

jh200031-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、繰り込んだ質量を一定とするパラメータでスケール設定関数とカイラル転移温度を決定するとともに、温度スケールを修正して得られた相図が他グループの相図とコンシステントであることを確認した。また、低温高密度領域におけるハドロンスペクトルやハドロン間相互作用を測定するためのコード開発を進めつつ、これらのハドロンの性質のみならず、フラックスチューブや超流動密度の測定にも不可欠となる配位生成用コードのチューニングのため、京都大学学術情報メディアセンターの次年度プログラム高度化共同研究に応募し採択された。

### 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 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

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。

似を全く使わない第一原理計算で調べる。そのため計算コードの開発から行い、相図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の性質解明に注力する。

具体的には、

【目的 i】 ハドロン質量・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 ii】 フラックスチューブの密度依存性

【目的 iii】 超流動密度の導出のための解析法（スパースモデリング法）の構築

### 2. 研究の目的と意義

#### (目的)

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モデルである「SU(2) ゲージ理論 (2 カラー QCD) の有限温度・有限密度系」を、近

を目標とし、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の性質に対して新しい知見を得る。

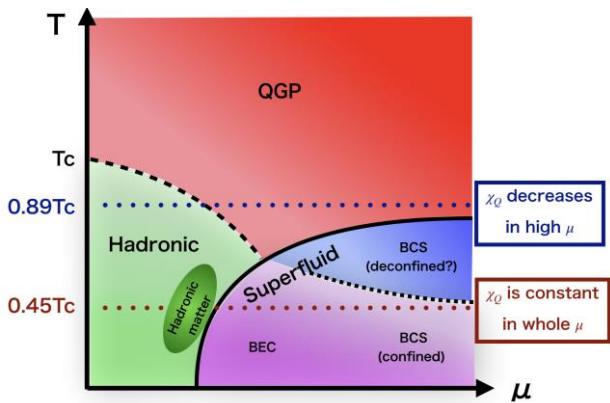


図 1 : 2 カラー-QCD 相図 (JHEP 01, 181 (2020) より)。

2018 年度までに 2 カラー-QCD での相図の概略が分かり、2019 年度 (昨年度) は 2 つの温度 ( $T=0.89T_c$  と  $T=0.45T_c$ ) についての詳細な有限密度相図を得た (図 1)。その結果、高温領域にはクォーク・グルーオン・プラズマ (QGP) 相、低温低密度領域にはハドロン相、低温高密度領域には超流動相が出現し、超流動相においては、中間密度領域にボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) 相、高密度領域に BCS 相 (閉じ込めあり) があると分かった。また、 $T_c$  より低い 2 つの温度を調べると、温度により現れる相やトポジカル感受率 ( $\chi_Q$ ) の密度依存性も異なると分かり、結果として低温高密度領域の豊かな相図を得た。

今年度はさらに研究を進め、超流動相が現れる低温領域において、ハドロンの質量スペクトルや核力、フラックスチューブの密度変化を明らかにする。さらに、最終的な大きな目標である「超流動密度の決定」に向け、新しい解析方法 (スパースモデリング法) の有用性をクエンチ QCD で調べる。

**(意義)**

一般的な  $SU(N_c)$  理論では、有限密度下で計算を行うと作用が複素数になる「符号問題」と、高密度領域で仮想粒子の対生成・対消滅が生じて「シミュレーションが不安定になる問題」

があり、理解があまり進んでいない。そこで、我々は、現実の QCD と近い性質を持ちつつ、有限密度系でも符号問題が生じない  $SU(2)$  2 フレーバー理論を考え、さらに、作用に粒子・反粒子の対称性を破る「ダイクォーク源」を加えることで不安定性問題を回避する事にした。この方法の実践は日本初である。計算方法の有効性を調べ、チューニング等を実行し、今後同じような問題を持つ様々な分野に活用できると期待される。

また、研究対象である QCD 型理論の第一原理計算による超流動性の解明は、中性子星内部で実現されている有限密度 QCD の性質に対して定性的な理解を与える重要課題である。本申請課題では独自のアプローチによりこの問いに対して結論が得られる事が期待される。

