

超並列スーパーコンピュータで探る 素粒子の世界

- ・ 素粒子の世界
- ・ 素粒子と計算機
- ・ CP PACSによる格子QCD計算
- ・ 将来への展望

宇川 彰

筑波大学物理学系

計算物理学研究センター

・素粒子の世界

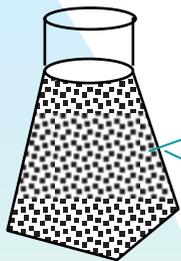
そりゅうし【素粒子】(elementary particle) :
物質または場を構成する究極の単位物質。陽子・中性子・電子・陽電子・中性微子・光子などがあり、それぞれ質量・スピン・荷電等によって特徴付けられる。素粒子の間には相互作用が働き、その結果相互転化が行われる。

広辞苑第二版補訂版（昭和44年）

- 理論的研究 : 紙と鉛筆
- 計算物理的研究 : スーパーコンピュータ
- 実験的研究 : 素粒子加速器

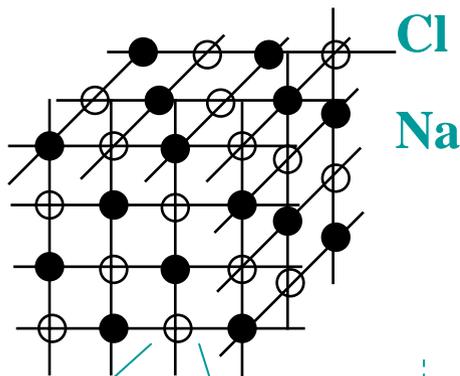
物質の構成要素の階層構造と大きさの尺度

日常の物質 1 cm



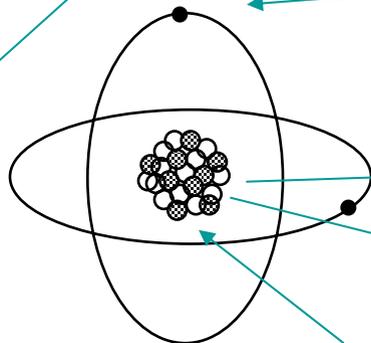
食卓塩

結晶



原子 (約100種類)

10^{-8} cm



原子核 (数百種類)

10^{-12} cm

素粒子の世界

電子

? cm

クォーク
(現在 6種類)

? cm



陽子・中性子など (数百種類)

10^{-13} cm

素粒子の種類

- ハドロン (数百種類)

陽子、中性子

- バリオン

$p, n, \Sigma, \Xi, \Lambda, \Delta, \Sigma^*, \Xi^*, \Omega, \dots$

- メソン

$\pi, K, \eta, \eta', \rho, \omega, \phi, K^*, f, \dots$

- レプトン (6 種類)

e

$\mu \quad \tau$

電子

パイ中間子

$\nu_e \quad \nu_\mu \quad \nu_\tau$

- ゲージボゾン (3種類)

- 光子

- ウィークボゾン

- グルオン

素粒子を特徴付ける性質

•質量	重さ	多様な値	$10^{-27} g - 10^{-22} g$
•電荷	電氣的性質	$e = 1.6 \times 10^{-19} C$	の整数倍
•スピン角運動量	回転の度合い	$\hbar/2$	の整数倍
•内部量子数	クォークの色・香りなど		

素粒子の世界を支配する物理定数

•光速	$c = 299,792,458 m/sec$	相対性理論
•プランク定数	$\hbar = 1.054,572,766(63) \times 10^{-34} J \cdot sec$	量子力学

質量とエネルギー

Einsteinの関係式 $E = mc^2$

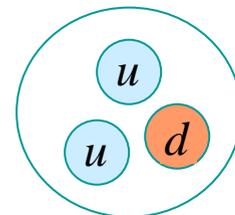
$$1.7826 \times 10^{-24} g \Leftrightarrow 1 GeV = 10^9 eV$$

