



Title	勾配流法とスパースモデリング法によるQCD粘性の決定
Author(s)	伊藤, 悦子
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2022, 12, p. 13-16
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/89339
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

勾配流法とスパースモデリング法による QCD 粘性の決定

伊藤 悦子

理化学研究所 数理創造プログラム/慶應義塾大学 自然科学研究センター/

大阪大学 核物理研究センター

1. はじめに

物質の基本構成要素である「クォーク」とその間の力を媒介する粒子である「グルオン」は、量子色力学(QCD)で記述される。これらクォークやグルオンは、低温で原子核程度の大きさの中に「閉じ込め」られており、単体で取り出すことができない一方、高温では非閉じ込めの性質を持つ「クォークグルオンプラズマ(QGP)相」へ相転移することがアメリカブルックヘブン国立研究所の RHIC 実験によって確認された。さらに、その相転移付近で QCD は非常に小さい「粘性-エントロピー比(η/s)」を持つ完全流体で記述されることがわかった。理論的には閉じ込め相から QGP 相への相転移は格子 QCD によって予言され、RHIC 実験の結果と定性的には無矛盾であることがわかった一方、格子 QCD による第一原理計算で粘性を計算するのが難しく、未だ定量的な理解が得られていないのが現状である。

QCD 粘性を格子 QCD で計算する一つの方法は、まず、エネルギー運動量テンソル(EMT)の 2 点相関関数($C(\tau)$)を計算する。その後、

$$C(\tau) = \frac{1}{T^3} \int d\vec{x} \langle T_{12}^R(0, \vec{0}) T_{12}^R(\tau, \vec{x}) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega K(\tau, \omega) \rho(\omega). \quad (1)$$

の式を使って、相関関数のデータ($C(\tau)$)からスペクトル関数($\rho(\omega)$)を推定する。ここで、右辺の $K(\tau, \omega)$ は積分カーネル

$$K(\tau, \omega) = \frac{\cosh(\omega(\frac{\tau}{2} - \tau))}{\sinh(\frac{\omega\tau}{2})}$$

で格子計算のデータに依存しない。最後に得られたスペクトル関数から $\eta = \pi dp/d\omega$ ($\omega=0$) として粘性が得られる。つまり、スペクトル関数の特に振動数がゼロ付近での精密な結果が必要となる。

これらの手順において、以下の 3 つの大きな困難があることが知られている。

困難(1) 格子上で EMT をどのように定義し、式(1)の真ん中の式を第一原理的に計算するか

困難(2) EMT の相関関数のシグナル-ノイズ比をどのように改善するか

困難(3) 有限個の相関関数のデータからスペクトル関数を推定するという逆問題をどのように解くか

これらの 3 つの困難の中でも、QCD 粘性の計算では、EMT が QCD 真空と同じ量子数を保つため**困難(2)**が深刻であり、これまでの研究である程度の精度の結果を得るためには、quenched QCD の場合でも数十万から数百万個の配位データが必要であった。統計制度が悪いと当然のことながら、その後の**困難(3)**もさらに難しくなり、 η/s の値やその温度依存性は未だよくわかっていない状況である。

本研究では、**困難(1)**と**(2)**に対しては勾配流法 (gradient flow method)を、**困難(3)**に対してはスパースモデリング法を用いることで問題を改善し、quenched QCD の η/s の値を得ることが目的である。この 2 つの方法を組み合わせることで、従来の方法では一般に 5-6 年かかると言われる QCD 粘性の計算を 2-3 年で行い、これまで以上の精度で決定できると期待される。

2. 勾配流法

勾配流法は 2010 年に M.Luescher により提案され (文献[1])、様々な応用がされている。そのうちのひとつが、文献[2]により鈴木氏が提案した EMT の定義を与える事である。それは

$$T_{\mu\nu}^R(x) = \lim_{t \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\alpha_U(t)} U_{\mu\nu}(t, x) + \frac{\delta_{\mu\nu}}{4\alpha_E(t)} [E(t, x) - \langle E(t, x) \rangle_0] \right\}, \quad (2)$$

