



Title	格子QCDシミュレーションを用いた高密度QCDの探索
Author(s)	福田, 龍太郎
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2016, 6, p. 27-31
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/70509
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

格子 QCD シミュレーションを用いた高密度 QCD の探索

福田 龍太郎

東京大学 理学系研究科 物理学専攻
理研 BNL 研究センター

1 はじめに

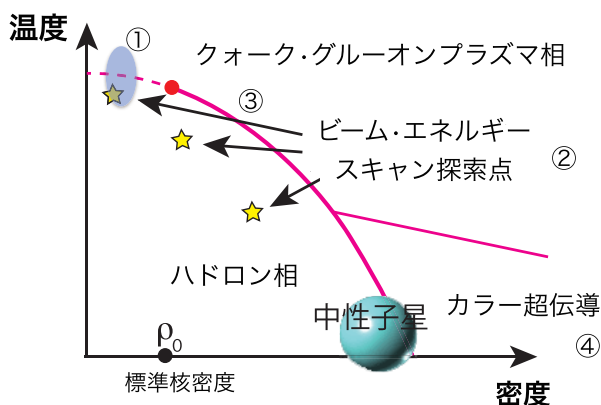


図 1 QCD 相図の概念図

図 1 は、有限温度、有限密度 QCD 相図の概念図である。現在の本分野の重要な課題の 1 つは、図 1 で示されている閉じ込め-非閉じ込め相転移線 ③ が、相図中のどの領域に存在するのかを特定することである。米国のブルックヘブン国立研究所においても、閉じ込め-非閉じ込め相転移線を探る、ビーム・エネルギー スキャン実験 (図 1 の ②) が進行中であり、本課題は理論家、実験家が一体となって取り組むべきものであると言える。QCD 相図を一意的に決めるには、第一原理計算である格子 QCD 計算を用いるのが最良であるが、格子 QCD 計算を有限密度系に適用すると負符号問題 [1, 2] と呼ばれる問題に直面し、現状では限られたごく一部の領域 (図 1 の ①) でしか、信頼できる結果が得られていない。筆者は、この問題を解決する糸口を見つけるべく、正準集合の方法 [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9] に基づいた格子 QCD シミュレーションを行う。さらに、QCD 相図の低温高密度領域にはカラー超伝導相 (図 1 の ④) の存在が示唆されている。その領域ではダイクォーク [10] が潜在的な自由度として重要な役割を果たしていると考えられているが、その存在は未だ裏付けられていない。そこで筆者は、格子 QCD シミュレーションがダイクォークの存在を支持するかどうかの検証も行う。

2 正準集合の方法に基づいた有限密度 QCD 相構造の解析

2.1 モンテカルロ法と負符号問題

場の量子論の一般論によれば、有限温度 T 、有限密度 (有限クォーク化学ポテンシャル μ_q) での物理量 $O(T, \mu_q)$ の期待値 $\langle O(T, \mu_q) \rangle$ は経路積分量子化法を用いると次のように計算できる。

$$\begin{aligned} \langle O(T, \mu_q) \rangle &= \frac{\text{Tr} [O(T, \mu_q) e^{-(\hat{H} - \mu_q \hat{N})/T}]}{\text{Tr} [e^{-(\hat{H} - \mu_q \hat{N})/T}]} \\ &= \frac{\int [dA] O(T, \mu_q) \det \Delta(T, \mu_q) e^{-S_g}}{Z_{GC}(T, \mu_q)} \end{aligned}$$

$$Z_{GC}(T, \mu_q) \equiv \int [dA] \det \Delta(T, \mu_q) e^{-S_g}$$

ここで、 $\hat{H}$, $\hat{N}$, Δ , S_g , Z_{GC} は、ハミルトニアン、クォーク数演算子、クォーク行列、ゲージ作用、大分配関数である。 A はゲージ場 A_μ の 4 つの成分 $\{A_1, A_2, A_3, A_4\}$ を表しており、積分の測度 $[dA_\mu]$ は $[dA_\mu] = \prod_x \prod_\mu dA_\mu(x)$ と定義されている。この積分は、一般的には超多重積分であり、区分求積法に基づいた様々な手法によってそれを評価することは、我々が現在利用できる計算資源を考えると不可能と言える。そこで、格子 QCD シミュレーションでは、モンテカルロ法を用いて上記の積分値を評価する。本方法では、確率 $P \propto \det \Delta e^{-S_g}$ に従って、ゲージ場を生成していき、生成されたゲージ場の集合 $\{A^1, \dots, A^N\}$ を用いて $\langle O \rangle$ を次のような統計平均で求める。

$$\langle O \rangle \sim \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O(A^i)$$

