

SX-ACE を用いた格子 QCD による軸性ベクトル中間子の質量計算

若山 将征

大阪大学 核物理研究センター 核物理理論研究部門

1. はじめに

本研究のモチベーションの根幹には「質量はどこから来るのか?」という疑問がある。我々の身体の質量は原子核を構成する核子の質量でほぼ決まる。核子の質量はおよそ $939 \text{ MeV} (=1.67 \times 10^{-27} \text{ kg})$ である。そして、核子は基本的に 3 つのクォークからなるが、3 つのクォークの質量を足しても 15 MeV 程度にしかならない。核子の質量の残り 98% がどこから来るのかを解明するには、クォーク・グルーオンを記述する基礎理論である量子色力学(QCD)による理解が必要である。

核子の質量の起源を解明する手がかりになるのが QCD の持つ「カイラル対称性」と「クォークの閉じ込め」の 2 つの性質である。ゼロ温度では、カイラル対称性は自発的に破れており、また、クォークは単体で観測することができない。しかし、約 2 兆度の臨界温度以上になると、クォーク・グルーオンプラズマ相への相転移が起こる。すると、カイラル対称性は回復し、クォークは単体の存在として自由に動き回れるようになると考えられている。従って、核子の状態とバラバラなクォークの状態とを繋ぐ、自発的に破れたカイラル対称性が回復する過程での何らかの情報が引き出せれば、質量生成機構の解明の鍵となり得る。

本研究では、その情報を担うものとして軸性ベクトル中間子に注目した。カイラル対称性において対をなす粒子はカイラル・パートナーと呼ばれ、軸性ベクトル中間子とベクトル中間子はその関係にある。そして、それらの質量は臨界温度以上で縮退することが予想されている[1]。しかし、それらの質量がどのような過程を経て縮退するのかは未だ明確ではない。本研究の目的は、第一原理計算である格子 QCD シミュレーションを用いて、その過程を明らかにすることである。

しかしながら、軸性ベクトル中間子に対する格子 QCD 計算は、ゼロ温度においても、実験値との比較に耐える信頼度の高い結果は得られていない。軸性ベクトル中間子の格子 QCD 計算は 1995 年にヘラーらによって初めて行われ[2]、2008 年にもガトリンガーらによって行われた[3]。しかし、前者はスタグガード作用とウィルソン作用の異なるフェルミオン作用を組み合わせて得られた結果であり、後者は実験値と比較可能な領域への外挿にまで至っていない。そのため、まずはゼロ温度で、軸性ベクトル中間子に対する格子 QCD 計算をきちんと行う必要がある。

2. 格子カイラル対称性を満たすフェルミオン作用

本研究の目的は、温度上昇につれて、カイラル・パートナー同士の質量がどのように変化するかを調査することである。従って、QCD の持つカイラル対称性の性質はフェルミオン作用に取り入れるべき性質である。しかし格子理論では、フェルミオン作用にカイラル対称性等のいくつかの基本的な条件を課すだけで、ダブラーと呼ばれる非物理的なモードが必ず出現する (ニールセン・二宮の定理) [4]。文献 [2]でも使用されたウィルソン作用はカイラル対称性を陽に破ることでダブラーを回避している。

この状況を変えたのがルッシュャーである。彼はカイラル対称性を格子上に拡張した格子カイラル対称性を提案した[5]。フェルミオン作用が格子カイラル対称性を満たしていても、カイラル対称性を満たさなければ、ニールセン・二宮の定理には抵触せず、ダブラーも回避可能である。格子カイラル対称性を満たすフェルミオン作用は、現在、ドメインウォールフェルミオン(DWF)作用[6,7,8]やオーバーラップフェルミオン作用[9]が提唱されている。本研究では、カイラル対称性を尊重した DWF 作用を用いた。

$m_f a$	m_π/m_ρ	配位数	計算時間/ジョブ
0.08	0.702(2)	3,000	25 時間
0.06	0.652(3)	3,000	32 時間
0.04	0.584(2)	7,964	46 時間

表 1 クォーク質量($m_f a$)、 π 中間子と ρ 中間子の質量比 (m_π/m_ρ)、配位数と 1 ジョブあたりの大よその計算時間。計算時間は SX-ACE 上での相関関数に対するものである。

