

「格子ゲージ理論の大規模シミュレーションとその素粒子現象論への応用」平成18年度研究報告書

高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 橋本省二

平成19年6月8日

1 研究組織

scqcd グループは KEK、京大基研、筑波大、広島大を主体とするグループで、「大型シミュレーション研究」の開始当初から、格子 QCD の大規模シミュレーションを通じて、素粒子物理学の非摂動的研究を行ってきた。対外的には JLQCD collaboration の名前で研究発表を行っている。メンバーは以下の通りである。

- 研究責任者

- － 橋本 省二 (はしもと しょうじ)
高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 助教授

- 研究従事者

- － 金児 隆志 (かねこ たかし)
高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 助手
- － 山田 憲和 (やまだ のりかず)
高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 助手
- － 松古 栄夫 (まつふる ひでお)
高エネルギー加速器研究機構 計算科学センター 助手
- － 野秋 淳一 (のあき じゅんいち)
高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 博士研究員
- － 岡本 昌高 (おかもと まさたか)
高エネルギー加速器研究機構 素粒子原子核研究所 博士研究員
- － 大野木 哲也 (おおのぎ てつや)
京都大学 基礎物理学研究所 助教授
- － 深谷 英則 (ふかや ひでのり)
理化学研究所 仁科加速器研究センター 川合理論物理学研究室 研究員
- － 青木 慎也 (あおき しんや)
筑波大学 物理学系 教授
- － 宇川 彰 (うかわ あきら)
筑波大学 計算科学研究センター長、教授

- 金谷 和至 (かなや かずゆき)
筑波大学 物理学系 教授
- 石塚 成人 (いしづか なるひと)
筑波大学 計算科学研究センター 助教授
- 吉江 友照 (よしえ ともてる)
筑波大学 計算科学研究センター 助教授
- 蔵増 嘉伸 (くらまし よしのぶ)
筑波大学 計算科学研究センター 講師
- 谷口 祐介 (たにぐち ゆうすけ)
筑波大学 物理学系 助手
- 大川 正典 (おおかわ まさのり)
広島大学大学院 理学研究科 教授
- 石川 健一 (いしかわ けんいち)
広島大学大学院 理学研究科 助教授
- Ting-Wai Chiu
National Taiwan University, Department of Physics, Professor
- 小川 兼司 (おがわ けんじ)
National Taiwan University, postdoctoral fellow
- Weonjong Lee
Seoul National University, School of Physics and Astronomy, Professor

2 研究目標

自然界の強い相互作用は量子色力学 (QCD) で記述される。低エネルギーでの QCD はその非摂動的な性質のために、解析的な手法では定量的な予言を与えるのが多くの場合に非常に困難である。例えば、物質の質量はそのほとんどがカイラル対称性の自発的破れによってもたらされると理解されているが、QCD を解くことでこれを示すことは未だに誰も成功していない。

格子に定義された QCD (以下では格子 QCD) は、QCD の非摂動的領域も含む構成的な定式化を与えているだけでなく、数値シミュレーションを使って非摂動的計算を行う手法を与えており、計算機の急速な進歩にともなって様々な物理量の現実的な計算が可能になりつつある。特に、動的クォークの効果を無視したクエンチ近似の範囲内では、大規模な数値計算が行われ種々のハドロンの質量や行列要素の値が高い精度で求められるまでになった。クエンチ近似によらない (動的クォークの効果をとり入れた) 数値シミュレーションも、近年盛んに行われるようになってきた。

一方で、その難しさも明らかになりつつある。当初は、速い計算機さえあればすぐに大規模シミュレーションを行って物理量の精密な計算を行うことができるという予測をしていたが、実際には 1 TFlops 程度の計算機では十分に満足いく結果にまでは至らなかった。その最大の理由はカイラル極限の問題にある。

格子 QCD では、軽いクォークを含むシミュレーションに非常に計算コストがかかるため、比較的重いクォーク質量からの外挿が必要になる。これまでは軽いクォークの質量として、 $m_s/2$ (m_s はストレンジクォークの質量) 付近からの外挿が通常であったが、この領域ではカイラル摂動論が有効かどうか明らかでないため外挿の不定性が無視できない。クエンチ近似では計算時間がおよ

