

Title	格子QCDシミュレーションを用いたQCDの相図の研究
Author(s)	永田, 桂太郎
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2011, 1, p. 45-49
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/70449
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

格子 QCD シミュレーションを用いた QCD の相図の研究

永田 桂太郎

広島大学 情報メディア教育研究センター

1 物質の理解へむけて

クォークとグルーオンは強い相互作用の基本粒子であり、その間の相互作用は非可換ゲージ理論である量子色力学 (QCD) により記述される。強い相互作用の世界では通常の温度や密度下では陽子や中性子、原子核が形成される。ビッグバン後のような超高温ではクォークとグルーオンのプラズマ状態 (QGP) が形成されると考えられている。中性子星内部のような高密度下での状態についてはカラー超電導などの様々な可能性が指摘されている。このように、QCD は温度や密度などの環境を変えることで多様な状態を形成する。QCD のつくる様々な状態やその間の相転移は物質の微視的な構成やその起源という重要な問題と関係しており、ハドロン物理学の重要な課題の 1 つとして懸命に調べられている。

QCD の解析はスーパーコンピュータを用いた数値シミュレーションが威力を発揮する分野である。QCD の相図の中で有限密度領域の解析は「符号問題」と呼ばれる問題のため長年にわたり困難な課題であったが、計算手法の改良や計算機の進歩により、近年大きく進展してきている [1, 2]。

我々のグループでは、大阪大学 CMC の NEC-SX9 などのスーパーコンピュータを用いて QCD 相図の研究を行っている。本稿では我々のグループが現在行っている研究を紹介する。

2 有限密度 QCD の符号問題

クォーク化学ポテンシャル μ を持つ QCD の大分配関数は

$$Z(\mu) = \int DU (\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-S_G} \quad (1)$$

で与えられる。ここで S_G はゲージ作用、 N_f はフレーバ数、 $\Delta(\mu)$ はクォーク伝搬関数の逆行列であり、 $\det \Delta(\mu)$ はクォーク場の経路積分を代数的に実行することで現れる。

QCD は非摂動的性質を持つため、その解析は非摂動的解法である格子 QCD を用いて行われる。格子 QCD では格子状に離散化した作用を考え、その経路積分を

Monte Carlo (MC) 法を用いて数値的に解く。ボルツマン因子 $(\det \Delta(\mu))^{N_f} e^{-S_G}$ は MC 法における確率測度として扱われる。格子 QCD は閉じ込め/非閉じ込め相転移の転移温度や相転移の次数を预言するなど有限温度 (ただし $\mu = 0$) 系の研究において威力を発揮している。

一方、 $\mu \neq 0$ である場合の解析は「符号問題」と呼ばれる問題のため困難な課題である。クォーク行列は $\mu \in \mathbb{C}$ に対して γ_5 -エルミート性の関係式 $\Delta(\mu)^\dagger = \gamma_5 \Delta(-\mu^*) \gamma_5$ を満たし、これから $(\det \Delta(\mu))^* = \det \Delta(-\mu^*)$ が得られる。この式を用いると、 $\mu \in \mathbb{R}, \mu \neq 0$ に対して $\det \Delta(\mu)$ は一般に複素数となることが示せる。ボルツマン因子が複素数になってしまうため、MC 法が破綻する。これが符号問題である。

3 虚数化学ポテンシャルの方法

符号問題を回避して QCD の相図を調べる方法の 1 つに虚数化学ポテンシャルの方法がある。化学ポテンシャルが純虚数 $\mu = i\mu_I$ の場合 $\det \Delta(\mu)$ が実数となり、符号問題が存在しない。自由エネルギーや物理量は相転移線を横切らない限り連続であるので、QCD の相図の虚数化学ポテンシャル側で求めた物理量は実側に解析接続する。

相図の虚数化学ポテンシャル領域の性質や閉じ込め/非閉じ込め相境界線の位置などは格子 QCD シミュレーションによって調べられている。2 フレーバに対しては、スタaggered フェルミオンと呼ばれる格子作用を用いたシミュレーションが文献 [3, 4, 5] で、Wilson クォーク作用を用いたシミュレーションが文献 [6] で行われており、一致した結果が得られている。他にも 3 フレーバ [7]、4 フレーバ [8, 9, 10, 11] などの研究も行われている。

