

jh200030-NAH

カイラ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 強い相互作用の第 1 原理である量子色力学 (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。本研究ではフェルミオン (この場合はクォーク) のカイラル対称性を格子時空間上で実現した大規模シミュレーション用のプログラムコードを作成することが最重要課題である。カイラル対称性を実現するために 5 次元目の自由度を導入したが、代わりに数値計算上の計算コストが高くなった。この計算コストを下げるためには、プログラムコードの高速化が必要である。5 次元目にサイズを大きくすればカイラル対称性に関する性質は改善するが、計算コストは上がってしまう。そこで、5 次元目のサイズを最低どれくらいにすれば物理的な結果が得られるかを検討した。また、本年度は $SU(N)$ ゲージ理論用のウィルソン・フェルミオン (WF) 作用コードを作成した。これにより QCD のプロトタイプである $SU(2)$ QCD の数値シミュレーションや QCD の非摂動的な計算手法である $1/N$ 展開と対応させることが可能となった。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

大阪大学

(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

- ・ 関口 宗男 (国士舘大学・理工学部)
代表 研究統括・理論的分析・データ解析
- ・ 若山 将征 (国士舘大学・理工学部)
副代表 コード開発・演算の実行・データ解析
- ・ 伊達 進 (大阪大学・サイバーメディアセンター) アルゴリズム・コード開発
- ・ 中村 純 (大阪大学・核物理研究センター)
アルゴリズム・コード開発
- ・ 和田 浩明 (国士舘大学・理工学部) 演算の実行・データ解析
- ・ 村上 祐子 (国士舘大学・理工学部) アルゴリズム・コード開発

2. 研究の目的と意義

強い相互作用の第 1 原理計算である量子色力学 (QCD) を非摂動的に計算できる格子 QCD を用いて、カイラル相転移付近での中間子の質量生成機構を明らかにすることを目的としている。カイラル相転移とは、QCD の持つカイラル対称性が自発的に破れ、QCD 真空が相転移を起こす現象である。この現象はビッグバン直後の超高温状態から現在の宇宙が生成されたときに起きたと考えられている。有限温度では、カイラル対称性の破れが部分的に回復し、臨界温度で相転移が起こることが期待されている。QCD 有効理論によれば臨界温度以上ではカイラル対称性において対をなす中間子 (カイラル・パートナー) の質量は縮退すると予想されている。 π 中間子と σ 中間子、 ρ 中間子と a_1 中間子がそれぞれ対になっていて、カイラル・パートナーと呼ばれる。第 1 原理に基づく有限温度のシミュレーションにより QCD 真空の相転移付近でのカイラル・パートナーの質量変

化を調べることはカイラル相転移を理解する上で重要な課題である。これによりカイラル対称性の力学的破れが物質の質量のほぼすべてを生成していることを実証する。質量の起源に関する根本的な理解を深める点が本研究の最大の特徴であり、宇宙の創生の過程を明らかにするために欠くことのできない研究課題である。現在のスーパーコンピュータの能力を超えるテーマであるが、現実的な計算機リソースで最大限の物理的な成果を得ることを目指す。スーパーコンピュータを最大限に活用するプログラムコードの開発が研究の成否を分けることになり計算機科学分野と計算科学分野の双方の研究基盤の発展に資すると考える。

この公募研究では最終的に大規模シミュレーション用のコード開発と開発したコードの検証を行うためのテスト・シミュレーションの実施を計画している。Lattice ツールキットは本研究参加メンバーにより開発された格子 QCD の数値シミュレーション用のソースコードで、オープンソースとして、現在、国内外の複数の研究グループにより利用されている。本研究で作成したコードについても最終的な大規模シミュレーションが終わった段階でオープンソースとしての公開を計画している。また、汎用性のある部分的なコードの公開も予定している。

【目標とするプログラムコード】

格子上でカイラル対称性を実現している作用を用いて中間子の伝搬関数の数値シミュレーションを実施するためには最低 300 万次の正方行列に対する線形方程式を解法する必要がある。この計算を高速化し、現実的な計算機リソースを使って物理的結果が得られるプログラムコードを作成することが目的である。

