

jh230030

格子 QCD による複合スカラー粒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。そのため本研究では格子カイラル対称性を持つクォークによるフル QCD 用の大規模シミュレーション用のコード開発と、その計算速度向上を目的としている。本年度は $SU(N)$ のウィルソン・フェルミオン作用による 2 フレーバー・フル QCD コードのベクトル化と並列化を完成させシミュレーションを実施した。また格子カイラル対称性を持つトランケイテッド・オーバーラップ・フェルミオン作用による 2 フレーバー・フル QCD コードの高速化及び並列化に取り組んだ。各コードは、大阪大学サイバーメディアセンターの SQUID ベクトルノード群の計算性能を最大限に引き出すために最適化を実施した。これより、これまで WF 作用でも到達できなかった、中程度のクォーク質量領域での σ 中間子の計算が TOF 作用で現実的に実施可能な範囲になった。

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

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 (HPCI 資源利用課題のみ)

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
- ・若山 将征 (千葉工業大学・情報科学部)
副代表 コード開発・演算の実行
- ・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・コード検証

・和田 浩明 (国士舘大学・理工学部)

コード検証・データ解析

・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。

さらにダークマター (暗黒物質) が QCD の $SU(3)$ カラー相互作用と似た $SU(N)$ カラー相

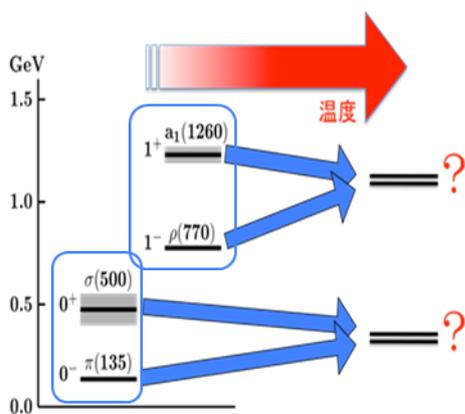


図 1 有限温度におけるカイラル・パートナー中間子質量とカイラル相転移

相互作用によってダーククォークと反ダーククォークが結合した複合粒子である可能性が検討されている。我々の研究のエネルギースケールを変えることによりダーククォークの質量生成機構について知見が得られる可能性があり、検討を開始している。本研究は通常物質とダークマターの双方の質量生成機構を明らかにする研究課題である。

3. 当拠点の公募型共同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、 $(3 \times 4 \times 8^3 \times 16 \times N_5)$ 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。

我々の TOF 作用コードは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。そのため大阪大学サイバーメディアセンターの高性能計算・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、本研究を実施するのに適した環境である。また、大阪大学サイバーメディアセンター伊達進教授に共同研究に参画していただいている。伊達教授を中心とする大阪

大学サイバーメディアセンター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ことも開発環境として理想的である。以上より、大阪大学を拠点として公募型共同研究を実施した。

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プログラムコード開発を実施している((a)~(c))。いずれもコードは、2プレーヤー用のものである。

(a) TOF 作用によるクエンチ近似コード開発

TOF 作用によるクエンチ近似コードの開発状況と 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化してからになる。ベクトル型のスーパーコン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、サブルーチンのコンパイラへの最適化を実施した Ver.4 は、テスト計算で計算速度が Ver.3 の 3.64 倍になった。このコードに関しては、スレッド並列化を採用することにより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最終目標であるため一旦開発を終了とした。

表 1 TOF 作用によるクエンチ近似コード開発

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	JHPCN2020-2021	SQUID
Ver. 4	JHPCN2021	SQUID

コード開発で行った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計算機資源を活用したシミュレーションにより、有限温度中での中間子質量の知見が得られた。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 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計算を行い、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ヤ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した(Proceedings of Science 363 45 (2020).)。

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 N_5 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 (J. Phys. Commun. 5 085009 (2021). (IOP)) に掲載された。