で与えられる。ここで、 t が flow time という仮想的な時間のパラメータで、右辺の U と E は格子上で定義できるゲージ不変かつ質量次元が 4 の演算子である。 α_U と α_E の具体的な値は、鈴木氏の論文により解析的に計算されており、これによって式(2)は、

左辺の EMT と格子上的演算子の関係を与える。つまり格子上的演算子を数値的に計算することで、EMT の値を得ることができる。

その後、私を含む共同研究（文献[3]）で初めて実際の計算が行われた。この時は、有限温度領域で EMT の一点関数から熱力学量を求め、それが従来の積分法の結果と一致することを示し、勾配流法による EMT から物理量を取り出すことが可能だと実際に確かめられた。また、この時、勾配流法はスメアリングの性質も持ったため、シグナル-ノイズ比が大幅に改善することもわかった。

3. スパースモデリング法

スパースモデリングは、近年 MRI や最近のブラックホールシャドウの画像解析など様々な分野で応用されている解析法である。2017 年に物性理論の分野で相関関数からスペクトル関数を推定する方法が、提案された（文献[4,5]）。このスパースモデリング法は、最適化問題を解く時に、L1(L2)正則化という解析を安定させる項を加えることで、データのノイズに強い結果が得られる。この条件付き最適化問題を解くための手法は LASSO と呼ばれ、補助ベクトルを導入することで解く手法が、2010 年ごろに提案された。

格子 QCD への応用は、我々による文献[6]で初めて行われた。特にスパースモデリング法は、マクロな自由度に対応する ω が、小さい領域で非常に安定であることが特徴であり、我々は QCD 粘性を求めるのに適していると考えた。

4. シミュレーションセットアップ

本研究では、 $T=0.88T_c, 1.10T_c, 1.32T_c, 1.65T_c$ の 4 点を取り、Wilson ゲージ作用を用いてそれぞれ $N_t=8, 10, 12, 16$ の格子サイズで連続極限を取ることを目指している。勾配流法とスパースモデリング法を使うことで、計算量の大幅な縮減ができるようになったものの、それでも全体で 3 年程度はかかる予定である。2021 年度は、全体の 1/3 程度の計算を行なった。

具体的な計算手順は大きく 3 つに分けられる。(1) モンテカルロ法によるゲージ配位生成(2)勾配流法

による相関関数の測定(3)スパースモデリング法によるスペクトル関数の推定である。このうち、(1)と(2)の計算を octopus と squid で行った。

5. シミュレーション結果

まず、計算手順(2)の勾配流法を用いた成果を見てみる。

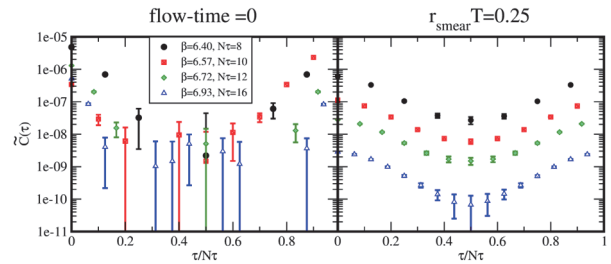


図 1: flow time の有無による相関関数の統計誤差の比較(文献 [7] より)

図 1 は、同じ統計数で勾配流法を使わなかった時（左図）と使った時（右図）の比較である。統計数は 2000 である。配位相関関数は理論的には正の値を取るはずだが、勾配流法を使わない場合はデータ点が大きな統計誤差を持ち、いくつかのデータ点では中心値が負になっているため図に表示されていない。一方で、勾配流法を用いた右図ではすべてのデータ点が正しく正の値をとり、統計誤差も大幅に改善している。

しかし、この勾配流法を用いることは、計算手順(3)であるスペクトル関数の推定問題をより困難にすることに我々は気づいた。

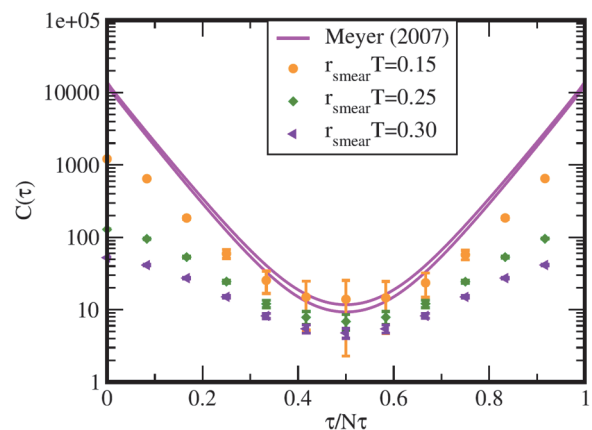


図 2: 相関関数の flow time 依存性 (文献 [6] より)

