

計算物理学の現状と未来

宇川 彰

筑波大学計算物理学研究センター

- *計算物理学の目指すもの*
- *CP PACSによる計算物理学*
- *計算物理学の今後*

計算物理学の目指すもの

- 物理学

- 素粒子物理

物質の基本構成要素とその相互作用

- 宇宙物理学

宇宙の歴史と構造の成り立ち

- 物性物理学

多数個の原子集団としての物質の性質

-

-

-

自然法則の基本方程式



多様な自然現象の理解

計算物理学の目指すもの

- 自然法則の基本方程式と自然現象を繋ぐための基本的道具としての高速計算機
- 解析的方法(紙と鉛筆)では取り扱えない多自由度・非線形な物理系の理解
- 可能な限り近似を排除し、現実の条件に即応した計算の実現

CP-PACSによる計算物理学

- CP-PACSの概要
- CP-PACSの運用
- 素粒子物理学 (格子量子色力学)
- 宇宙物理学 (輻射宇宙流体力学)
- 物性物理学 (固体水素の相図)

超並列計算機 CP-PACS

- 基本緒元:

- 2048PU+128IOU
- 614GFLOPS peak
- 128GByte memory
- 1058GByte disk

- 開発:

- 1992 - 1996 筑波大学計算物理学研究センター
- 日立製作所と協力(SR2201として製品化)

- 完成稼動:

- 1996年(平成8年)9月

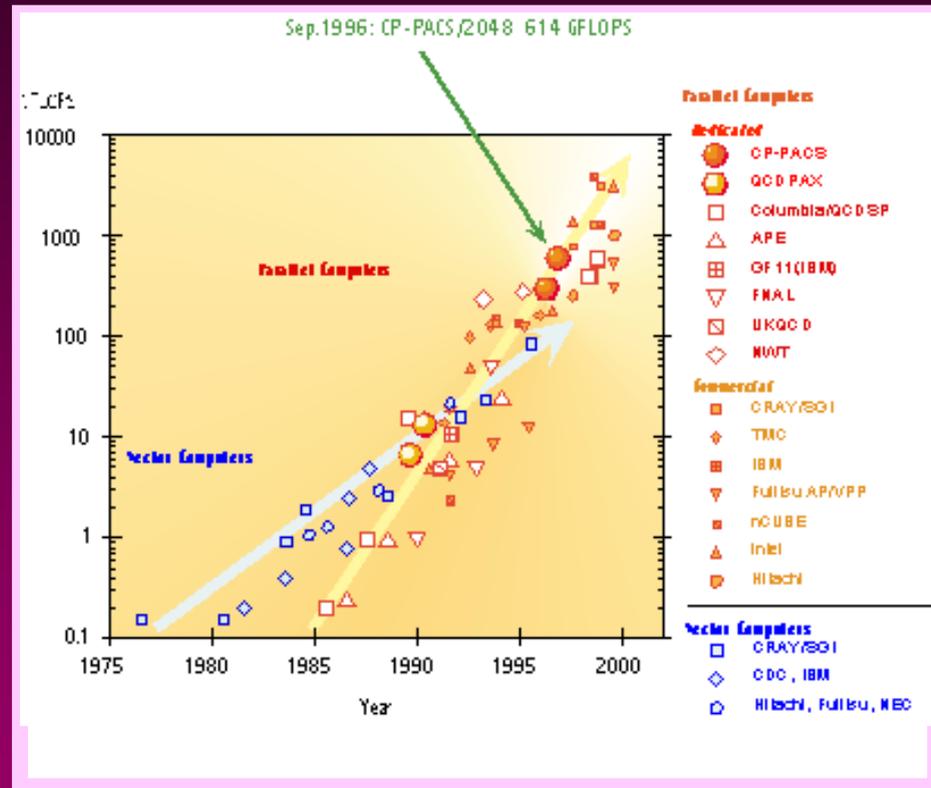


高性能計算機の発達と CP-PACS

- Top 500 List ranking

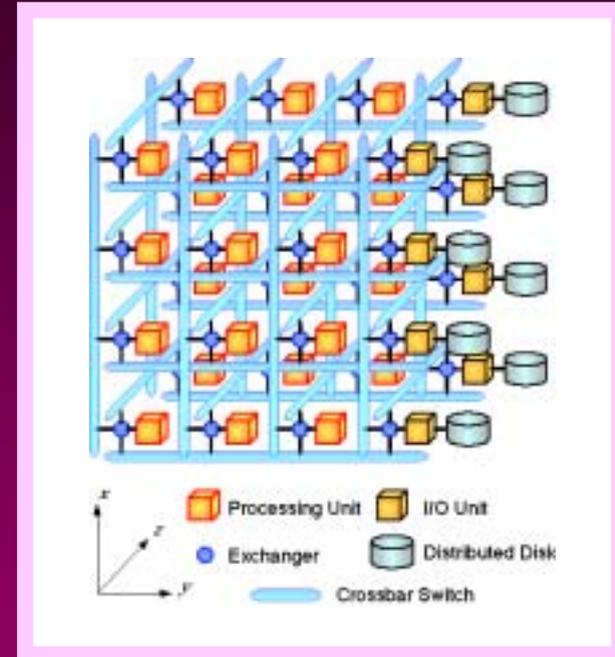
No. 1 November 1996
Linpack 368.2Gflops

No. 24 November 1999
(still No. 4 within Japan)



