

jh200049-NAH

格子量子色力学に基づく初期宇宙の諸性質の精密数値解析

北澤 正清 (大阪大学)

概要

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。これらの研究は、gradient flow に基づく SFtX 法を使った物理量解析や、改良されたクエンチ近似などの新しい手法を使った数値計算を特徴とする。前年度までに研究推進のための数値計算体制が整備され、各数値計算のデータ蓄積が順調に推移したことにより、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、重クォーク極限 QCD の有限温度一次相転移の精密解析などに関する各研究課題の集大成ともいえる論文を公表することができた。未解析のデータを活用した今後の更なる研究の展開も予定している。

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

(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
江尻信司 シミュレーション実行とデータ解析
金谷和至 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
白銀瑞樹 シミュレーション実行とデータ解析
若林直輝 シミュレーション実行とデータ解析

は、我々人類の自然観の深化と直結する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、その性質を理解するうえでは格子場の理論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。

本研究では、初期宇宙に対応する超高温状態を格子場の理論に基づいて数値解析することにより

- 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

という三つの研究課題に関する精密解析を行い、初期宇宙を満たしていた物質を従来とは異なる新しい視点から理解し、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では遂行が困難で

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

ある。そこで本研究では、(1) gradient flow を使った解析手法である SftX 法による各種物理量の高統計解析、(2) 改良されたクエンチ近似による数値解析の高速化、などの処方を採用し、従来困難であった物理量の測定を実現する。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ことも目的としている。

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、カラーゲージ場の場の歪み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（エネルギー運動量テンソル）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数値計算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に対してこの解析を行い、閉じ込め相転移温度周辺においてカラーゲージ場が静的なクォークの存在によって受ける歪みを可視化し、その性質を調べる。

(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での相構造に注目し、従来の研究に対し、① gradient flow 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、従来の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 法に基づく SftX 法を用いることによってこの困難を克服する。

本研究は昨年度からの継続研究課題である。昨年度は、共同研究内におけるコードやデータフォーマットの共有化などを進めながら物理成果を挙げていたが、本年度はこれらの数値研究基盤に立脚して研究を進めることができた。これにより、本年度はデータ収集が円滑に進み、後述する課題（1）、（2）での集大成的な論文発表などの大きな成果を順調に挙げる事ができた。

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
て研究に取り組んだ。

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

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

前年度までに、非可換ゲージ理論の数値解析
において静的クォーク系の解析に必要な
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幾つか
の温度に対して終えた。各温度で 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
を行い、試験的な結果を得ていた。

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、数値計算結果に基づ
いて閉じ込め相転移を理解するための興味深
い結果を得た。

2) 重クォーク領域における QCD 相構造の精密解析

前年度は、重クォーク領域に存在する相転移
の次数が変化する点、すなわち臨界点に関する
研究に中心的に取り組んだ。従来の解析では時
間方向の格子点が $Nt=4$ だったのに対し、 $Nt=6, 8$
というより細かい格子間隔での数値計算を行
い、格子間隔依存性を調べた。

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ためのデータ収集を進め
た。

3) 境界条件を課した系における非等方圧力の測定

本研究では、非等方で有限な境界条件を設定
した有限温度系に生じる非等方な圧力の測定
に取り組んだ。前年度の数値解析により、臨
界温度より高温で、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
運動量テンソルを測定し、熱力学量を解析す
ることに成功した。この解析により、臨
界温度付近においては縦方向と横方向の圧力比の振
舞いが自由ボソン場の結果と全く異なり、境界
条件の効果が現れにくいという極めて興味深
い結果が得られた。

