



Title	Gradient flowに基づくSFtX法による物理点QCD熱力学特性の研究
Author(s)	金谷, 和至
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2021, 11, p. 39-42
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/87670
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

Gradient flow に基づく SFtX 法による物理点 QCD の熱力学特性の研究

金谷 和至¹

筑波大学 宇宙史研究センター

1. はじめに

ビッグバン宇宙論によると、138 億年前の宇宙創世直後は、宇宙全体が極めて高温・高密度であるために、クォークが陽子や中性子などのハドロンから解放された「クォーク・グルオン・プラズマ(QGP)状態」という、現在我々が知るものとは全く違う物質状態にあったと考えられている。ビッグバンからの膨張・冷却により、宇宙年齢 10^{-4} 秒頃（温度約 1 兆度）に、高温相の QGP 状態から、クォークがハドロンに閉じ込められた「ハドロン状態」（低温相）へ相転移したと考えられる。この QCD 相転移の解明は、我々の知る元素がいかにかに創成されたかの初期状態の解明でもあり、超新星爆発やブラックホール周辺の物理過程などを経て、生命の発生にも繋がる様々な原子（元素）へと物質進化を理解する上で極めて重要である。

これは本質的に非摂動的な問題であり、信頼できる情報を得るためには、クォークの基礎理論である量子色力学(QCD)の第一原理に直接基づく格子 QCD シミュレーションが不可欠である。これまでの格子 QCD 研究の多くは、計算量が比較的少ないスタガード型格子クォークを用いて行われているが、連続極限で現実の QCD を再現することが証明されていない等の本質的問題を孕んでいる。我々は、理論的基盤が確立した Wilson 型格子クォークを用いて、QCD 相転移の性質と、相転移近傍の温度でクォーク物質がどのような熱力学特性を示すかの大規模シミュレーション研究を推進している。

2. 研究方法

Wilson 型クォークは、連続極限の正しさが保証されている反面、有限の格子上ではカイラル対称性を

陽に壊しているため、カイラル対称性に関わる物理量に関して格子化誤差が大きく、それを取り除いて物理量を計算するために膨大な計算資源が要求されるという困難があった。

また、並進対称性に伴う保存カレントとして定義されるエネルギー運動量テンソルは系の力学特性を調べる上で基本的な観測量だが（例えば、対角成分はエネルギー密度や圧力などの情報を含み、2 点相関関数から様々な粘性率が導かれる）、格子上では連続的な並進対称性が離散的なものに壊されているため、従来の方法では、5 種類の演算子の非自明なくりこみと混合を非摂動的に決定するという、複雑で困難な作業が要求されていた。

我々は、Gradient flow（勾配流）に基づいて鈴木博らにより開発された **SFtX 法**（small flow-time expansion method）を応用して、これらの困難を緩和する[論文 1, 論文 2]。Gradient flow とは、仮想的なパラメータ t （フロー時間）を導入して、作用の勾配で与えられる発展方程式（フロー方程式）により場の量を変形させる理論的手法である。この発展方程式は一種の拡散方程式で、 $t = 0$ の元の場合の量を $t > 0$ までフローさせた結果は、元の場合の量を $\sqrt{(8t)}$ の物理的領域で平準化(smear)させたものと解釈することができる。さらに、フローさせた場で作る演算子に紫外発散も同一点特異性も存在しないことが、Lüscher らにより摂動の無限次まで証明された。

SFtX 法は、フローさせた場の有限性を活用して、連続極限のくりこまれた物理量を格子で評価する一般的な方法で、本プロジェクトのメンバーである鈴木博らにより開発された。図 1 にその基本アイデアを示す。連続理論で何らかの物理量を非摂動的に評価しようとする、通常は、その物理量を格子理

¹ プロジェクトメンバー：江尻信司（新潟大学）、北澤正清（大阪大学）、鈴木博（九州大学）、谷口裕介（筑波大学）、梅田貴士（広島大学）

論で定義し、格子上で評価された値を連続極限まで外挿 ($a \rightarrow 0$) するが、数値的なくりこみに加えて、格子上で重要な対称性が壊されている場合にはそれによる不要な演算子との混合を数値的に除去する必要があり、十分な精度を出すためにはしばしば重い計算となる。SFtX 法では、フローさせた演算子が有限であることを利用して、対応する演算子を格子上で計算することにより、くりこみ操作や混合の除去無しに直接評価する。ただし、フローさせた演算子は求める物理量そのものではないので、格子の結果を、連続極限 ($a \rightarrow 0$) とフロー時間ゼロ極限 ($t \rightarrow 0$) に 2 重外挿する。この 2 重外挿では、格子化誤差が大きい $t/a^2 \approx 0$ 領域のデータを取り除く必要があるが、それを行えば 2 つの外挿の順序によらず同じ結果が得られると期待される。後述するように、クエンチ QCD でそれを実際に確認した[論文 3]。