ハドロンのクォーク模型

『ハドロンはより基本的なクォークからできている』

・バリオン

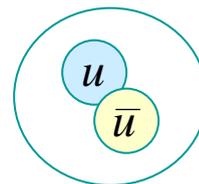
3個のクォーク



陽子

・メソン

クォークと反クォーク



パイ中間子

クォークの種類

u
up

c
charm

t
top

$$Q = +2e/3$$

d
down

s
strange

b
bottom

$$Q = -e/3$$

→ 質量大

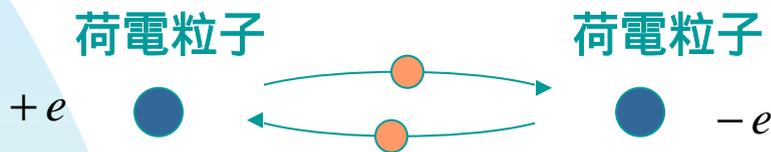
$$m_{u,d} \approx 5\text{MeV}$$

$$m_{top} \approx 174\text{GeV}$$

素粒子の相互作用

『素粒子の間に働く力は特別な素粒子の交換による』

湯川秀樹(1935)



光子の交換 → 電磁気的な力（電磁相互作用）

	媒介粒子	力を受ける粒子
■ 電磁相互作用	光子	荷電粒子
■ 弱い相互作用	ウィークボゾン	クォーク・レプトン
■ 強い相互作用	グルオン	クォーク
■ 重力相互作用	グラビトン	全ての粒子

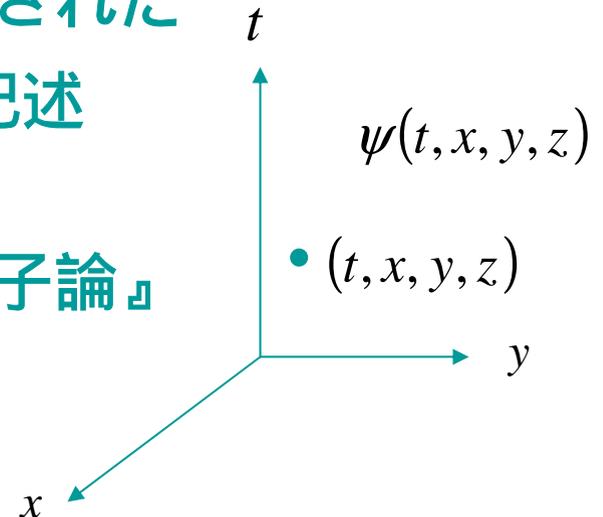
素粒子とその相互作用の数学的記述

二つの基本原理

- 量子力学 粒子は波の性質を持つ
- 相対性理論 時間と空間の同等性

→ 4次元の時間・空間の各点に定義された
「場」 $\psi(t, x, y, z)$ による素粒子の記述

『相対論的場の量子論』



素粒子とその相互作用の標準理論

物質粒子

■ クォーク

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

■ レプトン

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

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

・素粒子と計算機

- ハドロンの強い相互作用と量子色力学
- 計算物理学としての格子量子色力学
- 専用並列計算機の系譜

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

- 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

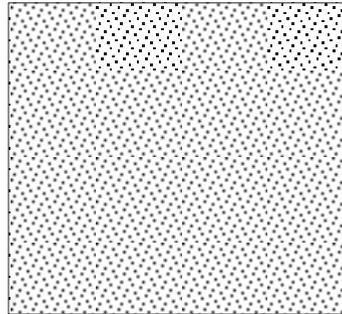
量子色力学 Quantum Chromodynamics (Q C D)

- 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) 自由度とする場の理論

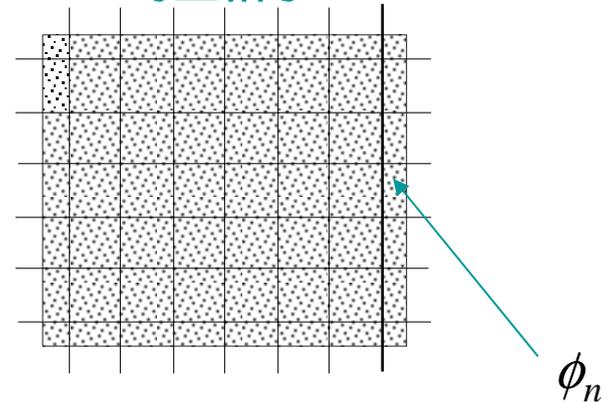
Gross-Wilczek, Politzer (1973)