クォーク質量の逆数に比例して増えるが、動的クォークのシミュレーションでは最大でクォーク質量の -3 乗に比例するため、物理的なクォーク質量への外挿は動的クォークシミュレーションでははるかに困難な問題になる。

さらに問題なのは、ウィルソン型格子フェルミオンはカイラル対称性を陽に破るという点である。このため、カイラル摂動論はクォークが十分に軽い領域でも厳密には有効でない。したがって通常は、カイラル対称性の破れをあらわすパラメータを理論に導入し、格子データをフィットすることになるが、パラメータの数が増えるため不定性も増してしまう。ウィルソン型格子フェルミオンにはもう一つ、クォーク質量がゼロになる点がゲージ配位ごとにゆらぐためにカイラル極限に近づくにつれてシミュレーションが不安定になるという問題もある。

このように、動的クォークシミュレーションの問題はカイラル極限の問題と言っても過言ではない。この問題を根本的に解決するために、本研究課題では厳密なカイラル対称性をもつフェルミオン定式化を用いた動的クォークシミュレーションを推進している。この定式化によれば、カイラル極限付近での不安定性の問題は本質的になくなり、原理的には物理的なアップおよびダウンクォーク質量でのシミュレーションも可能になる。また、比較的重いクォーク質量からの外挿の際にも、連続理論で知られているカイラル有効理論の予言（クォーク質量依存性）を使うことが正当化できるので、カイラル極限の問題は非常に単純化できる。カイラル対称性をもたないフェルミオン定式化では、余分なパラメータを導入してフィットした後で連続極限をとる操作が必要になるので、数値的にははるかに困難な問題になる。

厳密なカイラル対称性をもつフェルミオン定式化は、オーバーラップフェルミオンとして知られており、クエンチ近似の範囲内ではすでに多くの研究がなされている。この定式化の最大の問題点は、計算コストが通常のウィルソン型フェルミオンに比べて100倍程度も大きいことであるが、これまでの我々の研究によれば現行のスーパーコンピュータシステムを使えば大規模なシミュレーションも十分に可能であることがわかってきた。

カイラル対称性は、ゲージ対称性と並んでQCDのもっとも重要な対称性の一つであり、自発的対称性の破れによって物質の質量の源を与えるという、われわれの自然界の理解のためにも根本的な役割を果たしている。従来の格子QCDシミュレーションでは、カイラル対称性を厳密に保った定式化を使っていなかったため、カイラル対称性の自発的破れという興味深い現象を直接扱うことはできなかったが、この研究で初めてその第一原理シミュレーションを実現することができた。カイラル対称性の破れの帰結はカイラル有効理論によってよく記述されると理論的に期待されているが、それらを逐一検証することも可能になる。この意味で、本研究課題はわれわれの自然界の理解を飛躍的に深めることにつながる。

カイラル極限の問題が根本的に解決できれば、現象論的応用での価値も高い。なぜなら、カイラル極限におけるカイラルログの問題は普遍的で、ほとんどの物理量がこの問題の影響を受けるからである。これまで、パイ中間子やK中間子の崩壊定数、K中間子のバッグパラメータ、B中間子の崩壊定数とバッグパラメータ、パイ、K、B中間子のセミレプトニック行列要素等の計算を進めてきたが、これらのすべてにおいてカイラル極限の問題は未解決で、この研究プロジェクトによって初めて本質的な解決が期待できる。これらの物理量はクォークフレーバー物理において小林益川行列要素を決定する上での中心的な物理量であり、信頼できる理論計算がかねてから期待されてきたものである。

この研究課題の目的は、これらの重要なハドロンの行列要素を厳密なカイラル対称性をもつ格子QCDのシミュレーションで計算すること、またそのための基本的な手法を開発することである。

