

jh220021

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、広い密度範囲で状態方程式の測定を実行し、音速の密度依存性について、中性子星観測から示唆される音速のピークを第一原理からはじめてサポートする結果を得た。また、低温高密度領域におけるハドロン質量の測定において高精度のデータを蓄積するとともに、ハドロン相におけるハドロン間相互作用についての初期成果を得た。

1. 共同研究に関する情報

- (1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名（該当するものを残す）

京都大学 学術情報メディアセンター

大阪大学 サイバーメディアセンター

- (2) 課題分野（該当するものを残す）

大規模計算科学課題分野

- (3) 共同研究分野（HPCI 資源を利用している研究課題のみ、該当するものを残す）

超大規模数値計算系応用分野

- (4) 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，成果の発表。

2. 研究の目的と意義

（目標）

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模型である「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

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。また、
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、

【目的 iii】有限密度領域での状態方程式の
解明

を目指した研究を行う。

2018 年度から 2020 年度にかけて、 $\mu=0$ における T_c などのスケール設定を行い、計算している系の温度を決定した。それらをまとめた結果、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。

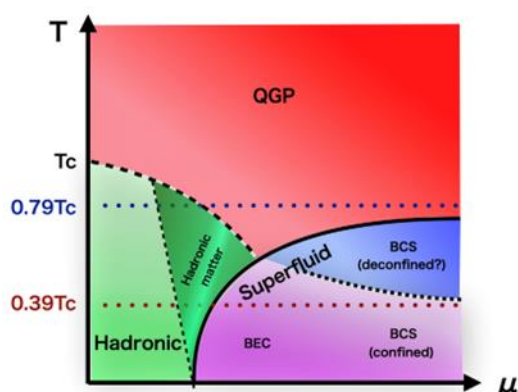


図 1: 2カラー-QCD 相図。

2021 度からはさらに研究を進め、超流動相が現れる低温領域での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の調査を継続中である。また今年度は状態方程式解明に向けた研究も

進める。

(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を生じない $SU(2)_2$ 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. 当拠点の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、我々の手法は其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、有限密度の計算コストは非常に高く、相構造は未知の部分が多い。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 $N_t=16$ (N_t は温度方向の長さ) と、 T_c より少し下の温度に対応する $N_t=8$ 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、 $N_t=16$ 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。)

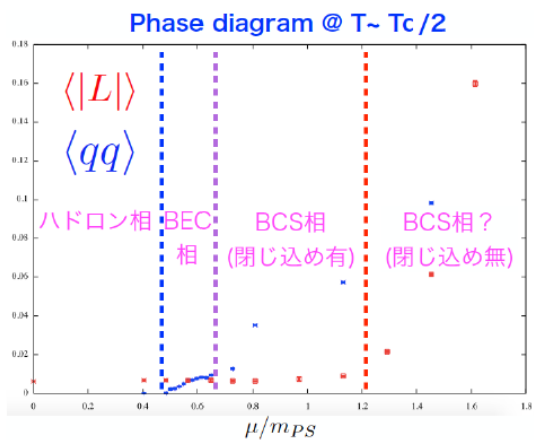


図 2：低温 2 カラー QCD の有限密度相図。

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 $N_t=8$ 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。

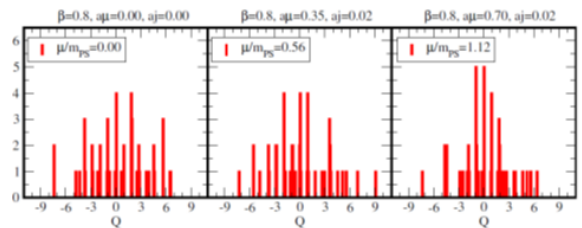


図 3：0.45 T_c における 2 カラー QCD のトポロジカル電荷分布。左から順に、ハドロン相、BEC 相、BCS 相のデータ。図は、JHEP 01, 181 (2020) からの抜粋。

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、0.45 T_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。