CP-PACS の特徴

- ベクトル演算
 - PU間高速データ転送
 - 大量の中間結果
 - 様々な問題サイズ
- PVP-SW機構
 - RDMA機構
 - 分散磁気ディスク
 - PU群分割機能



計算物理学研究センターのシステム構成

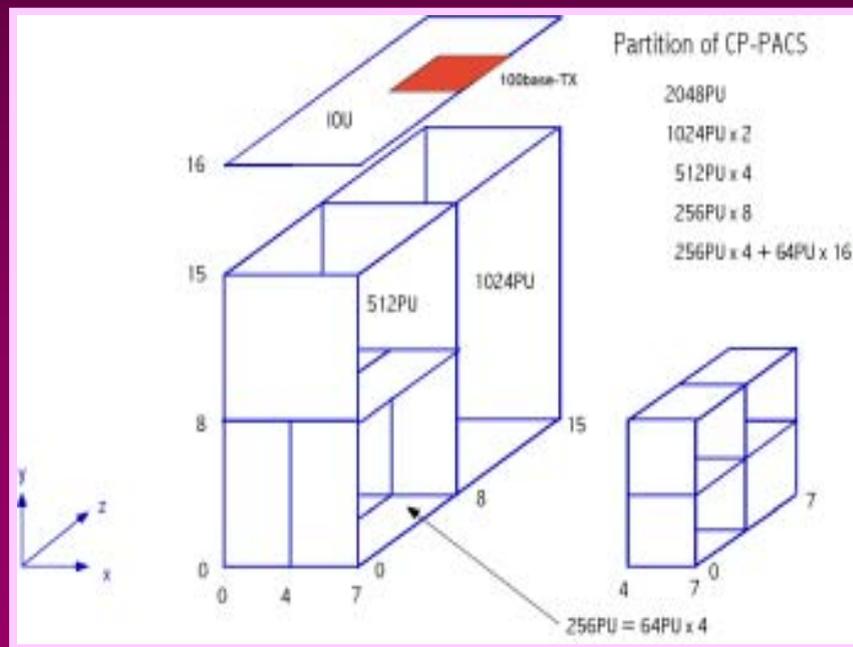


CP-PACS の分割運用

- 計算需要と問題規模に応じて適宜分割運用

格子QCD計算の実例

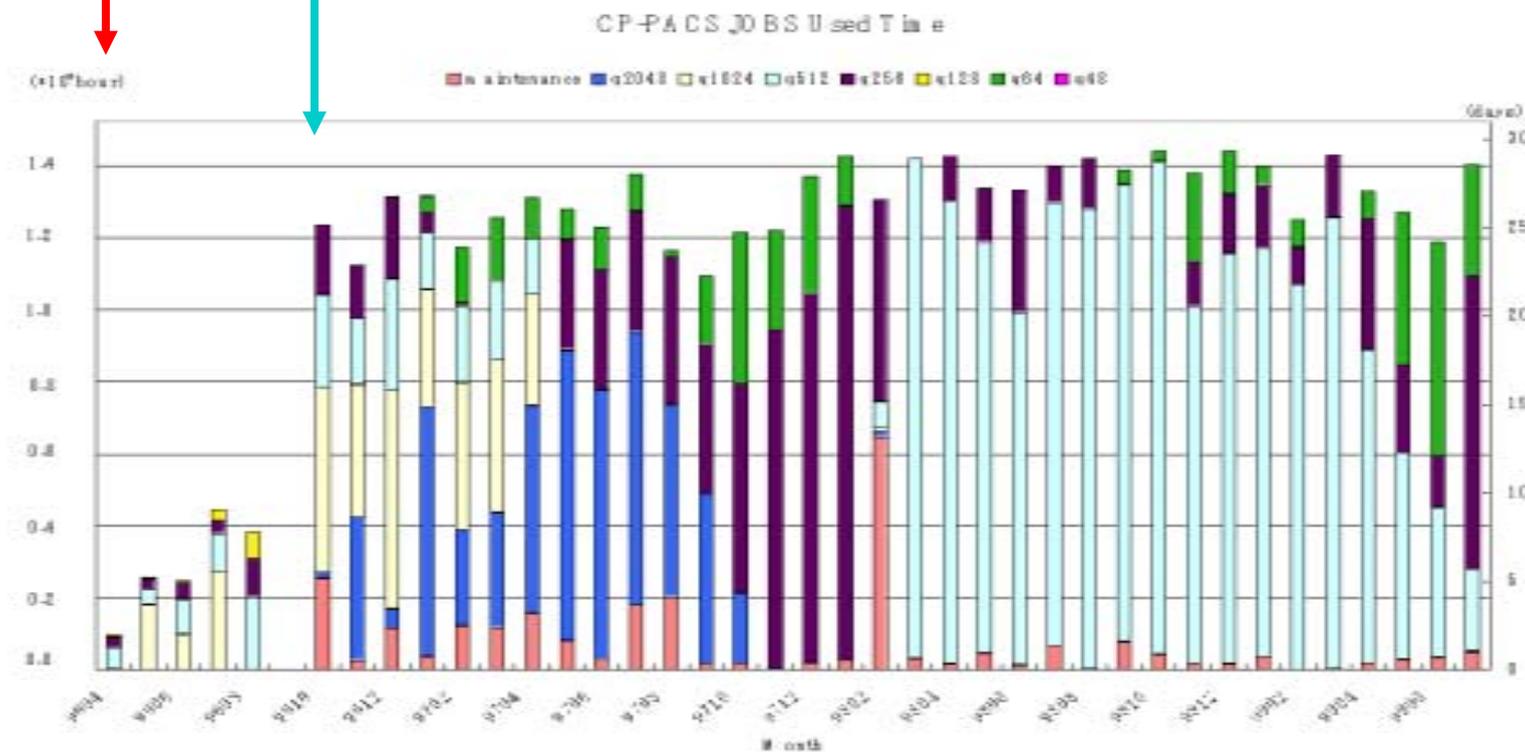
- $32^3 \times 56$ 256PU
- $40^3 \times 70$ 512PU
- $48^3 \times 84$ 1024PU
- $64^3 \times 112$ 2048PU