その理由は、図 2 に示すように勾配流法で長い flow time のデータを用いると、 τ の小さい短距離相関が統計誤差を小さくするだけでなく、誤差を超えて中心値が変わってしまうことがある。これは勾配流法が、flow time t の時に $\tau \sim (8t)^{1/2}$ の領域のデータを平均化するスメアリングをすることから説明できる。今、相関を見たい 2 つの演算子が flow time を長くしすぎると互いに重なってしまう。このため正しい相関を測ることができなくなる（オーバースメアリング問題）。この問題は EMT の一点関数を測定した文献[3]の時にわかり、この領域の τ のデータを解析から外すことが妥当である。

一方で、この相関関数のいくつかのデータ点を解析から外すことは、困難(3)の「有限個の相関関数のデータからスペクトル関数を推定するという逆問題をどのように解くか」という問題をより困難にする。つまり、式(1)で $C(\tau)$ のデータから $\rho(\omega)$ を得るのに、方程式のインプットである $C(\tau)$ のデータ点が高々 10 点程度しかないのに、アウトプットとなる $\rho(\omega)$ は理想的には無限自由度持っているため、解が一意的に決まらない事を意味する。

そこで最適化問題を解く際に、L1 正則化を課すことでこの不定性を減らすことにした。つまりコスト関数として

$$F(\vec{\rho}) \equiv \frac{1}{2} \|\vec{C}' - S\vec{\rho}'\|_2^2 + \lambda \|\vec{\rho}'\|_1$$

を最小にするような ρ を探す。(C や ρ にプライムが付いているのは、適切な特異値分解した基底に変換したことを示す。) ここで、右辺第 2 項が L1 正則化項と呼ばれるもので、 ρ ベクトルの成分の絶対値の和で表される。また、 S は積分カーネル K の特異値行列である。この式から小さい特異値に対応するモードは、最適化問題を解く時にほぼ寄与しないことがわかり、大きな特異値をもつモードのみの小さな行列を取り扱えばよくなる。我々の研究ではさらに物理的要請から、スペクトル関数の正定値性を条件に加え、さらに解の安定性を強化した。

その結果、得られたスペクトル関数が図 3 である。

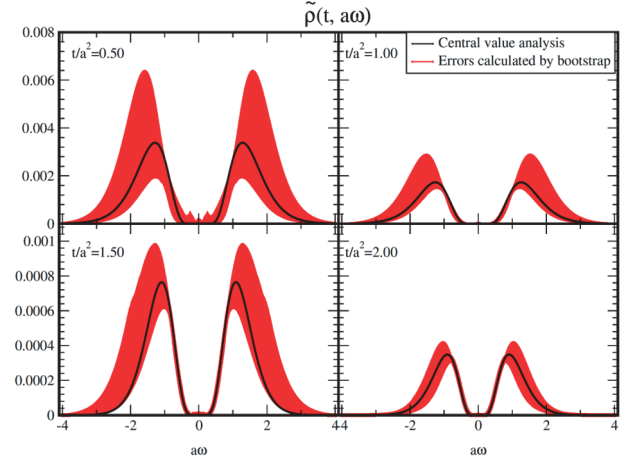


図 3: スパースモデリング法により得られたスペクトル関数(文献 [6] より)

ここで各パネルは異なる flow time の結果を表す。勾配流法は一種の平均化、つまりブロックスピン変換であり、系の自由度を減らしていくが、得られたスペクトル関数の ω に関する積分値が、flow time が大きくなると小さくなるが見てとれる。また、その中でも高振動数（大きな ω ）に対応するデータがよりサプレスされており、直感的な理解と一致する。

