

Title	厳密な Z_3 対称性を持つ量子色力学による格子計算
Author(s)	開田, 丈寛
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2018, 8, p. 39-42
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/70830
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

厳密な Z_3 対称性を持つ量子色力学による格子計算

開田 丈寛

九州大学 大学院理学府 物理学専攻

1. はじめに

身の回りの物質は原子で構成され、これはさらにクォークとグルーオンから成る。これらに働く相互作用は「強い力」と呼ばれ、「量子色力学 (QCD)」で記述される。クォーク・グルーオンの系は、温度 (T) やクォーク化学ポテンシャル (μ) を変化させることで様々な状態へと変化し、その様相は QCD 相図で描かれる。低温低密度ではクォークはハドロンに閉じ込められ、高温状態や高密度状態になると、クォークは閉じ込めから解放され、自由粒子として振る舞えるようになる。しかし、QCD 相図において特に高密度領域は未確定であり、様々な手法で研究されている。

QCD 相図を解明する一つ的手段として、「格子 QCD 計算」がある。これは QCD の第一原理計算であり、QCD 相図を研究するための強力な手法である。しかし、特に高密度領域 ($\mu/T > 1$) では「符号問題」という数値計算上の問題が生じてしまう。この問題に対して様々な対処法が提案・検証されてきたが、未だ完全な解決には至っていない。

我々は、QCD の Z_3 対称性 (ゲージ変換の中心対称性) を厳密に取り込んだ「 Z_3 -QCD」[1]に注目した。これはゼロ温度において元の QCD と一致することが知られており、また符号問題が弱まると予想されている。この予想については、格子 QCD の有効模型として 3 状態 Potts 模型[2]や effective Polyakov-line 模型[3]を用いて数値計算が行われ、厳密な Z_3 対称性を模型に取り入れることで符号問題が生じる領域が狭まることがわかった。しかし、符号問題が一番深刻な領域を比較すると、問題の深刻度合いは改善されていなかった。そこで、符号問題の対処法の 1 つである「再重み法」の改良を行い、その結果符号問題の深刻さを劇的に改善することに成功した。

そこで本研究では、改良された再重み法に関する再検証を行った。また、有限クォーク化学ポテンシャル領域における Z_3 -QCD の格子計算の準備として、クォーク化学ポテンシャルがゼロでの Z_3 -QCD の格子計算プログラムを構築し、これの計算チェックも行った。

2. 格子 QCD と符号問題

格子 QCD による数値計算では、以下の大分配関数を用いた統計計算が行われる。

$$Z_{QCD} = \int DU \det[M(\mu)] \exp[-S_G]$$

ここで、 U はグルーオン場、 S_G はグルーオンの作用、 $\det[M(\mu)]$ はクォークの作用、 μ はクォーク化学ポテンシャルをそれぞれ表している。グルーオン場 U は格子 QCD では格子点の間で定義されており、格子点の数 \times 方向 (x, y, z, t 方向) の数だけの積分をすることで分配関数 Z_{QCD} を評価することができる。しかし、積分する変数が多すぎるためこれは現実的に不可能である。そこで、被積分関数

$$F = \det[M(\mu)] \cdot \exp[-S_G]$$

を確率分布関数とみなし、その確率に従ってグルーオン場の配位を生成する「重点サンプリング法」が用いられるようになった。この手法により、精度の高い格子 QCD 計算結果を得ることができると。

重点サンプリング法を用いた格子 QCD 計算は、主に零クォーク化学ポテンシャル領域で数々の成功を収めている。しかし、有限クォーク化学ポテンシャル領域ではクォークの作用 $\det[M(\mu)]$ が

$$(\det[M(\mu)])^* = \det[M(-\mu^*)]$$

の関係を満たすため、特に実数クォーク化学ポテンシャル領域では大分配関数の被積分関数が複素数となってしまい、確率分布関数としてみなす

ことができなくなってしまう。これにより、実数クォーク化学ポテンシャル領域では重点サンプリング法を用いた格子 QCD 計算が行えなくなってしまう。これが「符号問題」である。この問題に対して、様々な対処法が考案されてきたが、未だ完全な解決には至っていない。

