

jh210016-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、相状態についての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、相図の決定、および興味ある物理量の測定を行う。今年度は低温高密度領域におけるハドロン質量、フラックスチューブの測定において、著しく精度を向上させるとともに、状態方程式についての初期成果を得た。また、京都大学学術情報メディアセンターとの共同研究により配位生成用コードのチューニングを進めるとともに、大阪大学サイバーメディアセンターの SQUID ベクトルノードにおいて、測定用コードのベクトル化率を上げた。

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，ジョブの実行と解析，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。

村上耕太郎：コード開発，ジョブの実行と解析。

原山卓也：チューニング。

伊藤泰善：チューニング。

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、近似を全く使わない第一原理計算で調べる。そのために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。

今年度は昨年度に引き続き、超流動性の現れる高密度領域にて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の解明

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。

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

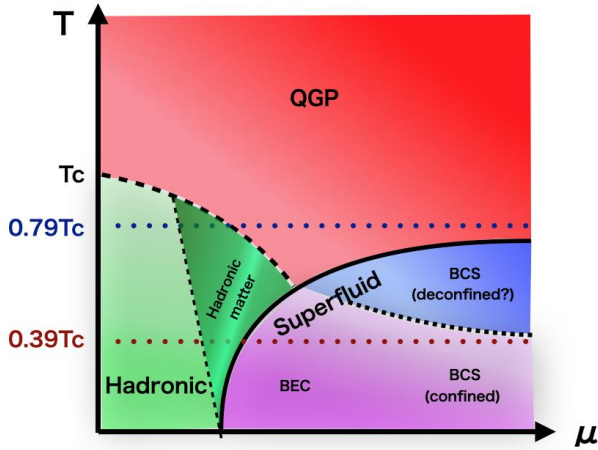


図 1： 2 カラー-QCD 相図。

2018 年度までに 2 カラー-QCD での相図の概略が分かり、2019 年度は 2 つの温度についての詳細な有限密度相図を得た。さらに 2020 年度は、 $\mu=0$ における T_c などのスケール設定を行い、計算している温度の決定 ($T=0.79T_c$ と $T=0.39T_c$) を行った。これらの成果をまとめた結果、図 1 が得られ、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、超流動相には、中間密度領域にボーズ・アインシュタイン凝縮 (BEC) 相と、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ロジカル感受率 (χ_Q) の密度依存性も異なると分かり、低温高密度領域の豊かな相構造を得た。

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ハドロン間相互作用、フラックスチューブの密度変化を明らかにする。昨年度後半から既に実施している課題であり、今年度は特に質量スペクトルの結果を得ることを目標とする。

(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 年度以降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 (μ) 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。)

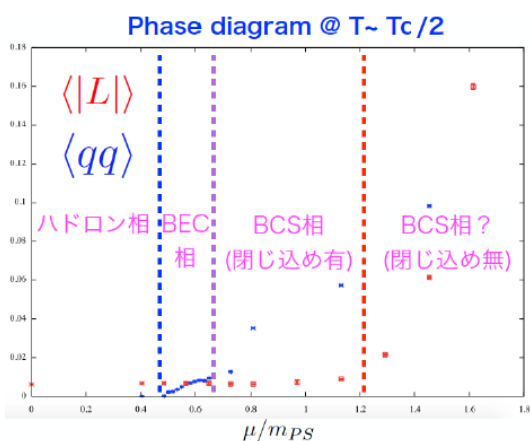


図 2：低温 2 カラー QCD の有限密度相図。赤はポリヤコフープ、青はダイクォーク凝縮、 m_{ps} は擬スカラーメソンの質量を表す。

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 μ 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 μ 依存性が全く異なることを示した。

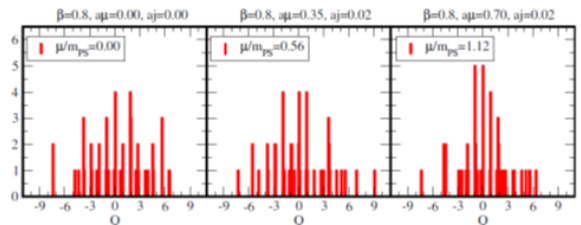


図 3： $0.45T_c$ における 2 カラー QCD のトポロジカル電荷分布。左から順に、ハドロン相、BEC 相、BCS 相のデータ。図は、JHEP 01, 181 (2020) からの抜粋。

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 μ 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 μ 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、 μ 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 μ の領域に相当する。

