

素粒子原子核物理学におけるパーシステントホモロジー解析

河野宏明*・開田丈寛**

The Persistent Homology Analyses in Particle and Nuclear Physics

By

Hiroaki Kouno and Takehiro Hirakida

Abstract: We report the persistent homology analyses applied to particle and nuclear physics. As the first step, the analyses of the confinement and deconfinement transition in quark system are shown. We use the effective Polyakov line model which is the effective model of quantum chromodynamics. We analyzed the space distribution of the phase of the Polyakov line which is composed of the time component of gluon field. The persistent diagram in the deconfined phase is much different from that in the confined phase.

Key words: particle and nuclear physics, persistent homology, quark, confinement, deconfinement

1. はじめに

現代の素粒子原子核物理学においては、実験的にも理論的にも莫大なデータを解析する必要が生じている。素粒子の反応と言うと少数の粒子が関与するシンプルなイメージを描くかもしれない。だが、素粒子のエネルギーが高エネルギーになればなるほど、粒子・反粒子の生成消滅が増え、複雑な反応過程となる。また、ごく稀な反応を見つけるためには、莫大な数の実験を行い、そこから統計的に結論を導かなければならない。現代のインターネット社会の基本になっている World Wide Web という技術は、素粒子原子核物理学における莫大なデータ情報のやりとりのために生まれた事はよく知られている。

データの数だけではない。現代の素粒子原子核物理学では、素粒子自体が大量にある状況の研究も重要になってきている。素粒子原子核物理学において、高エネルギーの人工的な実験は、基本的に加速器を使って素粒子を加速する事により行われる。粒子のエネルギーが大きくなればなるほど、加速器の大きさは大きくなる。

巨大な加速器を作るには莫大な予算がかかる。たとえば、スイスのジュネーブ近郊にある国際的な円形の加速器であるラージ・ハドロン・コライダー (LHC) は、その全周が約 27km 程度あり、山手線より

少し小さいぐらいで、一部は国境をまたいでフランス領になっている。これ以上に大きな加速器を作る事は、国際協力を行うにしても、予算的にだんだんと難しくなっている。素粒子物理学において、新しく提唱されている理論は、多くの場合、現在の加速器のエネルギーよりも高いエネルギー領域の現象に対応する。それらの高エネルギーの物理現象を実験的に確かめようとする、加速器ではなく、宇宙そのものを巨大な実験装置としなければならない状況になってきた。宇宙初期において、高エネルギーの素粒子が多数飛び交っていたと考えられるからだ。したがって、宇宙の諸現象を説明できる事が、新しい理論の成否を決める事になる。

宇宙初期における高エネルギーの素粒子は、単体でなく、多数の集合状態で存在していた。したがって、それらを理論的に考える場合は、素粒子単体の性質だけでなく、素粒子多体系の性質が重要になる。言ってみれば、素粒子の“物性”が問題になるのである。宇宙初期以外でも、たとえば、中性子星と呼ばれる高密度天体の内部では、高密度の極限状態で素粒子が密集して存在すると考えられており、その極限状態での素粒子の“物性”を解析する事が重要となる。

実は、加速器実験においても同様の事が言える。先に述べた LHC では、単体の素粒子だけでなく、金やウランといった巨大な原子核も衝突させる事できる。そのような衝突でできる状態は高温・高密度の状態、宇宙初期のビッグバンにたとえて、リトル

