

jh22024

格子 QCD によるカイラル対称性とスカラー中間子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（WF）作用による SU（N）ゲージ相互作用のフル QCD コードの高速化と並列化及び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（TOF）作用によるフル QCD コードの高速化及び並列化に取り組んだ。本コードにおいて、SQUID のベクトルノード群の性能を最大限に引き出すためには並列化のさらなる改良が必要であり、次年度も継続してコード開発を実施する。以上の研究課題の他に今までの TOF 作用によるクエンチ近似でのシミュレーションをまとめて査読付き学術論文として発表した。

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

大阪大学 サイバーメディアセンター

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(4) 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）

アルゴリズム・データ解析

- ・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

物質の質量の起源は2種類あると考えられている。ひとつは、ヒッグス粒子によるゲージ対称性の自発的破れによりクォーク、レプトン及びウィークボソンの質量が与えられるヒッグス機構によるものである。もうひとつは、強い相互作用におけるカイラル対称性の自発的破れによる質量の生成であり、この機構が我々の周りの物質に質量の大部分を与えていると考えられている。このカイラル対称性の破れによる物質の質生成機構を明らか

にするためには、強い相互作用の第 1 原理である量子色力学 (QCD) を非摂動論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強い相互作用のカイラル対称性の自発的破れにより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。本研究では、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。

有限温度では、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）が起こることが期待されている（図 1）。それを第 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。このことは宇宙創成のメカニズムを解き明かす重要な研究課題である。

また、標準模型ではヒッグス粒子に由来する質量の起源があるが、この粒子は σ 中間子と同じくスカラー粒子である。このヒッグス

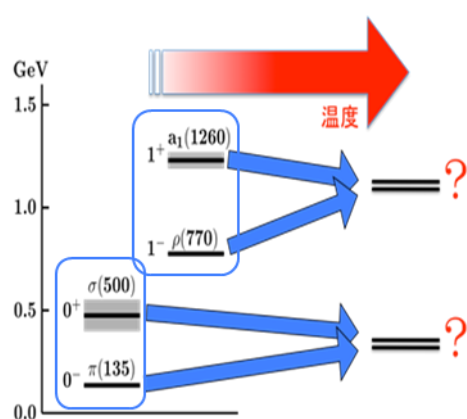
図 1 有限温度におけるカイラル・パートナー中間子質量とカイラル相転移

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複合模型は多数提案されていきたが完全なものはない。現在の標準模型ではヒッグススカラー粒子は 1 種類であるが、物質優勢の宇宙を形成するためには大きな CP の破れが必要であり、複数のヒッグスが存在する複合模型は標準模型を超える模型の候補になり得る。 σ 中間子（スカラー粒子）の研究はこの複合ヒッグス粒子の模型構築に関して新たな知見を与える可能性がある。

3. 当拠点の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。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いる。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 Truncated overlap フェルミオン (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、格子サイズが $8^3 \times 16$ の場合、 $(3 \times 4 \times 8 \times 8 \times 8 \times 16 \times N_5)$ 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。 $N_5=16$ とした計算を計画すると、およそ 160 万次の正方行列に対する方程式を解法することになる。

TOF のコードはベクトル化に向いているため、ベクトル型のスーパーコンピュータでの



開発を進めてきた。大阪大学の高性能計算・データ分析基盤システム SQUID のベクトルノード群 (SX-Aurora TSUBASA) は、これまでの経験が活かせるため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

本研究課題では主に以下の 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) 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)

(b) 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 (フル QCD 用) のコード

(c) TOF 作用によるフル QCD 用のコード

(a) についての開発状況と JHPCN との関係を表 1 にまとめた。JHPCN 採択前から開発を始めていたが、本格的なコード開発は、2018 年度に JHPCN に採択され、大阪大学サイバーメディアセンターとの共同研究が本格してからになる。ベクトル型のスーパーコン

Version	開発期間	利用計算機
Ver. 1	2016 開発開始	SX-ACE
Ver. 2	JHPCN2018	SX-ACE
Ver. 3	JHPCN2019-2020	SX-ACE
Ver. 3.5	JHPCN2021	SQUID
Ver. 4	JHPCN2021	SQUID