時空格子上の量子色力学

連続時空



時空格子



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

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

作用

- 物理量

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

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

計算物理学としての特徴

- 大次元の複素数配列が基本変数 L^4 格子での自由度数

クォーク場 q_n L^4 個の12次元複素ベクトル $12 \cdot L^4$

グルオン場 $U_{n\mu}$ $4 \cdot L^4$ 個の3x3複素行列 $36 \cdot L^4$

$64^3 \times 112$ 格子 (現在までの世界最大サイズ: CP-PACS)

クォーク 5.25GB グルオン場 15.75GB

補助変数を含めると 約100GB

- モンテ・カルロ計算

計算精度は独立サンプル数Nの $\propto \frac{1}{\sqrt{N}}$

$64^3 \times 112$ 格子での計算

CP-PACS (614GFLOPS) で約3ヶ月 (サンプル数150)

■ グルオン場の基本演算

隣接する3個の3x3複素行列の積の格子全体にわたる繰り返し

$$\begin{array}{c}
 U_2 \\
 \square \\
 U_3 \quad U_1
 \end{array}
 \quad (U_1, U_2, U_3) \rightarrow U_1 \cdot U_2 \cdot U_3$$

■ クォーク場の基本演算

グルオン場を係数に含む大次元連立方程式の解

$$\sum_{m \in L^4} D(U)_{n,m} x_m = b_n \rightarrow x = D(U)^{-1} b$$

行列 $D(U)$ の特徴

- 隣接格子点のみの疎行列

- 条件数 $1 / (\text{クォークの質量})$



$$p_n \rightarrow D(U)_{n,m} p_m$$

格子量子色力学の計算

- 大次元配列の複素線型計算
 - ⇒ ベクトル化による高速化
- 各点での計算には隣接格子点のみが関係
 - ⇒ 並列化による高速化
- 高統計が必要
 - ⇒ 可能な限り強力な計算機

格子量子色力学計算の2つのカテゴリー

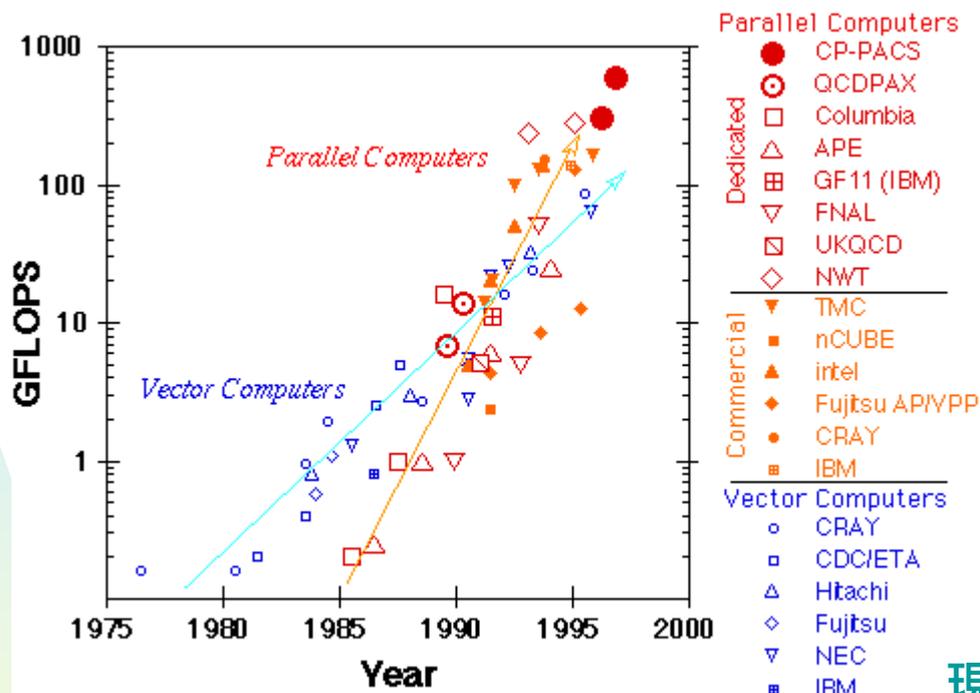
- クエンチ近似
 - クォークの対生成・消滅効果を無視
- full QCD
 - 近似なし計算
 - クエンチ近似に較べ、1000倍以上の計算量