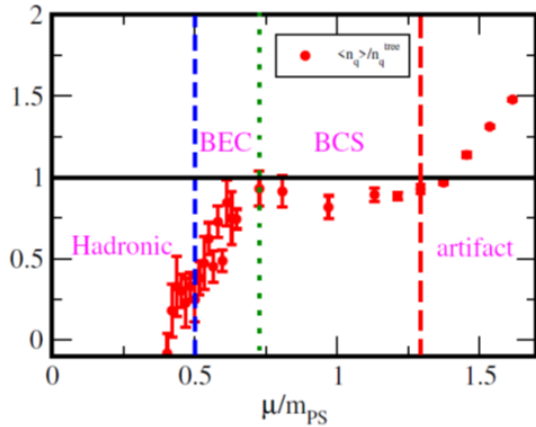


図 4： $0.45T_c$ におけるクォーク数密度の μ 依存性。データはダイクォーク源のパラメータ $j \rightarrow 0$ の外挿値。図は、JHEP 01, 181 (2020) からの抜粋。

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)。

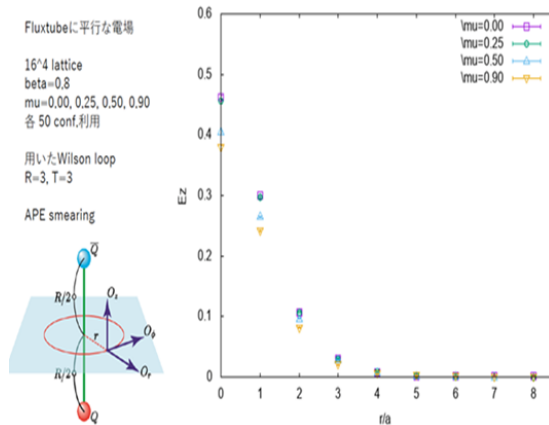


図 5： $0.45T_c$ におけるクォーク・反クォーク間のカラーフラックスチューブの予備的結果 ($a\mu=0, 0.25, 0.50, 0.90$)。縦軸は左図上方向のカラー電場、横軸はクォーク・反クォークを結ぶ軸からの距離。

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。

2020 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するとともに、温度スケールを修正して得られた相図 (図 1) 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 におけるずり粘性率に対して詳しく調べた (図 6)。

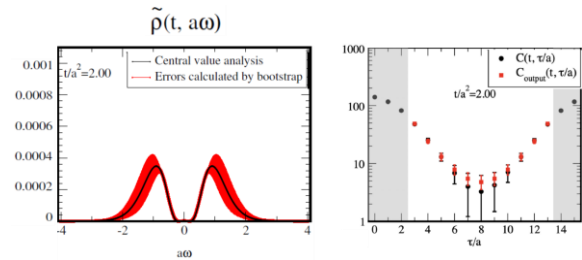


図 6：スパースモデリング法を用いたスペクトル関数の推定。入力データは、クエンチ QCD のエネルギー運動量テンソルの相関関数 (右図の黒データ)。図は、JHEP 07, 007 (2020) からの抜粋。

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

●ハドロン間相互作用の HAL QCD 法に基づくコード開発

の 8 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, 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ハドロン間相互作用, フラックスチューブの密度変化を明らかにするという昨年度後半から既に行っている課題に取り組んだ。低温高密度領域におけるハドロン質量,

フラックスチューブの測定において, 32^4 の配位を用いて著しく精度を向上させるとともに, ハドロン相互作用測定用のコード開発を行った。また, 状態方程式についての初期成果を得た。

以下, 上記成果の各論を述べる。

●ハドロン質量の密度依存性

コードの見直しとジョブの実行を進めた。いろいろなハドロンの質量の密度依存性 (図 7 はバリオンの場合) について, 先行研究との比較を行うとともに, 2 点関数からの質量導出法を改良した。

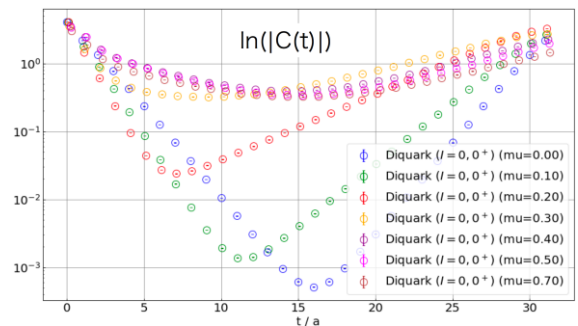


図 7: バリオン (スカラーダイクォーク) の 2 点関数の μ 依存性 (7. (4) [1])。 μ に依存して傾き (\sim 質量) が大きく変化することがわかる。