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の臨界温度周辺に

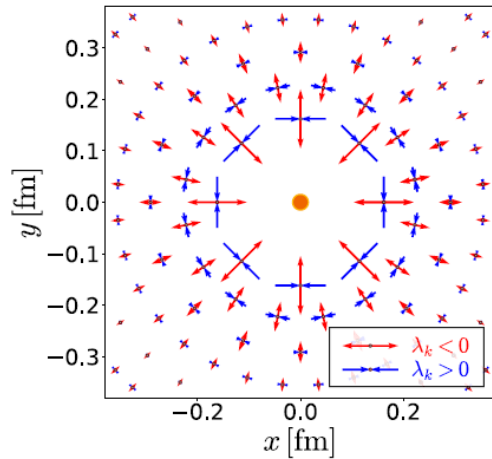


図 1：非閉じ込め相における静的クォーク周辺の応力構造[3]。応力の縦方向成分（引力）を赤矢印、横方向成分（斥力）を青矢印で示してある。

おける物質の性質を近接相互作用的な観点から理解することを目指すものである。

本年度は、前年度に蓄積した非可換ゲージ理論における Polyakov loop とエネルギー運動量テンソルのデータについて、更に統計量を増やしたうえで解析を行った。これにより、非閉じ込め相に静的クォークを一個置いた系における応力テンソルの空間構造解析に関する最終結果を得て、この研究成果を論文として発表した[3]。

この解析では、連続外挿を行う際に格子間隔誤差に由来するデータの振動がもたらすフィットの悪化などの問題があったが、tree level 補正を用いた格子間隔誤差の低減などの処置を行うことで、信頼性の高い連続外挿に成功したことも特筆に値する。

この解析により、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 $1/r^4$ で減衰するという結果が得られた(図 1, 2)。ただし、素朴な電磁気学ではエネルギー運動量テンソル各成分の絶対値が全て縮退するのに対し、今回計算を行った非可換ゲージ理論においては図 2 に示すように各成分の値に有意なずれが存在することが確認できた。

また、数値計算結果からは、エネルギー密度

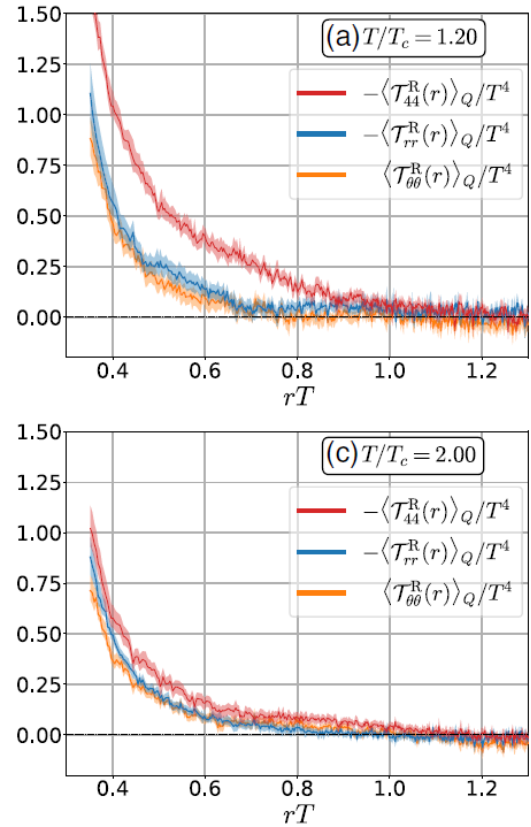


図 2：非閉じ込め相における静的クォーク周辺のエネルギー密度 ($-T_{44}$) および応力の縦方向成分 (T_{rr}) と横方向成分 ($T_{\theta\theta}$) の位置 r 依存性 [3]。

および応力テンソルの各成分の r 依存性は、 $1/r^4$ から有意にずれていることが分かった。このずれは、遠距離では熱的遮蔽に由来し、短距離ではゲージ結合定数のスケール依存性に由来するものである。実際、図 2 に示すエネルギー密度の温度依存性を見ると、 $rT \ll 1$ 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。

本研究では、これらの r 依存性に関する数値計算結果を理解するために摂動計算を最低次で行い数値計算結果と比較したほか、摂動計算の専門家に依頼し高次項を取り込んだ場合の摂動計算の結果と数値計算結果を比較する議論を進めている。

さらに、この解析のために生成したデータを用いてクォーク 2 体系および 3 体系のエネルギー運動量テンソルを解析する研究にも取り組んでいる。クォーク 2 体系に関しては、既に一部のデータに関する解析が終了しており、鋭意