3 平成18年度の研究報告

平成18年3月に新スーパーコンピュータシステムが稼働してからの研究では、以下のことを行った。

- まず2フレーバーでのシミュレーションを開始した。目標はオーバーラップフェルミオンによるシミュレーションが可能であることを示すこと、さらには十分に軽いクォーク質量まで到達することである。格子サイズは $16^3 \times 32$ 、格子間隔は0.125 fmにとる。ゲージ作用としては岩崎型を採用し、トポロジを固定するための余分なウィルソンフェルミオンを導入する。ただし、この余分の自由度は重いので連続極限では無関係になる。トポロジを固定するシミュレーションに関してはすでに論文で発表した [1]。
- パラメータの調節のため、まず $\beta = 2.35$ でのシミュレーションをクォーク質量6点で行った。クォーク質量は $m_s/6 - m_s$ の広い範囲をカバーする。それぞれで1,200 HMC traj. のシミュレーションを終えて解析したところ、当初の予定よりも格子間隔が小さかったので、本格的なランはより格子間隔の大きい $\beta = 2.30$ で行うことにした。この当初のランによって、アルゴリズムの振る舞いや計算時間の評価など、貴重なデータを得ることができた。最も重要な発見は、 $m_s/6$ という非常に軽いクォークでもシミュレーションは問題なく動作し、計算時間も当初の予想よりも大きくなかったことである。
- $\beta = 2.35$ では、上記のテストランに加えてクォーク質量が極端に小さいいわゆるイプシロン領域のシミュレーションを行った。パイ中間子のコンプトン波長が格子よりも長くなるこの領域では、カイラル有効理論を用いて解析的にディラック演算子の固有値分布が求まるなど、多くのことが知られている。これらを格子計算でテストすることで、カイラル有効理論とQCDとの橋渡しを精密に行うことができる。すなわち、QCDにおいてカイラル対称性が自発的に破れているという考えを実証することができる。この研究はすでに論文として発表した [2]。
- 本格的なランは $\beta = 2.30$ で行った。格子間隔はおよそ0.12 fmで、物理的な格子の大きさは $(1.9 \text{ fm})^3 \times (3.8 \text{ fm})$ になる。クォーク質量は $m_s/6 - m_s$ の間に6点をとり、十分な統計量を得るために、10,000 HMC traj. を集めることを目標とした。7月の国際会議までにおよそ4,000 HMC traj. 弱程度まで進み、夏にアルゴリズムを改善することで全体のスピードを2倍以上向上し、最終的には11月初めまでに目標としていた10,000 HMC traj. をためてシミュレーションは完了した。
- 本格的なシミュレーションと並行して、物理量測定のためのアルゴリズム開発を進めた。以下のような技術的進展があった。

固有値計算 オーバーラップ演算子の小さな固有値と対応する固有ベクトルを求めるために、Implicitly Restarted Lanczos アルゴリズムを用いる。演算子をエルミート化するために、まず演算子を特定のカイラル空間に射影して、その空間での固有値を求めると元の演算子の固有値を再構成することができる。この手法を使って、蓄積した格子配位すべてについて、固有値と固有ベクトルを小さい方から順に100個計算してディスクに蓄積するようにした。

Multi-Shift Solver オーバーラップ演算子では $D(m)^\dagger D(m)$ が $D(0)^\dagger D(0) + m^2$ の形に書けることから、multi-shift solver の手法を使うことができる。これによって、異なる質量のクォークプロパゲータを1回の計算で同時に求めることができる。

Low Mode Preconditioning (LMP) 上記の固有値と固有ベクトルを使って、オーバーラップ行列のもつ空間のうちで小さな固有値で張られる空間だけを射影して取り除くことができる。これにより、逆行列を求める計算はおよそ8倍高速化した。

Low Mode Averaging (LMA) 上記の固有値と固有ベクトルを使って、クォークプロパゲータのうちで小さい固有モードでできている部分を明示的に書き下すことができる。このクォークプロパゲータは始点と終点を自由に動かすことができるので、始点に関する平均を簡単に計算することができる。これにより、得られるハドロン相関関数の統計精度が格段に向上した。

これらのアルゴリズムによって、あらゆる物理量の計算が格段に高速化かつ精密化した。これらもオーバーラップフェルミオンを用いることの利点の一つである。

- 物理量の計算としては、現在、以下のようなプロジェクトが進行している。

カイラルログのテスト パイ中間子の質量と崩壊定数を精密に計算することで、カイラル有効理論が予言するカイラルログ（パイ中間子の雲の効果）が格子計算で再現されているかどうかを調べる。以前のシミュレーションではクォーク質量が大きかったために、この効果を調べることでできる領域に到達しなかったが、今回は格段に軽いクォークで、かつ厳密なカイラル対称性をもつため、初めて意味のあるテストが可能になると考えている。このためには非常に精度のよい計算が必要になるが、上記の技術開発によってそれもクリアできたと考えている。