格子量子色力学研究の推移と計算機の発達

私の使った計算機

1980
格子QCDシ
ミュレーションの開始

VAX 1 MFLOPS?



1985
full QCD アルゴ
リズムの開発

第二世代ベクトル計算機
S810/10(KEK)
CRAY-XMP (CERN)

100MFLOPS

1990

精密計算の実現
第三世代ベクトル計算機
S820/20(KEK)
第二世代専用並列計算機
QCDPAX(U. Tsukuba)

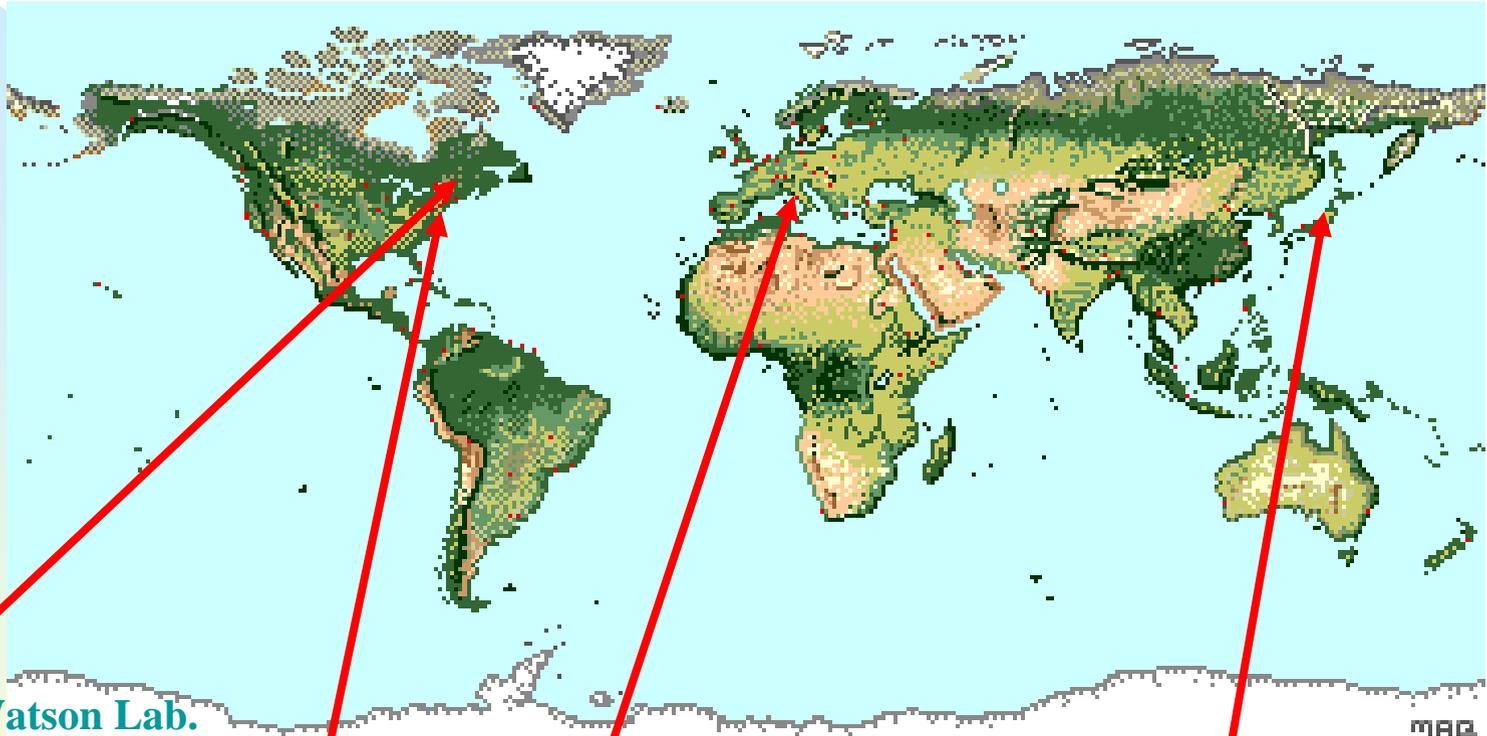
1 5 GFLOPS

1996
現実的 full
QCDへの動き

ベクトル並列計算機
VPP-500/80(KEK)
第三世代専用並列計算機
CP-PACS(U. Tsukuba)

50 300 GFLOPS

QCD専用並列計算機の系譜



IBM Watson Lab.
1993 11GF GF11

Columbia U.
1982 0.1GF
1984 0.3GF
1988 16GF
1998 0.4TF QCDSP

Rome U.
1984 1GF APE
1988 25GF APEcento
1999 ? 1TF ? APEmille

Tsukuba U.
1991 14GF QCDPAX
1996 0.6TF CP-PACS

. CP-PACSによる格子QCD計算