**3. 当拠点公募型研究として実施した意義**

計算機科学の分野では符号問題に対して様々なアプローチが提案されており、我々の手法はその中でも独自のアプローチとなっている。その手法は、高密度領域まで計算可能なハイブリッド・モンテカルロ・コードであり、現在の格子 QCD 分野でもっともスタンダードな計算手法を元に、有限密度効果とダイクォーク源の効果を加えて拡張したものである。2017 年度までに、ベクトル型計算機の SX-ACE とスカラー型の計算機である XC40 に対して並列計算コードを開発し、2018-2019 年度にはチューニングを行ってきた。

さらに、計算科学分野において、第一原理計算による有限密度 QCD 型理論の相図の決定は、中性子星同士の合体が重力波等で観測された今日、重要課題となっている。しかしながら、有限密度の計算コストは非常に高く、また相構造は未だ未知の部分が多い。効率よくインパクトのある成果を得るためには、多数の計算機ノードを並行して使うことが必要不可欠となる。

#### 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。

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  $Nt=16$  ( $Nt$  は温度方向の長さ) と、 $T_c$  より少し下の温度に対応する  $Nt=8$  で実現される相の化学ポテンシャル ( $\mu$ ) 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、 $Nt=16$  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。)

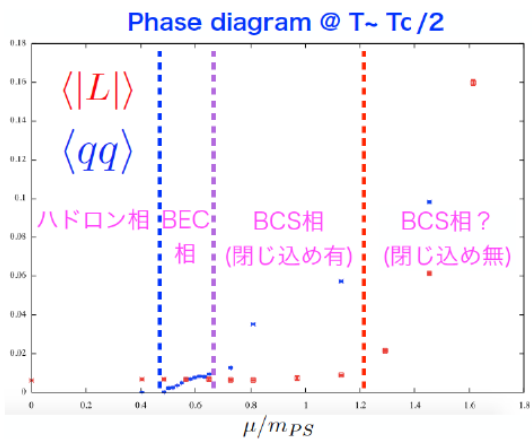


図 2：低温 2 カラー QCD の有限密度相図。赤はポリヤコフープ、青はダイクォーク凝縮、 $m_{ps}$  は擬スカラーメソンの質量を表す。

さらに、それより高い温度に対応する  $Nt=8$  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た。

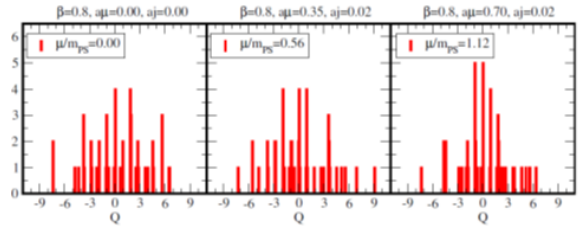


図 3： $0.45T_c$  における 2 カラー QCD のトポロジカル電荷分布。左から順に、ハドロン相、BEC 相、BCS 相のデータ。図は、JHEP 01, 181 (2020) からの抜粋。

2019 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。その過程で、各相でトポロジカル電荷を詳しく調べた結果、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定性的にも知られていなかった新しい発見を得た (図 3)。また、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 4)。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  $m_{ps}/2$  に近づくにつれて減少するため、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られる。なお、図 1 において“Hadronic matter”と記されている領域が、図 4 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。

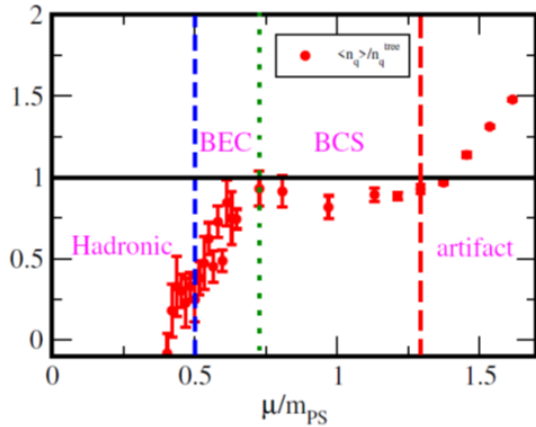


図 4:  $0.45T_c$  におけるクォーク数密度の  $\mu$  依存性。データはダイクォーク源のパラメータ  $j \rightarrow 0$  の外挿値。図は, JHEP 01, 181 (2020) からの抜粋。

