

jh190035-NAJ

格子量子色力学に基づく初期宇宙の諸性質の精密解析

北澤 正清 (大阪大学)

数値シミュレーションによって超高温の初期宇宙で起こった閉じ込め相転移の情報を得るための研究として、(1) 相転移温度近傍におけるクォーク間相互作用変質の解析、(2) 重クォーク領域における QCD 相構造の精密解析、(3) 境界条件を課した系における非等方圧力の測定、という 3 つの研究課題に取り組んだ。これらの研究により、非閉じ込め相に置かれた単体静的クォーク周辺の応力テンソルの解析や、従来より細かい格子間隔での重クォーク領域の相構造解析、空間 1 方向のみに境界条件を課した系での熱力学量測定など、各研究課題それぞれで有用な研究成果が得られた。本期間中のシミュレーションで収集した膨大な計算データは、今後の研究でも有効活用可能である。また、二つの共同研究の間のデータフォーマット共有化などによるアルゴリズムの相互利用や技術共有が進み、今後の研究を更に推進するための体制が整備できた。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

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

北澤正清：研究の総括・シミュレーション実行とデータ解析（主に課題 1 と 3）

江尻信司：シミュレーション実行とデータ解析（主に課題 2）

金谷数至：研究のアドバイス・シミュレーション実行とデータ解析

柳原良亮：シミュレーション実行とデータ解析（主に課題 1）

白銀瑞樹：シミュレーション実行とデータ解析（主に課題 2）

若林直輝：シミュレーション実行とデータ解析（主に課題 3）

2. 研究の目的と意義

我々の宇宙はどのようにして始まり、どのような進化を経て現在の姿に至るのか。この問いは、我々人類にとって根源的な研究テー

マであり、物理学に課された最重要課題の一つである。

ビッグバンによる開闢直後の初期宇宙は、現実の実験で探索することが困難であるため、その性質を調べ理解するうえでは格子 QCD に基づく第一原理数値シミュレーションが極めて重要な「数値実験」としての役割を果たす。

本研究は、初期宇宙に対応する超高温状態の格子数値解析により

1. 相転移温度近傍におけるクォーク間相互作用変質の解析
2. 重クォーク領域における QCD 相構造の精密解析
3. 境界条件を課した系における非等方圧力の測定

という三つの課題に関して精密解析を行い、初期宇宙を満たしていた物質を従来とは異なる視点から理解し、それによって宇宙進化の理解に深化をもらすことを目指すものである。

以上の課題は、通常の数値解析では計算時間が膨大で現在の計算機能力の手に負えない。そこで本研究では、(1) gradient flow 法と呼ばれる革新的手法を用いた各種物理量

の高統計解析の実現、(2)改良化されたクエンチ近似による数値解析の高速化、などの処方を採用することで、従来困難とされていた物理量の測定を初めて達成する。これにより新しい物理量の定量的測定値を得ると共に、将来実現する近似に頼らない大規模数値解析に向けた技術的および物理的知見を蓄える。

以下、各課題の目的をより具体的に述べる。

(1) 相転移温度近傍におけるクォーク間相互作用変質の解析

クォーク閉じ込め相転移を、クォーク間相互作用の伝達機構に着目して解明する。場を通した相互作用の空間的伝達構造を特徴づける基本的物理量である応力テンソルの空間分布を、静的なクォークが一つもしくは複数置かれた系で測定する。応力テンソルの格子上での測定は従来原理的に困難であったが、gradient flow 法を使うことによってこの困難が克服できる。本研究では、閉じ込め相転移温度付近の高温物質でこの解析を行い、閉じ込め相転移温度周辺でクォーク間相互作用が弱まり、解放に至る様相を微視的伝達構造の立場から解明する。

(2) 重クォーク領域における QCD 相構造の精密解析

QCD の有限温度相転移は、クォークの質量に応じて相転移の次数を変える。本研究では、クォーク質量が重い領域に注目し、従来の研究に対し、①gradient flow 法を用いた潜熱の高統計解析、②クォーク場の効果をクエンチ近似に部分的に取り込んだ高速モンテカルロ処理、③逆質量展開高次項の取り込み、④高次キュムラントを使った臨界点の解析、などの新しいアイデアを採用して数値解析を改良し、高精度解析を実現する。こうして得られる研究成果は、QCD の有限温度相転移の理解のみならず、将来的な実現が期待さ