3. SX-ACE を用いた格子 QCD 計算

3.1 格子 QCD シミュレーションの計算手順

格子 QCD 用いて、軸性ベクトル中間子の質量を得る手順は次の通りである。

- ゲージ配位を生成する。
- ゲージ配位毎に中間子の相関関数を計算する。
- 中間子の相関関数から質量を抽出する。
- クォーク質量を変化させて(a)-(c)の手順を繰り返し行い、実験値と比較可能な領域へと質量の外挿を行う。

特に、手順(a)と(b)は大規模計算を行う必要がある。

手順(a)について、今回扱う格子サイズ $8^3 \times 8^3 \times 24$ に対して真面目にやると、 4×10^5 重積分を何回も実行しなければならない。この計算は不可能なので、モンテカルロ法を用いた。また本研究では、海クォークが存在しないゲージ場（グルーオン場）だけの配位を生成した（クエンチ近似）。この近似の下では、擬熱浴法が有用である。今回は利用可能な計算機資源の関係から、手順(a)は東京大学情報基盤センターの FX10 上で行なった。手順(d)で変化させるクォーク質量($m_f a$)は 0.08, 0.06, 0.04 の 3 点を取り、それぞれに対するゲージ配位の数 は表 1 にまとめた。

3.2 SX-ACE での計算

本節では、大阪大学サイバーメディアセンター (CMC) の SX-ACE 上で行なった手順(b)について詳細に述べる。

本研究では、DWF 作用を用いて、中間子の相関関数の計算を行なった。DWF 作用はカイラル対称性を尊重しているという点でウィルソン作用よりも優れているが、欠点は多大な計算機資源を要することである。相関関数の計算では、大規模線形方程式を解

く部分が最も時間がかかる。格子サイズを $8^3 \times 8^3 \times 24$ とすると、ウィルソン作用の場合、 $(3^4 \times 8^3 \times 8^3 \times 24)$ 次の正方行列に対する線形方程式を解く必要がある。これだけでも大変だが、DWF 作用はウィルソン作用を構成要素に 5 次元方向に拡張した形をしている。さらに逆行列が入れ子構造になっている。そのため、5 次元方向の格子サイズを N_5 とすると、DWF 作用の場合、 $(3^4 \times 8^3 \times 8^3 \times 24 \times N_5)$ 次の正方行列に対する線形方程式を解いた後に、さらにもう一度、同じサイズの方程式を解く必要がある。今回、 $N_5=32$ としたので、DWF 作用の計算時間はウィルソン作用と比較して、およそ数百倍にもなる。このため、DWF 作用は提唱された後も、実際の使用が難しかった。

この計算を行うためには、SX-ACE の性能を最大限に引き出せるようにプログラムをチューニングすることが不可欠である。まず我々は、Lattice Tool Kit Fortran 90 [10] を元に DWF 作用のコード開発を行なった。大規模線形方程式を解く部分は双共役勾配法 (Bi-CG 法) を用いた。そして、SX-ACE はベクトル型計算機なので、ベクトル化率が上がるようプログラム全体のチューニングを行い、ベクトル化率 99.8% を達成した。

しかしながら、我々だけでは SX-ACE を最大限に活用できるプログラムになっていると判断するのは難しい。そこで、8 月 30 日に CMC 主催の「2017 年度第 1 回性能チューニングプログラム」に申請した。プログラムは 12 月 6 日に返却され、5 次元フェルミオン場の配列の順序を変更することで、約 1.2 倍の高速化の実現に至った。各クォーク質量に対する 1 ジョブあたりの大よその計算時間を表 1 に載せた。

ジョブの実行については、以下の通りである。SX-ACE は総計 1,536 ノード、1 ノードあたり 4 コアで構成されている。従って、我々は 4 つのゲージ配位に対する相関関数の計算を同時に行うパラメータ並列を採用し、1 ジョブあたり 1 ノード利用のジョブを作成した。500 ジョブまで投入可能であったため、最大 500 ノード、2,000 並列での計算を行った。