ピュータの性能を最大限に引き出すため、ベクトル化率を向上させることを目標に開発を実施した。Ver. 1 に対して Ver. 3 の計算速度は 37% 向上した。Ver. 3 以降の開発はスーパーコンピュータが SQUID のベクトルノード群 (SX-Aurora TUBASA) に変わる。SX-ACE で開発した Ver. 3 を Ver. 3.5 でプログラムの分岐を削減し、ベクトル化を徹底して最適化して SQUID で実行すると主要なルーチンの計算速度が 32 倍に向上した。さらに、サブルーチン・コンパイラへの最適化を実施した Ver. 4 は、テストシミュレーションで計算速度が Ver. 3.5 の 3.64 倍になった。このコードに関しては、スレッド並列化によるさらに計算速度を向上させることが可能だと思われるが、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) の高速コードの開発が目標であるため一旦開発を終了とする。

(a) のコード開発で行ったテストシミュレーション及び大阪大学核物理研究センターとの共同研究により、将来的に TOF 作用を用いたフル QCD における有限温度でのシミュレーションを目指しているが、クエンチ近似で現状の TOF 作用コードでどこまで物理的な内容に迫れるかを確認するためにシミュレーションを実施した。クォーク質量に関しては、重い領域での計算である。シミュレーションは 2 段階で行っており、第 1 段階として、TOF 作用を使って真空での π 中間子と ρ 中間子の伝搬関数を計算する。カイラル対称性を近似的に実現するための 5 次元目の格子サイズを $N_5=32$ とし、5 次元の質量を $m_5=1.65$ 、空間の格子サイズを N_s 、時間の格子サイズを N_t とし、 $N_s \times N_t \times N_5=16^3 \times 16 \times 32$ でのシミュレーションを実施した。この格子空間上で 8 つのゲージ結合定数を指定するパラメーター β に対して複数のクォーク質量 $m_f a$ に関してシミュレーションを行った。 π 中間子と ρ 中間子の伝搬関数を求めて、 π 中間子と ρ 中

間子の質量比 (m_π/m_ρ) を求める。本シミュレーションでは、ゲージ場に対してはプラケットゲージ作用によるクエンチ近似を用い、ゲージ配位については 12~80 個生成し使用している。

第 2 段階として、このゲージ配位を用いて有限温度におけるカイラル・パートナーに属する 4 つの中間子質量を各温度でシミュレーションを行い、カイラル・パートナーに属する 4 つの中間子 (π 中間子、 ρ 中間子、スカラー中間子 (バレンス σ 中間子)、 a_1 中間子) 質量と真空での ρ 中間子質量の比の温度 (T/T_c) 依存性を明らかにした (図 2)。ここで、 T_c は臨界温度である。これらの中間子はすべて $u(d)$ クォーク及びその反クォークの 2 体のオペレーターで構成している。スカラー中間子 (バレンス σ 中間子) は、 σ 中間子を構成するファイマンダイアグラムの一部を計算したものである。 π 中間子、バレンス σ 中間子及び ρ 中間子、 a_1 中間子質量は臨界温度付近から同じ質量に縮退しはじめ、徐々に大きくなることが分かった (図 2)。また、温度の低い領域では a_1 中間子はシグナルがかなり不明瞭な結果であったが (低温部分のデータは図 2 にプロットしていない)、クォーク模型で励起状態になる中間子 (σ 中間子、 a_1 中間子等) は角運動量を持つため格子 QCD のように空間を離散化した場合にはシグナルが不明瞭になる傾向にあり、さらに 1000 から 2000 程度のゲージ配位が必要である。今回はテスト計算であり、計算機リソースの有効活用の立場からシミュレーションを継続することは不適當であると判断し、シミュレーションはここまでとした。カイラル・パートナーの中間子の質量が臨界温度付近から変化し縮退をはじめることが分かった点と有限温度での計算量を見積もるという点で成果があった。これらの結果は査読付き国際会議プロシーディングスとして出版された (Proceedings of Science 363 45 (2020).)。