我々のグループでは、クローバ改良型 Wilson 作用とくりこみ群改良型ゲージ作用と呼ばれる改良型作用を用いた研究を行っている。最近の研究 [12] では、2 フレーバの場合の閉じ込め相/非閉じ込め相の相境界線を調べるために格子 QCD シミュレーションを行った。格子体積は $\sim (2\text{fm})^3$ 、クォーク質量 ($m_\pi/m_\rho \sim 0.8$) 程度を用いた。熱力学パラ

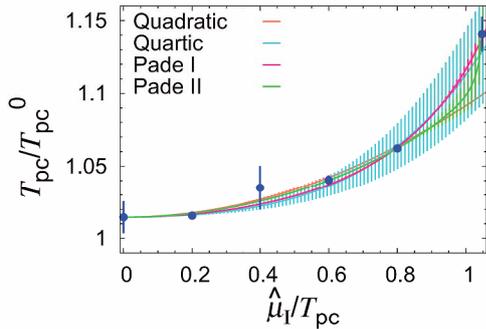


図 1: 虚数化学ポテンシャル領域の閉じ込め/非閉じ込め相の相境界線: モンテカルロシミュレーションによって得られたデータとデータとのフィッティングで決定した 4 種類の試行関数。 $\hat{\mu}_I$ は物理次元での虚数化学ポテンシャル、 $T_{pc} = T_{pc}(\mu_I)$ は化学ポテンシャル μ_I における相転移温度、 $T_{pc}^0 = T_{pc}(0)$ 。

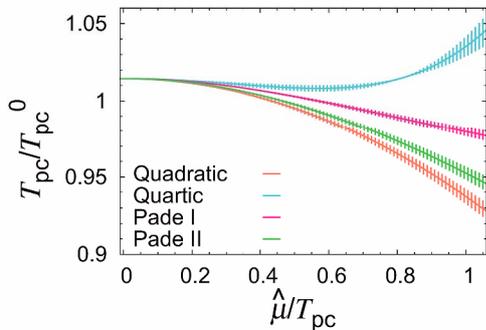


図 2: 実化学ポテンシャル領域の閉じ込め/非閉じ込め相の相境界線。虚数化学ポテンシャル領域の相境界線を解析接続 ($\mu_I^2 \rightarrow -\mu^2$) して得られる。べき級数に対して Pade 近似では収束性が大きく改善している。

メータ (μ_I, T) の様々な値に対してシミュレーションを行い、ポリヤコフループを計算した。ポリヤコフループは閉じ込め相/非閉じ込め相を特徴付ける量であり、その感受率の温度や密度依存性を調べることで相転移点を決定した。

図 1 は格子シミュレーションで得られた相転移点のデータおよび試行関数によるフィットの結果を表している。試行関数としては 2 次関数、4 次関数、および 2 種類の Padé 近似を考えた。4 種類の試行関数の中で 2 次関数はデータを上手く再現しないので、高次項の寄与が存在することがわかる。このような寄与はスタガード作用 [3] や標準的な Wilson クォーク作用 [6] を用いた計算では得られていないので、作用の改良の結果と考えられる。4 次関数と 2 種類の Padé 近似はデータを同程度に再現している。ただし、4 次関数の結果では他のケースと比べて誤差が大きい。

これらの関数を実化学ポテンシャル側に解析接続した結果が図 2 である。虚数化学ポテンシャル領域と比べて実化学ポテンシャル側では関数間の違いが大きく、また、それは化学ポテンシャルが大きくなるほど増大することがわかる。2 次関数と 4 次関数の振る舞いは大きく異なるが、これはべき展開の次数によって漸近的な振る舞いが決まってしまうためであり、べき展開は大きい化学ポテンシャルでの不定性が大きいことを示している。2 種類の Padé 近似の違いは $\mu/T \sim 1$ で 2 ~ 3% に収まっており、べき展開に比べて収束性が大きく改善されている。閉じ込め/非閉じ込め相転移の相境界線は Padé 近似の近傍の領域に存在すると推測される。ただし、我々の計算では実際のクォーク質量より大きい値を用いたため実際の相境界線は低温側にシフトするものと考えられる。

虚数化学ポテンシャル領域では、閉じ込め相転移以外にも虚数化学ポテンシャル領域に固有な相転移や周期性などが存在することが知られており [13]、その数値的な検証も重要な課題となっている。文献 [12] では、そのような相転移についても研究を行っている。