れる超高密度領域に存在する一次相転移探索に向けた技術的・物理的知見としても有用である。

(3) 境界条件を課した系における非等方圧力の測定

エネルギー密度や圧力などの熱力学量は閉じ込め相転移温度付近の物質を理解する基本的な物理量だが、従来熱力学量の数値解析は、全てが無限体積で等方的な系を想定して行われてきた。これに対し本研究では、非等方な境界条件を設定した際に生じる非等方な圧力（応力）の測定を初めて行う。この解析によって得られる系の情報は無限系における熱力学量よりも多く、この新しい解析によって初期宇宙を構成していた物質を従来とは異なる角度から理解することが可能となる。なお、非等方な熱力学量の測定は従来の数値計算技法では困難であったが、本研究では gradient flow 法を用いることによってこの困難を克服する。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

本申請課題が取り組む前述の三つの研究課題は、いずれも幾つかの高度な数値解析技法を組み合わせることで初めて実現するものである。そこで本研究では、これまでほぼ独立に研究を進めてきた FlowQCD 共同研究（代表の北澤らが所属）と WHOT-QCD 共同研究（副代表の江尻らが所属）の持つ数値解析技術を組み合わせることで、コード開発のコストを削減しつつ、各課題に同時並行で取り組み相乗効果を得て研究を進める体制を整えて研究を行った。

このような研究体制は、本 JHPCN 公募型研究に申請を行う際に共同研究者間で相談を行い構築したものであり、JHPCN 課題として採択されたことでこのような体制を常に意識して研究に携わったことが研究促進につながった。たとえば、代表の北澤を含む

FlowQCD 共同研究はハドロン・原子核物理学、副代表の江尻を含む WHOT-QCD 共同研究は素粒子物理学の研究者によって構成されたグループだが、これら文化の異なる研究者の融合が深まり、数値計算技術のみならず、物理課題そのものに対する理解を深化させることができた。また、それぞれのグループが持つコードに対する相互理解を深めたほか、各アルゴリズムの入出力フォーマットの共通化などによる数値解析技法の融合が進んだことにより、研究を更に進めるための足場ができた。

また、本公募型研究として採択された大型計算機の計算時間の活用により以下に述べる研究課題を遂行することができ、大規模数値シミュレーションが迅速に行えたという点においても本公募研究は大変有用であった。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

本研究は継続課題ではないため、該当しない。

5. 今年度の研究成果の詳細

1) 相転移温度近傍におけるクォーク間相互作用変質の研究

この研究は、初期宇宙に対応する高温状態に静的なクォークを一つもしくは複数置いた系の応力テンソルの解析を行い相互作用の微視的伝達機構を調べることで、初期宇宙で起こったクォーク閉じ込め相転移をクォーク間相互作用の立場から理解することを目指すものである。

本年度に本課題に配分された計算資源の利用により、非可換ゲージ理論の数値解析においては静的クォークの解析に必要な Polyakov loop とエネルギー運動量テンソルの空間分布の測定を臨界温度より高温の4つの温度に対して終えることができた。各温度

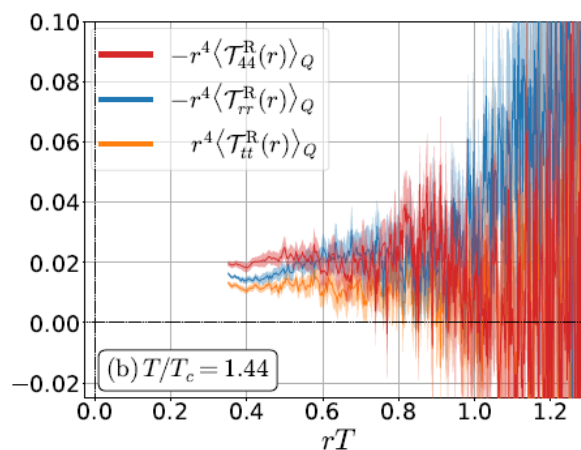


図 1 : 非閉じ込め状態に静的クォークを置いた系のエネルギー密度及び応力テンソル各成分の空間分布。

で5種類の格子間隔に対する測定を行い、連続外挿を行うのに必要なデータの収集を終えた。

また、このデータを使って解析できる物理量の中で最も解析が容易な単体クォーク周辺の応力分布の測定を行った。これまでに、各温度での応力分布の測定がほぼ終了し、現在はこれらの結果を論文として発表する準備の最終段階にある。