K 中間子のセミレプトニック崩壊 カイラル有効理論の枠内で議論することのできる最も単純な物理量は上記の質量と崩壊定数であるが、次に単純な量はセミレプトニック崩壊である。ここではパイ中間子の荷電半径と K 中間子のセミレプトニック崩壊行列要素に着目する。これまでにやられたことのない小さなクォーク質量と高い統計精度で、カイラルログの効果をここでも明らかにすることを目指す。 K 中間子のセミレプトニック崩壊の行列要素を精密に計算できれば、小林益川行列 $|V_{us}|$ の決定に有効である。ここで必要となるハドロンの3点関数の計算で高い精度を実現するために、任意点から任意点へのクォークプロパゲータを計算する手法を開発する。この手法はその他の物理量、特にフレーバー重項のハドロンの物理量を計算する際に重要になる。

K 中間子の B パラメーター B_K K 中間子の B パラメーターは、CP対称性の破れのパラメーター ϵ_K を、クォークレベルの結合定数に翻訳するために必要になるパラメーターで、束縛状態としての K 中間子の情報を含む非摂動的な物理量である。クォークのもつカイラル対称性によって小さく抑えられている量なので、格子計算においてもカイラル対称性を保つ定式化を用いて計算する必要がある。厳密なカイラル対称性を保つことで、非常に精度のよい計算ができると期待できる。

トポロジー依存性 我々のシミュレーションは時空全体のトポロジーを固定する枠組みで行っている。これはQCDの θ 真空とは異なるので、それに起因する誤差が生ずると思われる。もちろん体積無限大の極限では違いはなくなるので、この誤差は有限体積効果と呼ぶべきである。いずれにせよ、トポロジーを固定することによる影響を調べておくことは重要であり、このために有限のトポロジーでのシミュレーションも進めている。

トポロジー感受性 時空全体のトポロジーを固定していても、QCDに固有の局所的なトポロジーのゆらぎは起るはずであり、そのゆらぎの大きさはトポロジー感受率 χ_t で特徴

づけられる。通常、トポロジー感受率は空間全体のトポロジーの分布を使って計算されるが、我々のシミュレーションはトポロジーを固定しているのでそれは不可能である。その代りに、局所的に測定できる物理量からトポロジー感受率を計算する手法を検討している。これによって、トポロジーを固定するシミュレーションの正当性を証明できる。

固有値分布 イブシロン領域でのディラック演算子の固有値は多くの情報を含んでいることが明らかになってきている。固有値の平均値を使ってカイラル凝縮の値 Σ を計算できるだけでなく、化学ポテンシャルが入ったときの固有値の相関を見ることでパイ中間子の崩壊定数 F_π を求めることができることも知られている。もっと重要なことは、QCD がカイラル対称性の自発的破れを起こすことの直接的な証明を与えることができる点にある。すでに完了したシミュレーションの固有値分布を詳細に分析することで、これらのことが明らかになると期待される。

イブシロン領域の相関関数 固有値分布だけでなく、イブシロン領域での相関関数も Σ や F_π に関する独自の情報を与える。固有値分布よりも優れている点は、イブシロン展開の高次を計算に取り込むことができることである。現在、種々の演算子の相関関数の解析を進めているところである。

重いクォークの物理 このプロジェクトでは、軽いクォークの領域が主たる興味であるが、重いクォークの物理でもカイラル外挿は主要な系統誤差の要因になっており、この問題を解決することが最終的に精度のよい計算を行うための鍵になると考えている。まずは重いクォークとして静的近似を考え、カイラル外挿の問題に集中する。物理量としては B 中間子の崩壊定数と、 $B^*B\pi$ 結合定数が最初の課題となる。

厳密なカイラル対称性はこのプロジェクトで初めて実現されるものであるため、これら以外にも新たな応用を開拓できる可能性が大いにある。素粒子現象論を中心に、広くテーマを考えていきたい。