CP-PACSの稼働率

April 96 CP-PACS (1024PU) starts operation

October 96 CP-PACS (2048PU) starts operation



Average CPU usage over 3 years = 82%

素粒子とその相互作用の標準理論

物質粒子

- クォーク
- レプトン

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} s \\ c \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} e \\ \nu_e \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \mu \\ \nu_\mu \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \tau \\ \nu_\tau \end{pmatrix}$$

ゲージ粒子（力の媒介粒子）

- 光子 γ 電磁相互作用
- ウィークボゾン W, Z 弱い相互作用
- グルオン g 強い相互作用

Weinberg
- Salam理論

量子色力学
QCD

ハドロンの強い相互作用と量子色力学

クォークの力学の不思議

- 陽子・中性子などハドロンはクォークからなる
- 単独のクォークは発見されていない

⇒ クォークの閉じ込め

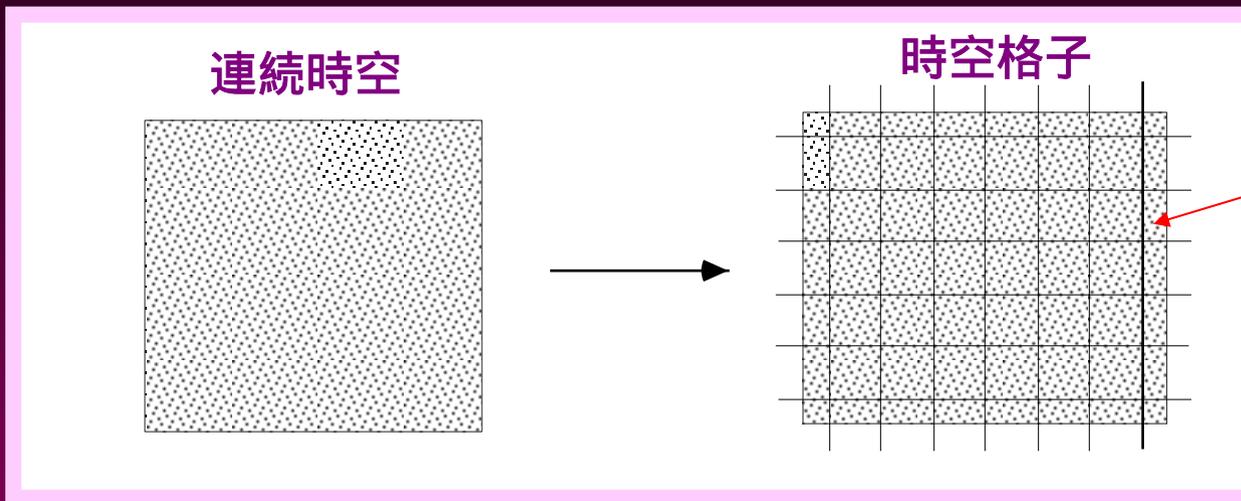
量子色力学 Quantum Chromodynamics (Q C D)

- クォーク場 色電荷 (3種類) と香り (6種類)
- グルオン場 色電荷 (8種類) を基本的自由度とする場の理論

Gross-Wilczek, Politzer (1973)

時空格子上の量子色力学

K. G. Wilson 1974



ϕ_n

格子上にクォーク場・グルオン場を定義

積分形式による記述

- 分配関数
- 物理量

$$Z = \int \prod_n d\phi_n e^{-S(\phi_n)}$$

作用

$$\langle O(\phi) \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_n d\phi_n O(\phi) e^{-S(\phi)}$$

作用を重みとする多重積分平均

格子量子色力学の方法と目標

- モンテ・カルロ法による多重積分の
数値計算

- QCDの第一原理に基づくクォークの
力学の解明

- クォークの閉じ込めの理解
- ハドロンの諸性質の導出
- 新たな予言の抽出

CP-PACSにおける格子QCDプロジェクト

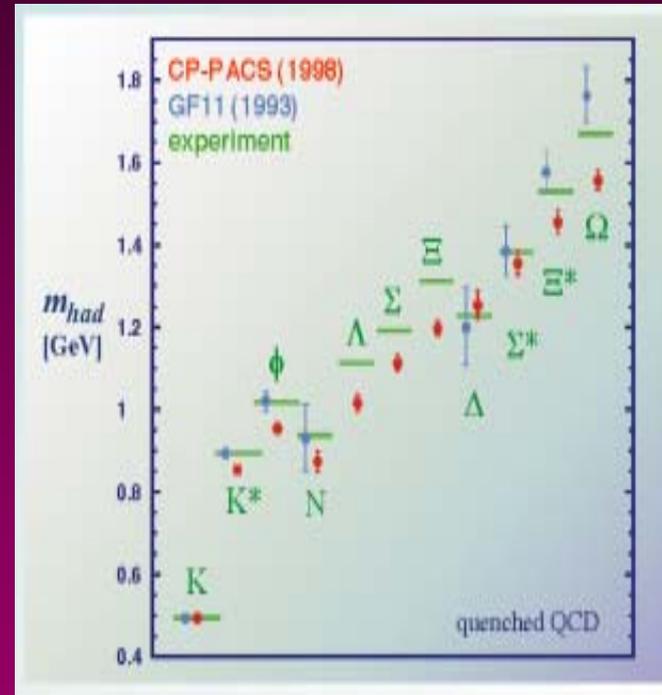
- October 1996 - October 1997
ハドロンの質量スペクトル(クエンチ近似)
- September 1997 - present
完全なQCDシミュレーション