最後に、得られたスペクトル関数から相関関数を再構成して、インプットとして用いた勾配流法で測定した EMT の相関関数の値と比較した (図 4)。

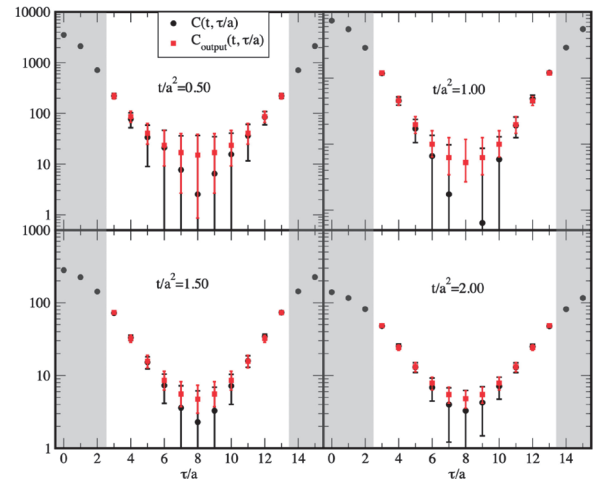


図 4: インプットの相関関数(黒)とスパースモデリングで得られたスペクトル関数から再構成した相関関数 (赤)。グレーの領域のデータはオーバースメアリング問題のため解析から取り除いた。(文献 [6] より)

結果、2つの相関関数は統計誤差の範囲でよく一致しており、スパースモデリング法によるスペクトル関数の推定がうまくいっていることを示している。

6. まとめ

現在まで世界で計算されている η/s の主な結果のまとめを図5に示した。この中で、マゼンタ以外のデータはまだ連続極限が取られていない。

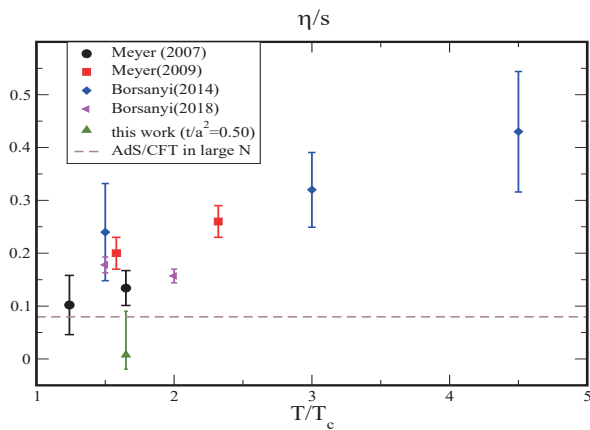


図5. quenched QCD の η/s の現状。(文献(8)より)

従来は勾配流法を用いない相関関数のデータを使っていたため、大体5-6年計算機を使い続けてやっと1パラメータの値が見積もれる、といった具合であった。またスペクトル関数の推定においても、関数形の仮定を用いたフィットやモック関数を導入する最大エントロピー法が主流であったが、スパースモデリング法はこれらに比べてスペクトル関数に対する仮定が少なく、また結果がノイズに強いという示唆が得られている。連続極限を取りきった最終結果を得るにはまだまだ計算の継続が必要となるが、着々と進めることでQCD粘性の有効な計算方法の確立を目指したい。

最後に、本研究を遂行するにあたって、日頃からシステムの運営を支えてくださっている方々に深く感謝致します。

参考文献

- 文献[1] M. Lueuscher, JHEP 1008, 071 (2010)
- 文献[2] H. Suzuki, PTEP2015(2015)079201
- 文献[3] M. Asakawa, T. Hatsuda, E. Itou, M. Kitazawa, H. Suzuki, Phys. Rev. D90, 011501, (2014)
- 文献[4] H. Shinaoka, J. Otsuki, M. Ohzeki, K. Yoshimi, Phys. Rev. B 96 (2017) 035147
- 文献[5] J. Otsuki, M. Ohzeki, H. Shinaoka, K. Yoshimi, Phys. Rev. E 95 (2017) 061302
- 文献[6] E. Itou and Y. Nagai, JHEP07(2020)007
- 文献[7] E. Itou and S. Aoki, PoS INPC2016 (2017) 342
- 文献[8] E. Itou and Y. Nagai, PoS(LATTICE2021)214