π 中間子質量と 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大きな

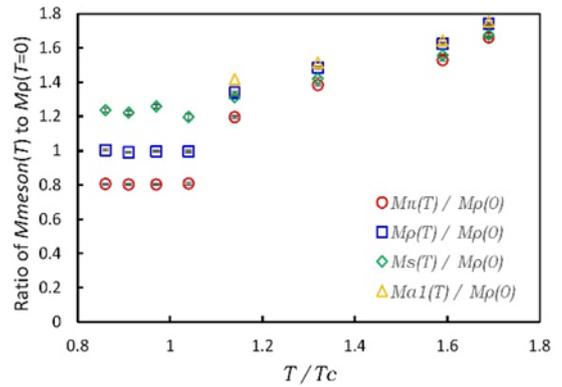


図 2 有限温度における π 中間子質量、 ρ 中間子質量、スカラー中間子（バレンス σ 中間子）質量、 a_1 中間子質量と真空での ρ 中間子質量との比の T/T_c 依存性

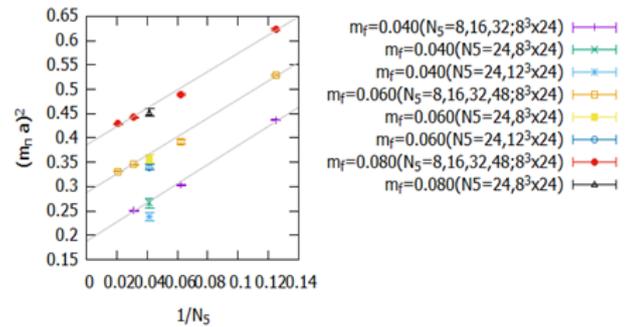


図 3 π 中間子質量の 2 乗の $1/N_5$ 依存性

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の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 乗が小さくなるのが分かる。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 次元自由度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。

TOF 作用によるクエンチ近似コードを使用した 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 (図 5-7) である。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 での計算の結果では、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。

このコードによる中間子励起状態の質量についてのシミュレーションを実施した。我々の結果はクエンチ近似であるがカイラル対称性を尊重することで、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 5-7)。この結果は、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といえる。これらの結果は、Journal of Physics Communications 誌

