1) 中の学術論文)。その

結果、BCS 相では非自明なインスタントン配位が生成されるという新規な性質を確認したほか、ハドロン相中に有限密度の物質状態が存在することを発見した。

また、カラーフラックスチューブの  $\mu$  依存性に関して、予備的な成果を得た (7. (4) 中の日本物理学会発表 (2020 年 3 月 18 日))。

さらに、超流動密度を調べるために必要なスペクトル関数の推定方法として、近年機械学習の分野から発展してきた「スパースモデリング法」を QCD 相関関数に用いる予備的研究も行った (7. (4) 中の日本物理学会発表 (2020 年 3 月 19 日))。

以下、上記 3 点の各論を述べる。

●有限密度・低温 2 カラー QCD の相構造とトポロジー

昨年度得られた相図やインスタントン電荷に関する成果を論文にまとめた。その過程で、有限密度ハドロン相を新たに発見した。これは、カイラル摂動論と呼ばれる有効理論では  $\mu$  が  $m_{PS}/2$  より小さいハドロン相においてクォーク数密度がゼロと予測されているが、 $0.45T_c$  の温度における測定値を見ると、明らかにゼロではない正の値を示す  $\mu$  の領域が存在する (図 3)。これは、カイラル摂動論によればダイクォーク (ハドロン的一种) の質量が  $\mu$  が  $m_{PS}/2$  に近づくと減少するため、質量が温度と同程度になる領域でダイクォークが熱的に励起されることに起因すると考えている。この解釈を確認するためには、ダイクォークの質量を有限の  $\mu$  で測定する必要があるが、これは後述するように、今後の課題である。

この知見をもとに、図 1 にある有限温度・密度 2 カラー QCD の相構造予想図をアップデートしたものを図 4 に記す。“Hadronic matter” と記されている領域が、図 3 におけるクォーク数密度が正の値となる  $\mu$  の領域に相当する。

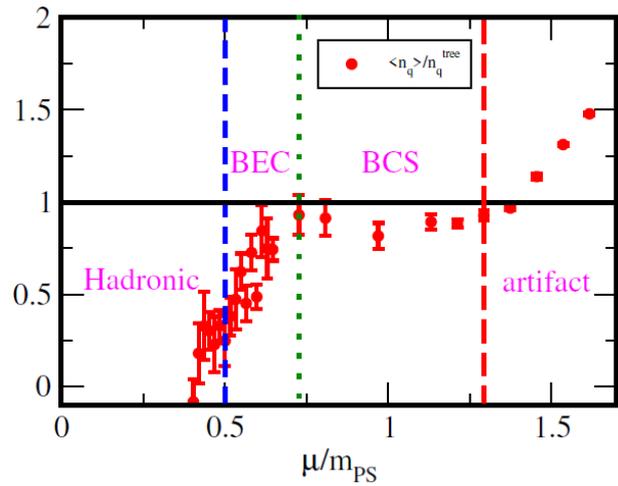


図 3:  $0.45T_c$  におけるクォーク数密度の  $\mu$  依存性。データは  $j \rightarrow 0$  の外挿値。図は、7. (1) 中の学術論文からの抜粋。

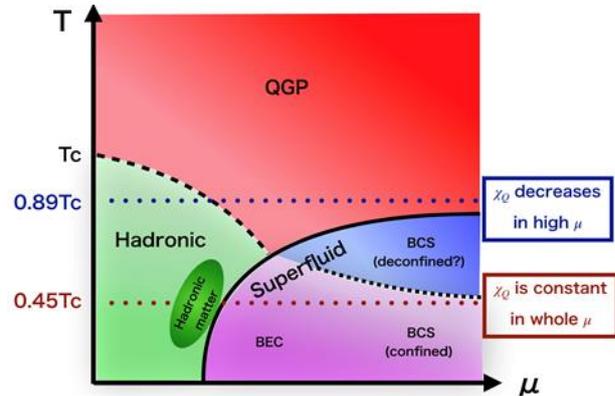


図 4: 有限温度・密度 2 カラー QCD の相構造予想図 (図 1) をアップデートしたもの。図は、7. (1) 中の学術論文からの抜粋。

さらに、図 4 に付記されているのは、昨年度の最終報告書において示したトポロジカル感受率の測定結果である。今年度は、 $0.45T_c$  の温度に現れる BCS 相を含む数点の  $\mu$  において、精度を上げてトポロジカル電荷の分布を測定し、昨年度得た結論、即ちトポロジカル感受率がほぼ  $\mu$  によらないことを再確認した (図 5)。 $0.89T_c$  の温度で高い  $\mu$  で現れる QGP 相においては、トポロジカル感受率 (インスタントンの密度に対応) が小さい値に抑えられるのとは対照的である。インスタントンの密度が BCS 相において減少しな