【今年度研究課題】

(1) トランケイテッド・オーバーラップ・フェルミオン (TOF) 作用コードを用いた真

空での π 、 ρ 中間子の質量生成機構の研究 (JHPCN 研究資源を利用する)

(2) ウィルソン・フェルミオン (WF) 作用コードの高速化 (JHPCN 研究資源を利用しない)

(3) TOF コードの高速化 (JHPCN 研究資源を利用しない)

公募申し込み後の研究の遅れから中間報告で記載したように今年度の研究課題を変更して実施した。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

本研究では、4 次元時空間を離散化して、その格子上でクォークを記述する格子 QCD によるシミュレーションを行うが、さらにカイラル対称性を導入するため 5 次元空間を使用する。我々が JHPCN 拠点公募型研究として開発しているプログラムコードは、我々のグループにより作成され公開されている Lattice ツールキットのウィルソン・フェルミオン (WF) 作用のプログラムコードを基に開発をしている。WF 作用を使った中間子の伝搬関数の数値シミュレーションを行うと、例えば時空間を $8 \times 8 \times 8 \times 16$ の格子に離散化し、その格子点にフェルミオン (この課題のフェルミオンはクォーク) を考えると $3 \times 4 \times 8 \times 8 \times 8 \times 16 (=98304)$ 次の正方行列に対する線形方程式を解く必要がある (この行列の大きさは物理的な成果を得るのに最低限の大きさである)。本研究は、さらに格子上のクォークにカイラル対称性を近似的に待たせるために 5 次元目の自由度を導入する (TOF 作用コード) と少なくとも 300 万次の正方行列に対する線形方程式を解くことになる。クォークと反クォークから構成される真空と同じ量子数を持つ σ 中間子は、非連結グラフの計算が必要であり、単純に計算しようとするると他の中間子と比べて時空間体積倍だけ計算コストがかかる。そのため現実的な計算機リソースとはかけ離れた

計算コストになり第1原理計算からのアプローチが困難であった。この困難を解決するため計算機科学分野の研究者との共同研究が必要である。特にWF作用のコードはベクトル化に向いているためSX-ACEでのコード開発により計算の高速化が見込まれる。また、これまでの大阪大学核物理研究センターとの共同研究として、大阪大学サイバーメディアセンター(CMC)のNECのスーパーコンピュータSXシリーズでのコード開発の経験があり、それを活かすことができることも大きな利点である。さらに拠点である大阪大学CMCの伊達進准教授が共同研究に参画し、SX-ACEでのコード開発・最適化についての協力が受けられる。以上のように大阪大学を拠点とする公募型共同研究は、我々の研究を発展させるのに最適である。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

(1) 第1原理計算による a_1 中間子励起状態の質量の確定 (JHPCN の計算機リソースを使用する)

2018 年度に JHPCN 共同研究で開発した TOF 作用コード(Ver. 1)を大阪大学 CMC との共同研究で計算速度を 10% 向上させた改良版 (TOF 作用コード Ver. 2)のコードを用いて真空中での π 、 ρ 、 a_1 の伝搬関数をクエンチ近似での数値シミュレーションを実施した。2018 年度に同じ中間子について Ver. 1 のコードでシミュレーションをしているが、今回のシミュレーションでは、 a_1 中間子の第1励起状態を確定することを目的として、新たに2種類のクォーク質量 $m_f a = 0.05, 0.07$ についてシミュレーションを実施した。クォーク質量それぞれにつきゲージ配位数は、3000、3600 を使用した(表1)。

表1 各クォーク質量 ($m_f a$) におけるゲージ配位数と π 中間子と ρ 中間子の質量比 (m_π / m_ρ)。

$m_f a$	0.07	0.05
$m_\pi a$	0.6283(7)	0.5478(8)
$m_\rho a$	0.9249(21)	0.8816(27)
m_π / m_ρ	0.679(2)	0.621(3)
Confs.	3000	3600