この解析では、クォーク周辺のエネルギー密度や応力の各成分が電磁気学の場合と同様にクォークからの距離 r に対し概ね $1/r^4$ で減衰する結果が得られた。ただし、電磁気学の場合にはこれら各成分の絶対値は全て縮退するが、今回計算を行った非可換ゲージ理論においては図 1 に示すように各成分の値に有意なずれが存在するという興味深い結果が得られた。今後、この非可換ゲージ理論に特有の結果が有限温度摂動論などの理論的研究によって説明されることが期待される。

また、各成分の r 依存性は、図 1 から読み取れるように $1/r^4$ から有意にずれている。このずれの起源は、短距離ではゲージ結合定数の running coupling を反映したものであり、遠距離では熱的遮蔽によるものと理解できる。実際、図 2 に示すエネルギー密度の温度

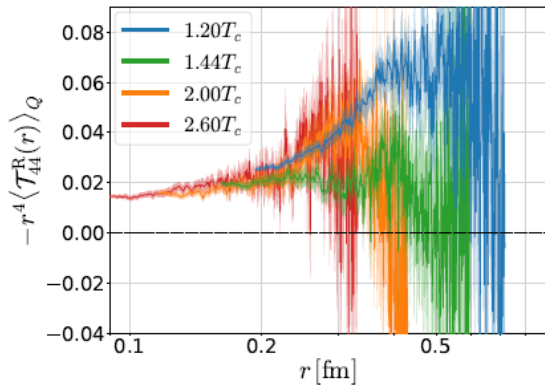


図 2 : 静的クォーク周辺のエネルギー密度分布の温度依存性。

依存性を見ると、 $rT \ll 1$ では温度依存性が存在せず、全ての温度でエネルギー密度が同じ値に収束することが読み取れる。この収束先は running coupling で説明される。一方、本解析の結果では遠距離で統計誤差が増大してしまい、この領域を支配する熱的遮蔽の効果は明かに観測できなかった。

以上の解析は非可換ゲージ理論に対して行われたものである。本研究期間には、この解析に加えて動的クォークを含む QCD で同様な解析を行うための数値計算も進めた。この解析では、エネルギー運動量テンソルの解析を WHOT-QCD 共同研究が行い、Polyakov loop の測定や相関関数の構築を FlowQCD 共同研究が担当する体制で研究を進めている。本年度の研究で、両共同研究間でのゲージ配位のフォーマットの共有など、アルゴリズムを相互利用する環境が整い、測定に必要なテスト解析を終えることができた。現在はこのテスト解析結果を確認している段階であり、検証が終わり次第、本解析へと研究を進める予定である。

更に、以上の数値解析と並行して数値解析で得られた応力の空間分布を QCD の有効モデルとしての Abelian-Higgs 模型を用いて理論的に解析する研究にも取り組み [2]、興味深い結果を得た。

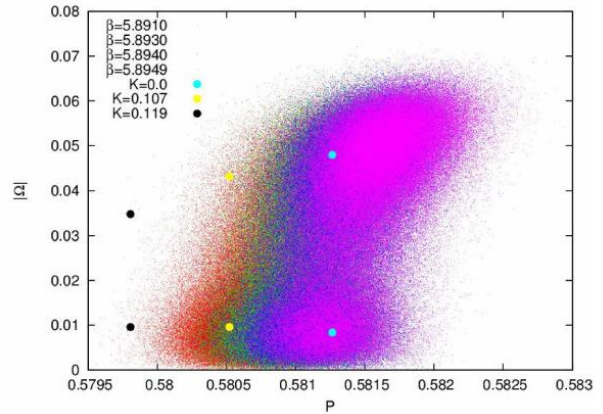


図 3 : overlapping 問題が顕在化する場合のシミュレーション点の分布 [3]。物理量の測定を行う黒点が分布の範囲外にある。

2) 重クォーク領域における QCD 相構造の精密解析

QCD の有限温度相転移は、クォーク質量の変化に応じて相転移の次数が変わる。本研究では、クォーク質量が重い領域に存在する一次相転移に注目し、改良されたクエンチ近似や gradient flow の適用などの様々な新しい数値解析技法を適用することで、状態方程式や潜熱、臨界指数などの精密測定を行うことを目指している。