4 実化学ポテンシャルの場合へのアプローチ

符号問題はクォーク行列式 $\det \Delta$ の虚数部から発生する。そのため、化学ポテンシャルが実で有限な場合は、符号問題の回避法が必要となり、 $\det \Delta$ の扱いはその際のポイントの 1 つである。行列式の計算時間は行列のランクの 3 乗に比例する。クォーク行列は大規模行列である

ため、その計算は非常に時間がかかる。テイラー展開などの方法も提案されているが、化学ポテンシャルは Δ に含まれるため、低密度領域を除いては近似を用いず正確に求めることが望ましい。

クォーク行列式には、有限密度系での解析の際に有用な簡約公式が存在する [14, 15, 16, 17, 18]。簡約公式は以下のように導出される。格子 QCD 作用の時間方向は最近接相互作用と境界条件の項によって構成されており、時間成分の行列として表示すると帯行列のような構造を持っている。この場合行列式の時間成分を代数的に実行することが出来て、行列式のランクを小さくすることができる。このアイデアを実行するとクォーク行列式は

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \xi^{-N_r/2} \det(Q + \xi) \quad (2)$$

と変形される。ここで $\xi = e^{-\mu/T}$ はフガシティである。 C_0, Q はクォーク行列 Δ を時間方向の行列構造に注目して分解、再構築したもので、ランクは Δ に比べて $1/N_t$ に縮小されている。従って、行列式 $\det(Q + \xi)$ の計算時間は $\det \Delta$ の計算時間のおよそ $1/N_t^3$ になり、計算時間が大幅に短縮される。

Q の固有値を λ_n と書くと

$$\det \Delta(\mu) = C_0 \xi^{-N_r/2} \prod_{n=1}^{N_r} (\lambda_n + \xi) \quad (3)$$

を得る。 C_0, Q は μ に依存せず、従って λ_n も μ に依存しない。 μ 依存性はフガシティ ξ にのみ含まれており、 $\{\lambda_n\}$ を求めれば任意の μ に対して $\det \Delta$ を求めることが出来る。つまり、(3) 式は $\det \Delta$ の μ 依存性を解析的に与える式になっている。

Q の固有値の分布を2つの温度に対してプロットした結果を図3に示した。固有値は低温のハドロン相では Z_3 対称に分布し、高温の QGP 相では固有値が正の実軸に近づき対称性が破れている。最近の研究では固有値に $\lambda, 1/\lambda^*$ の対称性があり、この対称性によって固有値が2つのスケールに分離することもわかっている。現在は固有値の性質に注目した符号問題の解決可能性を探っている。

簡約公式の応用として、状態方程式のテイラー展開を考えてみる。圧力 p を温度の4乗で割った量のテイラー展開

$$\frac{\delta p(T, \mu)}{T^4} = \sum_{n=2,4,\dots}^{\infty} c_n(T) \left(\frac{\mu}{T}\right)^n \quad (4)$$

を考える。ここで $\delta p = p(\mu, T) - p(0, T)$ 。簡約公式を用いて求めた c_2, c_4 および c_6 の結果が図4である。クォー