CP-PACS Performance (ratio to peak):

50% for quenched run	$64^3 \times 112$	2048PU
34% for full QCD	$24^3 \times 48$	512PU

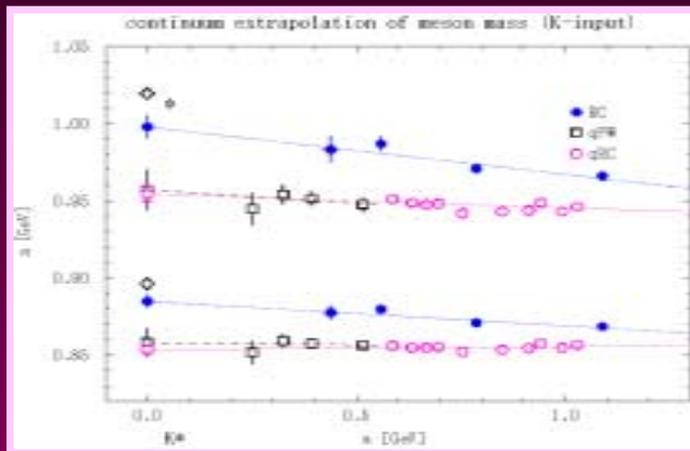
ハドロンの質量スペクトル(クエンチ近似)