本年度は、従来の解析では時間方向の格子点が $N_t=4$ だったのに対し、数値解析を $N_t=6, 8$ というより格子間隔の細かい格子で行い、格子間隔依存性を調べた [3]。この解析では、モンテカルロ計算によるゲージ配位の生成をクォーク質量が無限大の場合に行ったうえで、ホッピングパラメータ展開に基づく再重み付け法を使うことでクォーク質量が有限の場合の物理量測定を行っている。再重み付け法では overlapping 問題と呼ばれる問題が起こらない範囲でしか有効な解析ができないが、図 3 に示すようなシミュレーション点の分布を調べたところ、 $N_t=6$ の空間体積が大きい場合と $N_t=8$ の解析は解析の有効範囲外であり、 $N_t=8$ についてはホッピングパラメータ展開の適用範囲からも外れることが分かった。このような解析の有効性の検証を経て安全性が確認できた計算結果を用いて得

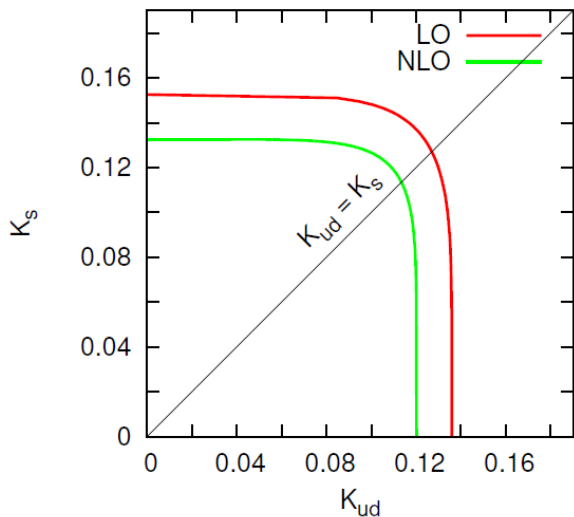


図 4 : $N_f=6$ の数値解析で得られた重クォーク領域の QCD 相転移の分類[3]。曲線の左下が一次、右上がクロスオーバー。

たホッピングパラメータ空間内での相図を図 4 に示す。

本研究では、クォーク質量の効果はホッピングパラメータ展開によって評価しているが、従来から考慮していた展開の最低次項 (LO) に加え、次の次数 (NLO) の評価も行い、展開の収束性を議論したことも本研究の特色である。図 4 には、各次数での結果を示してある。

以上の解析のほかに、高統計の計算が可能な $N_f=4$ の場合について、大体積のシミュレーションを行う研究を進めた。この研究ではこれまでに、ビンダーキウムラントの有限体積スケーリングの解析がほぼ終了し、臨界指数などの情報を得た[5]。

さらに、gradient flow 法を用いることで一次相転移周辺に存在する準安定状態の熱力学量や潜熱を測定する研究にも取り組んでいる。この研究は WHOT-QCD 共同研究が中心に行っているが、FlowQCD 共同研究が過去に行った熱力学量の解析で蓄積した測定技術やアルゴリズムの提供が重要な役割を果たしている。