(Phys. Commun. 6 105009 (2022)) に掲載された。

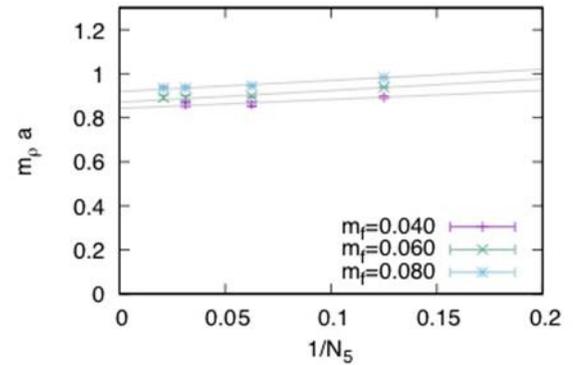


図 4 ρ 中間子質量の $1/N_5$ 依存性

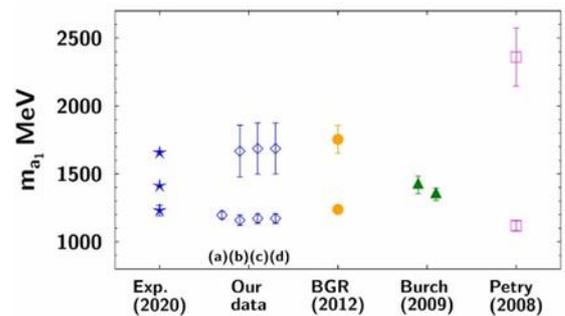


図 5 a_1 中間子の基底状態と励起状態の質量

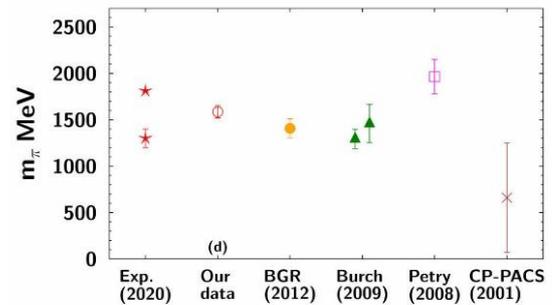


図 6 π 中間子の励起状態の質量

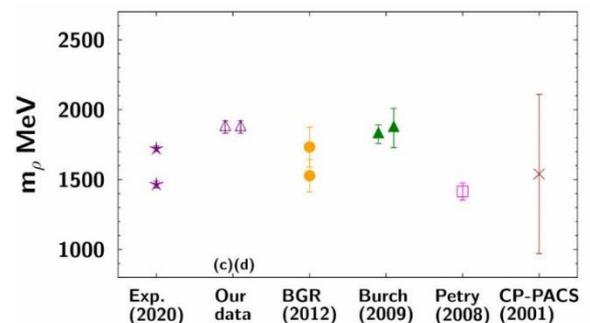


図 7 ρ 中間子励起状態の質量

(b) WF 作用による SU(N) ゲージ相互作用のフル QCD コード開発

ウィルソン・フェルミオン(WF)作用での SU(3) のコードを SU(N) のコードへ拡張させることを完了した。さらに大阪大学 CMC の SQUID ベクトルノード群への最適化を開始した。小規模な格子サイズでのプラケットエネルギー作用のシミュレーションを実施して先行研究と一致することを確認した。

(c) TOF 作用による SU(3) カラーと SU(2) カラー・フル QCD コード開発

TOF 作用によるフル QCD コードが完成し国士舘大学の SX-Aurora TSUBASA を利用して計算を実施し、先行研究と一致することを確認した。このコードを SQUID に移植し、ベクトル化を実施した。その後、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計算を開始した。この計算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。まだ物理的に粗い計算ではあるが、期待している結果が得られた (図 8)。

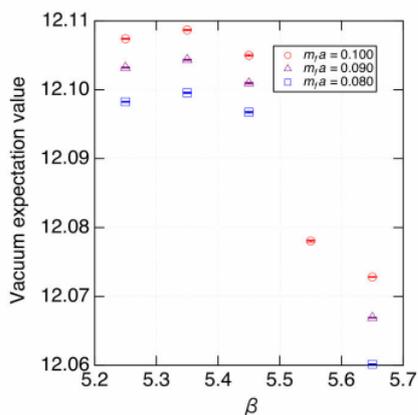


図 8 真空期待値と β (温度) の関係

5. 今年度の研究成果の詳細

研究課題 1 WF 作用によるフル QCD コードの最適化と真空中・有限温度中での σ 中間子伝

搬関数のシミュレーション

WF 作用コード (SU (N) カラーゲージ相互作用) については、小さい格子サイズでのプラケットエネルギーでのシミュレーションは先行研究と一致していたためベクトル化のみを行ったコードを用いて 4次元格子サイズが $8^3 \times 16$ でのシミュレーションを実施した。その結果、中間子の質量比が先行研究の値と 10%の差があり、その原因の追及が必要であることが分かった。本プログラムコードをクエンチ近似で実行 (動的フェルミオンを止めた状態) したところ先行研究と誤差の範囲内で π 中間子と ρ 中間子の質量比が一致した。このため、ハイブリッドモンテカルロ法での動的フェルミオンの計算のコード部分にバグがあることを突き止めた。バグの修正及び修正後のシミュレーションは JHPCN 以外の計算機資源を活用する予定で計画をする。また、このシミュレーションの他に、コードのベクトル化・並列化による高速化を実施し、ベクトル化率 99.6%、ストロングスケール法による並列化率 99.9%を達成している。バグの修正は残るが大阪大学 CMC ベクトルノード群への最適化は終了している。今年度 WF 作用コードを使用したテストシミュレーションで利用可能計算資源の約 30%を使用した。

研究課題 2 TOF 作用によるフル QCD コードの高速化

TOF 作用コードについては 2022 年度最終報告の提出段階でベクトル化率 94.1%、ストロングスケール法による並列化率は最大で 85.1%であった。さらにコードの改良を行い、計算規模を 4 倍に大きくしたテストシミュレーションでは、ベクトル化率 99.5%まで向上させることに成功した。また、計算速度は改良前と比べて約 1.8 倍に向上した。ベクトル化においては 4 重ループの 1 重ループ化および、2 重ループのループ展開を行い、ループ長を稼いだ。並列については、

mpi_comm_split を活用して、mpi_comm_world を分割することで、不要な通信処理を削減した。このコードを用いて真空及び有限温度の物理的な結果を得るためのシミュレーションを開始した。今年度はゲージ配位を SU(3) と SU(2) に関して生成している。生成した SU(3) のゲージ配位を使用して、閉じ込め・非閉じ込めに対するオーダーパラメーターであるポリャコフループの期待値について有限温度依存性のシミュレーションを実施した結果が図 9 である。 $\beta=5.5$ 付近で相転移がありそうということが分かる。また、 π 中間子と ρ 中間子の質量の有限温度をシミュレーションした結果が図 10-12 である。これらの結果からも $\beta=5.5$ 付近で相転移がありそうということが分かる。