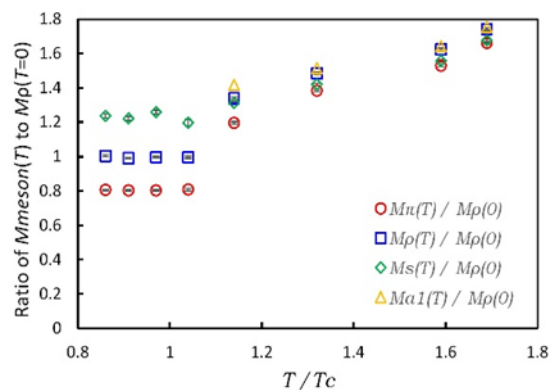
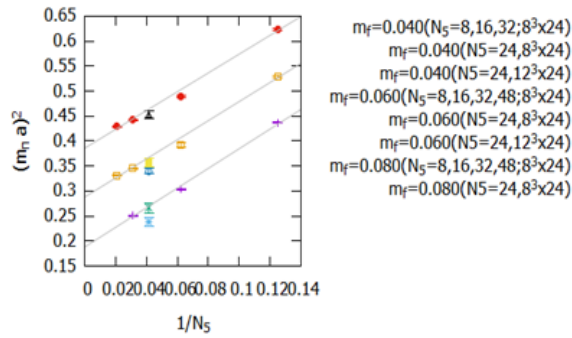
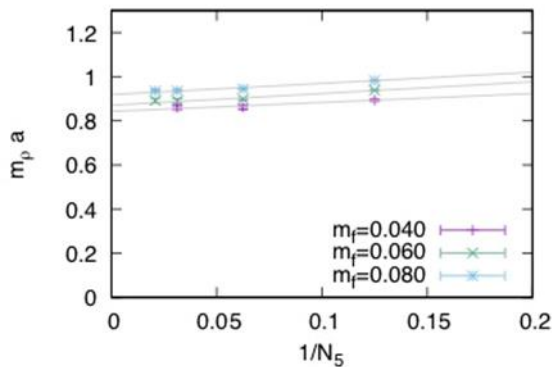


図 2 有限温度における π 中間子質量、 ρ 中間子質量、スカラー中間子 (バレンス σ 中間子) 質量、 a_1 中間子質量と真空での ρ 中間子質量との比の T/T_c 依存性

このシミュレーションに使用したコードは Ver. 1 と 2 である。

次の研究成果としては、TOF 作用コードを用いた真空での π 、 ρ 中間子質量の 5 次元自由度依存性を検討するシミュレーションを実施した。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) に掲載された。

π 中間子質量と 5 次元 N_5 依存性を図 3 に示す。 ρ 中間子質量と N_5 依存性を図 4 に示す。 N_5 が大きいほど質量が小さくなることがわかるが、 $N_5=16$ 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大きくないことが分かった。理論的には N_5 が大きいほど格子カイラル対称性を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

図3 π 中間子質量の2乗の $1/N_5$ 依存性図4 ρ 中間子質量の $1/N_5$ 依存性

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を行う上で、計算機資源との関係から 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指針が得られた。このことは今後のシミュレーションの計算量を見積もるために参考になる。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 TSUBASAを使用した追加のシミュレーションを実施した。この研究結果は、査読付き学術雑誌(J. Phys. Commun. 5 085009 (2021).)に発表をした。

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を使用した3番目の物理

的成果は、励起状態についてのシミュレーションである。中間子励起状態に対する格子QCDによる研究は、まだ実験結果を完全に再現できるレベルまで達していない。明瞭なシグナルを得るためには大量の計算量が必要になる。

このためTOFのフェルミオン行列とその逆行列を作るには、2つのアプローチがあるので、その比較検討を行いより高速なアルゴリズムを作成した。一つは、5次元と4次元のフェルミオン場を用意し、5次元の行列に対して共役勾配法(CG法)を用いる方法である。もう一つは、4次元のフェルミオン場のみを用意し、4次元の行列を持つCG法を採用する方法である。この方法は式が複雑になる。我々は両方のTOFコードを開発した。 π 、 ρ 、 a_1 中間子の伝搬関数のテスト計算は、 $4^3 \times 8$ 格子、 $N_5=4$ 、 $M_5=1.65$ 、 $m_f a=0.20$ で、大阪大学サイバーメディアセンターのSX-ACE及びSQUIDでの計算の結果は、上述の第1の方法は第2の方法よりも約7倍高速であったため、Ver.2からは第1のアルゴリズムで作成したコードを実装している。

(b) のWF作用によるSU(N)ゲージ相互作用のフルQCDシミュレーション用のコードについては、進捗状況を表2にまとめた。CG法収束判定部分のアルゴリズムを見直し、SX-Auroraへの最適化を実施し、テストシミュレーションでは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。SU(3)での計算コストが非常に莫大なことから、プロトタイプとしてSU(2)ゲージ作用でのシミュレーションや複合Higgs粒子等