4 成果報告

平成 18 年度に発表した論文は、トポロジーを固定するゲージ作用に関する研究 [1] および、イブシロン領域の固有値分布をランダム行列理論のそれと比較してカイラル対称性の自発的破れを実証した研究 [2] の 2 編である。後者は Phys. Rev. Lett. に掲載され、それと同時に高エネルギー加速器研究機構からプレスリリースを発表した（「量子色力学における自発的対称性の破れを厳密に実証」2007 年 4 月 24 日プレスリリース, <http://www.kek.jp/ja/news/press/2007/supercomputer2.html>）。

2006 年 7 月に米国アリゾナ州ツーソンで行われた “The XXIV International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2006)” において発表した。発表者とタイトルは以下の通り。それぞれ、プロシーディングスに論文を投稿した。

- T. Kaneko, “JLQCD’s dynamical overlap project” [3]
- H. Fukaya, “Dynamical overlap fermions in the epsilon regime” [4]
- S. Hashimoto, “Dynamical overlap fermions at fixed topology” [5]
- H. Matsufuru, “Improvement of algorithms for dynamical overlap fermions” [6]

- N. Yamada, “Mobility edge and locality of the overlap-Dirac operator with and without dynamical overlap fermions” [7]

2006年11月に名古屋大学で行われた“Origin of Mass and Strong Coupling Gauge Theories (2006 International Workshop SCGT06)”において、深谷が発表し、プロシーディングスに論文を投稿した。

- S. Fukaya, “Approaching the chiral limit in lattice QCD” [8]

2007年3月にBrookhaven National Laboratoryで行われた“Workshop on Domain Wall Fermions at Ten Years”においていくつかの発表を行った。発表者とタイトルは以下の通り。

- S. Hashimoto, “Dynamical QCD with exact chiral symmetry — from the p -regime to the ϵ -regime”
- T. Kaneko, “Approaching the chiral limit with dynamical overlap fermions”
- J. Noaki, “Spectrum study of Nf=2 QCD with overlap fermions”
- T.-W. Chiu, “Topological susceptibility in the trivial sector with dynamical overlap”
- N. Yamada, “ B_K with two flavors of dynamical overlap fermions”
- T. Onogi, “Should we change the topology at all?”

参考文献

- [1] H. Fukaya, S. Hashimoto, K. I. Ishikawa, T. Kaneko, H. Matsufuru, T. Onogi and N. Yamada [JLQCD Collaboration], “Lattice gauge action suppressing near-zero modes of H_W ,” Phys. Rev. D **74**, 094505 (2006) [arXiv:hep-lat/0607020].
- [2] H. Fukaya *et al.* [JLQCD Collaboration], “Two-flavor lattice QCD simulation in the epsilon-regime with exact chiral symmetry,” Phys. Rev. Lett. **98**, 172001 (2007) [arXiv:hep-lat/0702003].
- [3] T. Kaneko *et al.* [JLQCD Collaboration], “JLQCD’s dynamical overlap project,” PoS **LAT2006**, 054 (2006) [arXiv:hep-lat/0610036].
- [4] H. Fukaya *et al.* [JLQCD Collaboration], “Dynamical overlap fermions in the epsilon-regime,” PoS **LAT2006**, 050 (2006) [arXiv:hep-lat/0610024].
- [5] S. Hashimoto *et al.* [JLQCD Collaboration], “Dynamical overlap fermion at fixed topology,” PoS **LAT2006**, 052 (2006) [arXiv:hep-lat/0610011].
- [6] H. Matsufuru *et al.* [JLQCD Collaboration], “Improvement of algorithms for dynamical overlap fermions,” PoS **LAT2006**, 031 (2006) [arXiv:hep-lat/0610026].
- [7] N. Yamada *et al.* [JLQCD Collaboration], “Mobility edge and locality of the overlap-Dirac operator with and without dynamical overlap fermions,” PoS **LAT2006**, 060 (2006) [arXiv:hep-lat/0609073].
- [8] H. Fukaya, “The chiral limit in lattice QCD,” arXiv:hep-lat/0702024.