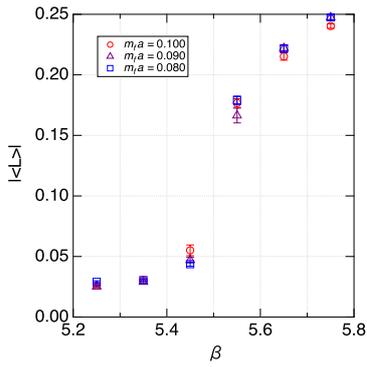


図 9 ポリャコフループの β 依存性 (温度依存性)

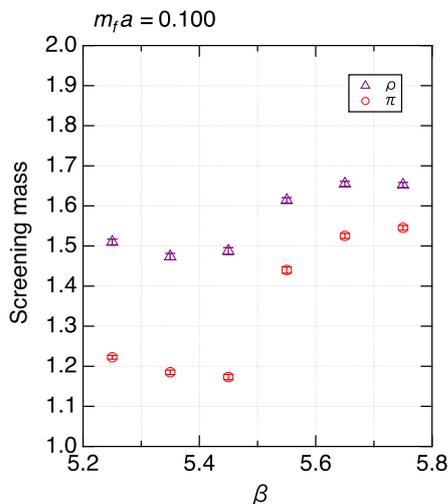


図 10 中間子質量の β 依存性 (温度依存性)

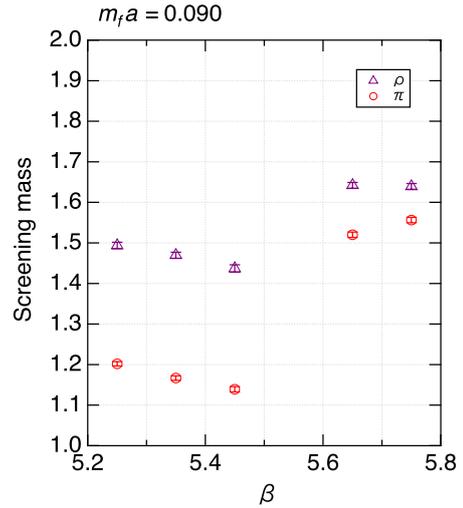


図 11 中間子質量の β 依存性 (温度依存性)

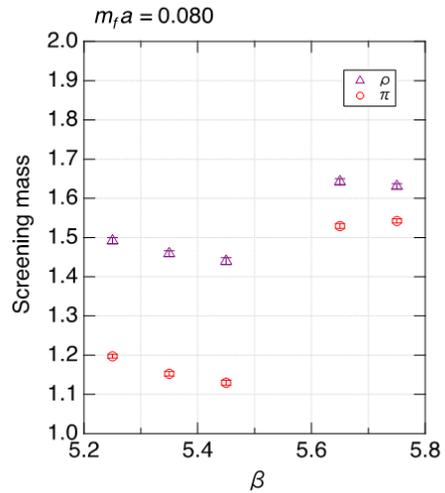


図 12 中間子質量の β 依存性 (温度依存性)

これらのシミュレーションでは、 $8^3 \times 4$ 格子、 $N_5=12$ 、 $M_5=1.65$ 、 $m_f a=0.10, 0.09, 0.08$ としている。これらのシミュレーションに約 70% の計算機資源を使った。本年度のゲージ配位数では不足しているため σ 中間子のプロパゲータのシミュレーションに入ることができなかった。しかし、本年度のシミュレーションから、先行研究では WF 作用による重いクォーク質量領域での計算しかできなかった σ 中間子のシミュレーションが TOF 作用により中程度の質量領域で現実的に実施可能な範囲になったと考えている。

JHPCN 研究の成果を利用した研究成果

昨年度までに得られたシミュレーション結果を利用して、ダークマターに関する研究成果を上げることができた。テクニカラー理論でのスケールアップのアイデアを利用して、複合ダークマターの質量スペクトルについての研究に着手した。