3. Z₃-QCD、再重み法

3.1 Z₃-QCD

QCD は SU(3) の非可換ゲージ理論であり、Z₃ 群は SU(3) の部分群である。QCD では、Z₃ 対称性はゲージ変換 V に以下の境界条件

$$\begin{aligned} V(x_1, x_2, x_3, x_4 = \beta) \\ = \exp[i(2\pi/3)] V(x_1, x_2, x_3, x_4 = 0) \end{aligned}$$

を課すことで、クォークの境界条件が $\exp[i(2\pi/3)]$ だけ変更してしまうことで破れてしまう。この問題に対し、クォークの境界条件を

$$\begin{aligned} q(x_1, x_2, x_3, x_4 = \beta) \\ = -\exp[i\theta_f] q(x_1, x_2, x_3, x_4 = 0) \\ \theta_f = (2\pi/3)f, f = 0, 1, 2 \end{aligned}$$

とすることで Z₃ 変換に対して不変にすることができる。ここで、添字 f はクォークの種類に対応させ、クォークの質量は全て等しいとする。この境界条件は、上記の Z₃ 変換により元の場合と同様の変更を受けるが、添字 f を改めてクォークの種類に対応するように書き直すことで、変換に対して不変になるようにする。クォーク場にこの境界条件を課したものを「Z₃-QCD」[1]と呼ぶ。これは零温度で元の QCD と一致することが知られており、また符号問題が緩和されると予想されている。

Z₃-QCD は先に有効模型で研究され、また零クォーク化学ポテンシャル領域での格子計算[4]も実行されている。本研究では、実数クォーク化学ポテンシャル領域での Z₃-QCD による格子計算の準備として、中村氏のグループが開発したプログラム[5]を独自に改良し、これの計算チェックを行った。

3.2 再重み法

符号問題の対処法の1つとして、再重み法が挙げられる。これは確率分布関数が複素数となる系に対して、確率分布関数を $|F|$ としてゲージ場の配位を生成し、

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \langle O \exp[i\theta] \rangle_1 / \langle \exp[i\theta] \rangle_1 \\ \langle O \rangle_1 &= \frac{1}{Z_1} \int DU O |F| \\ Z_1 &= \int DU |F|, \quad F = |F| \exp[i\theta] \end{aligned}$$

として、物理量の期待値を計算する手法である。これは数学的には厳密な書き換えではあるが、再重み因子 $\langle \exp[i\theta] \rangle$ が 0 に近い値を取る時、期待値の誤差が肥大化してしまい、信頼できる結果が得られない。よって、再重み因子は再重み法における符号問題の深刻さの指標として適している。

本研究では、この手法を以下の式に従って改良を行った。

$$\begin{aligned} \langle O \rangle \\ = \langle O \exp[i\theta + \alpha\theta^2] \rangle_2 / \langle \exp[i\theta + \alpha\theta^2] \rangle_2 \\ \langle O \rangle_2 = \frac{1}{Z_2} \int DU O |F| \\ Z_2 = \int DU |F| \exp[-\alpha\theta^2] \end{aligned}$$

ここでは、系の作用の虚部 θ の寄与 $\exp[-\alpha\theta^2]$ を取り入れた。この寄与は、作用の虚部をなるべく小さく抑えるために導入した。本研究では、この改良された再重み法を、格子 QCD の有効模型として挙げられる effective Polyakov-line (EPL) 模型[6]を用いて、主に再重み因子のパラメータ α 依存性と体積依存性について調べた。また、Z₃-QCD の考えをもとに EPL 模型を Z₃ 対称化して同様の検証を行った。

4. 数値計算結果

4.1 Z₃-QCD の格子計算

今回の格子計算では、グルーオン作用として Clover gauge action を用い、クォーク作用として Wilson fermion action を用いた。また、格子の大きさは、空間方向を 8、時間方向を 4 とした。Wilson fermion では偶数種類のクォークしか扱えないため、今回は Z₃ 対称性を取り入れるにあたり、クォ

ークの種類を6個とした。グルーオン作用のパラメータとクォーク作用のパラメータの関係については、文献[7]のものを採用した。ここでは、計算する量として QCD の閉じ込め相転移の秩序変数として用いられる Polyakov loop を計算した。

