

jh210032-NAH

格子 QCD によるスカラー中間子の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し、その計算速度の向上を課題としている。本年度はウィルソン・フェルミオン作用による SU(N) ゲージ相互作用のダイナミカル・シミュレーションコードの高速化とテストシミュレーションを実施した。さらに、トランケイテッド・オーバーラップ・フェルミオン作用のクエンチ近似のシミュレーション・コードの高速化を主な研究課題として取り組んだ。以上の研究課題の他に、2021 年度までの研究成果をまとめる上で必要になった追加のシミュレーションを実施した。

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 (千葉工業大学・情報科学部)
副代表 コード開発・演算実行・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)
理論的分析・アルゴリズム
- ・和田 浩明 (国士舘大学・理工学部)
コード開発・演算の実行
- ・村上 祐子 (広島大学・情報メディア教育研究センター)
アルゴリズム・コード開発

2. 研究の目的と意義

物質の質量の起源を解明するためには強い相互作用の第一原理である量子色力学 (QCD) を非摂動的に計算する必要がある。この計算を実現する手法として、時空間を離散化して格子上に QCD を定義した理論が格子 QCD である。物質の質量のほとんどの部分はその物質を構成する核子に由来し、その核子の質量は核子を構成する u クォークと d クォークの構成子としての質量であると考えられている。有効理論によると、この構成子クォークの質量は真空中で強い相互作用のカイラル対称性の自発的破れによって獲得されると考えられている。クォークが質量を獲得すると同時にクォーク・反クォークから構成される π 中間子と σ 中間子、 ρ 中間子と a_1 中間子 (これらの中間子はカイラル・パートナーと呼ばれる) も質量を獲得する。特にこの中でスカラー粒子である σ 中間子の性質及び質量の生成機構での役割を第 1 原理である QCD から明らかにすることを目標としている。また、素粒子の標準理論によると、もうひとつの物質の質量の起源は同じくスカラー粒子であるヒッグス粒子が質量を獲得す

ることにより生成されると考えられている。ヒッグス粒子により u 、 d クォークも僅かな質量を獲得する。この質量はカレント・クォーク質量と呼ばれる。ヒッグス粒子がより基本的な粒子から構成されていると考えるモデルは多数提案されてきたが完全なものはない。 σ 中間子の研究はこのヒッグス粒子を複合粒子と考えるモデル構築に関して新たな知見を与える可能性もある。

質量の起源に関する研究は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。実験的には CERN における高輝度 LHC 実験により検証される可能性がある。

使用できる研究資源の最大限に活かして可能な限り研究目標を達成するためにスーパーコンピュータの計算能力を最大限に活用するコード開発が本研究の最大の課題である。そのため本研究は、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。

本研究は、3 種類のシミュレーション・コードの作成を行うが、段階毎に現実的な目標を定めて大規模シミュレーションを実施し、各段階でコードの性能の確認を兼ねて物理的な結果を得るための大規模シミュレーションを進める。当面はスカラー中間子である σ 中間子の真空での性質を明らかにするためのコード開発とシミュレーションを実施するが、最終的には有限温度でカイラル対称性が部分的に回復し、臨界温度で相転移（カイラル相転移）が起こると期待されている現象を第 1 原理による大規模シミュレーションで再現することを目標とする。

今年度は、以下の 2 つの研究課題に取り組んだ。

- (1) ウィルソン・フェルミオン (WF) 作用による $SU(N)$ ゲージ相互作用コードの高速化とフル QCD シミュレーション・コードの開発 (JHPCN の計算機資源を利用する)

- (2) Truncated overlap フェルミオン (TOF) 作用のクエンチ近似コードの高速化と TOF 作用のフル QCD シミュレーション・コードの開発 (フル QCD コードの開発は JHPCN の計算機資源を使用しない)

さらに、JHPCN でのシミュレーションの結果を用いて可能な限り、その成果を論文にする。その際に追加的なシミュレーションを実施する (JHPCN 以外の計算機資源を利用する)。