- 格子QCD計算機としての CP-PACS
- CP-PACSの最近の成果

CP-PACS諸元

- 理論ピーク性能 614GFLOPS
- 主記憶容量 128GB
- PU台数 2048PU+128IOU
- ノードプロセッサ 300MFLOPS/64MB RISC
- ネットワーク 8x17x16 ハイパークロスバー
(300MB/sec ピーク)
- 分散磁気ディスク 1057GB
- 外部入出力 HIPPI+ETHER
- サイズ 7m(D)x4.2m(W)x2m(H)
- 消費電力 275kW max



QCD計算機としてのCP-PACS

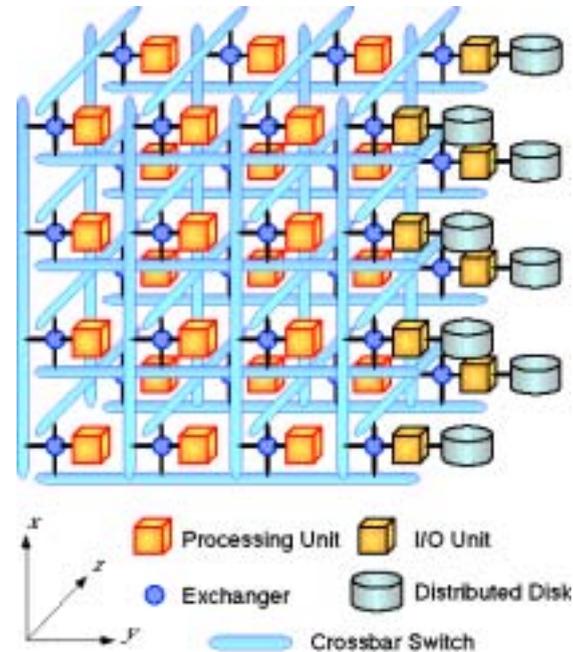
- 複素ベクトル演算
- PU間高速データ転送
- 大量の中間結果
- 様々な格子サイズ

PVP-SW機構

RDMA機構

分散磁気ディスク

PU群分割機能



QCD計算における実効性能：

クォーク連立一次方程式の解

- 計算のコア：行列とベクトルの積 $p_n \rightarrow D(U)_{n,m} p_m$

Load	store	mult	add	ideal #MC
78	12	92	52	98

•机上ピーク性能 $\frac{144FLOP}{98MC} \times 150MHz = 220MFLOPS$ (73%)

•アセンブラーコード $186MFLOPS$ (62%)