ダークマターはどんな物質なのか、その正体はまだ解明されていないが、ダークマターが存在する多くの証拠は確認されている。またダークマターは質量を持ち、ダークマターが宇宙の構成に占めるエネルギーの割合は 27%と、通常物質が占める 5%よりも大きい。このダークマターの質量の生成機構をダークマターのエネルギースケールでのカイラル対称性の自発的な破れで説明するモデルが提案されている。そのモデルでは、安定なダークマターはダーク π 中間子等の複合粒子が候補として挙げられる。

本研究では、SU(3)カラーゲージ理論である QCD に類似した隠れた SU(3)カラーゲージ理論をダークマターのセクターとして導入し、格子ゲージ理論のシミュレーションを行うことで、ダーク中間子の質量スペクトルを求める。我々の WF 作用(過去の大阪大学 RCNP との共同研究成果)と TOF 作用を用いたシミュレーションの結果(JHPCN 共同研究での成果)をダークマターのエネルギー領域までスケールアップすることにより、ダーク π 中間子、ダーク ρ 中間子、ダーク σ 中間子及びダーク a_1 中間子の質量を予言した。本研究の成果は国際シンポジウム TAUP2023 で発表し、査読付き国際会議報告として Proceedings of Science 誌に掲載された。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

進捗状況

課題 1 に関しては、プログラムコードのベクトル化と並列化による高速化は達成されて

いるので JHPCN での共同研究としては終了とする。プログラムのバグ抜きをして最終的に完成させる。課題 2 は、シミュレーションの結果として、プラケットエネルギーや π 中間子と ρ 中間子の質量比は先行研究と一致しているため、物理的な結果を得るためのシミュレーションをして、有限温度でのポリヤコフループや π 中間子と ρ 中間子の質量に関するシミュレーションを実施した。 σ 中間子の質量を計算するためにさらにゲージ配位を生成しなければならない。このシミュレーションは次年度に実施する。また、 σ 中間子の非結合ダイアグラムの計算の計算量を減らすための計算手法の検討についても次年度に取り組む。またダークマターの研究から SU(2)カラーについても計算の必要性・重要性が分かったため、SU(2)カラーについてのゲージ配位の生成も開始した。

自己評価と今後の展望

課題の進捗状況から 7.5 点の評価だと判断している。計画段階で適切な時間配分ができていなかったと考えている。

格子カイラル対称性を持つ 2 フレーバー TOF 作用のフル QCD コードを用いて SU(2)カラーと SU(3)カラーについて物理的な結果を目指したパラメータの設定によるシミュレーションに入った。次年度には σ 中間子のシミュレーションに入ることが可能になる。これにともなってコード開発としては、2 + 1 フレーバー用のフル QCD コードの開発に移行して行く。2 フレーバー・フル QCD コードと 2 + 1 フレーバー・フル QCD コードを使用することにより、ストレンジネスを含むスカラ中間子の質量生成機構を明らかにすることが次の目標になる。

7. 研究業績

(1) 学術論文 (査読あり)

なし

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

[1] Yuko Murakami, Motoo Sekiguchi, Hiroaki Wada and Masayuki Wakayama, “The mass spectroscopy of dark matter in SU(3) hidden color”, in proceedings of XVIII International Conference on Topics in Astroparticle and Underground Physics, Proceedings of Science, PoS(TAUP2023) 336, 4 pages, March 22, 2024. (The International School for Advanced Studies, Italy).

(3) 国際会議発表 (査読あり)

[1] Yuko Murakami, Motoo Sekiguchi, Hiroaki Wada and Masayuki Wakayama, “The mass spectroscopy of dark matter in SU(3) hidden color”, XVIII International Conference on Topics in Astroparticle and Underground Physics, 2023 年 8 月 28 日 (オーストリア、ウィーン) .

(4) 国内会議発表 (査読なし)

[1] 若山将征、関口宗男、伊達進、和田浩明、村上祐子、「Truncated overlap フェルミオンを用いた格子 QCD 計算による研究」、2023 年度 RCNP スパコン成果報告会、大阪大学核物理研究センター、2024 年 3 月 29 日 (口頭発表) .

(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