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。本研究を進める上で現実のクォークが持つカイラル対称性を格子上で近似的に持つカイラルフェルミオンを採用する必要がある。カイラルフェルミオンには複数のモデルがあり、そのひとつである TOF 作用を用いて、中間子の伝搬関数の計算を実施する。TOF 作用は格子上のクォークにカイラル対称性を持たせるために 5 次元方向 (N_5) の自由度を持たせており、カイラル対称性を尊重するために多大な計算機資源を必要とする。TOF 作用で伝搬関数の計算を行うと、 $(3 \times 4 \times 8 \times 8 \times 8 \times 24 \times N_5)$ 次の正方行列に対する逆行列が入れ子構造になっている線形方程式を解く必要がある。 $N_5=48$ とした計算を計画すると、およそ 700 万次の正方行列に対する線形方程式を解法することになる。2020 年度まで TOF のコードはベクトル化に向いているため SX-ACE でのコード開発を進めてきた。そのため大阪大学が今年度導入した高性能計算・データ分析基盤システム SQUID の SX-Aurora TSUBASA で構成させるベクトルノード群は、これまでのコード開発の経験が活

かせ、SX-ACE で使用していたコードを継続して使用できる大阪大学を拠点とすることが本研究を実施するのに適した環境である。また、拠点である大阪大学サイバーメディアセンター(CMC)伊達進准教授に共同研究に参画していただいている。伊達准教授を中心とする大阪大学 CMC によるコード開発及びコードの最適化に加え数値計算手法の改良についての協力が得られる。以上より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

本研究課題では以下の 3 つの大規模シミュレーション用のコード開発を実施している。

(a) WF 作用による SU(N)ゲージ相互作用のダイナミカル・シミュレーション用のコード

(b) TOF 作用によるクエンチ近似でのシミュレーション用のコード (SU(3)ゲージ理論用すなわち QCD 用)

(c) TOF 作用によるダイナミカル・シミュレーション用 (フル QCD 用) のコード

このうち (a) と (b) は計算速度の向上を目指した改良の段階にある。(c) については、2020 年度の段階で未着手である。いずれのプログラムコードもベクトル化に適した構造を持っている。さらに並列化を上手く導入することで最終的に大阪大学の SQUID のベクトルノート群の能力を最大限に引き出すことが本共同研究の最重要課題である。

(a) 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 法を導入にして、もともと SU(3)ゲージ相互作用 (QCD) ためのプログラムであったものをさ

らに SU (N) ゲージ相互作用でのシミュレーション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高速化に手を付けたが 2020 年度内には改良が終わらなかった。

(b) TOF 作用によるクエンチ近似でのシミュレーション用のコード (SU(3)ゲージ理論用すなわち QCD 用)

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たが確定的な結論を得るために 2021 年度も研究継続となってしまった。その間にデータ解析と結果の検討及び追加のシミュレーションを繰り返した。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 になる TOF 作用によるクエンチ近似コードを完成させた。Ver. 1 より計算速度が約 37% 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ところまでプログラムの改良ができた。このことは本研究としては大きな成果であるが、現実的なシミュレーションの実施を考えると、さらなる高速化が必要である。2021 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)での結果があるが、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することは重要課題である。研究を今年度に継続したため最終的な結果については今年度の研究成果として報告する。さらに、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(JPS Conf.Proc. 26 (2019) 03100)も含めて、すべてのデータの再解析を実施した。この研究は 2020 年度で成果を論文にまとめる予定であったが、 π 中間子の励起状態についても結果をだすことにより論文の価値が高まると考え、2021 年度後半に追加のシミュレーションを実施した(JHPCN の研究資源を使用しない)。また、TOF 作用の Ver.1 と Ver.2 を使用して、重いクォーク質量領域でのクエンチ近似による有限温度における中間子シミュレーションを 2017 年度から 2019 年度にかけて実施している。臨界温度以上でカイラル・パートナーに属する中間子(σ 中間子を除く)質量が縮退するという結果が得られている(Proceedings of Science 363 045, 2020)。