- 通信のコア：ベクトルの袖を隣に送る

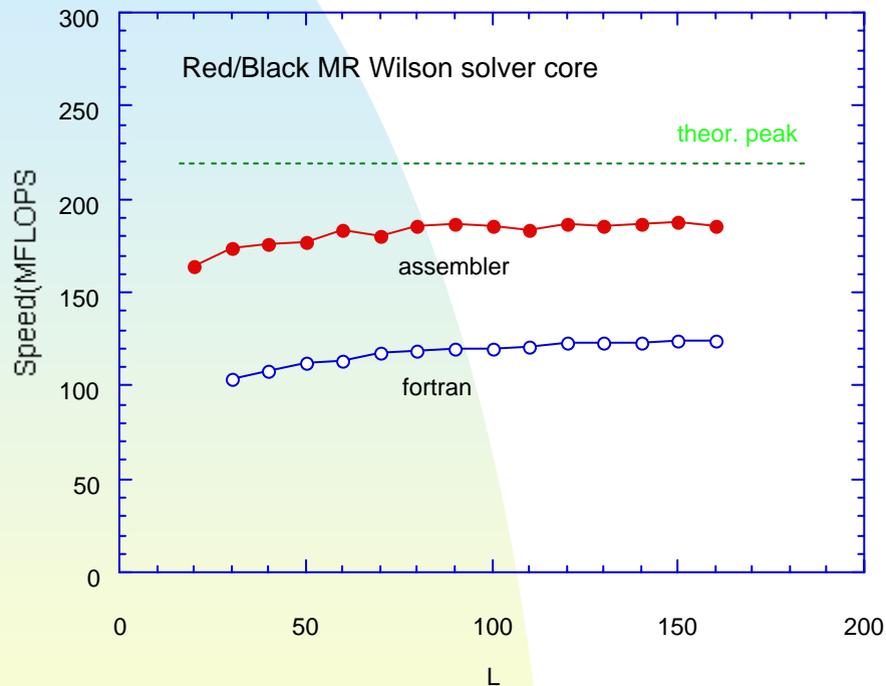


•RDMA通信 $225MB/sec$ (75% of peak)