表2 WF作用によるSU(N)ゲージ相互作用のフルQCDシミュレーション用のコード

Version	開発期間	利用計算機
Ver. 1	JHPCN2020	SX-ACE
Ver. 2	JHPCN2021	SQUID

のモデル計計算を想定した SU(3) ゲージ相互作用のコードを SU(N) へ一般化したコードに拡張した。

(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）のコードの開発について 2021 年度の後半に着手した。

5. 今年度の研究成果の詳細

研究課題（1）TOF 作用によるフル QCD シミュレーション・コードの最適化・高速化

（当初の計画では JHPCN の研究資源を使用しない計画であったが、後半で使用した）

TOF 作用によるフル QCD シミュレーション・コードが完成し国士舘大学の SX-Aurora TSUBASA を利用してテストシミュレーションを小規模計算で実施し、先行研究と一致することを確認した。10 月よりこのコードを SQUID に移植し、このコードの SQUID での最適化・ベクトル化を実施した。このコードで重いクォーク及び中位の質量のクォークでのテストシミュレーションを開始した。このシミュレーションは大阪大学核物理研究センターとの共同研究による計算機資源も使用した。有限温度での真空期待値の温度変化のシミュレーションを実施している。まだテストシミュレーションであるが、期待している結果が得られると考えている（図 5）。ベクトル化を最大限に実施したコードを Ver. 1 として、次に並列化に入ったが SQUID でコードの並列化を実施した。当初は、5 次元方向を中心に並列化を実施したが、十分な計算速度の向上させることができなかった。そのため空間方向での並列化も検討し、ベクトル化率 94.1% で、ストロングスケール法による並列化率は最大で 85.1% までになるが、計算速度がさらに改善ができないか大阪大学サイバーメディアセンターの協力のもと現在も検討を続けている。

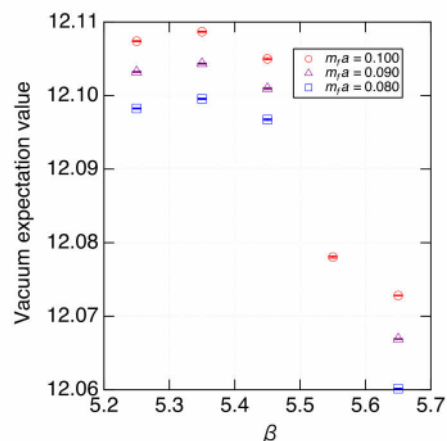


図 5 真空期待値と β （温度）の関係

研究課題（2）WF 作用によるフル QCD シミュレーション・コードの最適化と真空中での σ 中間子伝搬関数のシミュレーション（JHPCN の研究資源を使用する）

SU(N) ゲージ相互作用用に拡張した WF 作用によるフル QCD シミュレーション・コードのベクトル化が終わり (Ver. 2)、 π 中間子、 ρ 中間子、 σ 中間子の質量についてテストシミュレーションを開始した。 π 中間子と ρ 中間子の質量比を先行研究と比較した場合に、9.5% の違いがでていて、その原因の検討している。今回のシミュレーション・コードの作成するにあたり Mass precondition 法等の導入を行った際に意図しない変更をした可能性もあるのではないかと考えている。現在、このコードの並列及びテストシミュレーションを停止している。コードの性能に関しては、今回のテストシミュレーションでは、ベクトル率 99.6% でストロングスケール法による並列化率で 99.9% を達成している。しかし、今後、計算スケールを大きくしたとき、同等の計算性能を引き出すためのコード開発は必要である。

なお、今回のテストシミュレーションの結果から、特に計算時間を要する σ 中間子伝搬関数の非結合グラフの計算に関して、新たな

知見が得られる可能性があることが分かったが、計算量が不足している。

研究課題（3）コード開発以外の研究成果

TOF 作用によるクエンチ近似でコード開発でのテストシミュレーション及び大阪大学核物理研究センターとの共同研究によりシミュレーション結果をまとめて軽い中間子の励起状態に関する質量を求めた結果をまとめて、査読付き学術雑誌 Journal of physics Communications (IOP) に発表した。