5. 今年度の研究成果の詳細

今年度は拠点である大阪大学の計算機の

更新があり、使用する計算機が SX-ACE から SQUID のベクトルノード群 SX-Aurora TSUBASA に変更になった。

(1)「WF 作用によるコードの高速化とフル QCD による σ 中間子の質量生成機構の解明(JHPCN の研究資源を利用する)」WF 作用によるコードは、昨年度にフル QCD 用の SU(3) ゲージ相互作用コードを SU(N) ゲージ相互作用に対応したコードに改良した。このコードを SX-Aurora への最適化を大阪大学サイバーメディアセンターの協力の下に実施した。特に CG 法の収束判定の部分のアルゴリズムを再検討し効率化した。質量の重いクォークによるテストシミュレーションであるが、SX-ACE に対して SX-Aurora での計算速度は 7.1 倍に向上させることができた。本格的に並列化することは次年度に送り、このコードを WF 作用コードの Ver. 2 として、物理的なシミュレーションを実施することにした。このコードを用いて SU(3) ゲージ相互作用(QCD) についての WF 作用コードによるダイナミカル・シミュレーションを開始した。このシミュレーションでは以前に実施した SU(3) でのフル QCD による σ 中間子の結果を再現できるかをテストすること、および、SU(3) ゲージ理論のプロトタイプである SU(2) ゲージ理論での有限温度における中間子の質量の振る舞いを検討することを目標としている。現在はゲージ配位を生成している段階で、まだ物理的な結果はでていない。

(2)「トランケティド・オーバーラップ・フェルミオン(TOF)作用コード Ver. 3(クエンチ近似)の高速化とフル QCD シミュレーション・コードの開発(JHPCN の研究資源を使用しない。大阪大学 RCNP の研究資源を利用している)」

TOF 作用コードについては、昨年度後半から Ver. 3 コードの高速化に着手している。TOF コードはカイラル対称性を尊重するため通

常の 4 次元時空間に加えて 5 次元目の自由度 (N_5) があるため多大な計算機資源を必要とする。TOF 作用コードでの伝搬関数を計算するときには 4 次元時空間のサイズ $8^3 \times 24$ とすると ($3 \times 4 \times 8^3 \times 24 \times N_5$) 次の正方行列に対する逆行列が入れ子構造になっている線形方程式を解くことになる。最適化でのテストシミュレーションでは $N_5=48$ としている。大阪大学サイバーメディアセンターの協力の下でプログラムの分岐をできるだけ減らし、ベクトル化を徹底して、演算の高速化を実施した。現状の SX-Aurora のコンパイラへの最適化も実施した。その結果、質量が大きいクォークによるテスト計算であるが、SX-ACE に対して SX-Aurora で、3.6 倍まで計算速度を向上させることに成功した。さらに計算速度を上げるために並列化を試みた。1 ベクトルエンジンの中の 4 つの CPU を使用した MPI による並列化を実行したが、メモリへのアクセスの負荷が大きいコードであることが原因で実行時間が長くなることが分かった。1 ノードの内でのスレッド並列化を使用することで高速化の可能性があるが、クエンチ用のコードの開発はここまでで一旦終了とし、フル QCD 用のコード開発をすることにする。このクエンチ用コードを Ver. 4 とする。

今年度後半は TOF コードをフル QCD にするためのコード開発を実施した。年度内には、TOF 作用によるフル QCD 用のコードは完成できなかった。2022 年度継続して実施する。フル QCD コードを完成させることによりカイラル対称性が本質的な役割を担う物理的な現象への第 1 原理からのアプローチが可能になる。

上記の 2 つの研究課題の他に、昨年度までに JHPCN での計算機リソースを用いて実施したシミュレーション結果をまとめて論文にする作業を進めた。以下の 2 つの課題ともに論文にまとめてゆく過程で結果の精度を上

げるための追加のシミュレーション (JHPCN の計算機資源を使用しない) の必要があり、国士舘大学の SX-Aurora TSUBASA による追加のシミュレーションを実施した。