しかし、有限密度系ではこの方法は上手くいかない。なぜなら、有限密度系では $\det \Delta$ が複素数になり、モンテカルロ法で用いる確率 P を、もはや確率として扱えなくなってしまうからである。この困難は負符号問題 [1, 2] と呼ばれ、数十年に渡り未解決の問題である。

2.2 負符号問題を回避するための試み：正準集合の方法

負符号問題を克服するために、本研究では正準集合の方法に着目する。正準集合の方法では正準分配関数 $Z_n(T)$ を用いて、大分配関数を

$$Z_{GC}(T, \mu_q) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} Z_n(T) e^{n\mu_q/T}$$

のように展開する。正準分配関数は純虚数クォーク化学ポテンシャル $\mu_q = i\mu_I$ ($\mu_I \in \mathbb{R}$) で計算された大分配関数のフーリエ変換を用いて

$$Z_n(T) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\left(\frac{\mu_I}{T}\right) Z_{GC}(T, i\mu_I) e^{-in\mu_I/T} \quad (1)$$

と計算される。純虚数クォーク化学ポテンシャルでは $\det \Delta \in \mathbb{R}$ となるため、モンテカルロ法により $Z_{GC}(T, i\mu_I)$ を求めることができる。その一方で、式 (1) は粒子数 n が大きくなるにつれて激しい振動積分になり、また、 Z_n は n の増加に対して非常に早く減衰するので、式 (1) を評価する際には、多倍長精度計算が必要となる。

以上のように、正準集合による格子 QCD シミュレーションでは、原理的に負符号問題を回避できるため、有限密度 QCD 系を解析するための有望な手段と言える。

2.3 大分配関数の計算：巻き数展開法

式 (1) を数値的に評価するには、数百セットのゲージ配位に対して、数百から数千個の $Z_{GC}(i\mu_I)$ を計算する必要がある。 Z_{GC} の計算にはフェルミオン行列式 $\det \Delta$ の計算が必須であるが、 Δ は $4N_c N_V \times 4N_c N_V$ 行列であるため (N_c, N_V はカラー自由度、4次元時空中の格子点数)、十分大きな4次元時空を考えると、 $\det \Delta$ の計算コストが非常に高くなる。そこで本研究では、以下で説明する巻き数展開法を用いて、この計算コストを大幅に削減する。

ウィルソンフェルミオンのフェルミオン行列式は

$$\Delta = 1 - \kappa Q_s - \kappa Q_t(i\mu_I) \quad (2)$$

と書かれる。ここで Q_s, Q_t は3次元空間内のクォークの伝搬の寄与、虚時間方向のクォークの伝搬の寄与を表す。 κ はホッピングパラメーターと呼ばれる係数で、質量が大きい (小さい) とホッピングパラメータは小さく (大きく) なり、クォークの伝搬のしやすさを記述する。フェルミオン行列式を、次のような恒等式を用いて評価する。

$$\det \Delta(i\mu_I) = e^{\log \det \Delta(i\mu_I)} = e^{\text{Tr} \log \Delta(i\mu_I)} \quad (3)$$

式 (3) の最後の表式で、 $\log \Delta$ を式 (2) を用いてホッピングパラメータについて展開する。トレースの性質を考

えると、式 (3) で寄与を持つのは、4次元時空中の閉じられたクォークループのみであることが分かる。また、クォークが正 (負) の虚時間方向に1つの格子分だけ伝搬すると、格子間隔を a として、クォーク化学ポテンシャルが $e^{+\mu a} (e^{-i\mu_I a})$ だけ現れる。有限温度の場の理論では、虚時間方向は反周期境界条件が課されるので、式 (3) は

$$\begin{aligned} \det \Delta(i\mu_I) &= \exp \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} W_n e^{in\mu_I a N_t} \right) \\ &= \exp \left(\sum_{n=-\infty}^{\infty} W_n e^{in\mu_I/T} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

と求めることができる。ここで、 N_t は虚時間方向の格子点の数であり、最後の等式では $N_t a = 1/T$ という関係を用いている。 n は虚時間方向のクォークループの巻きつき数を表しており、負の巻きつき数は、虚時間負方向のクォークループを表す。このフェルミオン行列式の展開は巻き数展開 [11, 12, 13] と呼ばれる。