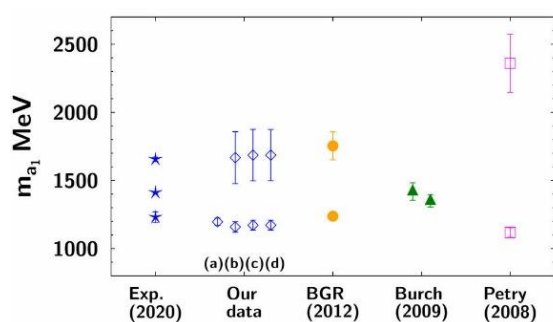


図 6 a_1 中間子の基底状態と励起状態の質量

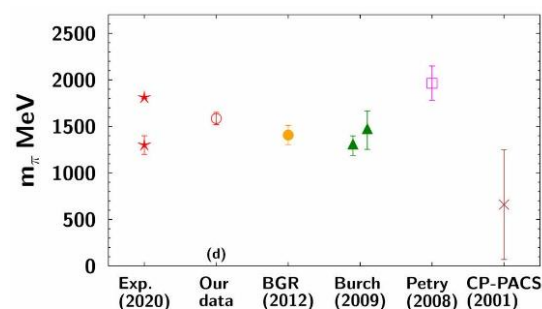


図 7 π 中間子の励起状態の質量

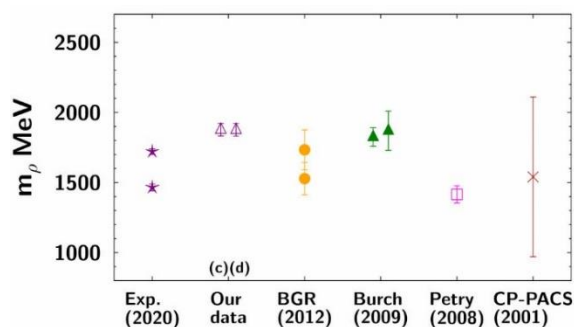


図 8 ρ 中間子励起状態の質量

シミュレーションを追加する必要などもあり、掲載までに時間がかかったが、格子カイラル対称性を尊重したことにより、過去のフル QCD シミュレーション及び実験結果と比較可能な結果となった（図 6–8）。さらに TOF 作用によるフル QCD によるシミュレーションを行うことにより励起状態の中間子質量の実験結果を第 1 原理計算により再現する可能性があることを示唆した成果である。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

研究課題（1）については、高速化までは順調に進めることができたが、その後の並列化では、我々が SQUID での並列化に不慣れであることに主な原因でプログラムコードの開発に大きな遅れが生じ、まだ完成に至っていない。ベクトル化には成功しているため、物理的なテストシミュレーションは可能であり、先行研究との結果を比較しながら物理的な結果がでてきている。これは予定以上のものである。このフル QCD でのシミュレーションの結果は、大阪大学サイバーメディアセンターの全面的な協力がなければ、到達できなかった。この課題についての自己評価は 80% である。

研究課題（2）については、先行研究と基本的な物理量のシミュレーション結果が数%食い違うということが分かった。これについては、プログラム開発の各段階でミスを防ぐような対策を丁寧に行うべきだったと考えている。テストシミュレーションから論文にする結果を引き出すことはできないが、 σ 中間子の非結合グラフの処理法について新しい方法が見出せる可能性があることを分かったことは大きな成果であり、今後、TOF 作用のフル QCD シミュレーションでの採用を検討する。本格的な並列化に手が付けられなかったことからこの課題については、自己評価は 60% と考える。

その他は、昨年度から引き継いだ励起状態中間子の質量の論文は、レフェリーとのやり取りで、追加のシミュレーションを行う必要があった。ただ結論としては格子カイラル対称性を尊重したシミュレーションはフル QCD により計算結果と遜色のない結果となり、軽い中間子でのカイラル対称性の重要性を再認識するものであった。今回のシミュレーションをフル QCD で実施することにより、軽い中間子の励起状態を格子 QCD で再現できる見通しがついたことは、第 1 原理計算の有効性を示唆する結果と言える。この件について自己評価は 80%とする。

以上のことから、総合的に考えて予定した研究の 70%を達成したと考えている。

(6) その他（特許，プレスリリース，著書等）
なし

7. 研究業績

(1) 学術論文（査読あり）

Yuko Murakami, Motoo Sekiguchi, Hiroaki Wada and Masayuki Wakayama,
Mass spectroscopy of excited light mesons using truncated overlap fermions,
Journal of Physics Communications, 6 105009 (2022) 8 pages. 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）

若山将征、関口宗男、伊達進、和田浩明、村上祐子、「Truncated overlap フェルミオンによる格子 QCD シミュレーション」、2022 年度 RCNP スパコン成果報告会、大阪大学、2023 年 3 月（口頭発表）。

(5) 公開したライブラリなど

なし