(3) 「TOF 作用コードを用いた真空での π 、 ρ 中間子質量の 5 次元自由度依存性の研究」

(2) で作成したクエンチ近似の TOF 作用コードを用いて、格子カイラル対称性を実現するために導入した 5 次元方向の自由度が中間子質量にどのような影響があるかを検討した結果をまとめて、Journal of Physics Communications 誌 (Institute of physics) に投稿し、8 月に出版された (学術論文[1])。

ρ 中間子実効質量と 5 次元 N_5 依存性を図 1 に示す。 π 中間子実効質量と N_5 依存性を図 2 に示す。 N_5 が大きいほど質量が小さくなるのがわかるが、 $N_5=16$ 程度からさらに N_5 を大きくしても、中間子の質量が小さくなる度合いは少なることが分かる。理論的には N_5 が大きいほど格子カイラル対称性が実現されたシミュレーションであると考えられるが、 N_5 を大きくすれば計算量はおよそ N_5 の 2 乗に比例して大きくなる。図 3 ではクォーク質量が小さく、 N_5 が大きいほど π 中間子の質量の 2 乗が小さくなることが分かる。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良く再現していると考えられる。 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資源との関係で N_5 を現実的な値に決めなければならない。また、 ρ 中間子の実効質量と $1/N_5$ 依存性 (図 4) から ρ 中間子は N_5 の依存性があまりないことが分かる。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。この研究により 5 次元自由をどこまで取れば良いかの指針が得られた。このことは今後のシミュレーションについて大きな成果

だと言える。これらの結果を論文にまとめている過程で国士舘大学の SX-Aurora TUSBASA を使用した追加のシミュレーションを実施した。

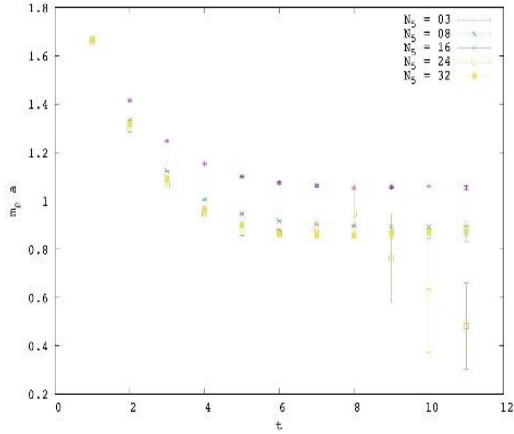


図1 ρ 中間子実効質量の N_5 依存性

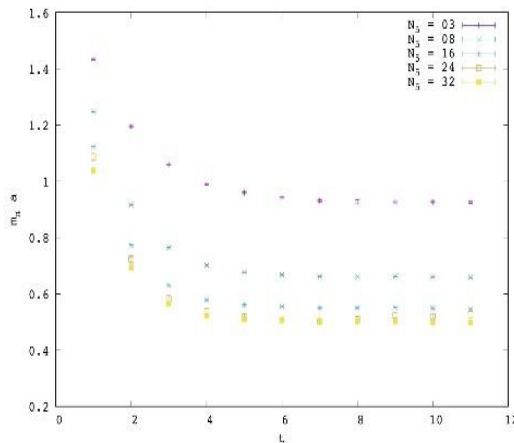


図2 π 中間子の実効質量の N_5 依存性

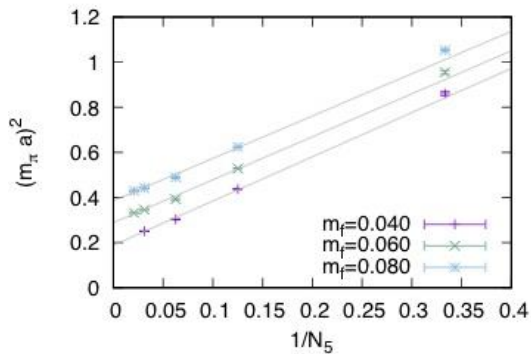


図3 π 中間子質量の 2 乗の $1/N_5$ 依存性

(4) 中間子の励起状態の TOF 作用近似でのシミュレーション (前年度のシミュレーションは JHPCN の研究資源と国士舘大学の SX-Aurora TUSBASA を使用、今年度分に関しては国士舘大学の SX-Aurora TUSBASA のみを使用)