いことがダイクオーク・ギャップの大きさにいかなる影響を与えるかを議論することは、次の重要課題である。

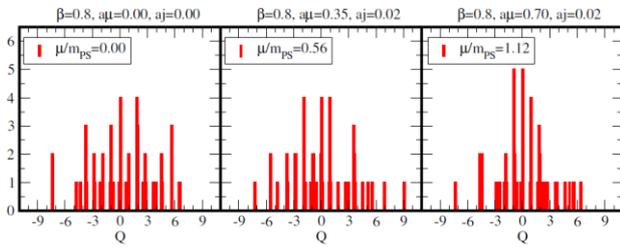


図 5：0.45Tc における 2 カラーQCD のトポロジカル電荷分布。左から順に、ハドロン相、BEC 相、BCS 相のデータ。図は、7. (1) 中の学術論文からの抜粋。

●フラックスチューブの  $\mu$  依存性

図 4 では温度によって相の密度依存性が大きく異なっており、比較的低温側 ( $T=0.45Tc$ ) では系は閉じ込めの性質を保ちつつハドロン相から BEC 相、さらには BCS 相へと変化すると予想されているものの、閉じ込めについては明確な結論が得られてはいない。そこで、閉じ込めを特徴付けるクォーク・反クォーク間のカラーフラックスチューブに注目し、2 カラーQCD の各相における閉じ込めの性質を調べることは重要である。

そこで、 $\mu=0$  の有限温度 2 カラーQCD に対して開発されていたカラーフラックスチューブ測定用コードをアレンジし、 $\mu>0$  の配位を取り込んでカラーフラックスチューブが測定できることを確認し、その予備的結果を得た (図 6)。カラーフラックスが絞られる様子が  $\mu$  にいかに依存するかを、より精度を上げた測定により明らかにすることは、喫緊の課題である。また、閉じ込めが残っているかを判定する上で明確な指標となる弦張力 (クォーク・反クォーク間ポテンシャルの長距離での傾き) を同時に測定することも視野に入れている。

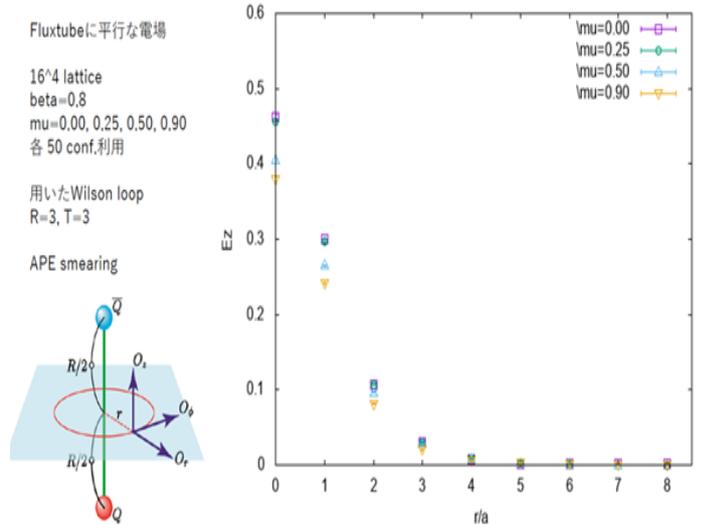


図 6：0.45Tc におけるクォーク・反クォーク間のカラーフラックスチューブの予備的結果 ( $a\mu=0, 0.25, 0.50, 0.90$ )。縦軸は左図上方向のカラー電場、横軸はクォーク・反クォークを結ぶ軸からの距離。

●スパースモデリング法のコードの構築

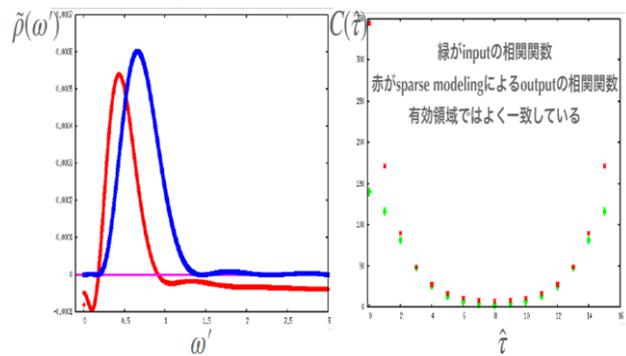


図 7：スパースモデリング法によるスペクトル関数の推定の予備的結果 (左図)。インプットデータはクエンチ QCD のエネルギー運動量テンソルの相関関数 (右図の赤データ)。