令和 2 年 5 月 28 日受理

*理工学部物理学部門

**学校法人出水学園出水中央高等学校

©佐賀大学理工学部

バンと言われることもある。巨大な原子核の衝突では生成される全エネルギーは高くなるが、素粒子の多体系が形成されるため、やはり“物性”の解析が必要となる。

ミクロな素粒子は、一方で場（波）でもある。素粒子物理学を記述する理論は場の量子論であるが、場の理論の立場からすると、多数の自由度を持つ系を非摂動的に扱う必要がある。近年、素粒子の多体系を非摂動的に扱う理論として、格子場のシミュレーションが発達してきた。これは計算機上に作られた、離散時空間に素粒子の場をおき、理論にしたがって場の理論的計算や統計力学的計算をシミュレーションで行う方法である。格子場のシミュレーションにおいても、“物性”的な解析が重要である事は言うまでもない。物性物理学においては、多体系を扱うが、そこから巨視的な性質を導く事が重要となる。近年、物性物理学においては、多体系の持つトポロジーの解析が重要となってきたり、その発展は素粒子物理学にも影響を与えている。ここでは、物性理論で発展してきたパーシステントホモロジー[1]とよばれる手法を素粒子原子核物理学に応用する事を、クォークの閉じ込め・非閉じ込め転移の分析を例として、論じる。

2. クォークの閉じ込め・非閉じ込め

ここで問題にする素粒子の物性は、クォークの物性である。物質は原子からできており、原子は原子核の周りを電子が回る形で構成される。原子核は陽子や中性子よりできており、原子の質量のほとんどを担っている。陽子や中性子の間には、中間子が飛び、それによって（強い）核力と呼ばれる力が働き、原子核を構成する。陽子や中性子の仲間の粒子をバリオンと呼び、バリオンと中間子を総称してハドロンと呼ぶ。先にでてきた LHC は、ハドロンを衝突させる大きな加速器という意味である。厳密に言うと、ハドロンは基本的な粒子ではない。クォークと呼ばれる基本的粒子が3つくっついてバリオンを作り、クォークとその反粒子である反クォークがくっついて中間子を作っている。したがって、現代の素粒子物理学では、電子などのレプトンとクォークが物質を構成する基本的な粒子である。基本的な粒子としては、それ以外に力を伝達する光子のようなゲージ粒子と、質量を生み出すヒッグス粒子がある事が知られている。

不思議な事に基本的な粒子であるはずのクォークを単体で取り出す事はできない。これはクォークの間にグルーオンと呼ばれるゲージ粒子の媒介で伝達する強い相互作用が働き、1つのクォークを他のクォークから引き離そうとすると、強い引力が働きク

ォークを引き戻してしまうためであると考えられる。この現象をクォークの閉じ込めと呼ぶ。なお、中間子によって伝達される（強い）核力は、クォーク間の強い相互作用から導かれる2次的な力である。

強い相互作用を記述する理論は量子色力学 (QCD) と呼ばれる理論である。これは電磁気学の量子論である量子電磁気学 (QED) と似た理論であるが、電荷の種類が正負だけでなく、色といった3種の種類も持った理論である。すなわち、クォークには赤、緑、青（これらの名前は光の3原色のたとえにすぎないが）の3色の色電荷をもっており、反クォークはそれらのマイナス、つまり、反赤、反緑、反青の色電荷をもっている。3つのクォークからなるバリオンの場合は、常に、赤、緑、青のクォークが1つずつあり、全体で白色となって、色を持たない。中間子の場合は、色を持ったクォークとその反色を持った反クォークが結合してやはり全体では色を持たない。したがって、クォークの閉じ込めは色の閉じ込めでもある。強い相互作用を伝達するグルーオンも色を持つが、グルーオンもハドロン内に閉じ込められる。

クォークの閉じ込めは、理論解析的な意味においては、未解決の問題である。しかし、格子場のシミュレーション、すなわち格子量子色力学[2]によって、クォークの閉じ込めは再現されている。さらに、温度を上げていくと、クォークの閉じ込めが破れて多数のクォークやグルーオンが自由に運動するクォーク・グルーオン・プラズマ (QGP) ができる事が予言され、高エネルギー原子核衝突でそういった状態が実際にできているらしい事がわかってきた[3]。物性論的な言い方をすると、温度を上げていくと、ハドロン相から QGP 相に相転移するのである。宇宙初期のビッグバン後 10^{-5} 秒ぐらいまでは、そのような QGP が存在したと考えられている。また、中性子星のようなコンパクトな星の内部の高密度状態でも QGP とはやや異なるクォーク物質が存在すると考えられている。