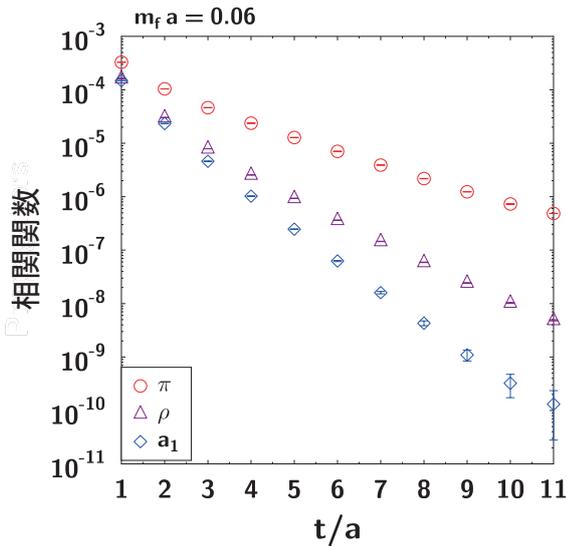


図1 クォーク質量 $m_f a = 0.06$ に対する、各中間子の相関関数の時間依存性。 a は格子間隔である。

4. 軸性ベクトル中間子の質量計算

4.1 各中間子の質量の抽出

手順(b)で得られた、ゼロ温度における各中間子に対する相関関数の結果を図1に示す。赤丸、紫三角、青四角がそれぞれ、 π 中間子(擬スカラー中間子)、 ρ 中間子(ベクトル中間子)、 a_1 中間子(軸性ベクトル中間子)に対応する。なお、時間軸方向に周期的境界条件を課しているため、横軸は、時間軸方向の格子サイズ $Nt=24$ に対して半分までの表示とした。

手順(c)では、中間子の相関関数を双曲線余弦関数 $Z \cdot \cosh(m \cdot t)$ でフィットすることで、中間子の質量 m を抽出できる。 Z は比例係数、 t は時刻である。図2に、異なるクォーク質量ごとに抽出した各中間子の質量を示した。 π 中間子に対してのみ、質量の2乗で表示されていることを注意しておく。その理由は、 π 中間子はその特徴的な軽さから、南部・ゴールドストーン(NG)粒子に対応すると考えられているからである。カイラル対称性が自発的に破れると、NG粒子と呼ばれる質量ゼロの擬スカラー中間子が現れる。しかし、クォークが質量を持つと、カイラル対称性は陽に破れ、NG粒子も質量を持つようになる。この質量の関係性は、ゲルマン・オクス・レナー(GOR)関係式として知られており、NG粒子の質量の2乗はクォークの質量に比例する。

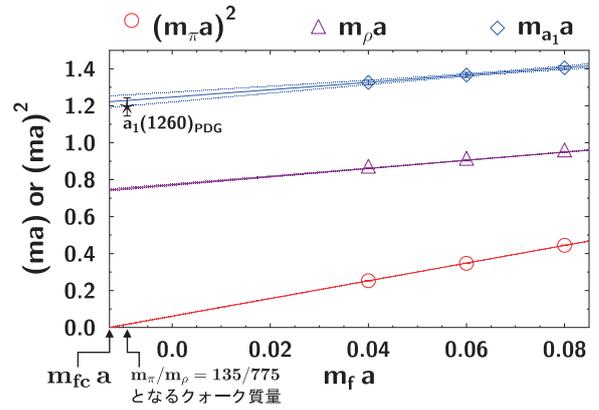


図2 各中間子の質量のクォーク質量依存性。図の左端は π 中間子の質量がゼロになる点に対応。星印は $a_1(1260)$ の質量の実験値を表す。

4.2 格子 QCD 計算と実験値との比較

手順(d)にあるように、格子 QCD 計算の結果を実験値と比較するためには、各中間子の質量の外挿を行う必要がある。外挿の結果は図2に示した。その手順は以下の通りである。

まず GOR 関係式に従い、 π 中間子の質量($m_\pi a$)の2乗をクォーク質量($m_f a$)に対して線形で外挿する。ここで、 a は格子間隔である。格子 QCD 計算では無次元量の値しか得られないので、エネルギーの次元を持った m_π と距離の次元を持った a を掛け合わせた無次元量の形で表れる。そして、 π 中間子の質量がゼロになる極限はカイラル極限と呼ばれる。カイラル極限はクォーク質量がゼロでカイラル対称性が陽に破れていない領域であり、有効模型と比較する場合に有用である。図2では、カイラル極限は左端に対応するが、そのときのクォーク質量はゼロではなく、 $m_{fc} a = -0.0128(4)$ である。これは DWF 作用が、 N_5 が無限大の極限で、初めて格子カイラル対称性を厳密に満たすことに起因する。

現実世界では π 中間子は質量を持つ。従ってカイラル極限の一步手前の点で、格子 QCD 計算の結果に次元を持たせる必要がある。本研究では、その点を質量比(m_π/m_ρ)が実験値と同じ(135/775)になる点 $m_{fp} a = -0.0092(4)$ に選び、 $a = 0.192(2)$ fm の次元を得た。結果、 a_1 中間子の質量 m_{a1} を 1266(43) MeV と得た。ここで、($m_\rho a$)と($m_{a1} a$)は線形的に外挿した。