さらに,  $\mu=0$  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 5)。

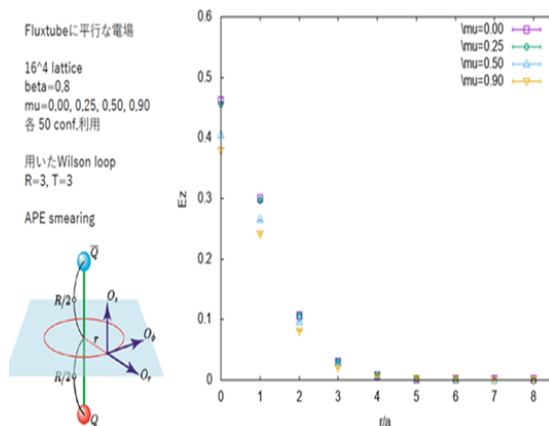


図 5:  $0.45T_c$  におけるクォーク・反クォーク間のカラーフラックスチューブの予備的結果 ( $a\mu=0, 0.25, 0.50, 0.90$ )。縦軸は左図上方向のカラー電場, 横軸はクォーク・反クォークを結ぶ軸からの距離。

また, 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 相関関数に用いる研究を行い, クエンチ近似のもと, 粘性率についての予備的結果を得た。

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
  - (2018 年度には, 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。2019 年度には, SX-ACE でも約 54 倍高速化。)
- 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
- フラックスチューブ測定コードの構築
- スパースモデリング法のコードの構築

の 7 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

今年度は、さらに研究を進め、繰り込んだ質量を一定とするパラメータでスケール設定関数とカイラル転移温度を決定 (7. (1) 中の学術論文 PTEP 2021, 013B05 (2021)) するとともに、温度スケールを修正して得られた相図が他グループの相図とコンシステントであることを確認した。また、超流動相が現れる低温領域において、ハドロンの質量スペクトルや核力、フラックスチューブの密度変化を明らかにするためのコード開発及び配位生成に注力した。さらに、最終的な大きな目標である超流動密度の決定に向け、新しい解析方法 (スパースモデリング法) の有用性をクエンチ QCD で調べた (7. (1) 中の学術論文 JHEP 07, 007 (2020))。

以下、上記成果の各論を述べる。

### ●スケール設定

繰り込んだ質量を一定とするパラメータで、スケール設定関数とカイラル転移温度 (図 1 の  $T_c$ ) を決定し、結果を 7. (1) 中の学術論文 PTEP 2021, 013B05 (2021) にまとめた。これによって 2 カラー QCD 相図 (図 1) の温度スケールが修正され、新たに図 6 を得た。

### ●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の生成を昨年度より継続的に行っている。また、ハドロン質量決定のために必要なハドロンの 2 点相関関数の測定コードを構築し、MPI 化も完了した。

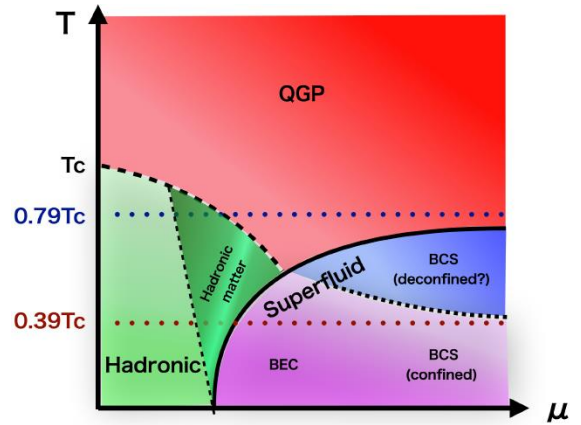


図 6: 2 カラー QCD 相図 (温度スケール修正後)。

### ●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作成し、 $16^4$  の配位 ( $a\mu=0, 0.25, 0.35, 0.50, 0.70$ ) で、カラー源としてのクォーク・反クォークに対応するウィルソンループまたはポリヤコフループとプラケットの相関関数を測定した。その結果、誤差は大きいもののカラー電場の侵入長には密度依存性が見られること、また高密度においても電場は絞られており、閉じ込め相と同様の性質を持っていることがわかった (図 7)。