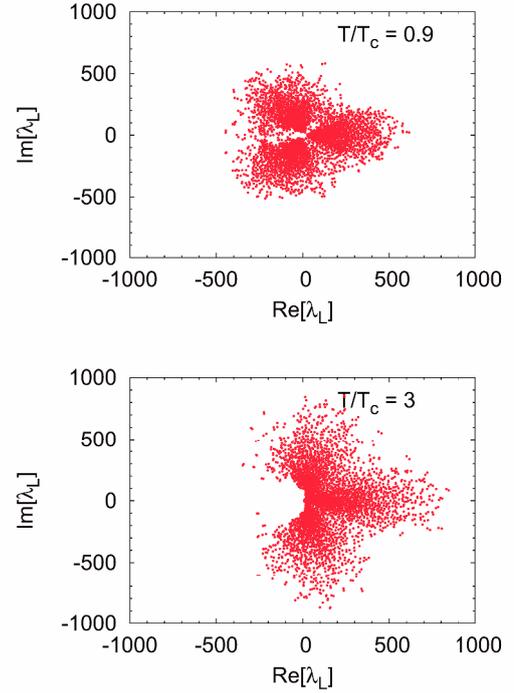


図3: Q の固有値の複素平面上的分布: ハドロン相 (上) と QGP 相 (下)。ハドロン相側では Z_3 対称性がある。

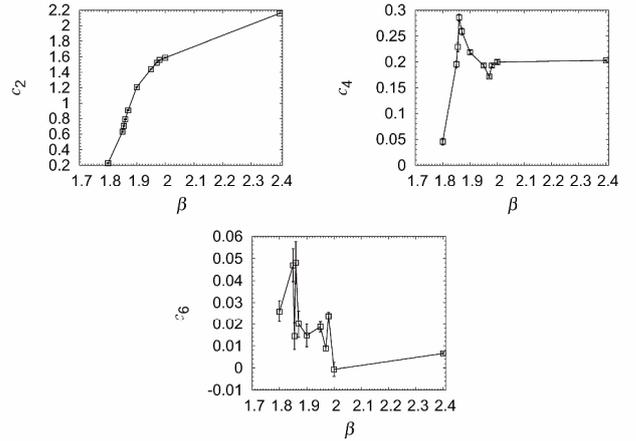


図4: $\delta p/T^4$ の μ/T についての2, 4, 6 次のテイラー係数。Stefan-Boltzmann 極限での値は $c_2 = 1, c_4 = 1/(2\pi^2)$ 。横軸 β は結合定数を表し、 β の大小は温度の高低にそれぞれ対応する。相転移点は $\beta = 1.86$ 近傍に存在する。

クとグルーオンの自由ガスとなるような高温極限 (Stefan Boltzmann 極限) では

$$\frac{\delta p}{T^4} = \frac{N_f}{2} \left(\frac{\mu}{T}\right)^2 + \frac{N_f}{4\pi^2} \left(\frac{\mu}{T}\right)^4 \quad (5)$$

となる。SB 極限の値と比べると c_2 は 2 倍程度、 c_4 は 4 倍程度の値になっている。これは有限体積効果や重いクォーク質量の影響によるものと考えられるが、その検証は今後の課題である。クォーク行列式の化学ポテンシャル依存性が代数的に与えられることが簡約公式の利点の 1 つであるが、これを利用すると高次のテイラー係数も容易に計算できる。 c_6 までではテイラー係数はよく収束する振る舞いがみられる。より高次の項の計算も容易であるが、高次の係数では統計誤差が大きく精度が低下するため高統計の計算が必要である。

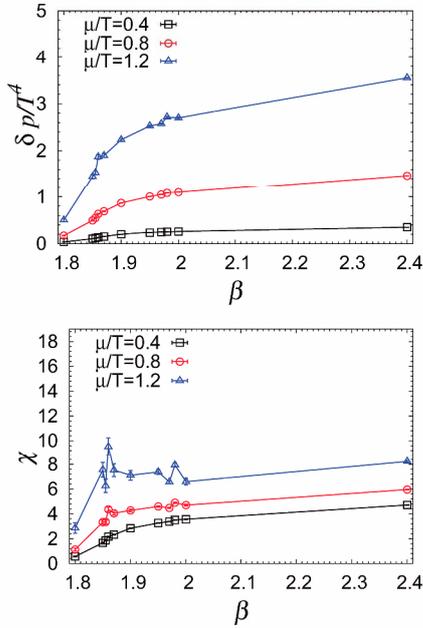


図 5: c_2, c_4, c_6 を用いて求めた $\delta p/T^4$ と χ .

図 5 は $\delta p/T^4$ と感受率 χ の結果を表している。状態方程式 $\delta p/T^4$ は温度の関数としてほぼなめらかな振る舞いをしていいる。感受率 χ は $\mu/T \leq 0.8$ まではピークを持たず、 $\mu/T \sim 1.2$ では小さなピークを持っている。図の小さなピークが物理的な相転移を表しているかどうかはテイラー係数の収束性や有限体積効果などを見積もる必要がある。

ここではテイラー展開への応用を考えたが、簡約公式は様々な問題に応用できる。(3) 式を展開するとクォーク行列式をフガシティ ξ の多項式として表現することが出来る。Lee-Yang 零点定理で知られるように、大分配関数のフガシティ多項式としての表現は相転移の解析の有用な