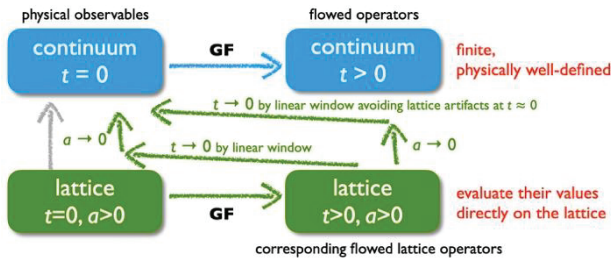


図 1 : SFtX 法 [論文 1, 論文 2]

この方法は、どんな物理量にも使うことができるので、格子化で並進対称性が陽に壊されるためにこれまで扱いが難しかったエネルギー運動量テンソルの格子計算に応用された。我々は、SFtX 法がカイラル対称性の破れの困難にも有効であることに着目し、Wilson 型クォークを持つ QCD に SFtX 法を応用した一連の研究を推進している。

3. u, d クォークが重い $N_f=2+1$ QCD での試験研究

動的クォークを含む QCD への応用の第一段階として、s クォーク質量は現実に近いが u, d クォークは現実より重い $N_f=2+1$ QCD を、格子間隔 $a \approx 0.07\text{fm}$ の格子で調べた[論文 2, 論文 4]。温度 $T=1/(aN_t)$ は、温度軸方向の格子サイズ N_t で変化させる。

エネルギー運動量テンソルの対角成分から計算し

た状態方程式の結果を図 2 の左に示す。赤丸が SFtX 法の結果で、黒三角は従来の積分法の結果である。 $T < 300\text{MeV}$ ($N_t \geq 8$) で従来の結果を良く再現している。他方、 $T > 300\text{MeV}$ の不一致は、 $O((aT)^2 = 1/N_t^2)$ の格子化誤差が $N_t < 8$ で無視できないことを示唆する。右図には、ud クォークのカイラル感受率を示す。SFtX 法により直接計算した結果、相転移温度 190MeV 近傍で明確なピークを示す結果を得た。図 3 では、位相感受率の結果を示す。その温度依存性はアクシオンが宇宙暗黒物質の候補となるかの判定で重要だが、格子では評価の難しい量であった。SFtX 法により、2 種類の評価式 (gluonic と fermionic) で一致する、信頼性の高い結果を得た。これらは格子間隔 $a \approx 0.07\text{fm}$ の 1 点で得られた結果で、連続極限外挿はまだ取られていないが、これらの結果は、この格子が連続極限に近いことを示唆する。

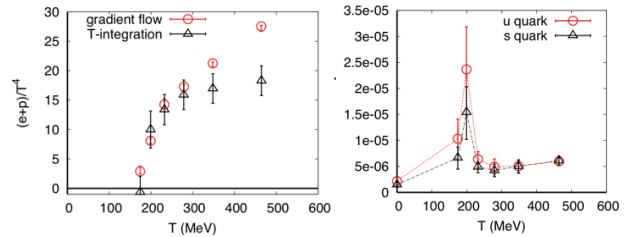


図 2 : u, d クォークが重い $N_f=2+1$ QCD の熱力学。左: エントロピー密度、右: カイラル感受率 [論文 2]

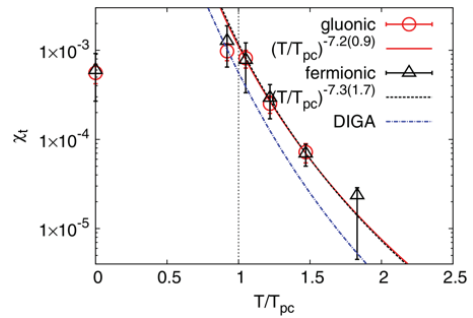


図 3 : u, d が重い $N_f=2+1$ QCD の位相感受率 [論文 4]

4. 2020 年度の研究成果

この結果をうけ、2020 年度には以下を推進した。

- (i) 現実のクォーク質量 (物理点) での $N_f=2+1$ QCD シミュレーション[論文 5 の研究の継続]
- (ii) SFtX 法のさらなる試験と改良[論文 3, 論文 6]
- (iii) 連続極限外外挿に向けてのシミュレーション
- (iv) 他の物理量への応用[論文 3, 論文 7]

2020 年度の CMC 大規模計算機システム公募型利用制度による計算資源 [OCTOPUS 4,960 ノード時間配分、3,4777 ノード時間(84.9%)使用] は、(i) のシミュレーション、および、論文 3、論文 6 の研究の一部で使用した。以下では、論文 6 と論文 3 の概要と、それに基づく(i)の進捗状況を報告する。