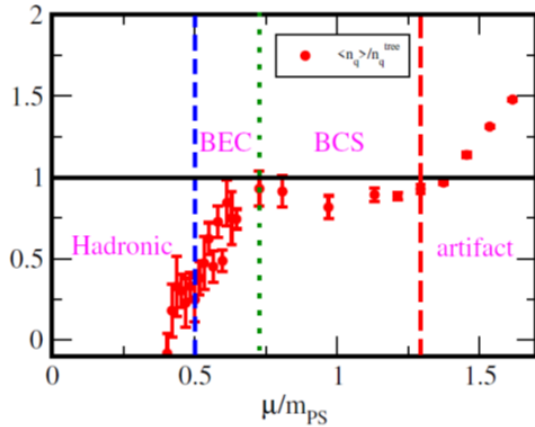


図 4： $0.45T_c$ におけるクォーク数密度の μ 依存性。データはダイクォーク源のパラメータ $j \rightarrow 0$ の外挿値。図は, JHEP 01, 181 (2020) からの抜粋。

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)。

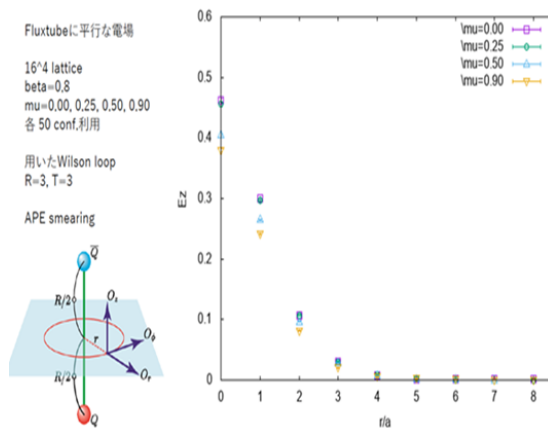


図 5： $0.45T_c$ におけるクォーク・反クォーク間のカラーフラックスチューブの予備的結果 ($a\mu=0, 0.25, 0.50, 0.90$)。縦軸は左図上方向のカラー電場, 横軸はクォーク・反クォークを結ぶ軸からの距離。

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)。

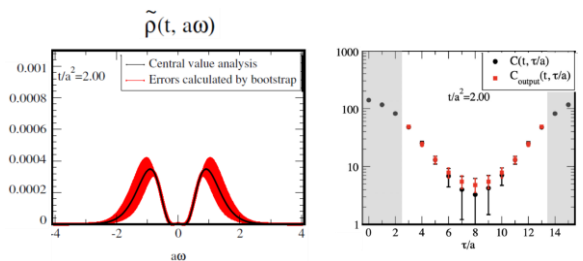


図 6：スパースモデリング法を用いたスペクトル関数の推定。インプットデータは, クエンチ QCD のエネルギー運動量テンソルの相関関数 (右図の黒データ)。図は, JHEP 07, 007 (2020) からの抜粋。

2021 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前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質量 (図 7), 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。

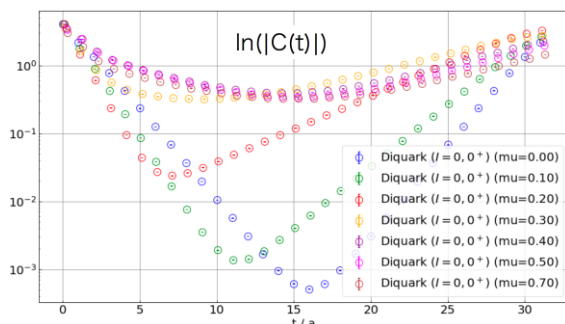


図 7：バリオン(スカラーダイクォーク)の 2 点関数の μ 依存性 (7. (2) [1])。 μ に依存して傾き ($\sim$ 質量) が大きく変化することがわかる。

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 (ポリヤコフループ, 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

●ハドロン質量の密度依存性

ジョブの実行を進め、アイソスカラー・擬スカラーのメソンの質量が超流動相で密度とともに軽くなる (図 8) など、主要な結果を国際会議プロシーディングス (7. (2) [1]) にまとめた。さらに、線型シグマ模型に基づき、超流動相におけるバリオン数の破れによるハドロン混合を勘案することにより、結果の考察を行った (7. (1) [1])。

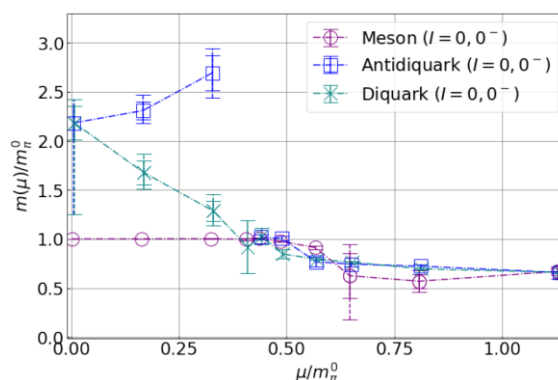


図 8：アイソスカラー・負パリティのハドロンが示す質量の μ 依存性 (7. (2) [1])。

●ハドロン間相互作用の密度依存性

HAL QCD 法に基づくコード開発を進めつつ、 32^4 の配位とハドロン質量の測定結果を用いて、ハドロン相におけるハドロン間相互作用の密度依存性についての初期成果を得た。