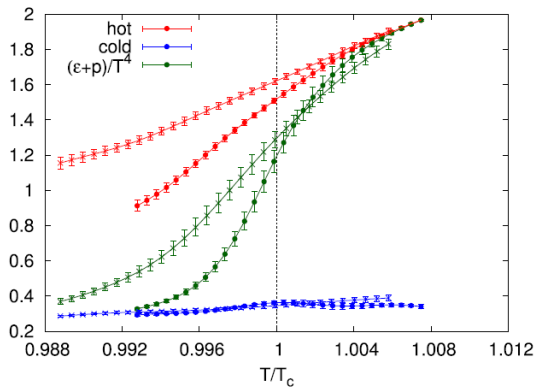


図3 : SU(3) 非可換ゲージ理論における臨界温度 T_c 付近における準安定状態の熱力学量の温度依存性 [1]。赤が高温相、青が低温相、緑が平均値で、太線が大体積の結果。

研究を進めている段階にある。

以上の解析は非可換ゲージ理論に対するものである。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 [4] で同様な解析を行うための数値計算も進めた。この研究に関しては、これまでにテスト解析を終え、本解析を行うための準備をしている段階にある。

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、QCD の重クォーク極限に相当する SU(3) 非可換ゲージ理論について、一次相転移周辺での熱力学量に関する精密解析を行った。前年度までに蓄積していたデータに加え、格子間隔の細かい $N_t=12, 16$ のデータ蓄積を行い、これらのデータを総合的に解析することによって、一次相転移に伴う潜熱の測定と、準安定状態の解析を行うことに成功し、これらの結果を論文として発表した [1]。

これらの解析では、SFtX 法による熱力学測定

による誤差低減が極めて有用な役割を果たした。潜熱 $\Delta \varepsilon$ の測定に関しては、我々が知る限り世界で初めて格子間隔が無小への連続外挿を行うことに成功し、

$$\Delta \varepsilon / T^4 = 1.117 \pm 0.040$$

という結果が得られた。また、一次相転移の二相共存状態において二つの相の圧力差がゼロとなることを高い精度で数値的に確認した。これは、物理的には当然の結果だが、数値計算の観点からは我々が採用する SFtX 法を含む解析手法の妥当性を確認するという意味で重要な結果である。

これに加え、相転移点周辺における準安定状態の熱力学量の解析を行い、いわゆるヒステリシス曲線を得た (図3)。これにより、臨界温度付近における低温相の熱力学量の温度依存性が極めて小さいことが分かった。また、上述の潜熱測定を行った際に比較的大きな有限体積効果が観測されていたが、この有限体積効果の起源が主に高温相の熱力学量の体積依存性に由来することが分かるなど、一次相転移に関する新たな知見が得られた。

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物質の性質を反映する基本的な物理量だが、従来の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。

空間の一方向に対して周期境界条件を課した場合の数値解析は前年度までに定量的な成果を得ていたため、本年度は空間の複数の方向に境界条件を課した場合の数値解析や、境界条件を反周期境界条件に変更した場合、また前年度の研究では臨界温度より高温しか調べていなかったが、より計算の困難な臨界温度より低温状態の解析へと研究を進めるための準備的

研究に取り組んだ。

複数の境界条件を課した場合と、臨界温度より低温の解析に関しては、現在データ生成を進めている段階にある。また、反周期境界条件を課した計算を行うためにはこの境界条件を取り込むための新しいルーチンを開発する必要がある。この数値計算を並列計算機上で効率的に遂行するためのアルゴリズムの開発と、テスト解析に取り組んだ。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

本年度は、前年度までに蓄積したコード開発や共同研究内での意思疎通に基づいて研究を進めることができ、研究が順調に進んだ。これにより、課題(1)、(2)に関しては本研究の当初の目標を達成したといえる結果が得られ、論文として発表することができた。課題(3)に関しては、前年度に定量的な結果が得られていたこともあって本年度はまとまった研究成果を報告するには至らなかったことは残念であったが、研究計画全体としては順調に研究が進み、実り多い成果を挙げることのできた一年間であったといえよう。

本研究は、JHPCN 研究課題としての研究は本年度で一旦終了とするが、本研究でこれまでに蓄積した数値計算データは更なる研究で活用可能であり、今後はこれらの資産を活用して研究を展開していきたい。例えば、静的クォーク系の解析のために測定した Polyakov loop とエネルギー運動量テンソルのデータは、本年度に解析したクォーク体系だけでなく、二体系、三体系の解析にも使える形式でデータを取得してあるため、直ちにこれらの研究へと応用可能である。今後、これらの解析へと研究を進めることを楽しみにしている。