- 格子QCDの基本的課題
- クエンチ近似でのスペクトルを確立(1981年以來の懸案)
- クエンチ近似の効果を定量的に解明

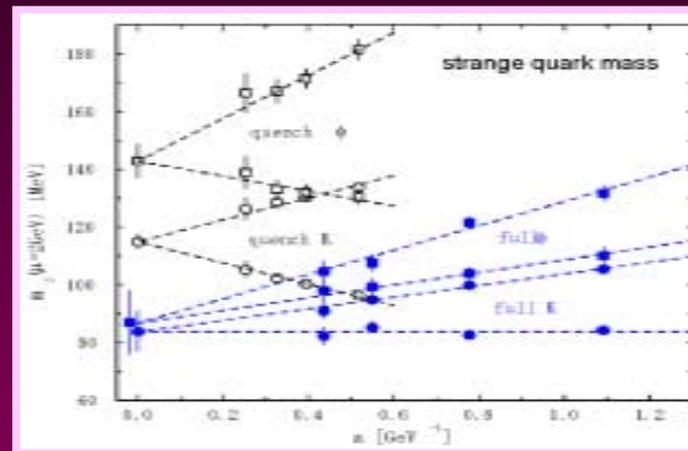


完全なQCDのシミュレーション

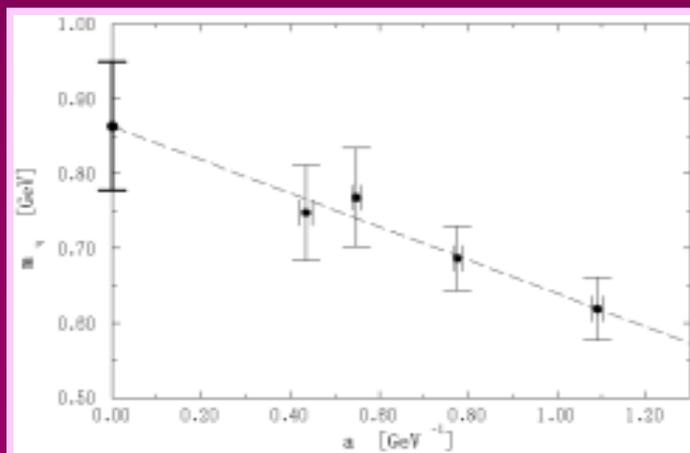
Meson hyperfine splitting



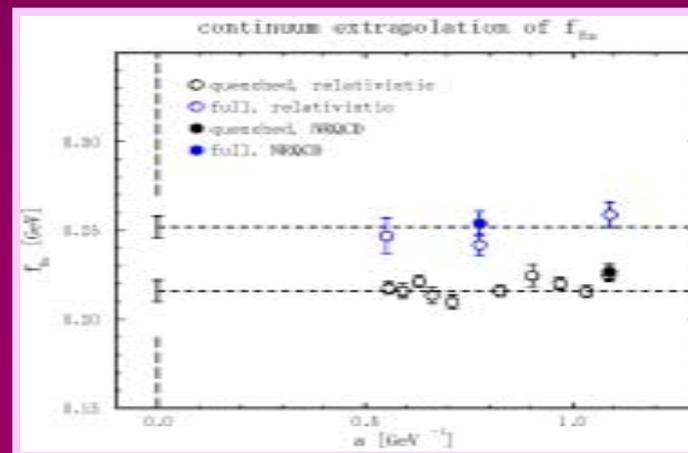
Strange quark mass



Eta meson mass

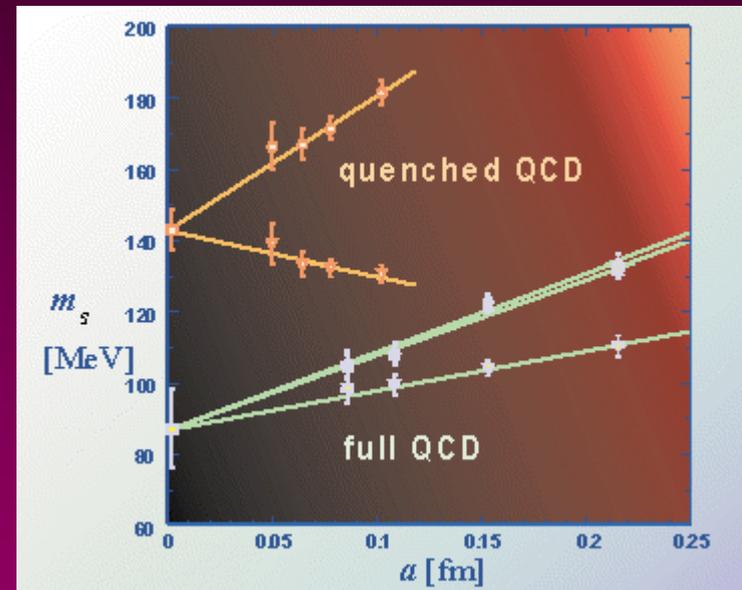


B meson decay constant



クォークの質量の決定

- クォークの質量：
自然界の重さを決める基本的なパラメータ
- クォークの閉じ込めのため
理論的にのみ決定可能
- 従来予想より遥かに軽い値
(素粒子物理学全般に大きな影響)



輻射宇宙流体力学

梅村雅之・中本泰史・須佐元
(計算物理学研究センター)

- **宇宙物理現象の決定要素**

- 重力(Newton近似)
- 物質の流体運動
- 輻射輸送

 光と物質の相互作用の忠実な取り扱い

輻射輸送方程式

- 光子分布関数に対する Boltzmann方程式

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t} + n \cdot \nabla I_\nu = \chi_\nu (S_\nu - I_\nu)$$

- 6次元問題

$3D(\text{space}) + 2D(\text{directions}) + 1D(\text{frequency})$

$$N^3 = 128^3 \quad N_\theta = N_\phi = 128 \quad N_\nu = 6$$

$$\# \text{ flop} = f \cdot N_{\text{iter}} \cdot N^3 N_\theta N_\phi = 1.14 \text{Tflops} \cdot \text{hour} (f \approx 200, N_{\text{iter}} \approx 100)$$

- 並列化

Sequential Wave Front Method

high parallelization efficiency ($\geq 98\%$ for $N_{\theta,\phi} = 128$ on 2048PU)