将来、図 4 の超流動相の性質を調べる上で、超流動密度を測定することは重要である。それには、測定されるエネルギー運動量テンソルの虚時間相関関数からスペクトル関数を引き出す手続きが必要となる。

近年グラディエントフロー法により格子 QCD のモンテカルロ計算におけるエネルギー

運動量テンソルの測定法が確立してきた。しかしながら、その相関関数からスペクトル関数を出すのは逆問題を解くのに等しく、未だ困難を極める。さらに、グラディエントフローを施すことによって二つの新しい問題が生じる。一つは、相関関数の形が変形されてしまうこと、もう一つは、フローによるオーバースマアリング領域を避けるために有効なデータ点の数が減ってしまうことである。そこで、機械学習の分野から発展してきたスパースモデリング法をクエンチ近似した QCD 粘性の推定に適用し、予備的結果を得た (図 7)。

## 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)

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 ( $\mu$ )
- (4) 閉じ込めスケール ( $\Lambda_{\text{QCD}}$ )
- (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。

スケール設定については昨年度までに 8 割方完了したが、格子結合定数と格子間隔の関係、 $T_c$  (図 1 の QGP/ハドロン相転移温度) の最終決定に向けて、計算精度を向上中である。スケール設定は、通常は大きなグループでないと手が出せないチャレンジングな問題であるが、申請書の【計画 III】につながる重要なステップである。他方、現在精力的に超流動相を含む 2 カラー QCD の格子シミュレ

ーションを行っているグループがイギリスとロシアにもあり、互いに異なる格子上の作用を用いているにもかかわらず、互いに矛盾しない相図の全体像が描けそうな傾向が見えてきた。今後は他グループの結果も見ながら、相図の詳細な決定を行っていく事が重要となりうる。

### ●ハドロン質量の密度依存性

図 1 の低温領域でハドロン相と超流動相をカバーするべく、いろいろな  $\mu$  に対し、大きな格子体積 ( $32^4$ ) のもとで配位データを生成中である。ハドロン質量測定に向けてのコードを開発中である。これは、申請書の【計画 I】さらには【計画 II】につながる初期段階に相当するが、最も時間を要する大きな格子体積かつ有限密度での配位生成を申請値の半分に満たない計算時間の範囲で進めざるを得ず、3 割方の進展と判断している。

### ●フラックスチューブの密度依存性

閉じ込めに深く関係するカラーフラックスチューブを測定するためのコードを、有限密度の配位を用いてテストし、予備的な結果を得た。これにより、申請書の【計画 IV】のうち 5 割程度進んだと考えている。

### ●計算コードの改良

大阪大学サイバーメディアセンターに依頼し、ダイクォーク源を入れた場合の配位生成のために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のチューニングを行った。具体的には、ループで複数回の転送を行っているサブルーチンにおいて、まとめて転送するよう修正、また、ベクトル化されていない処理のあるサブルーチンにおいてベクトル化を阻害する要因を除くことで、阪大 SX-ACE では実行時間の約 2.5 倍の高速化が、京大 XC40 では約 1.6 倍の高速化が実現された。これにより、申請

書の【計画 V】がほぼ完遂できたと考えている。

また、トポロジカル電荷の測定に用いるグラディエントフロー法コードのチューニングを行い、SX-ACE で約 54 倍の高速化が実現された。

#### ●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をまとめる (10 月 1 日現在)。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 (224, 640 ノード時間積) のうち  
51.1%使用。

#### 阪大計算機資源

SX-ACE :

配分 (60, 418 ノード時間積) のうち  
45.4%使用。

OCTOPUS・CPU/GPU ノード :

配分 (104, 463 ノード時間積) のうち  
63.9%使用。

使用した計算資源は、SX-ACE ではスケール設定、XC40, OCTOPUS では  $32^4$  の配位生成 ( $a\mu = 0, 0.25, 0.27, 0.30, 0.50, 0.70$ ) にあてられた。