道具となる [19, 20]。その他の応用としては、フガシティ展開を利用してクォーク数を固定した分配関数を導出する方法はカノニカル法と呼ばれ、近年注目されている方法の一つである。

5 今後の展望

格了 QCD を用いた有限密度系の研究は近年大きく進展してきている。符号問題は深刻な問題であるが、様々なアイデアが提案され、研究されている。信頼性を検証する満足いく方法や高密度領域へ適用可能な方法が確立されていないなどまだまだ多くの課題が残っているが、臨界点を示す結果など物理的に重要な成果も得られるようになってきている。

本稿では我々が現在行っている研究内容を紹介した。数値計算の詳細については説明を省いたが、本研究では多重積分のモンテカルロシミュレーションの他に大規模行列の行列式計算と固有値問題、さらには次元の大きな多項式の係数決定や、倍精度を越える変数の扱いなど数値計算の面でも様々な問題に取り組んでいる。相転移は熱力学極限における現象であるため、その位置や次数の定量的決定のためには有限サイズスケーリングと呼ばれる計算が本質的に重要である。また、相構造はクォーク質量に強く依存するため、より現実の値に近いクォーク質量を用いることも重要である。実化学ポテンシャルの研究は、行列式計算や固有値問題の解法の計算時間とメモリの制約のために、現在のところ小さい格子での計算に限られている。今後の QCD 相図の研究では計算機の進歩だけでなく、行列式計算と固有値解法のアルゴリズム面の改良が鍵となるかもしれない。

本研究の多くの部分は大阪大学サイバーメディアセンターの NEC-SX9 を用いて行った。管理、運営メンテナンスなどに関わっている多くの方々に感謝する。

参考文献

- [1] S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, and T. Takaishi, *Prog.Theor.Phys.* **110**, 615 (2003), arXiv:hep-lat/0306031.
- [2] P. de Forcrand, *PoS LAT2009*, 010 (2009), arXiv:1005.0539.
- [3] P. de Forcrand and O. Philipsen, *Nucl. Phys.* **B642**, 290 (2002), arXiv:hep-lat/0205016.
- [4] M. D'Elia and F. Sanfilippo *Phys. Rev.* **D80**, 111501 (2009), arXiv:0909.0254.

- [5] M. D’Elia and F. Sanfilippo, Phys.Rev. **D80**, 014502 (2009), arXiv:0904.1400.
- [6] L.-K. Wu, X.-Q. Luo, and H.-S. Chen, Phys. Rev. **D76**, 034505 (2007), arXiv:hep-lat/0611035.
- [7] P. de Forcrand and O. Philipsen, Phys.Rev.Lett. **105**, 152001 (2010), arXiv:1004.3144.
- [8] M. D’Elia and M.-P. Lombardo, Phys.Rev. **D67**, 014505 (2003), arXiv:hep-lat/0209146.
- [9] M. D’Elia and M. P. Lombardo, Phys.Rev. **D70**, 074509 (2004), arXiv:hep-lat/0406012.
- [10] M. D’Elia, F. Di Renzo, and M. P. Lombardo, Phys.Rev. **D76**, 114509 (2007), arXiv:0705.3814.
- [11] P. Cea, L. Cosmai, M. D’Elia, and A. Papa, Phys.Rev. **D81**, 094502 (2010), arXiv:1004.0184.
- [12] K. Nagata and A. Nakamura, Phys.Rev. **D83**, 114507 (2011), arXiv:1104.2142.
- [13] A. Roberge and N. Weiss, Nucl. Phys. **B275**, 734 (1986).
- [14] P. E. Gibbs, Phys. Lett. **B172**, 53 (1986).
- [15] A. Hasenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys. **B371**, 539 (1992).
- [16] A. Borici, Prog. Theor. Phys. Suppl. **153**, 335 (2004).
- [17] K. Nagata and A. Nakamura, Phys.Rev. **D82**, 094027 (2010), arXiv:1009.2149.
- [18] A. Alexandru and U. Wenger, Phys.Rev. **D83**, 034502 (2011), arXiv:1009.2197.
- [19] T. Lee and C.-N. Yang, Phys.Rev. **87**, 410 (1952).
- [20] C.-N. Yang and T. Lee, Phys.Rev. **87**, 404 (1952).