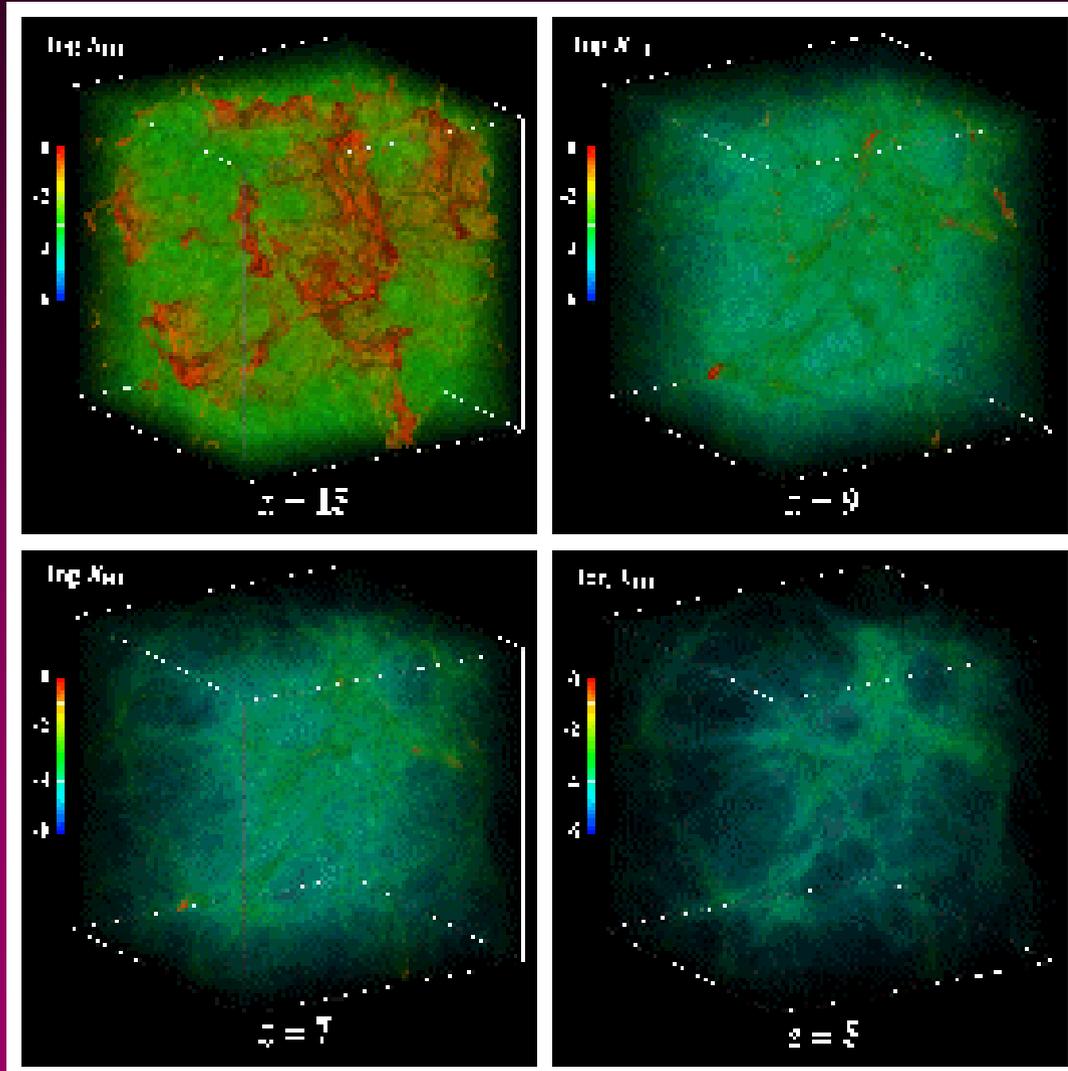
- 実効効率: 25% of peak on CP-PACS

宇宙の再イオン化のシミュレーション

水素原子の再イオン化
のスナップショット：
Big Bangの約10億年後
から5億年後まで

$Z = 15$ 5
過去 現在

赤 青
イオン化度増加



超高压化の固体水素の相図

● 物性物理としての興味

- 陽子と電子からなる最も簡単な固体
- 高压化での金属化
- 陽子の量子効果

● 宇宙物理・惑星物理としての興味

- 高温高压化での金属化 木星の地磁気？

● 実験

- 高温：140GPa,3000Kで金属化
- 低温：340GPa以下で金属化なし
 - 100GPa以上の結晶構造未知

常行信司・荻津格他
(東大物性研究所)

CP-PACSの共同利用

CP PACS全マシン
換算で約200時間

第一原理経路積分分子動力学法

Marx-Parrinello (1994)

- N体の量子問題

→ NP体の古典問題

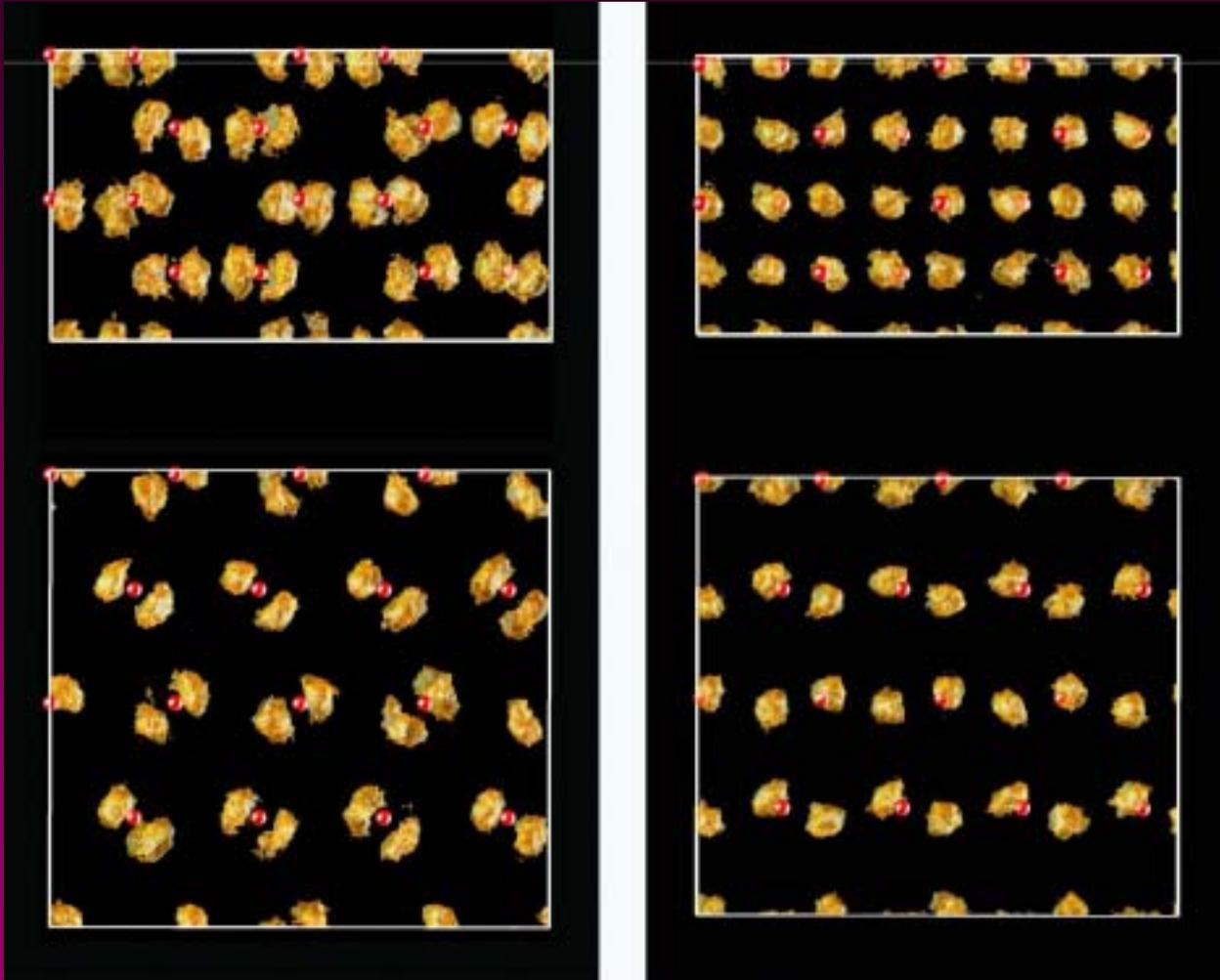
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta_i + V_{DFT}(\{r_i\})$$