●フラックスチューブの密度依存性

国際会議プロシーディングス (7. (2) [4]) が出版された。

●有限密度領域での状態方程式

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 の配位に基づく圧力、エネルギー密度、音速の測定結果を論文 (7. (1) [2]) にまとめた。超流動相において音速がピークをもつように見えるという著しい結果を得た (図 9)。

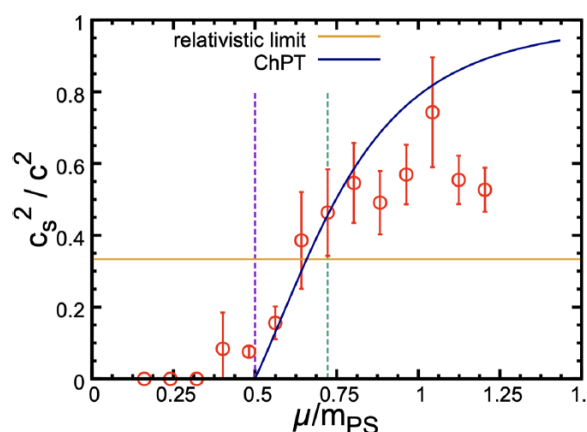


図 9：音速の自乗の μ 依存性 (7. (1) [2])。紫の実線はカイラル摂動論の結果。

●計算時間の詳細

今年度に入り約 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 (96,008 ノード時間積) のうち

78.4%使用 (利用期間終了)。

阪大計算機資源

SQUID・CPU ノード：

配分 (188,458 ノード時間積) のうち
80.6%使用 (年間で 100%使用)。

OCTOPUS・CPU ノード：

配分 (7,400 ノード時間積) のうち
20.0%使用 (年間で 100%使用)。

今年度前半に使用した計算資源は、ハドロン質量の測定 (SQUID 及び OCTOPUS)、 32^4 の配位生成 ($j=0.01, 0.02$; $a\mu=0.10, 0.20, 0.27$, 及び 0.30 から 0.80 まで 0.05 刻みの 11 点; XC40 及び SQUID)、及び状態方程式の測定 (SQUID) にあてられた。

今年度後半は、電気代高騰の影響を受け、OCTOPUS 及び SQUID の季節係数が 2022 年 11 月以降緊急的に 3.0 に上げられたため、ハドロン質量の測定 (SQUID 及び OCTOPUS) のみを行った。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

●配位生成

電気代高騰の影響を受けつつも、順調に進んだ。結果として、【計画 I】は 8 割方進展したと判断している。

●ハドロン質量の密度依存性の決定

電気代高騰の影響を受けつつも、順調に進んだ。結果として、【計画 II】は 8 割方進展したと判断している。

●フラックスチューブの密度依存性

電気代高騰による計算時間の実質的削減により、予定していた高精度の測定を見送ることとした。したがって、【計画 III】は未遂となっている。

●有限密度領域での状態方程式の解明

成果は論文 (7. (1) [2]) にまとめられ, 【計画 IV】は関連分野に大きな貢献を残しつつ完了した。

●今後の展望

5 年間もの間, 継続的に JHPCN の計算資源を利用させていただき, おかげさまで想定をはるかに超える成果が得られた。今後は別途計算資源を確保しつつ, これまでに蓄積した配位をさらに増やしながらか種々の測定を行う予定である。

ハドロン質量については, 非連結ダイアグラムの寄与を吟味し, 最終的な結果を論文にまとめる。

ハドロン間相互作用については, ハドロン相における HAL QCD 法に基づく定式化と格子上の測定を実行し, 成果を論文にまとめる。さらに, 超流動相においても, ハドロン混合を勘案しつつ, 定式化を進める予定である。

フラックスチューブについては, 精度を上げた測定を行い, 密度依存性を明らかにする予定である。

有限密度の状態方程式については, より高密度かつ低温の測定を行いたい。

7. 研究業績

(1) 学術論文 (査読あり)

[1] Daiki Suenaga, Kotaro Murakami, Etsuko Itou, and Kei Iida, “Probing hadron mass spectrum in dense two-color QCD with linear sigma model,” *Physical Review D* **107**, 054001 (2023), 17pp.