図1と2は、それぞれ低温領域と高温領域における Polyakov loop の複素平面上での分布である。低温領域(図1)では、Polyakov loop は複素平面の原点に集中し、高温領域(図2)では、Polyakov loop の絶対値が有限かつ位相が $0, 2\pi/3, 4\pi/3$ 付近に分布していることがわかる。これは我々が期待した振る舞いであり、今回独自改良した数値計算プログラムは正常に動作していることが確かめられた。

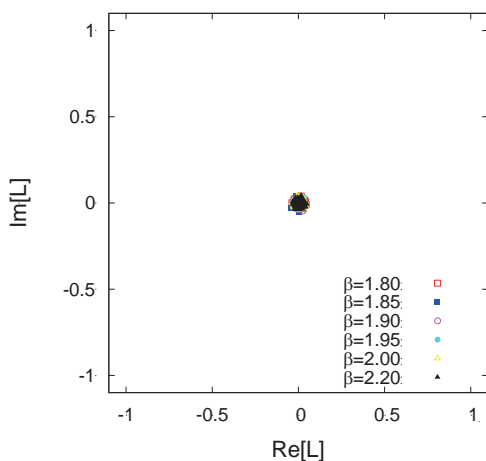


図1 低温領域における Polyakov loop の分布図

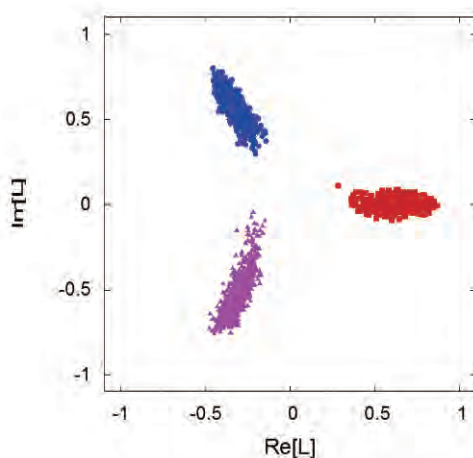


図2 高温領域における Polyakov loop の分布図

4.2 改良再重み法の検証

次に、EPL 模型を用いて、独自に改良した再重み法を用いた数値計算を行い、符号問題の深刻さについての検証を行った。

今回の数値計算では、 α 依存性の検証では空間方向の大きさを8とし、 α を1.0から3.5の範囲で変化させた。また、体積依存性の検証では空間方向の大きさを6、8、12、16とし、パラメータを $\alpha = 3.0$ で固定した。系のパラメータとしては、クォークの質量で規格化した化学ポテンシャル μ/M を0.0から2.0まで変化させた。この計算では、確率分布関数 F_2 を計算する際に一度空間全体での作用を計算する必要がある。そこで、SX-ACE 上では MPI の機能を用いてパラメータ μ/M をスレッド毎に分配して計算を行った。

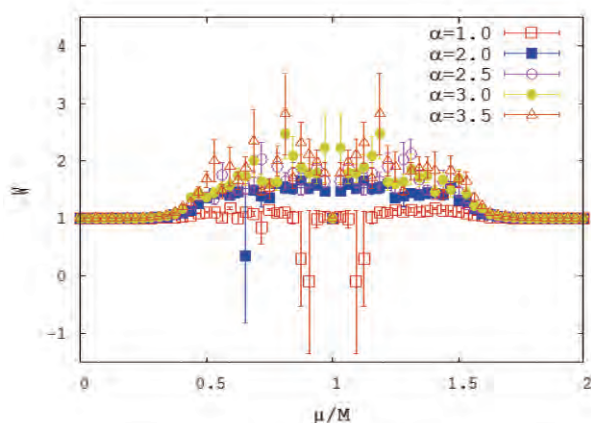


図3 EPL 模型における改良再重み法のパラメータ依存性。ここで空間方向の大きさは8で固定した。

図3は、再重み因子 W の α 依存性を表したものである。改良前の再重み法では、EPL 模型での再重み因子は $0.5 < \mu/M < 1.5$ で0に近い値を取り、符号問題が深刻化していた[3]。しかし、図3からわかるように、改良再重み法では再重み因子が1ないしはそれ以上の値を取るようになった。