●フラックスチューブ

国際会議プロシーディングスに成果を発表した (7. (2) [2])。その際, 32^4 の配位を用いて図 5 をアップデートし, 系統的にクォーク・反クォーク間ポテンシャル (図 8) およびカラー電場 (図 9) の密度依存性を得るに至った。

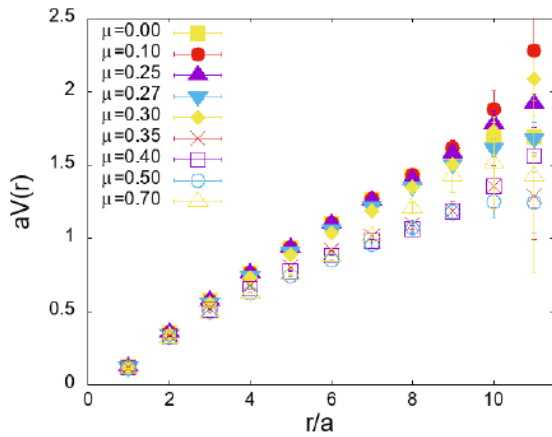


図 8：クォーク・反クォーク間ポテンシャルの密度依存性 (7. (2) [2])。

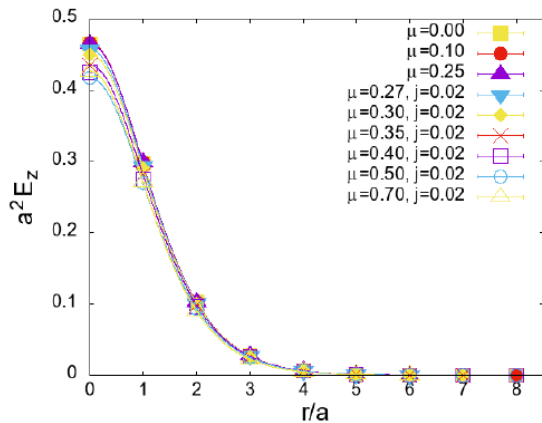


図 9：カラー電場分布の密度依存性 (7. (2) [2])。

●ハドロン間相互作用

HAL QCD 法の専門家が新たに課題に参加し、同法に基づくコード開発が飛躍的に進展した。

●状態方程式

中性子星観測データより制限される高密度物質の状態方程式を念頭に置き、 16^4 の配位を補完しつつエネルギー密度と圧力の測定を行った。その際、新たな fixed scale 法を考案し、コード開発を行った。予備的結果は、音速のピークが BCS 相中出现することを示唆する。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

●京大 XC40 でのチューニング

ヒューレット・パッカード社よりチューニングの専門家 2 名が新たに課題に参加し、配位生成コードに関する効率向上を目指した。その結果、RHMC コードにおいて 2.42 倍の高速化が実現され、【計画 IV】が完了した。

●ハドロン質量の密度依存性

コードの見直し、配位生成の補完を行いつつ、ハドロン質量の測定まで進めた。結果として、【計画 I】は 8 割方進展したと判断している。

●ハドロン間相互作用

HAL QCD 法に基づくコード開発は、 $\mu \neq 0$ かつ $j=0$ の場合に拡張され、そのテストが完了した段階である。【計画 II】自体は当初計画以上の進捗といえるが、最終的な相互作用の測定に向けては【計画 I】の進捗に左右される。

●フラックスチューブ

国際会議プロシーディングス (7. (2) [2]) の掲載が決定し、限定的な範囲ではあるが、正式に結果が公表された。また、クォーク・反クォーク間ポテンシャルを得るにあたり、SQUID ベクトルノードでベクトル化率の向上 (8%→98%) を実現した。最終結果を得ることが課題として残っており、【計画 III】は 8 割方の進展と判断している。

●状態方程式

当初計画にはない新規のプロジェクトであるが、中性子星観測データから高密度物質の状態方程式が制限をうけるようになってきた現状においては喫緊の課題であり、優先して研究を進めた。

●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。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 (276,480 ノード時間積) のうち
98.3%使用 (年間では 100%使用)。

阪大計算機資源

SQUID :
CPU ノード (配分 120,893 ノード時間積)
ベクトルノード (配分 2,492 ノード時間積) のうち
10.1%使用 (年間では 100%使用)。