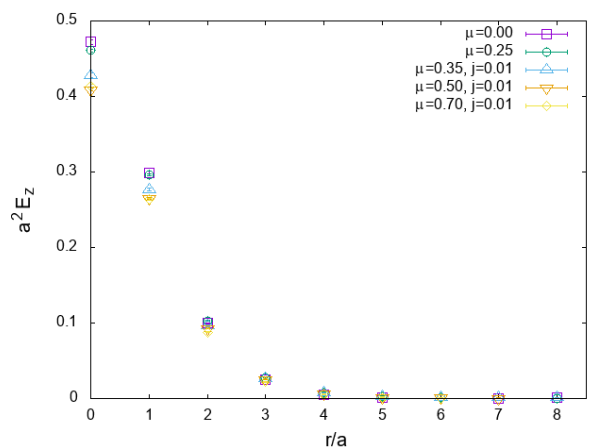


図 7: フラックスチューブの密度依存性。図 5 のアップデート (7. (3) 中の YITP workshop 発表スライド (2020 年 11 月 6 日) より)。



●スパースモデリング法

スパースモデリング法がずり粘性率の評価に有効であることを、グラディエントフロー法によって得られたクエンチ QCD のエネルギー運動量テンソルの相関関数を用いて実証した (図 8)。

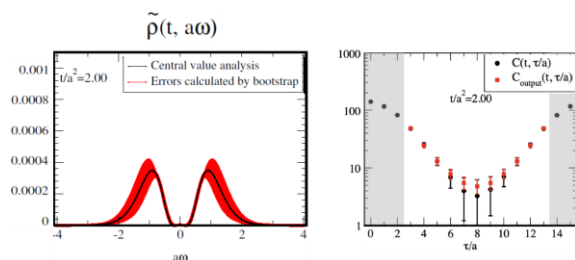


図 8 : スパースモデリング法を用いたスペクトル関数の推定。入力データは、クエンチ QCD のエネルギー運動量テンソルの相関関数 (右図の黒データ)。図は、7. (1) 中の学術論文 JHEP 07, 007 (2020) からの抜粋。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

●スケール設定

論文が出版されたことにより相関の定量性が格段に改善され、今年度の全ての計画に対する礎ができた。

●ハドロン質量の密度依存性

図 6 の低温領域でハドロン相と超流動相をカバーするべく、昨年度に引き続き、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。目標とする配位数は当初より上方修正した。ハドロン質量測定のためのコードも完成し、有限密度ハドロン相におけるハドロンの性質を調べることが次の目標となる。【計画 I】完遂に向けて、7 割方の進展と判断している。並行して、ハドロン間相互作用を測定するためのコード開発も HAL QCD 法の専門家とともに進めており、ゼロ密度のコードの開発及びテスト計算を終了した。【計画 II】は 8 割程度進んだと考えている。

●フラックスチューブの密度依存性

すでに得られている格子体積  $16^4$  の配位データを用いた予備的結果に対し、大きな格子体積 ( $32^4$ ) の配位データを用いることによりさらなる精度向上を目指している。【計画 III】完遂に向けて、8 割方の進展と判断している。

●スパースモデリング法

論文が出版されたことにより、【計画 IV】は完了した。

●計算コードの改良

上記の研究に必要な配位生成用コードのチューニングのため、京都大学学術情報メディアセンターの次年度プログラム高度化共同研究に応募し採択された。これは【計画 V】が半分程度進んだことに相当する。

●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 (388, 800 ノード時間積) のうち  
46.6%使用。

阪大計算機資源

SX-ACE :  
配分 (17, 100 ノード時間積) のうち  
100.0%使用。

OCTOPUS・CPU ノード :

配分 (177, 884 ノード時間積) のうち  
100.0%使用。

使用した計算資源は、SX-ACE ではハドロン質量の測定、XC40, OCTOPUS では  $32^4$  の配位生成

( $a\mu=0.25, 0.27, 0.30, 0.35, 0.40, 0.50, 0.70$ ) にあてられた。

今年度後半で、残りの計算資源を使い切った。そこでは、XC40 をグループ内で計画的にシェアしあいながら貴重な計算資源を  $32^4$  の配位生成 ( $a\mu=0$  も追加) にあてた。その結果、配位生成の今年度の目標は 100%, 最終目標の約半分にまで達した。

#### ●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、超流動相が現れる低温領域において、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与える。特に質量スペクトルの結果を得ることに注力する。

また、採択された京都大学学術情報メディアセンターのプログラム高度化共同研究を推進することにより、配位生成用コードのチューニングを行う。

### 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)

Kei Iida, Etsuko Itou, and Tong-Gyu Lee, “Relative scale setting for two-color QCD with  $N_f=2$  Wilson fermions,” *Progress of Theoretical and Experimental Physics* **2021**, 013B05 (2021), 17 pp.