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)

[1] M. Shirogane, S. Ejiri, R. Iwami, K. Kanaya, M. Kitazawa, H. Suzuki, Y. Taniguchi, T. Umeda, ‘Latent heat and pressure gap at the first-order deconfining phase transition of SU(3) Yang-Mills theory using the small flow-time expansion method’, Progress of Theoretical and Experimental Physics 2021, 013B08 (1-26), 2021

[2] T. Matsumoto, M. Kitazawa, Y. Kohno, ‘Classifying topological charge in SU(3) Yang-Mills theory with machine learning’, Progress of Theoretical and Experimental Physics, 2021, 023D01 (1-21), 2021

[3] R. Yanagihara, M. Kitazawa, M. Asakawa, T. Hatsuda, ‘Distribution of Energy-Momentum Tensor around a Static Quark in the Deconfined Phase of SU(3) Yang-Mills Theory’, Physical Review D102, 114522 (1-12), 2020

[4] Y. Taniguchi, S. Ejiri, K. Kanaya, M. Kitazawas, H. Suzuki, T. Umeda, ‘ $N_f=2+1$ QCD thermodynamics with gradient flow using two-loop matching coefficients’, Physical Review D102, 059903 (1-13), 2010

(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)

[5] M. Kitazawa, ‘Energy-momentum tensor in static-quark systems’, at the Proton MassWorkshop: Origin and Perspective (Argonne National Laboratory, USA (online), 15 Jan. 2021, 参加者約 50 名, 招待講演)

[6] M. Kitazawa, ‘Search for phase structure of QCD by relativistic heavy ion collisions’, at the Prospects on particle and nuclear

physics, and related subjects (Osaka University (online), 30 Nov. 2020, 参加者約 30 名, 招待講演)

[7] M. Kitazawa, 'Energy-momentum tensor on the lattice', at the Extreme Nonequilibrium QCD (ONLINE) (India, online, 7 Oct. 2020 参加者約 100 名, 招待講演)

[8] M. Kitazawa, 'Diffusion Dynamics of Fluctuations of Conserved Charges', at the Online seminar series on "RHIC Beam Energy Scan: Theory and Experiment" (China, online, 8 Sep. 2020, 参加者約 100 名, 招待講演)

[9] M. Kitazawa, S. Mogliacci, I. Kolbe, W. A. Horowitz, 'Anisotropic pressure induced by finite-size effects at nonzero temperature in SU(3) Yang-Mills theory', at the Asia-Pacific Symposium for Lattice Field Theory (APLAT 2020), (online, 4 Aug. 2020, 参加者約 200 名)

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[10] 北澤正清 '重イオン衝突実験におけるゆらぎを用いた QCD 相転移探索', 日本物理学会 2020 年秋季大会 (素核宇) (於オンライン、2020 年 9 月 14 日-9 月 17 日)

[11] 柳原良亮, 北澤正清, 浅川正之, 初田哲男, '静的クォーク周辺におけるエネルギー応力の空間分布とその温度依存性', 日本物理学会 2020 年秋季大会 (素核宇) (於オンライン、2020 年 9 月 14 日-9 月 17 日)

[12] 北澤正清, '格子量子色力学に基づく初期宇宙の諸性質の精密解析', 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 第 12 回拠点シンポジウム (THE GRAND HALL, 東京都, 品川区 (online), 7.09, 2020)

[13] 江尻 信司, '有限密度格子ゲージ理論におけるセンター対称性による符号問題の回避法を用いた粒子密度確率分布関数', 熱場の量子論とその応用 2020 (TFQT 2020) (KEK, Tsukuba, Japan (online),

8.24-26, 2020)

[14] 江尻 信司, 白銀 瑞樹, 石見 涼, 金谷 和至, 北沢 正清, 鈴木 博, 谷口 裕介, 梅田 貴士, 'Small flow-time expansion 法による SU(3) 格子ゲージ理論の一次相転移点における潜熱と圧力差', 日本物理学会第 76 回年次大会 (オンライン開催, 3.12-15, 2021)

(5) 公開したライブラリなど
なし

(6) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)
なし