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \text{Tr}(e^{-\beta H/P})^P = \int dr^1 \dots dr^P e^{-\beta V_{\text{eff}}(\{r_i\}^s)}$$

- 計算規模

- $N = 64$ hydrogen / supercell
- $P = 32 - 64$
- 1500 – 2100 MD steps ($\Delta t = 0.1 - 0.15$ fs)
- 10 CG steps for 1 MD step
- 1 MD step / (1 Tflops · min)

超高压化の固体水素の陽子分布



Phase II (T=80K, P=130GPa)

Phase III (T=100K, P=180GPa)

次世代の計算物理学

今後の計算物理学の重要テーマと計算量の検討

- 素粒子物理学 格子QCDの完全な解決
- 原子核物理学 現実的核力に基づく核構造
- 宇宙物理学 輻射流体力学による時間発展
- 物性物理学 硬い物質から柔らかい物質へ

格子QCDシミュレーション: 評価方法

仮定:

- RG -gauge + clover quark for 2 dynamical flavors
- HMC algorithm
- BiCGStab solver

FLOP 解析:

$$FLOP = (A + B \cdot N_{inv}) \frac{V}{\Delta\tau} \times 10^{-12} \text{ TFLOPS} \cdot \text{sec/trajectory}$$

CP-PACS experience

- $A = 45600$, $B=8800$
- $N_{inv} = 31 + 10.7/mq$
- $Dt = (0.223mq - 0.620mq^2) \times 24/L$ (mq in GeV)

通信についても同様な解析

格子QCDシミュレーション: 評価結果

物理系

目標

現状

- | | | |
|----------|---------------------------|--------------|
| • 物理サイズ | 3 fm | 2.5fm |
| • クォーク質量 | 15 MeV ($\pi/\rho=0.4$) | 44 MeV (0.6) |
| • 統計 | 25000 | 2000 |

理論的枠組み

従来からの方法

ドメインウォール法

- | | | |
|----------|------------------|----------------------------|
| • 格子間隔 | 3 GeV | 2 GeV |
| • 格子サイズ | $48^3 \times 96$ | $32^3 \times 64 \times 10$ |
| • CPU 時間 | 409 days | 343 days |
| • 通信比率 | 25% | 20% |

仮定マシンパラメータ:

- 32Gflops/PU , $16^3 = 4096$ PU
- 131 Tflops total **演算性能**
- 16GByte/sec/channel **通信性能**

物性物理: 生体反応の電子論的理解

- TCA サイクルと酸化リン酸化
- カルビンサイクル(光合成サイクル)
- 視物質(ロドプシンなど)の光反応
- ヘモグロビンの酸素運搬機能

⋮

- 未開拓の分野/多くの困難とチャレンジ
 - 大きな分子量
 - 水分子の影響
 - 小さなエネルギー差
 - 遅い反応速度

生体反応の電子論的理解: 計算時間評価

- 平面波基底を用いた第一原理分子動力学法

- $FFT \propto N^2 \log N$
- $pseudo\ potential\ calculation \propto N^2$
- $Gram - Schmidt\ diagonalization \propto N^3$

- 原子数 $N=5000$ に対するCPU時間評価

1000 sec/1 MD step \longrightarrow 1 ps/100days

仮定

- 16Gflops*5000PU=80Tflops
- 32GB/PU
- 4-8GB/sec network throughput (通信比率25%)

次世代の計算物理学の計算量

	field	problem	algorithm	effective speed (TFLOPS)	size	CPU hours	main memory
1	particle physics	lattice QCD	HMC method	131	$48^3 \times 96$	409 days	176GB
2	nuclear physics	nuclear properties from realistic nuclear potential	quantum MC method	100	Carbon with $A=12$	14 days	150GB
3	astrophysics	radiation hydrodynamics	SWT method	131	$128^5 \times 6$	9.2 hours	114GB
4	material science	determination of material properties	density functional method	100	2000 atoms	127 days	115GB
5	biophysics	electronic calculation of biochemical reactions	ab initio MD path integral	80	5000 atoms	100 days	32GB/PU
6	biophysics	protein folding	MD	100	200 amino acids	1300 days	50GB

$O(100Tflops)$ needed

技術的可能性

SIA roadmap on semiconductor technology

Year	1999	2001	2003	2006	2009	2012
rule (um)	0.18	0.15	0.13	0.10	0.07	0.05
clock(MHz)	1250	1500	2100	3500	6000	10000
tr. in MPU	21M	40M	76M	200M	520M	1.4B
power(W)	90	110	130	160	170	175