シミュレーションはすべて SX-ACE で実施した。2018 年度と 2019 年度のシミュレーションから a_1 中間子の基底状態と第1励起状態が得られた(表2)。カイラル・パートナーとして ρ 中間子と対を成す a_1 中間子は実験的に $a_1(1260)$ (質量 $1230 \pm 40 \text{MeV}$) と考えて良いことが分かった。また $a_1(1640)$ (質量 $1655 \pm 16 \text{MeV}$) は第1励起状態であると考えられる。先行研究では a_1 中間子の第1励起状態に関しては確定値を得られたものではなく、今回のシミュレーションによって初めて基底状態と第1励起状態の実験値を強い相互作用の第1原理である QCD により再現することができたといえる。さらに、実験的にはエキゾチックな状態の可能性を指摘されている $a_1(1420)$ (質量 $1411 \pm 4 \text{MeV}$) については今回のシミュレーションの結果では対応する状態が得られず、格子 QCD とクォーク模型の両方の立場からクォーク・反クォークの2体と考えることは難しいと考えられる。

表2 a_1 中間子の質量

	Our result	実験値[1]
基底状態	1158(42)MeV	1230(40)MeV
第1励起状態	1667(22)MeV	1655(16)MeV

この結果は国際会議 Hadron2019 で発表し、プロシーディングスに掲載された。今回のシミュレーションの結果からカイラル・パートナーに属する中間子には TOF 作用は有効であることが検証できたと考えられる。

(2) 第1原理計算による有限温度における中間子の質量変化のシミュレーション (JHPCN の計算機リソースを使用する)

本研究課題は将来的な有限温度の計算量を見積もるとともに現状の TOF 作用コード (Ver. 1) でどこまで物理的な内容に迫れるかを確認することが目的である。

シミュレーションは 2 段階で行っていて、第 1 段階として、TOF 作用を使って真空での π 中間子と ρ 中間子の伝搬関数を計算する。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 $N_5=32$ とし、5 次元の質量を $m_5=1.65$ 、空間のサイズを N_s 、時間のサイズを格子サイズ N_t として、 $N_s \times N_t \times N_5=16^3 \times 16 \times 32$ の格子でのシミュレーションを実施した。この格子空間上で 8 つのゲージ結合定数を指定するパラメーター β に対して複数のクォーク質量 m_{fa} に関してシミュレーションを行った。 π 中間子と ρ 中間子の伝搬関数を求めて、 π 中間子と ρ 中間子の質量比 (m_π/m_ρ) を求める。このシミュレーションから $m_\pi/m_\rho=0.8$ になるクォーク質量を求めた結果 (0.8 に一番近いクォーク質量) が表 3 である。このシミュレーションではゲージ場に関しては岩崎ゲージ作用によるクエンチ近似を用いて、ゲージ配位については 12~80 個生成し使用している。

表 3 $m_\pi/m_\rho=0.8$ でのクォーク質量

β	a [fm]	m_{fa}
2.187	0.2079(15)	0.177
2.214	0.1977(13)	0.175
2.247	0.1853(09)	0.160
2.281	0.1727(10)	0.150
2.334	0.1577(09)	0.145
2.416	0.1359(07)	0.133
2.487	0.1206(09)	0.113

これら 8 つのクォーク質量を使って有限温度のシミュレーションを実施した。この β 及びクォーク質量に対応する温度 T と臨界温度 T_c との比は、本来はシミュレーションをして求めるべきであるが今回は先行研究 [2, 3] のデータを使用した。このパラメーターの設定で

クエンチ近似を用いてゲージ場を生成した。各クォーク質量に対する T/T_c とゲージ配位数を表 4 に示す。

表 4 有限温度のシミュレーションパラメーター

β	T/T_c	a [fm]	m_{fa}	Confs.
2.187	0.86	0.2079(15)	0.177	2400
2.214	0.91	0.1977(13)	0.175	2000
2.247	0.97	0.1853(09)	0.160	2000
2.281	1.04	0.1727(10)	0.150	2000
2.334	1.14	0.1577(09)	0.145	2000
2.416	1.32	0.1359(07)	0.133	2000
2.487	1.59	0.1206(09)	0.113	2000