以上のことより、格子 QCD シミュレーションにより係数 W_n を計算すれば、フェルミオン行列式を評価できる。ここで重要なのは、 W_n が化学ポテンシャルに依存せず、化学ポテンシャル依存性は、複素フガシティ $\exp(i\mu_I/T)$ のみに現れることである。このことは、ある化学ポテンシャルにおいて係数の集合 $\{W_n\}$ を1度計算すれば、望みのすべての化学ポテンシャルにおいてフェルミオン行列式を計算できることを意味する。従って、この方法を採用すれば、フェルミオン行列式の計算コストを大幅に削減することができる。

2.4 熱力学量の計算

前節の方法でフェルミオン行列式が評価できれば、正準分配関数は式 (1) で求めることができる。正準分配関数が求められれば、圧力 p 、粒子数 n 、感受率 χ などの熱力学量を次のように求めることができる。

$$\begin{aligned} \frac{\Delta p(\mu, T)}{T^4} &= \frac{p(\mu, T)}{T^4} - \frac{p(0, T)}{T^4} \\ &= \left(\frac{N_t}{N_s} \right)^3 \log \left(\frac{Z_{GC}(\mu, T)}{Z_{GC}(0, T)} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{n(\mu, T)}{T^3} = \frac{\partial}{\partial(\mu/T)} \frac{p(\mu, T)}{T^4} \quad (6)$$

$$\frac{\chi(\mu, T)}{T^2} = \frac{\partial^2}{\partial(\mu/T)^2} \frac{p(\mu, T)}{T^4} \quad (7)$$

2.5 数値シミュレーション結果

本研究では、パイ中間子の質量 m_π とロー中間子の質量 m_ρ の比、 $m_\pi/m_\rho = 0.8$ で特徴付けられる、2フレーバーウィルソンフェルミオンを用いて、圧力、粒子数、感受率のバリオン化学ポテンシャル依存性を、5つの温

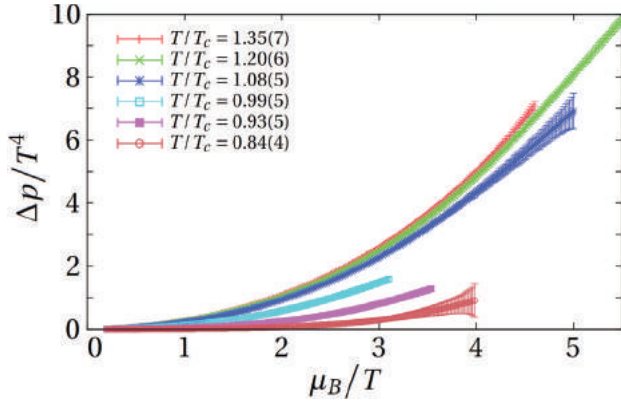


図2 圧力のバリオン化学ポテンシャル依存性

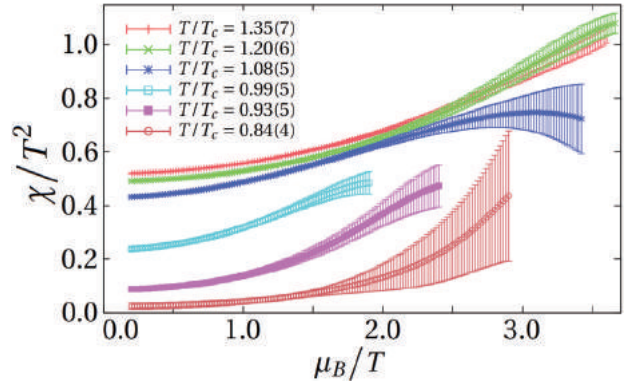


図4 感受率のバリオン化学ポテンシャル依存性

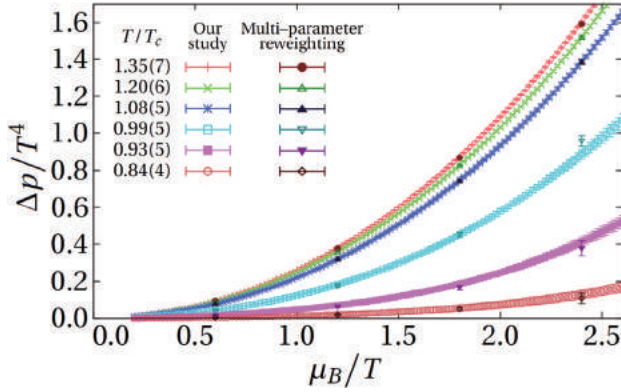


図3 多変数再重み付け法と正準集合の方法の比較

度 $T/T_c = 1.35, 1.20, 1.08, 0.99, 0.93, 0.84$ で計算した。ここで T_c はバリオン化学ポテンシャル $\mu_B = 0$ での系の相転移温度である。格子サイズは $(N_x, N_y, N_z, N_t) = (8, 8, 8, 4)$ とした。