5. SFtX 法の改良 [論文 6]

第 2 節で説明したように、SFtX 法では、格子化誤差が大きい $t/a^2 \simeq 0$ 領域を避けながら $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿を実行する必要があるが、その後の試験研究の結果、格子が粗い、もしくは演算子が複雑だと、外挿に必要な線形領域が不明確になる場合があることがわかった。論文 6 では、その改善にむけて、マッチング係数におけるくりこみスケールの効果を研究した。

マッチング係数は、フローさせた演算子と求めるくりこまれた物理量とを結びつける係数で、QCD を含む漸近自由な理論では t が大きくなればマッチング係数を摂動計算することができる。SFtX 法では、摂動であらかじめわかっている t 依存性をマッチング係数に取り込むことで、 $t \rightarrow 0$ 外挿が滑らかになるように改良する。実際、マッチング係数のおかげで、 $t \rightarrow 0$ 外挿を数値的に可能とする線形領域が実現する。マッチング係数の摂動計算におけるくりこみスケール μ は、フローさせた演算子の自然なスケールと同程度であれば何をとりてもよく、 $t \rightarrow 0$ 極限の最終結果は μ に依存しないはずである。しかし、実際は摂動展開を有限次で切っているので、 μ により影響を受ける。

通常 μ としては、フローの smearing スケールである $\mu_d = 1/(8t)^{1/2}$ が採用されてきた。論文 6 では、Harlander らが最近の摂動の高次計算で提案した $\mu_0 = 1/(2\epsilon\gamma t)^{1/2}$ [論文 7] の効果を調べた (γ はオイラー数)。数値的には $\mu_0 \approx 1.5 \mu_d$ なので、 μ_0 は摂動領域をより大きな t まで拡大し、 t が大きな領域で $t \rightarrow 0$ 外挿のシグナルを改善してくれる可能性がある。

図 4 に、第 3 節で議論した、u,d クォークが現実より重い $N_f=2+1$ QCD におけるエントロピー密度 (左図) と ud クォークのカイラル感受率 (右図) の $t \rightarrow$

0 外挿を示す。緑が μ_d スケール、青が μ_0 スケールの結果である。 $t \rightarrow 0$ 極限はどちらもコンシステントだが、 μ_0 スケールにより線形シグナルが改善されていることがわかる。

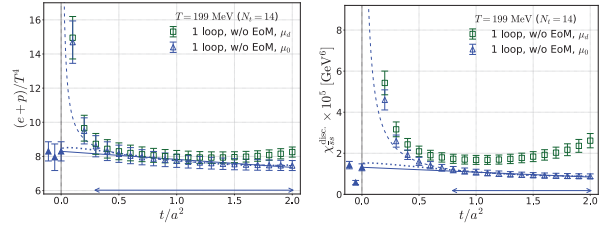


図 4 : マッチング係数におけるくりこみスケールの効果。ud クォークが重い $N_f=2+1$ QCD の結果 [論文 6]

論文 6 では、マッチング係数における 2 ループ項 [論文 7] の効果や 2 ループ計算で使われた運動方程式の影響も研究しているが、SFtX 法の改良には大きくは寄与しないので、ここでは省略する。

6. クエンチ QCD の潜熱と SFtX 法における 2 重外挿の順序依存性の研究 [論文 3]

論文 3 では、SFtX 法を応用して、クエンチ QCD (SU(3) Yang-Mills 理論) の有限温度 1 次相転移点における潜熱と圧力ギャップ Δp を研究した。1 次相転移点では、共存する 2 相の動的平衡から $\Delta p = 0$ となるはずで、その数値的確認は結果の信頼性の良い指標とされてきた。また、クエンチ QCD では様々な格子間隔を系統的に計算できるので、第 2 節で議論した、 $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の 2 重外挿における極限操作の順番の問題を試験した。

3 つの格子間隔、2 つの空間体積でシミュレーションを実行し、我々が開発した再重み付け法とヒストグラム法を組み合わせた手法を使って臨界点に調整した上で、SFtX 法を応用して臨界点における潜熱と Δp を測定した。

図 5 に、 μ_0 スケールを使った潜熱と Δp の結果を示す。 $t \rightarrow 0$ を先に実行する "method 1" と $a \rightarrow 0$ を先に実行する "method 2" の結果が比較されている (method 2 では、さらに $t \rightarrow 0$ 外挿のフィット・レンジがいくつか比較されている)。filled symbols はアスペクト比 $N_s/N_t = 8$ 、open symbols は $N_s/N_t = 6$ に相当する空間体積での結果である。

図 5 から、(a) $a \rightarrow 0$ と $t \rightarrow 0$ の極限操作の順番を

変えても結果が一致すること、および、(b) Δp がゼロとコンシステントであることが確認される。これにより、連続極限における潜熱を精密で信頼性が高く測定することに成功したが、体積依存性が確認されるので、より大きな空間体積での追試が望まれる。