第 2 段階として、このゲージ配位を用いて有限温度におけるカイラル・パートナーに属する 4 つの中間子質量を各温度でシミュレーションをして、カイラル・パートナーに属する 4 つの中間子 (π 中間子、 ρ 中間子、スカラー中間子 (バレンス σ 中間子)、 a_1 中間子) 質量と真空の ρ 中間子質量の比の T/T_c 依存性を明らかにした (図 1)。これらの中間子はすべて $u(d)$ クォーク及びその反クォークの 2 体のオペレーターで構成している。スカラー中間子 (バレンス σ 中間子) に関しては、 σ 中間子を構成するファイマンダイアグラムの一部を計算したものである (非連結ダイアグラムを省略した)。 π 中間子、バレンス σ 中間子及び ρ 中間子、 a_1 中間子質量は臨界温度付近から同じ質量に縮退しはじめ徐々に重くなるのが分かった。また、温度の低い領域で a_1 中間子はシグナルがかなり不明瞭な結果であったが (低温部分のデータは図 1 にプロットしていない)、クォーク模型で励起状態になる中間子 (σ 中間子、 a_1 中間子等) は角運動量を持つため格子 QCD のように空間を離散化した場合にはシグナルが不明瞭になる傾向にあり、データを数倍ためる必要がある。今回はテスト計算であり、計算機リソースの有効活用の立場からシミュレーションを継続することは不適當であると判断した。カイラル・パートナーの中間子の質量が臨界温度付近から変化し縮退をはじめることが

分かった点と有限温度での計算量を見積もるとい
う点で成果があった。これらの結果は国際会議
Lattice2019 で発表し、査読付き国際会議プロシ
ーディングスとして出版された。

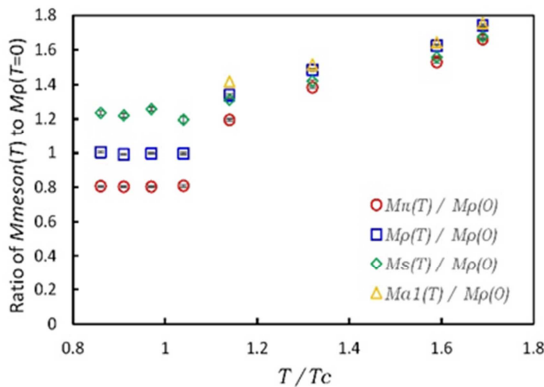


図1 有限温度における π 中間子質量、 ρ 中間子
質量、スカラー中間子（バレンス σ 中間子）、 a_1
中間子質量と真空の ρ 中間子質量との比の T/T_c
依存性

(3) シミュレーションコードの高速化 (JHPCN の計算機リソースを使用しない)

最終目標を達成するためにも計算資源の有効活
用のためにも正方行列に対す線形方程式を高速で
解法する必要があり、前処理付き共役勾配法によ
る WF 作用コードの開発を実施した。Hasenbusch-Jansen によつて提案されている前処
理法[4]を採用し、かつ独自の改良を行いながらコ
ードを作成している。この課題については2019年
度では終了できなかった。2020年度への継続とし
た。

(4) TOF 作用の高速計算の準備 (JHPCN の計算機 リソースを使用する)

TOF 作用コード(Ver. 2)では、カイラル対称性の
ために5次元方向の自由度が増えている。5次元
方向を小さくできれば計算量を減らすことができ
る。ただし、カイラル対称性は、この5次元方向
の自由度と関係しているため、5次元方向を小さ
くするとカイラル対称性に影響がでる。そのため
5次元方向 (N_5 の依存性) の依存性を検討するこ
とが有益であると判断した。2019年度では数値シ
ミュレーションは終了することができず、2020年度

へ継続した。

[1] M. Tanabashi et al. (Particle Data Group),
Phys. Rev. D 98, 030001 (2018).
[2] M. Okamoto et al. (CP-PACS Collaboration),
Phys. Rev. D 60, 094510, 1999
[3] A. A. Khan et al. (CP-PACS Collaboration),
Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.), 83, 176, 2000
[4] M. Hasenbusch and K. Jansen, Nucl. Phys. B
659, 299 (2003).