OCTOPUS・CPU ノード :
配分 (38,462 ノード時間積) のうち
72.2%使用 (年間では 100%使用)。

今年度前半に使用した計算資源は、SQUID の CPU ノードではフラックスチューブ・状態方程式の測定、OCTOPUS では 32^4 の配位生成 ($a\mu=0.1, 0.2$), XC40 では 32^4 の配位生成 ($j=0.02, a\mu=0.27, 0.30, 0.35, 0.40, 0.50, 0.70$) 及びゲージ固定、ハドロン質量・状態方程式の測定にあてられた。

今年度後半で、残りの計算資源をグループ内で計画的にシェアしあいながら使い切った。SQUID の CPU ノードでは、フラックスチューブ(図9)、状態方程式の測定を継続しつつ、ハドロン質量(図7)の測定、 32^4 の配位生成 ($j=0.01, a\mu=0.27, 0.30, 0.35, 0.40, 0.50, 0.70$) 及びゲージ固定を行った。SQUID のベクトルノードでは、クォーク・反クォーク間ポテンシャル(図8)の測定を行った。OCTOPUS では 32^4 の配位生成 ($a\mu=0.2$) を行った。なお、XC40 の使用は前期の継続であった。

●今後の展望

状態方程式の測定、ハドロン質量の密度依存性の解明、ハドロン間相互作用のコード開発をさらに進めたい。特に、音速の密度依存性についての結果を論文にまとめ、ハドロン質量の測定において、超流動転移近傍のふるまいや非連結ダイアグラムの寄与を調べるとともに、フラックスチューブの測定において、ウィルソンループのサイズを大きくすることを試みたい。

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] Masazumi Honda, Etsuko Itou, Yuta Kikuchi(+), and Yuya Tanizaki, "[Negative string tension of a higher-charge Schwinger model via digital quantum simulation.](#)" Progress of Theoretical and Experimental Physics **2022**, 033B01 (2022), EDITOR'S CHOICE.

[2] Masazumi Honda, Etsuko Itou, Yuta Kikuchi(+), Lento Nagano, and Takuya Okuda, "[Classically emulated digital quantum simulation for screening and confinement in the Schwinger model with a topological term.](#)" Physical Review D **105**, 014504 (2022).

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

[1] Etsuko Itou and Yuki Nagai, "[QCD viscosity by combining the gradient flow and sparse modeling methods.](#)" arXiv:2110.13417 (Proceedings of The 38th International Symposium on Lattice Field

Theory, LATTICE2021 26th–30th July, 2021, to appear as PoS(LATTICE2021)214).

[2] Katsuya Ishiguro, Kei Iida, and Etsuko Itou, “[Flux tube profiles in two-color QCD at low temperature and high density.](#),” arXiv:2111.13067 (Proceedings of The 38th International Symposium on Lattice Field Theory, LATTICE2021 26th–30th July, 2021, to appear as PoS(LATTICE2021)063).

(3) 国際会議発表 (査読なし)

[1] Etsuko Itou (招待講演), “Sparse modeling approach to obtaining the QCD shear viscosity from smeared correlation functions,” ECT* online workshop: Tackling the Real-Time Challenge in Strongly Correlated Systems: Spectral Properties from Euclidean Path Integrals, online, September 14, 2021.

[2] Etsuko Itou (招待講演), “Digital quantum simulation for screening and confinement in gauge theory with a topological term,” RIKEN-Vancouver Joint Workshop on Quantum Computing, online, August 25, 2021.

[3] Katsuya Ishiguro (ポスター発表), “Flux tube profiles in two-color QCD at low temperature and high density,” The 38th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021), online, July 28, 2021.

[4] Etsuko Itou (口頭発表), “QCD viscosity by combining the gradient flow and sparse modeling methods,” The 38th Annual International Symposium on Lattice

Field Theory (Lattice 2021), online, July 26, 2021.

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[1] 伊藤悦子 (口頭発表): 「2カラーQCDにおけるハドロンの性質の密度依存性」, 2021年度RCNPスパコン共同利用成果・進捗報告会, 2022年3月30日 オンライン。

[2] 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状態方程式」, 日本物理学会第77回年次大会, 2022年3月16日 オンライン。

[3] 伊藤悦子 (口頭発表): 「2カラーQCDの低温高密度相における状態方程式」, 日本物理学会2021年秋季大会, 2021年9月15日 オンライン。

[4] 伊藤悦子 (口頭発表): 「量子計算でみる負のストリングテンションの出現」, 日本物理学会2021年秋季大会, 2021年9月14日 オンライン。

(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