3) 境界条件を課した系における非等方圧力の測定

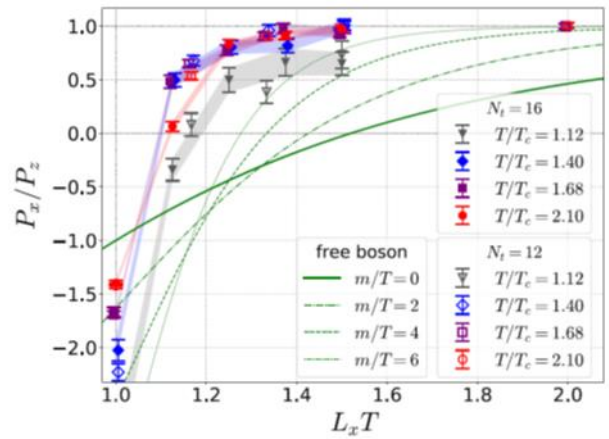


図 5 : 縦方向と横方向圧力 (応力) 比の、境界条件の長さ L_x に対する依存性[1]。実線は自由ボソン場の理論における結果。

エネルギー密度や圧力などの熱力学量は物質の性質を反映する基本的な物理量だが、従来格子数値解析で行われてきた熱力学量の測定は、ほぼ全ての研究が体積が十分大きく等方的な系を想定して行われてきた。これに対し本研究では、非等方で有限な境界条件を設定した際に生じる非等方な圧力の測定に取り組んだ[1]。

格子数値解析で行われていた従来の熱力学量の測定方法では、無限系でのみ有効な熱力学関係式が仮定されており、有限系の解析は原理的にできなかった。本研究では、gradient flow 法の採用によって有限系での圧力 (応力) の測定を実現させた。

境界条件が課された場の理論では、QED 真空におけるカシミア効果と同様に場の構造に非等方性が生じる。このような現象を、有限温度非可換ゲージ理論の場合に初めて詳しく調べたのが本研究の位置づけである。これまでに行った数値解析により、空間方向の一つの方向のみに周期境界条件を課した系におけるエネルギー運動量テンソルの測定に成功した[1]。図 2 に示すように、この数値計算で得られた縦方向と横方向の圧力比 (誤差付きの点) は、自由ボソン場での結果 (線) と全く異なる振る舞いを示すという極めて興味深い結果が得られた。特に、数値計算結果は自由ボソン場と比べて周期境界条件方

向の長さ L_x を小さくしても圧力非等方性が現れにくい、すなわち、非可換ゲージ理論の熱力学量は自由ボソン系と比べて境界条件の影響を受けにくいという結果が得られている。今後の理論研究により、このような奇妙な振る舞いの起源が物理的に解明されることが期待される。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

1) 相転移温度近傍におけるクォーク間相互作用変質の研究

今年度は、非可換ゲージ理論に関しては測定に必要なデータ収集を終え、このデータを使った単体クォーク系における物理量の測定をほぼ終わらせることができた。今年度収集したデータは、クォークが複数ある系の解析などの様々な物理量の測定に使えるため、今後はこのような応用課題の解析に取り組んでいきたい。特に、クォークを2個置いた系の解析を行うことでクォーク間相互作用の微視的伝達機構を調べることが実現するため、この解析に優先的に取り組むことを予定している。

また、動的クォークを含んだ QCD の解析もテスト解析を始めた段階だが、この解析によって現実の QCD で動的クォークが相互作用伝達にどのような効果をもたらすかを調べることができるようになる。今後、テスト解析を迅速に終了させて本解析に取り組むことを予定している。

2) 重クォーク領域における QCD 相構造の精密解析

本年度は、 $N_f=6$ の測定で解析の有効性を確認し、相転移の次数を調べる研究を終わらせることができたため、順調に研究が進んだと言える。

一方、本年度までに必要なデータ収集は終わったが物理量の最終結果の報告が終わっていない課題として、ビンダーキュムラントの

有限体積スケーリングの解析や、準安定状態の解析が残されている。これらの結果をまとめ、論文にまとめる作業に優先的に取り組みたい。

また、本研究の応用研究課題として、これまでに $N_t=4$ の場合にのみ行った、ホッピングパラメータ展開の低次項を作用に取り込むことで改良したモンテカルロ計算を使った数値解析を $N_t=6, 8$ に適用し、再重み付け法の有効範囲の拡張を実現する研究や、ホッピングパラメータ展開のより高次の項を直接評価する解析にも取り組むことを予定している。