5. 今年度の研究成果の詳細

(1) トランケイテッド・オーバーラップ・ フェルミオン (TOF) 作用コードを用いた真 空での π 、 ρ 中間子の質量生成機構の研究 (JHPCN 研究資源を利用する)

TOF 作用コードは5次元格子空間でフェ
ルミオンを定義することにより質量生成メ
カニズムに関係するカイラル対称性を実現
している。5次元の格子サイズを大きくと
るとカイラル対称性は改善するが計算量が大き
くなる。適切な5次元の格子サイズを検討
することは研究資源の有効活用の立場から
重要なテーマである。5次元の大きさを検討
するのにカイラル・パートナーである π 中間
子と ρ 中間子の質量比をシミュレーション
により求めた。この研究は2019年の後半に
数値シミュレーションを開始していたが確
定的な結論を得るためにさらにシミュレー
ションを実施する必要性があった。また、
2019年度から2020年度5月にかけて大阪大
学 CMC との共同研究によりアルゴリズムの
見直しを行い Ver. 3 の TOF 作用コードを完
成させ、Ver. 1 より計算速度が約20%向上し
た。そのためカイラル対称性を導入するた
めに増やした5次元自由度により増えた計算
量を計算速度でカバーできるまでプロ
グラムの改良ができた。このことは本共同研

究としては大きな成果であり、次のステップである TOF 作用コードでのフル QCD (ダイナミカル・クォークを含む) へ移行することへの見通しがついたことになる。本年度のシミュレーションはこの新しい TOF 作用コード (Ver.3) を使用した。カイラル対称性を持つフェルミオンの 5 次元自由度の依存性についての先行研究では他の種類のカイラルフェルミオン (ドメインウォールフェルミオン等) では結果があるが、TOF 作用について SU (3) での数値シミュレーションを行った研究はない。理論的には同じ種類のフェルミオン作用であってもアルゴリズムには違いがあるので今後の大規模シミュレーションを成功させるために自作コードでの検証をする必要がある。その場合 5 次元自由度 N_5 のサイズがどれくらい計算量に依存性があるかを検証しておく必要がある。JHPCN からの計算機リソースは 10 月 13 日で利用を終えた。10 月末からは、国士舘大学で導入した SX-Aurora TSUBASA を使ってシミュレーションを実施した。

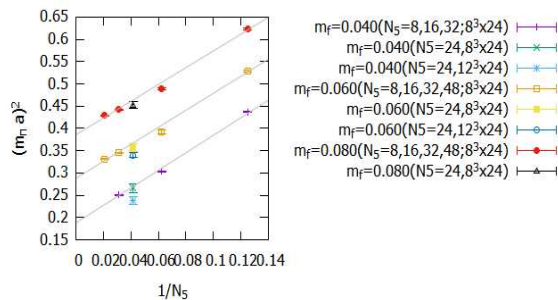


図2 π 中間子の質量 2 乗の $1/N_5$ 依存性

数値シミュレーションの例として π 中間子の質量 2 乗の $1/N_5$ 依存性を図 2 に示す。クォーク質量が軽く N_5 が大きいほど π 中間子の質量は小さくなるのが分かる。カイラル対称性の自発的破れによる NG ボソンとしての π 中間子の持つ性質を再現している。また、 N_5 が大きいほど π 中間子の質量 2 乗は小さくなっている。 N_5 は大きく取ればカイラル対称性の自発的破れをよりよく再現できることが

分かるが、数値シミュレーション上は計算機リソースとの関係で N_5 を現実的な値に決めなければならない。今回の数値シミュレーションより $N_5=24$ 前後でのシミュレーションを目標とすれば良いことが分かった。これらの結果は、“Property of 5th dimension for the truncated overlap fermions”(仮題)として、論文の投稿を予定している。確定的な結果を得るため 3, 4 月に追加のシミュレーションを実施したため投稿が最終報告には間に合わなかった。