図2は、圧力のバリオン化学ポテンシャル依存性である。 T_c よりも上の温度では、 $\mu_B/T \sim 5$ 程度まで、 T_c よりも下の温度では、 $\mu_B/T \sim 3.5$ 程度まで計算できていることが分かる。現在、有限密度格子 QCD シミュレーションの計算可能範囲は、 $\mu_B/T \sim 1$ 程度であると考えられており、本研究結果はその制限を超える可能性を秘めていると言える。図3は、圧力の計算における、多変数再重み付け法 [14, 15] と正準集合の方法の比較である。正準集合の方法と同様に、多変数再重み付け法も負符号問題を回避するために考えられた手法であり、今日では、低密度系に対する信頼に足る方法であると考えられている。図3から分かるように、本研究結果は、多変数再重み付け法の結果と低密度領域で良い一致を見せている。

図4は、感受率のバリオン化学ポテンシャル依存性である。系がある密度で相転移を起こす場合、その密度に対応するバリオン化学ポテンシャルで感受率が極大を持つ。図4を見てみると、 T_c より低いすべての温度で感受

率が極大を持つような傾向が見えるが、それは明白ではない。このように、正準集合の方法で計算できるバリオン化学ポテンシャルの領域が制限されてしまうのは、数値計算では式 (2.2) をある有限個の和で打ち切らなければならないからである。この打ち切り誤差を減らすためには、大きな粒子数 n までの正準分配関数 Z_n を正確に求める必要がある。本研究の今後の課題は、まさにこの部分を克服することである。

3 格子 QCD シミュレーションによるダイクォーク状態の探索

3.1 ダイクォーク描像とは

近年、クォークモデルでは説明できない X, Y, Z と呼ばれるエキゾチックハドロンが続々と見つかった。X, Y, Z を説明するための代表的なシナリオとして、メソン分子描像、テトラクォーク描像が提案されているが、後者のテトラクォーク描像はダイクォーク描像に立脚している。ダイクォークは元来、QCD によって予言される数多くのエキゾチックな粒子が現れないことを、自然な方法で説明するために数十年前に提案され、その歴史は長い。2015 年 7 月に、CERN でペンタクォークの存在が実証されたこともあり [16]、ダイクォーク描像の重要性はより高まっている。さらに、QCD の熱力学的側面で重要な低温高密度物質中のカラー超伝導状態でも、クォーク対としてダイクォークが主要な構成要素だと考えられている。上記以外にも、ダイクォーク描像は、様々な QCD 物理で重要な役割を果たしている。長年に渡り考えられており、関心を喚起し続けているが、その存在は未だ裏付けられていないため、その存在と性質を第一原理から議論することは有意義である。

3.2 本研究の意図：格子 QCD シミュレーションは現象論によるダイクォーク描像を支持するか

1 つのグルーオンの交換による相互作用に立脚したモデル [10] は、good diquark と呼ばれるカラー反 3 重項、

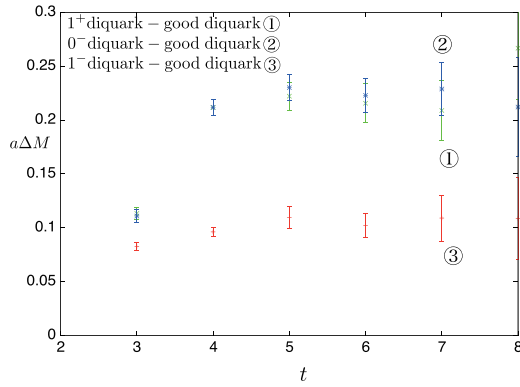


図5 good diquark とその他のダイクォークの質量差

フレーバー反対称、スピン 1 重項の正パリティチャネルで 2 つのクォーク間に引力があることを示唆する。加えて、この good diquark チャネルでのダイクォーク質量が最も軽いと結論されている。

本研究では、格子 QCD 計算を用いて様々なダイクォークの質量を計算し、good diquark が最も軽いかをどうかを調べる。次に、good diquark チャネルでクォーク間の引力が実際に増大するかどうかを調べる。これを定量的に調べるには、ダイクォークの量子数を持った状態においてクォークの密度-密度相関関数を計算し、それが 2 つのクォークを近づけるにつれ大きくなることを示せば良い。本研究の目的は、上記の現象論的予想を第一原理計算が支持するか否かを調べ、ダイクォークの存在の妥当性を議論することである。