- 2GHz clock / 4 pipelines of add&mult = 16Gflops around 2003
- 8192 CPU's = 131 Tflops

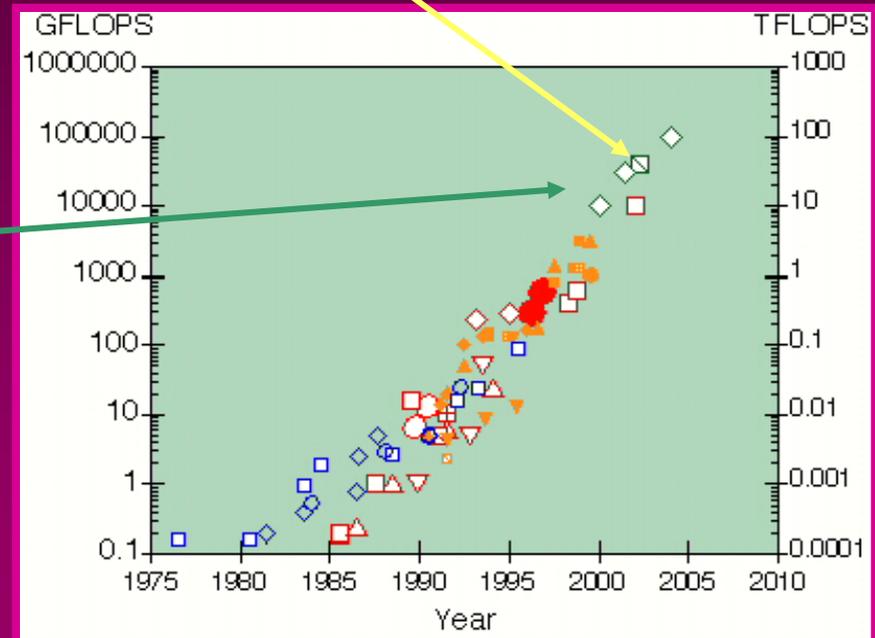
進行中の大規模プロジェクト

- Earth Simulator Project (2002)

- 8Gflops vector CPU x 8
- = 64 Gflops / node
- 64 Gflops x 640 nodes
= 40Tflops

- ASCI Project

- 10 Tflops (2000) by IBM
- 30 Tflops (2002)
- 100 Tflops (2004)

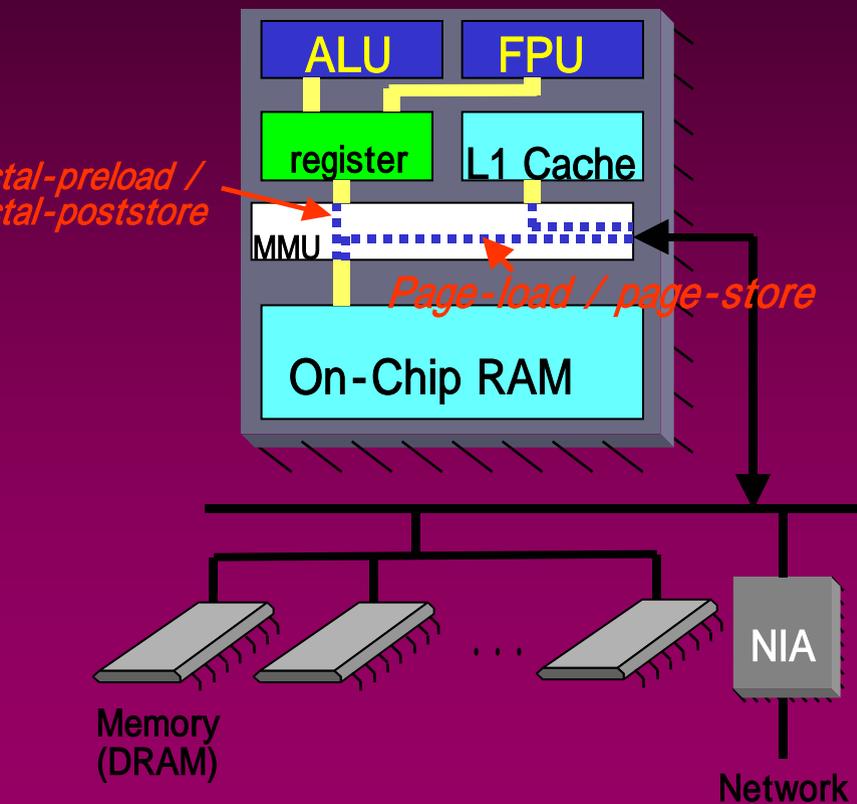


計算物理学研究センターでの基礎研究

学振未来開拓事業「計算科学」 “次世代超並列計算機開発” (平成9年度 13年度)

- メモリ CPU間のデータ転送バンド幅の問題
に対する SCIMA アーキテクチャの研究
- CPU演算性能とネットワーク性能のバランス
の検討
- 高速且つ柔軟な並列入出力・可視化システ
ムの構築

SCIMA concept



- FPU's will be running much faster than data can be fed from off-chip memory
- use *SRAM memory on-chip* to secure the bandwidth (data repeatedly used are kept on-chip in a controlled way)

結語

- 計算物理学の夢:

“計算機を紙と鉛筆の替わりに使って、
自然を掌に載せてみたい”

- 20世紀の発展:

“このような夢がありうることの認識”

- 21世紀:

“夢の実現と自然科学全体への展開”

硬い物質から柔らかい物質へ