[2] Kei Iida and Etsuko Itou, “Velocity of sound beyond the high-density relativistic limit from lattice simulation of dense two-color QCD,” *Progress of Theoretical and Experimental Physics* **2022**, 111B01 (2022), 8 pp.

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

[1] Kotaro Murakami, Daiki Suenaga, Kei Iida, and Etsuko Itou, “Measurement of hadron masses in 2-color finite density QCD,” *Proceedings of Science (The 39th Annual International Symposium on Lattice Field Theory)* **430**, 154 (2023), 9 pp.

[2] Etsuko Itou and Kei Iida, “Bump of sound velocity in dense 2-color QCD,” *Proceedings of Science (The 39th Annual International Symposium on Lattice Field Theory)* **430**, 151 (2023), 9 pp.

[3] Etsuko Itou and Yuki Nagai, “QCD viscosity by combining the gradient flow and sparse modeling methods,” *Proceedings of Science (The 38th Annual International Symposium on Lattice Field Theory)* **396**, 214 (2022), 9 pp.

[4] Katsuya Ishiguro, Kei Iida, and Etsuko Itou, “Flux tube profiles in two-color QCD at low temperature and high density,” *Proceedings of Science (The 38th Annual International Symposium on Lattice Field Theory)* **396**, 063 (2022), 8 pp.

(3) 国際会議発表 (査読なし)

[1] Etsuko Itou (招待講演), “Velocity of Sound beyond the High-Density Relativistic Limit from Lattice Simulation of Dense Two-Color QCD,” R-CCS workshop “Challenges and opportunities in Lattice QCD simulations and related fields,” RIKEN (Kobe), February 17, 2023.

[2] Etsuko Itou (招待講演), “Sound

Velocity beyond the High-Density Relativistic Limit from Lattice Simulation of Dense Two-Color QCD,” The 9th International Conference on Quarks and Nuclear Physics (QNP2022), online, September 6, 2022.

[3] Kotaro Murakami (口頭発表), “Measurement of hadron masses in 2-color finite density QCD,” The 39th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2022), Hörsaalzentrum Poppelsdorf (Bonn, Germany), August 11, 2022.

[4] Etsuko Itou (口頭発表), “Bump of sound velocity in dense 2-color QCD,” The 39th Annual International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2022), Hörsaalzentrum Poppelsdorf (Bonn, Germany), August 11, 2022.

[5] Etsuko Itou (口頭発表), “Equation of state of the finite density region in two-color QCD,” Joint RIKEN-Tohoku Workshop, RIKEN (Wako), April 27, 2022.

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[1] 伊藤悦子(セミナー講演): “Velocity of Sound beyond the High-Density Relativistic Limit from Lattice Simulation of Dense Two-Color QCD,” 東京大学福嶋研究室セミナー, 東京大学(本郷), 2022 年 10 月 28 日。

[2] 伊藤悦子(セミナー講演): “Velocity of Sound beyond the High-Density Relativistic Limit from Lattice Simulation of Dense Two-Color QCD,” KEK 理論センターセミナー, オンライン, 2022 年

10 月 11 日。

[3] 伊藤悦子(口頭発表): 「有限密度 2 カラーQCD 第一原理計算による音速のピークについて」, 基研研究会「熱場の量子論とその応用」, 京都大学基礎物理学研究所(京都), 2022 年 9 月 22 日。

[4] 伊藤悦子(口頭発表), 飯田圭: 「有限密度 2 カラーQCD の第一原理計算で見る音速のピーク」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, オンライン, 2022 年 9 月 8 日。

[5] 村上耕太郎(口頭発表), 飯田圭, 石黒克也, 伊藤悦子: 「有限密度 2 カラーQCD のハドロン質量の測定」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 岡山理科大学(岡山), 2022 年 9 月 8 日。

[6] 末永大輝(口頭発表), 伊藤悦子, 村上耕太郎: 「線形シグマ模型を用いた 2 カラーQCD 物質中のハドロン質量変化」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 岡山理科大学(岡山), 2022 年 9 月 8 日。

[7] 伊藤悦子(口頭発表): 「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」, 京都大学学術情報メディアセンター共同研究成果報告会 (2021 年度採択課題・プログラム高度化), オンライン, 2022 年 6 月 1 日。

(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。