Toshiaki Fujimori, Etsuko Itou, Tatsuhiro Misumi, Muneto Nitta, and Norisuke Sakai, “Lattice  $CP^{N-1}$  model with  $Z_N$  twisted boundary condition: bions, adiabatic continuity and pseudo-entropy,”

*Journal of High Energy Physics* **08**, 011 (2020), 29 pp.

Takuya Furusawa, Yuya Tanizaki, and Etsuko Itou, “Finite-density massless two-color QCD at the isospin Roberge-Weiss point and the 't Hooft anomaly,” *Physical Review Research* **2**, 033253 (2020), 20 pp.

Etsuko Itou and Yuki Nagai, “Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions,” *Journal of High Energy Physics* **07**, 007 (2020), 32 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)

Etsuko Itou (口頭発表), “Phase and topology of two-color QCD at low temperature and high density,” YITP workshop: Probing the physics of high-density and low-temperature matter with ab initio calculations in 2-color QCD, online, November 6, 2020.

Katsuya Ishiguro (口頭発表), “Color flux tubes in two-color QCD at low temperature and high density,” YITP workshop: Probing the physics of high-density and low-temperature matter with ab initio calculations in 2-color QCD, online, November 6, 2020.

Etsuko Itou (口頭発表), “Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions,” Asia-Pacific Symposium for Lattice Field Theory (APLAT 2020), online, August 6, 2020.

Etsuko Itou (セミナー講演), “Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions,” BNL High Energy / Nuclear Theory / RIKEN Seminars, online, May 14, 2020.

#### (4) 国内会議発表 (査読なし)

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」, 2020 年度 RCNP スパコン共同利用成果・進捗報告会, オンライン, 2021 年 3 月 25 日。

伊藤悦子 (口頭発表): 「低温高密度における QCD 型理論の現象 -中性子星内部の理解にむけた第一原理計算-」, 素粒子現象論研究会 2020, 大阪市立大学 (杉本キャンパス)・オンライン, 2020 年 11 月 27 日。

伊藤悦子 (口頭発表): “Two-colour QCD phases and the topology at low temperature and high density,” 第 5 回 クラスター階層領域研究会, オンライン, 2020 年 9 月 25 日。

伊藤悦子 (口頭発表): 「スパースモデリング法によるスメアされた相関関数からスペクトル関数の推定」, 日本物理学会 2020 年秋季大会, オンライン, 2020 年 9 月 15 日。

伊藤悦子 (口頭発表): 「2 カラー-QCD の低温高密度相におけるハドロンスペクトル」, 日本物理学会 2020 年秋季大会, オンライン, 2020 年 9 月 14 日。

伊藤悦子 (招待講演): 「スパースモデリングによる QCD 粘性の推定: 格子 QCD での第一原理計算から」, 第 7 回 「物質階層を横断する会」ハドロ核・原子核・原子・分子合同ミーティング, オンライン, 2020 年 9 月 2 日。

伊藤悦子 (口頭発表): 「2 カラー-QCD の低温高密度領域における物理」, 基研研究会「素粒子物理学の進展 2020」, オンライン, 2020 年 9 月 1 日。

#### (5) 公開したライブラリなど

スパースモデリングのコード:

<https://arxiv.org/src/2004.02426v2/anc>

#### (6) その他(特許, プレスリリース, 著書等)

京都大学基礎物理学研究所国際ワークショップの開催。

Organizers: Kei Iida, Etsuko Itou (Chair), Yuya Tanizaki

Title: Probing the physics of high-density and low-temperature matter with ab initio calculations in 2-color QCD

Number of participants: 90

Schedule: November 3-6, 2020

Venue: online

Home page:

<http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~qc2d/>