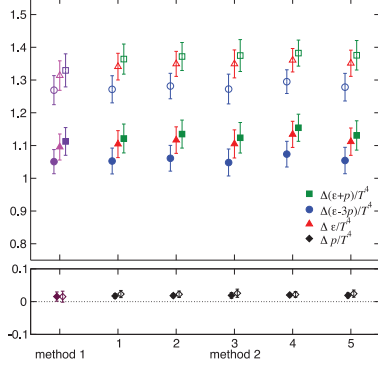


図 5 : クエンチ QCD の潜熱と圧力ギャップ [論文 3]

7. 現実のクォーク質量での $N_f=2+1$ QCD の研究

これらの研究を進展させ、クォーク質量を現実のクォーク質量（物理点）に調整した $N_f=2+1$ QCD の熱力学研究を推進している。ゼロ温度配位として PACS-CS Collaboration が生成したものを活用し、それと同じ格子間隔 $a \approx 0.09\text{fm}$ で有限温度シミュレーションを実行している。物理点の配位生成には大きな計算が要求されるので、様々な計算機資源を動員して系統的な大規模シミュレーションを遂行し、現在、この格子間隔での最後のステップとして、低温領域の統計数の補充を進めている。

この物理点シミュレーションでも、第 5 節で紹介した SFtX 法の改良が重要な役割を果たしている。図 6 に、物理点におけるくりこみスケール依存性の試験結果を示す。 μ_d を使ったデータが $t/a^2 \leq 1.5$ までしか無いのは、そこで摂動展開が破綻し、running coupling constant が発散するからである。この物理点シミュレーションでは、上で議論した ud クォークが重い場合よりも格子が少し粗くなっており、より小さな t/a^2 で破綻することになった。他方、 μ_0 スケールを採用すると、この格子でも $t/a^2 \approx 3$ まで摂動計算が有効である。左図のエントロピー密度から、 $t \rightarrow 0$ の外挿結果はくりこみスケールの取り方に依らないが、 μ_0 スケールでより安定した $t \rightarrow 0$ 外挿が可能となっていることがわかる。右図の ud クォークカイラル感受率より、 μ_d スケールでは $t \rightarrow 0$ 外挿をどのよ

うにとって良いか分からない物理量でも、 μ_0 スケールにより線形領域が広がり、 $t \rightarrow 0$ 外挿が可能となることがわかる。

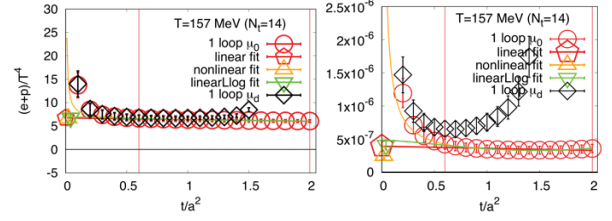


図 6 : 物理点 $N_f=2+1$ QCD におけるくりこみスケール依存性。左: エントロピー密度、右: カイラル感受率

この結果を得て、 μ_0 スケールを採用して物理点での熱力学量の評価している。これまでに得られた様々な物理量の挙動から、 $T \approx 122-146$ MeV が相転移近傍の臨界領域にあることが示唆されるが、まだ統計が十分ではなく、明確な結論を得るためにはこの低温領域で更なる統計が必要である。我々の Wilson クォークによる相転移温度の結果は、スタガード型による選考結果より低い可能性があるが、相転移温度の精密な評価は実験的にも重要である。現在そのための低温領域の配位生成を集中的に進めている。

参考文献

- (1) H. Suzuki, Prog. Theor. Exp. Phys. 2013, 083B03 (2013), Erratum: [*ibid.* 2015, 079201 (2015)]; H. Makino and H. Suzuki, *ibid.* 2014, 063B02 (2014), Erratum: [*ibid.* 2015, 079202 (2015)]; T. Endo, et al., *ibid.* 2015, 053B03 (2015); K. Hieda and H. Suzuki, Mod. Phys. Lett. A 31, 1650214 (2016).
- (2) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 96, 014509 (2017), Erratum: [*ibid.* 99, 059904 (2019)].
- (3) M. Shirogane et al., Prog. Theor. Exp. Phys. 2021, 013B08 (2021).
- (4) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 95, 054502 (2017).
- (5) K. Kanaya, et al., EPJ Web Conf. 175, 07023 (2018); K. Kanaya, et al., PoS LATTICE 2019, 088 (2020).
- (6) Y. Taniguchi, et al., Phys. Rev. D 102, 014510 (2020).
- (7) A. Suzuki, et al., Phys. Rev. D 102, 034508 (2020).
- (8) Harlander, et al., Eur. Phys. J. C 78, 944 (2018).