QCD計算における実効性能

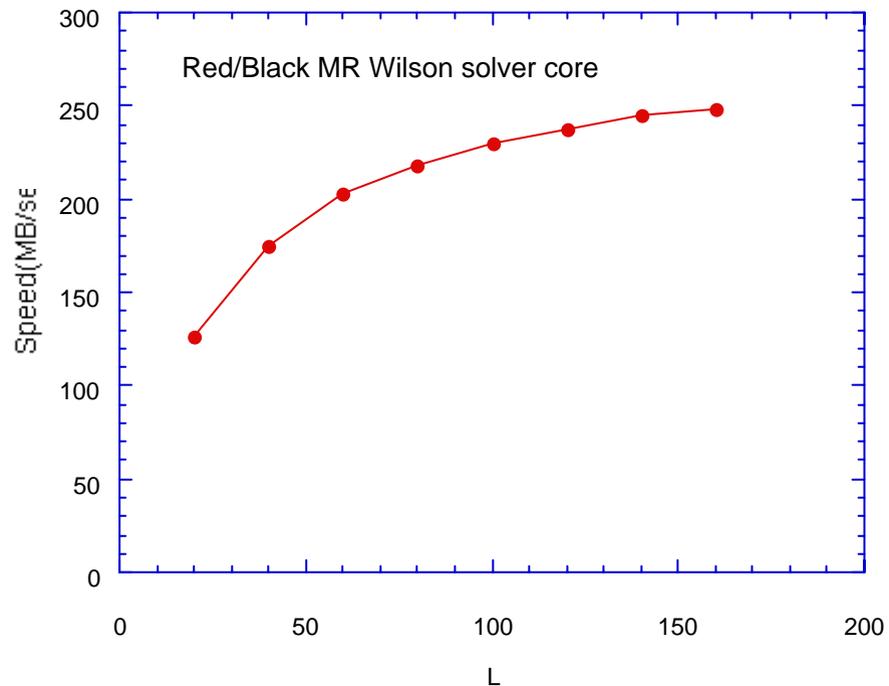
単体PU演算性能

MFLOPS



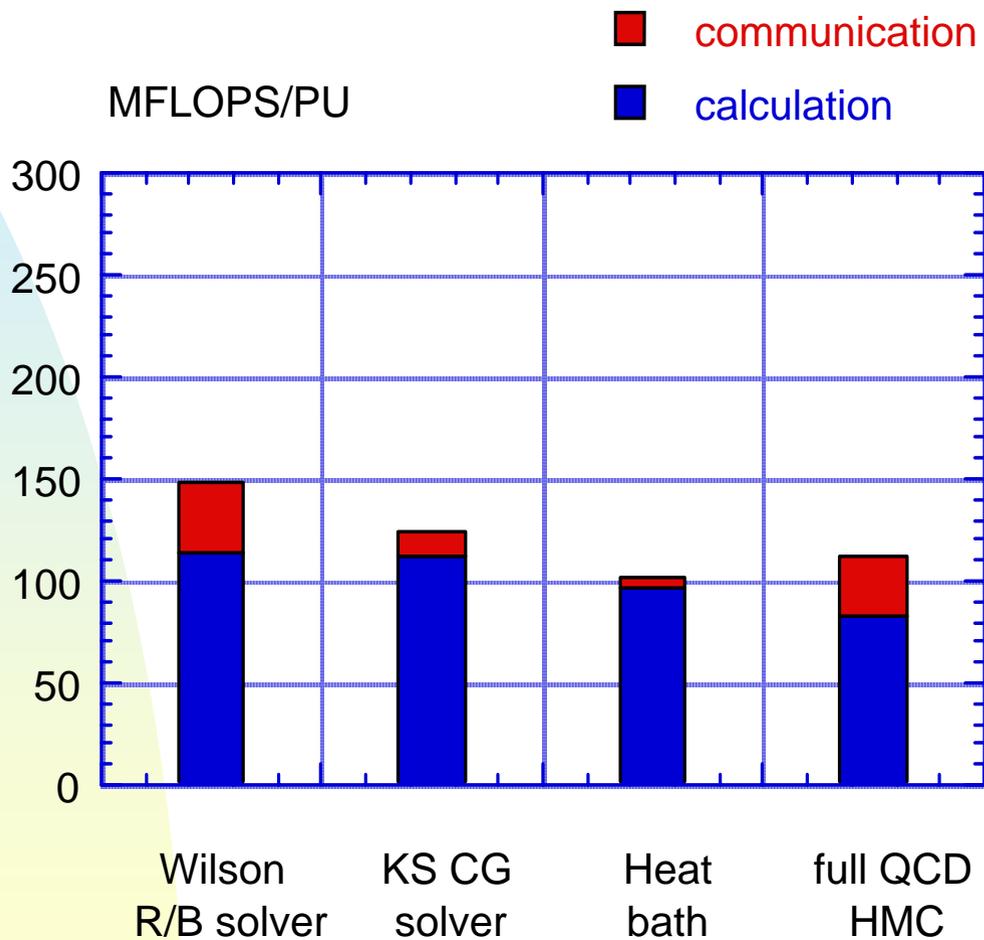
RDMA通信性能

MB/sec



L : ベクトル長

格子QCD基本プログラム実効性能



クエンチ近似でのハドロンの質量スペクトル

- ハドロンを特徴付ける最も基本的な量
- QCDの基本的検証