実施計画においては、 ρ 中間子と a_1 中間子の励起状態に関して論文にまとめる計画していたが、追加のシミュレーションをすることにより π 中間子の励起状態のシグナルも明確になる可能性があるため、 π 中間子のデータを増やすことにより論文作成を 2022 年度に持ち越した。追加シミュレーションとデータの解析は 2022 年度に継続している。他のカイラルフェルミオンを用いたフル QCD の先行研究と同じ程度の結果となった。励起中間子の励起状態のスペクトルではカイラル対称性を取り入れたシミュレーションが重要であるとの指摘をしている研究があるが、我々の TOF 作用コードはクエンチ近似であることを考えると TOF 作用の性質が他のフェルミオン作用のものよりも優れている可能性を示唆していると考えられる。現在論文作成中で 2022 年 6 月には投稿できる予定である。

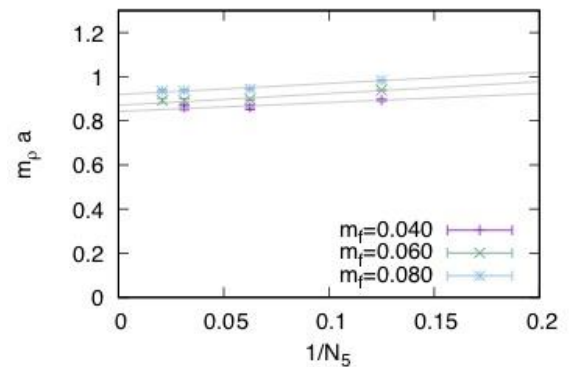


図4 ρ 中間子質量の $1/N_5$ 依存性

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

進捗状況としては、当初の本年度の計画か

ら遅れてしまい 70% 程度の計画を実現したに過ぎない。プログラムの改良に時間がかかり並列化は手を付けただけで完成できなかった。今回ひとまず完成したコードを WF コードの Ver. 2 として、このコードをもとにして今後は、並列化を検討する。現実的なパラメーターについて Ver. 2 がどのくらいの性能になるかを σ 中間子のシミュレーションでテストに入ったのは 10 月になってからで、ジョブが込み合う時期からシミュレーション開始であったため予定したほどシミュレーションを実施できなかった。シミュレーションの実施計画に問題があったと考えており、2022 年度は計画通り研究が進捗するようにしたい。2022 年度は、計画の 100% 実施ができるように取り組みたいと考えている。

次年度に関しては、TOF 作用のフル QCD 化を進める。現在の進捗状況は PC 用のプロトタイプのシミュレーション・コードがほぼ完成し、プラケット等の基本的物理量に対して検証を実施している。2022 年度中には SQUID のベクトルノード群に移植できるように研究を進める予定でいる。WF 作用コードについては Ver. 3 のコードで、実際の物理的なシミュレーションを行って、 σ 中間子の非結合ダイアグラムのテストシミュレーションを実施する。そして、先行研究との結果との比較、および、その計算速度を計測する。このシミュレーションと同時に WF コードの Ver. 3 についてスレッド並列化等を検討する。

085009-1~7, (Institute of Physics).

- (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)
なし
- (4) 国内会議発表 (査読なし)

[1] 若山将征、“トランケイテッド・オーバーラップフェルミオンの極限評価”、千葉工業大学「核物理×物性セミナー」、2021 年 10 月 23 日

- (5) (Webex によるオンライン講演). 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

7. 研究業績一覧

- (1) 学術論文 (査読あり)

[1] Y. Murakami, M. Sekiguchi, H. Wada and M. Wakayama, “Properties of the five dimensions for the truncated overlap fermions,” Journal of Physics Communications 5, August 17, 2021,