厳密な相転移においては、転移のおこる2つの相は対称性の自発的破れの有無によって区別できる。クォークの閉じ込め・非閉じ込めの場合も、もし、クォークと反クォークの対生成・対消滅の効果が無視できるのであれば、QCD のゲージ対称性に付随する Z3 対称性とよばれる対称性の自発的破れの有無で区別できる。すなわち、ゲージ場の時間成分を使って定義できるポリヤコフライン (ループ) という物理量があるが、これは Z3 対称でない。この物理量の期待値をハドロン相で計算すると零となり、Z3 対称性は守られるが、QGP 相では有限の大きさを持つため、Z3 対称性は自発的に破れる。Z3 対称性におけるポリヤコフラインのように自発的破れを検証できる物理量を秩序変数と呼ぶ。

ところが、クォークと反クォークの対生成・対消

滅の効果を検討すると、Z3 対称性は常に破れてしまい、秩序変数による相の区別ができなくなる。したがって、現実の QCD では、ハドロン相と QGP 相の間の転移は、非連続的な厳密な意味での相転移でなく、クロスオーバーと呼ばれる連続的な転移となり、ハドロン相と QGP 相の境界を決める事が困難になる。そこで、トポロジー的な概念を使って、両相を区別する試みなどが行われてきた[4, 5]。ここでは、近年物性物理学（あるいは化学などの分野）で発展してきた、パーシステントホモロジー[1]と呼ばれる手法で両相を区別する試み[6] について報告する。

3. パーシステントホモロジー

ここでは、パーシステントホモロジーの概念を簡単に、直観的に紹介する。パーシステントホモロジーの入門書を兼ねた教科書としては、文献[1]などがある。

ある空間に広がって分布するデータの点を考える。簡単のため、まず、Fig. 1(a)のような2次元空間の中の2点を考える。2点を中心とした半径 r の2つの円を考え、 r を次第に大きくする。Fig. 1(b)のように円が接したとき、点が繋がり“線”ができたと考える。(Fig. 1(c)) 3点を考えたときも、同様に隣り合う点の円が接した時に“線”ができると考えるが(Fig. 2(a))、さらに r が大きくなって3つの円が重なった時は(Fig. 2(b))、“(塗りつぶされた)三角形”ができたと考える(Fig. 2(c))。このように、 r を大きくすると、次々と(位相幾何学で言うところの)“単体”が生成され、それらによって“複体”が構成される。慣習にしたがって、 r の2乗を“時間”と呼ぶ事にしよう。時間と共に、単体・複体が増えていく過程をフィルトレーションと呼ぶ。ここで重要なのは、三角形の場合のように、“線”が3つできた段階では、図形に“穴”があったのに、(塗りつぶされた)三角形ができると“穴”が消滅する事である。

時間が経つと共に穴が生成され、やがてそれは消える。穴が生成される(生まれる)時間 Birth time を横軸に、穴が消える(死ぬ)時間 Death time を縦軸にとってプロットしたものをパーシステント図と呼ぶ。Fig. 3は有効ポリヤコフライン模型と呼ばれる量子色力学の有効理論におけるポリヤコフラインの位相についてのパーシステント図の例である。詳しい説明は次章で行うが、Death time が Birth time より小さい事はないので、穴を表す点はかならず対角線より上にある。