最も軽い軸性ベクトル中間子 $a_1(1260)$ の質量の実験値は 1230(40) MeV である[11]。この値は図2に星

印として載せた。実験値と格子 QCD 計算の結果を比較すると、誤差の範囲内で一致することが分かる。

5. おわりに

5.1 まとめ

QCD において、質量の生成機構を解明することは大きな課題である。軸性ベクトル中間子はベクトル中間子のカイラル・パートナーであり、有限温度中でのそれらの質量変化を調べることは、質量の生成機構を解明する鍵になり得る。本研究は、第一原理計算である格子 QCD を用いてその調査を行うのが目標である。しかし、軸性ベクトル中間子に対する格子 QCD 計算は、ゼロ温度においても、実験値との比較に耐える信頼度の高い結果は得られていない。そこで、カイラル対称性を尊重した DWF 作用を用いて、ゼロ温度での軸性ベクトル中間子の質量の計算を行なった。そして、 $a_1(1260)$ の質量の実験値と無矛盾な結果を得た。

5.2 有限温度での計算と今後の展望

これまでのゼロ温度での計算で、DWF 作用を用いることで、軸性ベクトル中間子に対して信用できる結果が得られることを確認した。次に、我々はこの計算を有限温度へ拡張する。プログラムのチューニングによって計算機資源を節約できたため、2017 年度中に、こちらの計算も随分と進めることができた。また、有限温度での計算はおよそ 100 時間のジョブを流す必要があった。2017 年 7 月 6 日に、SX-ACE 共用利用での利用可能な経過時間の上限が 24 時間^注から 120 時間に変更されたため、特にプログラムを変更することなく有限温度の計算を始められたこともここに述べておく。

今後は π 中間子のカイラル・パートナーの候補である σ 中間子の計算も検討している。これはより多大な計算量が必要なため、SX-ACE の後継機、若しくは、GPU 搭載の OCTOPUS での計算が期待される。

^注 1 ノード利用に限り経過時間の上限は 48 時間であった。

謝辞

本研究は、国広悌二氏、村上祐子氏、室谷心氏、中村純氏、野中千穂氏、関口宗男氏、和田浩明氏との共同研究として行われた。また本研究の数値計算は、大阪大学 CMC 大規模計算機システム公募型利用制度、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（課題番号: EX17706）と大阪大学核物理研究センターからの支援の下、NEC SX-ACE の多大な計算機資源を使用して行われ、並びに、東京大学情報基盤センターの富士通 FX10 を使用して行われた。さらに、大阪大学 CMC 主催の「2017 年度第 1 回性能チューニングプログラム」により、効率良く計算機資源を使用できるようになり、より多くの研究テーマの遂行が可能となった。そして、管理・運営に携わっている多くの方々には、いつも利用者視点でシステムの変更や問題解決をして頂き、安定的に計算機を利用することができた。ここに感謝の意を表す。

参考文献

- (1) T. Hatsuda and T. Kunihiro, Phys. Rept. **247**, 221 (1994).
- (2) M. Wingate, T. DeGrand, S. Collins and U. M. Heller, Phys. Rev. Lett. **74**, 4596-4598 (1995).
- (3) C. Gattringer, L. Glozman, C. Lang, D. Mohler and S. Prelovsek, Phys. Rev. **D78**, 034501 (2008).
- (4) H. B. Nielsen and M. Ninomiya, Nucl. Phys. **B185**, 20-40 (1981).
- (5) M. Lüscher, Phys. Lett. **B428**, 342 (1998).
- (6) D. B. Kaplan, Phys. Lett. **B288**, 342 (1992).
- (7) Y. Shamir, Nucl. Phys. **B406**, 90 (1993).
- (8) V. Furman and Y. Shamir, Nucl. Phys. **B439**, 54 (1995).
- (9) R. Narayanan and H. Neuberger, Phys. Lett. **B302**, 62-69 (1993).
- (10) S. Choe, S. Muroya, A. Nakamura, C. Nonaka, T. Saito and F. Shoji, Nucl. Phys. **B(PS)106**, 1037 (2002). <http://nio-mon.riise.hiroshima-u.ac.jp/LTK/>
- (11) C. Patrignani et al. [Particle Data Group], Chin. Phys. **C40**, 100001 (2016).