今年度後期で、残りの計算資源を使い切った。そこでは、SX-ACE, XC40, OCTOPUS をグループ間で計画的にシェアしあいながら、貴重な計算資源をスケール設定および  $32^4$  の配位生成 ( $a\mu = 0.35, 0.40$  も追加) にあてた。アウトプットは、申請時に設定した計画すべてに関連するものであり、最大限に有効活用させていただいたと考えている。

#### ●今後の展望

大きな格子体積 ( $32^4$ ) のもとで配位データを生成する。これを用いて、ハドロン質量の密度依存性、ハドロン間相互作用の密度依存性、カラーフラックスチューブの密度依存性に関する知見をえる。

スケール設定を完了し、他グループとの相図の比較を行うとともに、将来の超流動密度測定に向けて、スパースモデリング法を有限温度 QCD のずり粘性率に対して確立する。

### 7. 研究業績一覧 (発表予定も含む)

#### (1) 学術論文 (査読あり)

K. Iida, E. Itou, and T.-G. Lee, “Two-colour QCD phases and the topology at low temperature and high density,” *Journal of High Energy Physics* **01**, 181 (2020), 21 pp.

#### (2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

なし。

#### (3) 国際会議発表 (査読なし)

E. Itou (ポスター発表), K. Iida, and T.-G. Lee, “Topological susceptibility of two-color QCD at low temperature and high density,” *The 17th International Conference on QCD in Extreme Conditions (XQCD 2019)*, University of Tsukuba (Tokyo, Japan), June 24, 2019.

T.-G. Lee (ポスター発表), E. Itou, and K. Iida, “Phase structure of dense two-color QCD at low temperatures,” *International symposium on Clustering as a Window on the Hierarchical Structure of Quantum Systems (CLUSHIQ2020)*, Ryoutiku Bettei (Beppu, Japan), January 23, 2020.

#### (4) 国内会議発表 (査読なし)

伊藤悦子 (口頭発表) : 「2 カラーQCD 相図と様々な理論のトポロジー」, 平成 30 年度 SX-ACE/OCTOPUS@RCNP 成果・進捗報告会, 大阪大学 核物理研究センター (茨木), 2019 年 4 月 12 日。

李東奎 (口頭発表) : 「2 カラーQCD における  $T_c$  決定とスケール設定」, 平成 30 年度 SX-ACE/OCTOPUS@RCNP 成果・進捗報告会, 大阪大学 核物理研究センター (茨木), 2019 年 4 月 12 日。

伊藤悦子 (口頭発表およびポスター発表) : 「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 11 回シンポジウム, THE GRAND HALL (品川), 2019 年 7 月 11, 12 日。

伊藤悦子 (口頭発表), 飯田圭, 李東奎: 「2 カラーQCD の低温高密度相におけるトポロジー」, 日本物理学会 2019 年秋季大会, 山形大学 (山形), 2019 年 9 月 17 日。

伊藤悦子 (口頭発表), 永井佑紀: 「スパースモデリング法による QCD 粘性の決定」, 日本物理学会 2019 年秋季大会, 山形大学 (山形), 2019 年 9 月 18 日。

李東奎 (口頭発表), 伊藤悦子, 飯田圭: 「2 カラーQCD の低温高密度における相構造」, 2019 年度四国地区理論物理学セミナー, 高知大学 (高知), 2019 年 12 月 7 日。

飯田圭, 石黒克也 (口頭発表), 伊藤悦子, 李東奎: 「有限密度 2 カラーQCD におけるフラックスチューブの性質」, 日本物理学会第 75 回年次大会, 名古屋大学 (名古屋), 2020 年 3 月 18 日。

伊藤悦子 (口頭発表), 永井佑紀: 「スパースモデリング法による QCD スペクトル関数の推定」, 日本物理学会第 75 回年次大会, 名古屋大学 (名古屋), 2020 年 3 月 19 日。

伊藤悦子 (口頭発表) : 「低温高密度領域における 2 カラーQCD の相図と超流動性の解明」, 2019 年度 SX-ACE/OCTOPUS@RCNP 成果・進捗報告会, 大阪大学 核物理研究センター (茨木), 2020 年 3 月 25 日。

李東奎 (口頭発表) : 「2 カラーQCD におけるスケール設定」, 2019 年度 SX-ACE/OCTOPUS@RCNP 成果・進捗報告会, 大阪大学 核物理研究センター (茨木), 2020 年 3 月 25 日。

#### (5) その他 (特許, プレスリリース, 著書等) なし。