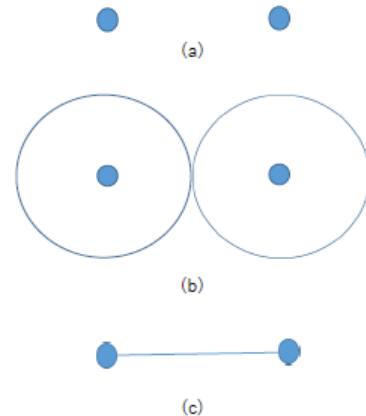


Fig. 1

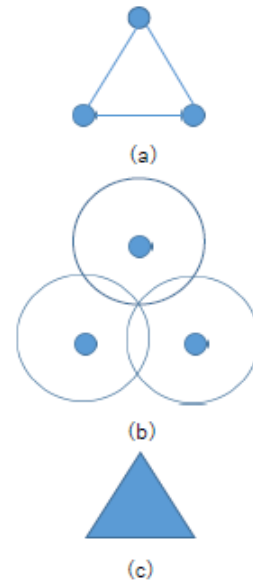


Fig. 2

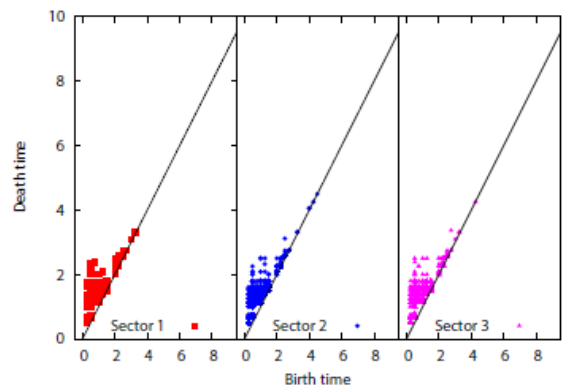


Fig. 3

穴の生成と消滅を示すパーシステント図はデータ空間でのマルチスケールのトポロジーの情報を反映すると考えられる。ただし、対角線に近いものは生存時間が短くデータのノイズ的な揺らぎであると考えられる。対角線から離れた穴は生存時間が長く、パーシステントであり、位相幾何学的な意味があると考えられる。

なお、データ分布の空間が3次元空間であれば、上述の“円”を球に置き換えて考えればよい。

4. 数値解析

クォークの閉じ込め・非閉じ込め転移の基本理論である量子色力学は、複雑な理論であるので、ここではその有効理論である有効ポリヤコフライン模型 (EPLM) を使う事にする。これは、先に出てきたポリヤコフラインを基本的な物理量と考えて、量子色力学を書き変えた有効理論である。この模型の細かい詳細は、文献[6, 7]を参照されたい。ここではパーシステントホモロジー解析の要点のみを述べる。

計算機上の3次元格子空間上に設定されたEPLMをシミュレーションし、統計力学にしたがった配位を生成する事で、ある配位でのポリヤコフラインの空間分布を知る事ができる。ポリヤコフラインは複素数であるが、その位相を複素平面で次のように3つに分け分類し、分類された位相が空間においてどのように分布しているかを解析する

Sector 1 位相が $-\pi/3 \sim \pi/3$

Sector 2 位相が $\pi/3 \sim \pi$

Sector 3 位相が $\pi \sim 5\pi/3$

3つに分けるのは、Z3対称性を考える時の変換であるZ3変換に対応している。Z3変換を行うと、ポリヤコフラインは複素平面内で1/3回転し、別の領域に移るのである。

次に各位相領域に対応するポリヤコフラインの3次元空間での分布を考え、パーシステントホモロジーの解析を行う。(解析では文献[8, 9]で示されている公開ソフトウェアを使用した。)得られたパーシステント図の例が前出のFig. 3である。この図は、低密度の状態(クォーク化学ポテンシャルの値がクォーク質量の0.5倍)の閉じ込め相に対応するもので、3つの領域がほとんど同じパーシステント図になっている。一方、やや高密度(クォーク化学ポテンシャルの値がクォーク質量の0.9倍)の非閉じ込め相に対応する図がFig. 4である。ここでは3つの領域が異なった分布を見せており、Sector 1ではBirth timeの小さい狭い範囲に“穴”は集中して分布しており、他の領域ではBirth timeの大きい部分に広く分布している。3つの領域で差異が大きくなったのは、クォークが非閉じ込めになって、もともと少し破れていたZ3対称性の破れがさらに大きくな