3) 境界条件を課した系における非等方圧力の測定

この課題については、当初当面の目標としていた、周期境界条件を課した場合の非閉じ込め相の解析について、本年度中に最終結果を報告することができた。

今後は、境界条件を空間二方向に設定した場合や反周期境界条件に変更した場合の解析や、より統計が必要とされる閉じ込め相での解析などの応用課題に取り組んでいきたい。また、非可換ゲージ理論のみならず、動的クォークを含む QCD の場合に同様な解析を行うことも開発済みの計算アルゴリズムの組み合わせで実現可能であるため、このような課題にも取り組みたい。

7. 研究業績一覧（発表予定も含む）

(1) 学術論文（査読あり）

- [1] M. Kitazawa, S. Mogliacci, I. Kolbé, and W. A. Horowitz, “Anisotropic pressure induced by finite-size effects in SU(3) Yang-Mills theory”, Phys. Rev. D 99, 094507 (10 pages) (2019).

[2] R. Yanagihara and M. Kitazawa, “A Study of Stress-Tensor Distribution around Flux Tube in Abelian-Higgs Model”, PTEP 2019, 093B02 (19 pages) (2019).

[3] S. Ejiri, S. Itagaki, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, A. Kiyohara, M. Shirogane, T. Umeda, (WHOT-QCD Collaboration), “End point of the first-order phase transition of QCD in the heavy quark region by reweighting from quenched QCD”, Phys. Rev. D 101, 054505 (10 pages) (2020).

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

[4] R. Yanagihara, T. Iritani, M. Kitazawa, M. Asakawa, T. Hatsuda (FlowQCD collaboration), “Stress distribution in quark-anti-quark and single quark systems at nonzero temperature”, PoS (LATTICE 2019) ref.004 (2020).

[5] S. Ejiri, S. Itagaki, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, A. Kiyohara, M. Shirogane, Y. Taniguchi, T. Umeda (WHOT-QCD Collaboration), “Determination of the endpoint of the first order deconfinement phase transition in the heavy quark region”, PoS (LATTICE 2019) ref.071 (2020).

[6] K. Kanaya, A. Baba, A. Suzuki, S. Ejiri, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, T. Umeda, “Study of 2+1 flavor finite-temperature QCD using improved Wilson quarks at the physical

point with the gradient flow”, PoS (LATTICE 2019) ref.088 (2020).

(3) 国際会議発表 (査読なし)

[7] 北澤正清, “Stress Tensor on the Lattice”, invited talk at “Frontiers in Lattice QCD and related topics”, 15-26 April (2019), Kyoto, Japan.

[8] 江尻信司, “Determination of the end-point of the first order deconfinement phase transition in the heavy quark region of QCD”, talk given at Lattice 2019, 16-22 June (2019), Wuhan, China

[9] 金谷和至, “Study of 2+1 flavor finite-temperature QCD with improved Wilson quarks at the physical point with the gradient flow”, talk given at Lattice2019, 16-22 June (2019), Wuhan, China

[10] 柳原良亮, “Stress distribution in quark-anti-quark and single quark systems at nonzero temperature”, talk given at Lattice2019, 16-22 June (2019), Wuhan, China

[11] 北澤正清, “Classifying Topological Sector via Machine Learning”, talk given at Lattice2019, 16-22 June (2019), Wuhan, China

[12] 北澤正清, “Lattice QCD and QGP”, invited talk at HaPhy-CENUM joint workshop “The Future of lattice studies in Korea”, 6-7 Sep. 2019, Busan, Korea

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[13] 江尻 信司 「Numerical study of the endpoint of first order phase transition lines in finite density Lattice QCD Density Fluctuations, Sign problem」, 第二回クラスター階層領域研究会 (東京工業大学, 東京, 5.31-6.1, 2019)

[14] 北澤正清 「高温物質中におけるクォーク間相互作用の微視的伝達機構の解明」, 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 第 12 回シンポジウム (7/09-10, 2019, THE GRAND HALL, 東京)

[15] 北澤正清 「応力テンソルを用いた クォーク間相互作用と自己エネルギーの数値解明」, 東京大学情報基盤センター 平成 30 年度「若手・女性利用者推薦」成果報告会 (6/03, 2019, 東京大学, 東京)

[16] 柳原良亮 「応力テンソルで探るカラー電荷の熱遮蔽効果と結合定数」, 日本物理学会第 75 回年次大会 (3/16-19, 2020 年)

(5) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)
該当なし