3.3 格子 QCD シミュレーションでのダイクォーク状態の解析方法

ダイクォーク状態はカラー自由度を陽に含む。従って、格子 QCD シミュレーションによってその状態を調べるには、適切な定式化が必要になってくる。その 1 つの方法は、格子理論に対してゲージ固定を行うことであるが、本研究では、ダイクォークと 1 つの静的クォークを組み合わせ、ゲージ不変なバリオン状態を構成する [17]。本方法を用いると、様々なダイクォーク間の質量差、及びクォークの密度-密度相関関数を well-defined な形で計算できる。

3.4 数値シミュレーション結果

本研究は、現在進行中のプロジェクトであるため、まだすべての結果が出揃っていない。そのため、今回は結果の一例として、様々なダイクォーク間の質量差のみを掲載する。図 5 は、格子サイズ a で無次元化された、good diquark とその他のダイクォークとの質量差である。図 5 を見ると、確かに good diquark が最も軽いということが分かり、格子 QCD シミュレーションと現象論的示唆との間に矛盾は見られない。

4 おわりに

4.1 正準集合の方法

本研究で用いた巻き数展開法は、クォーク質量が十分重い場合に機能する方法であり、決して万能ではない。しかし、本取り組みは、正準集合の方法による結果と先行研究による他の方法での結果を比べつつ、正準集合の方法の妥当性を議論するものとしてリーズナブルであった。筆者は、上記の問題点を克服し、より軽いクォーク質量でのシミュレーションを行うために、3 次元空間内のクォークの伝搬を厳密に評価できる、改良された巻き数展開法を開発し、現在、数値シミュレーションを行っている。

4.2 ダイクォーク状態の解析

本研究は現在進行中のため、様々なダイクォーク間の質量差の結果のみを掲載するに留まったが、密度-密度相関関数のプレリミナリーな結果を見ると、good diquark では 2 つのクォークが近づいていくと、それらの相関が他のチャネルよりも顕著に大きくなる傾向が見て取れる。

参考文献

- [1] Ph. de Forcrand PoS (LAT2009)010, 2009.
- [2] A. Nakamura, Phys. Lett. 149B (1984) 391.
- [3] A. Hasenfratz and D. Toussaint, Nucl. Phys B371 (1992), 539.
- [4] P. de Forcrand and S. Kratochvila, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **153**, 62 (2006) [hep-lat/0602024].
- [5] A. Li, A. Alexandru and K. F. Liu, Phys. Rev. D **84**, 071503 (2011) [arXiv:1103.3045 [hep-ph]].
- [6] A. Alexandru, M. Faber, I. Horvath and K. F. Liu, Phys. Rev. D **72**, 114513 (2005) [hep-lat/0507020].
- [7] A. Li, A. Alexandru, K. F. Liu and X. Meng, Phys. Rev. D **82**, 054502 (2010) [arXiv:1005.4158 [hep-lat]].
- [8] A. Alexandru, C. Gattringer, H. -P. Schadler, K. Splittorff, J. J. M. Verbaarschot, Phys. Rev. D **91**, 074501 (2015) [arXiv:1411.4143 [hep-lat]].
- [9] C. Gattringer, H. -P. Schadler, Phys. Rev. D **91**, 074511 (2015) [arXiv:1411.5133 [hep-lat]].
- [10] R. L. Jaffe and F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **91**, 232003 (2003)
- [11] X. -F. Meng, A. Li, A. Alexandru and K. -F. Liu, PoS LATTICE **2008**, 032 (2008) [arXiv:0811.2112 [hep-lat]].

- [12] C. Gatttringer and H. -P. Schadler, Phys. Rev. D **91**, 074511 (2015) [arXiv:1411.5133]
- [13] R. Fukuda, A. Nakamura and S. Oka, arXiv:1504.06351 [hep-lat]
- [14] Z. Fodor, S. D. Katz, JHEP, 014 (2002). [arXiv:0106002[hep-lat]]
- [15] C. R. Alton, S. Ejiri, S. J. Hands, O. Kaczmarek, F. Karsch, E. Laermann, Ch. Schmidt, L. Scorzato (Bielefeld-Swansea), Phys. Rev. D **66**, 074507 (2002). [arXiv:0204010[hep-lat]]
- [16] LHCb collaboration, Phys. Rev. Lett. **115**, 072001 (2015). [arXiv:1507.03414[hep-ex]]
- [17] C. Alexandrou, Ph. de Forcrand and B. Lucini, Phys. Rev. Lett. **97**, 222002 (2006)