った事を意味している。他の配位を使っても、パーシステント図は閉じ込め・非閉じ込めのどちらの相でもほとんど変わらないので、これらの特性は閉じ込めと非閉じ込めの性質を反映しているものと思われる。なお、低温における閉じ込め相(ハドロン相)と高温における非閉じ込め相(QGP相)についても同様の結果が得られている[6]。

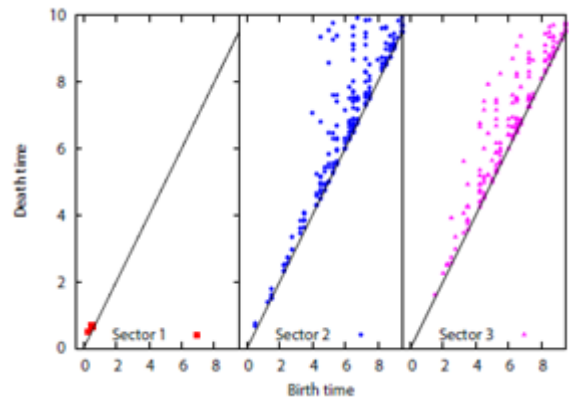


Fig. 4

5. まとめと展望

この報告では、素粒子物理学におけるパーシステントホモロジーによるデータ解析について報告した。クォークに働く強い相互作用の基本理論である量子色力学の有効理論である有効ポリヤコフライン模型を用いて、クォークの閉じ込め相と非閉じ込め相のポリヤコフラインの位相の空間分布を求め、その空間分布をパーシステントホモロジーの手法で解析した。

位相の空間分布のパーシステント図は、閉じ込め相と非閉じ込め相では全く異なる傾向を示した。このことは、両相においては、ポリヤコフラインの位相の空間分布のマルチスケールでのトポロジーが全く異なる事を意味し、パーシステントホモロジーの手法によって、両相が分類できることを示唆する。パーシステントホモロジーの素粒子原子核物理学における応用は、著者達の知る限り、この解析が世界で初めてである。今後は、以下のような研究を行っていきたい。

- (1) 様々な温度および有限化学ポテンシャル領域でのパーシステントホモロジーの分析。
- (2) 格子QCDシミュレーションで計算されたポリヤコフラインのパーシステントホモロジーによる解析。
- (3) 格子QCDシミュレーションにおけるボーテックス構造のパーシステントホモロジーに

よる解析。

- (4) パーシステントホモロジーによる分類の力学的解釈。

さらに、他のトポロジー的な手法との関連性も吟味していきたい。

謝辞

有益な議論を行っていただきました八尋正信氏、柏浩司氏、高橋純一氏、菅野淳平氏、石井優大氏、宮原昌久氏、大野晃氏に感謝いたします。この研究は科研費（基盤研究(C)一般 20K03974）の支援を受けております。また、計算の一部は大阪大学 RCNP の支援のもと、大阪大学 CMC の大型計算機 SX-ACE を使って行われました。ここに謝意を表します。

参 考 文 献

- (1) 平岡裕章, 「タンパク質構造とトポロジー」パーシステントホモロジー群入門, 共立出版, 2013 年.
- (2) 青木慎也, 「格子上の場の理論」現代物理学シリーズ 3, シュプリンガー・フェアクラーク東京, 2005 年.
- (3) 秋葉康之, 「クォーク・グルーオン・プラズマの物理」基本法則から読み解く物理学最前線 3, 共立出版, 2014 年.
- (4) M. Sato, Phys. Rev. D 77, 045013 (2008).
- (5) K. Kashiwa and A. Ohnishi, Phys. Lett. B 750, 282 (2015).
- (6) T.Hirakida,K. Kashiwa, J.Sugano,J. Takahashi, H. Kouno and M. Yahiro, Int. J. Mod. Phys. A 35, 2050049 (2020).
- (7) T. Hirakida, J. Sugano, H. Kouno, J. Takahashi and M.Yahiro, Phys. Rev. D 96, 074031 (2017).
- (8) DIPHA plugin for python available at <https://github.com/DIPHA/dipha>.
- (9) HomCloud available at http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab0/homcloudenglish.html