また、このシミュレーションにより ρ 中間子のデータが蓄積できたので、以前のデータと合わせて解析したところ ρ 中間子の第 1 励起状態の質量が求められた。2019 年度に報告した a_1 中間子の励起状態に関するデータも含めて、すべてのデータを再解析 (解析手法を改良した) し、“Lattice spectroscopy of excited mesons with the truncated overlap fermions”と題する ρ 、 a_1 中間子の励起状態の論文を作成中である。この論文も夏には投稿予定である。

(2) WF 作用コードの高速化 (JHPCN 研究資源を利用しない)

WF 作用コードに前処理付き共変勾配法の前処理法として Mass precondition 法[4]を導入にして、さらに相互作用が SU (N) ゲージ相互作用での計算ができるように改良を加えた。このコードはクエンチ近似とフル QCD 両方のシミュレーションに対応している。並列化と SX-Aurora TSUBASA に最適化を大阪大学と共同で実施している。2020 年度内に並列化・最適化は終了できなかったが 2021 年 5 月中には完成する予定である。

(3) TOF コード (Ver.3) の高速化 (JHPCN 研究資源を利用しない)

TOF 作用コード (Ver.3) をより大きな格子サイズでの計算を可能とするために並列化と

SX-Aurora TSUBASA の能力を最大限に活用して計算速度を上げることを目標にプログラムコードの改良を大阪大学の協力のもとに実施している。この課題についても2020年度内に完成することができなかったが2021年5月中には完成する予定である。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

2019年度の後半で研究に遅れが生じた。そのため申請時に設定した研究課題に対しては30%程度を終了したことになる。2019年度の遅れはWF作用コードで前処理付き共変勾配法の前処理法としてMass precondition法を単純に導入するだけでなくさらに改良を加えようとして試行錯誤を繰り返した。このため研究全体を遅延させた。最終的にMass precondition法を単純に導入し、さらなる高速計算を実現するために並列化することにより計算処理を効率化する方向で研究を進めている。研究の遅れを回避してもできる研究内容を優先する形で研究課題を再設定した。再設定した研究課題に関しては70%を実現していると考えている。

中間報告で2本の論文の作成計画を書いたが、両論文とも年度内には完成できなかった。いずれもまとめる段階での補足的なシミュレーションとデータ解析が完成を遅らせている原因である。夏までにはどちらも確実に投稿する。

2021年度に関しては、WF作用コードのフルQCDによるシミュレーションとTOF作用コードにMass precondition法を導入しフルQCD用書き換える作業を開始する。これら2つのコードにより物理的な成果が得られることを期待している。

7. 研究業績一覧（発表予定も含む。投稿中・投稿予定は含まない）

- (1) 学術論文（査読あり）
なし
- (2) 国際会議プロシーディングス（査読あり）
Y. Murakami, A. Nakamura, M. Sekiguchi, H. Wada, M. Wakayama, “Lattice study of meson properties at fine temperature using the truncated overlap fermions”, Proceedings of Science 363 045, pp. 1-7 2020.
- (3) 国際会議発表（査読なし）
なし
- (4) 国内会議発表（査読なし）
なし
- (5) 公開したライブラリなど
本研究で基にしているLattice tool kitは以下のWebページで公開している。JHPCNで開発したコードも検証後随時公開して行く方針である。
<https://nio-mon.riise.hiroshima-u.ac.jp/LTK/>
- (6) その他（特許、プレスリリース、著書等）
国際会議プロシーディングス（査読なし）
M. Wakayama, Y. Murakami, A. Nakamura, M. Sekiguchi, H. Wada, Proceedings of “Spectroscopy of all mesons from lattice QCD with the truncated overlap fermions”, The 18th International Conference on Hadron Spectroscopy and Structure, pp.104-108, August 2020, World Scientific.