$\alpha = 1.0$ では、今回考慮した領域で再重み因子が1に近い値を取るが、 $\mu/M=0.9, 1.1$ 付近では0に近い値を取っており、符号問題が完全に解消されたとはいえない。しかし、次第に α の値を大きくすることで、再重み因子は符号問題が深刻化する領域で1より大きな値を取るようになり、今回用い

た EPL 模型では α を 2.5 以上で設定すると因子が 0 に近い値を取らなくなった。以上のことから、適切なパラメータ α を与えることで、改良再重み法により符号問題が解消されることが示された。ただし、実際にこの手法を、実クォーク化学ポテンシャル領域で格子 QCD 計算に適用する際は、改めて α による再重み因子の振る舞いを調べ、適切な値を決定してやる必要がある。

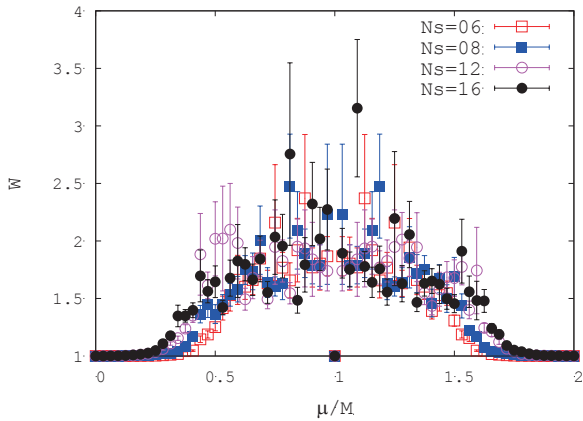


図 4 EPL 模型における改良再重み法の体積依存性。ここでパラメータは $\alpha = 3.5$ で固定した。

次に、図 4 は $\alpha = 3.5$ で固定した際の、改良再重み法における再重み因子の体積依存性を表したものである。体積が大きくなるに従って、因子が 1 より大きくなる領域が広がっていることがわかる。また、 $0.7 < \mu/M < 1.3$ の領域における因子の値は、空間方向の大きさによらずある一定の値に集中していることがみてとれる。このことから、改良再重み法における再重み因子は、比較的空間方向の大きさに依存せず同じ振る舞いをみせることがわかった。

5. まとめと展望

本研究では、(1) 零クォーク化学ポテンシャルにおける Z_3 -QCD の格子計算プログラムの数値計算チェックと、(2) 独自に改良した再重み法のパラメータ依存性と体積依存性を、格子 QCD の有効模型を用いて調べた。

(1) では、 Z_3 -QCD の格子計算で、QCD の Z_3 対称性の秩序変数である Polyakov loop を計算し、こ

れが低温領域では複素平面上の原点に点が分布し、高温領域では Z_3 群の位相に対応する領域に分布した。これは期待したとおりの振る舞いであり、今回用いたプログラムは正常に動作したことを確認した。今後は、これを有限クォーク化学ポテンシャル領域へと計算領域を拡大し、符号問題の影響等について検証を行う。

(2) では、新たに導入したパラメータについては、適切な値を決定してやることで、符号問題が深刻だった領域で問題が解消できることを示した。また、体積依存性については大きな変化は見られなかった。今後は、この改良再重み法を実際に有限クォーク化学ポテンシャル領域での格子 QCD 計算に実装し、符号問題の深刻さの振る舞いを調べる。これにより、格子 QCD 計算でも符号問題を軽減することができれば、有限クォーク化学ポテンシャル領域で物理量の期待値を精度良く計算することが可能となる。

参考文献

- [1] H. Kouno et al., Phys. Rev. D93, 056009 (2016).
- [2] T. Hirakida et al., Phys. Rev. D94, 014011 (2016).
- [3] T. Hirakida et al., Phys. Rev. D96, 074021 (2017).
- [4] T. Iritani et al., JHEP11, 159 (2015).
- [5] S. Choe et al., Lattice QCD Tool Kit in Fortran90, 素粒子論研究 108 巻 1 号 (2003 年 10 月号) 1-43.
- [6] J. Greensite et al., Phys. Rev. D90, 114507 (2014).
- [7] J. Takahashi et al., Phys. Rev. D 91, 014501 (2015).