- 格子QCD計算の基礎
- クエンチ近似の効果の確認

⇒ 1981年（最初のシミュレーション）以来の
格子QCDの基本的課題

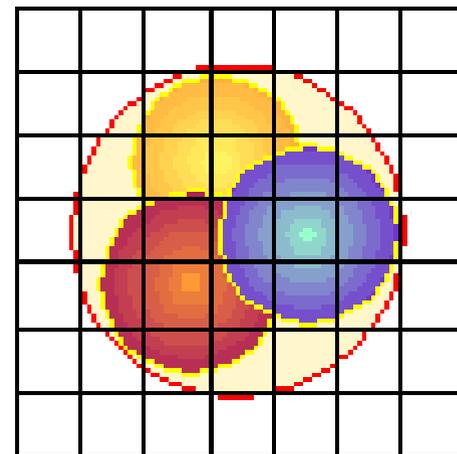
困難の諸因

- 軽いクォークでの統計誤差の急激な増大
- 十分な大きさの格子サイズの確保
- 格子間隔ゼロ（連続理論）への外挿の制御

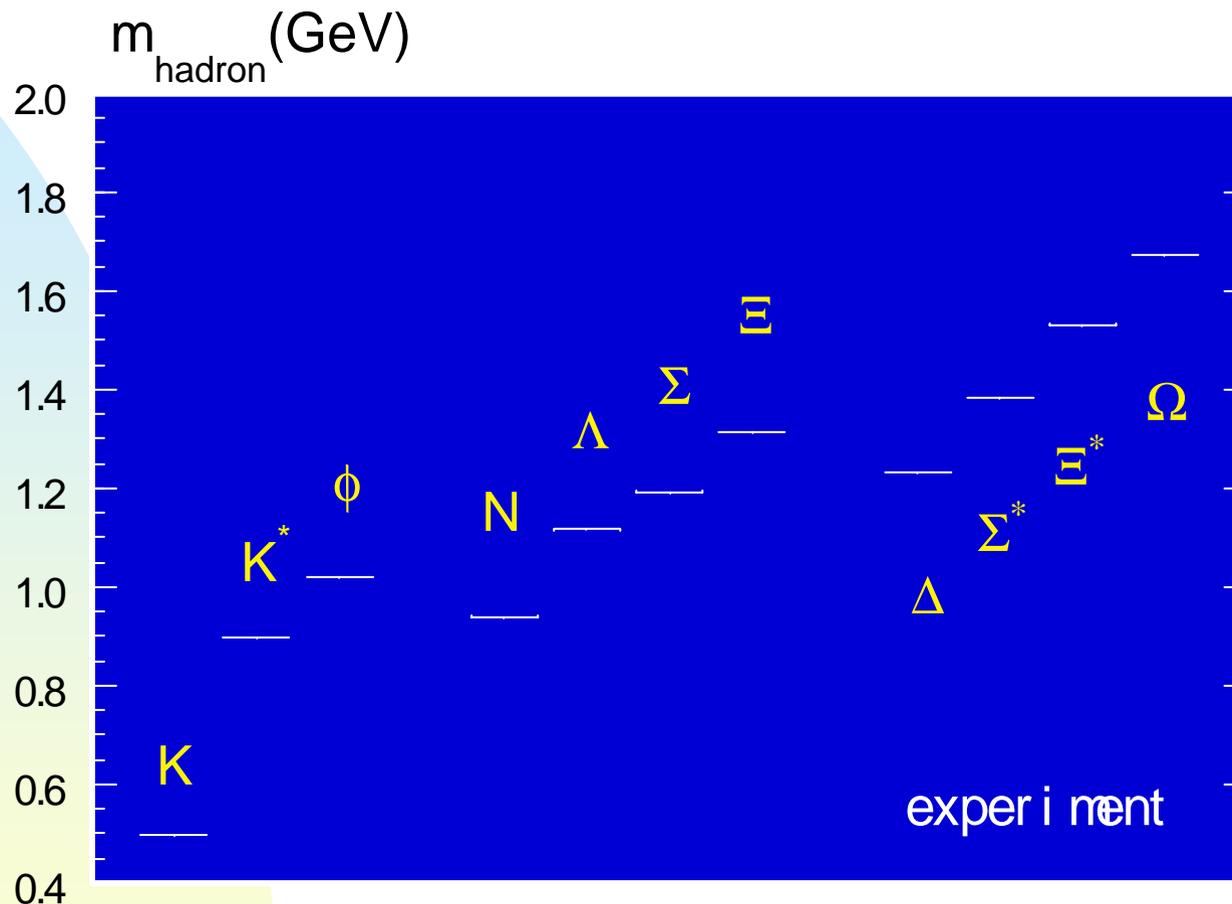
『十分な計算力の必要性』



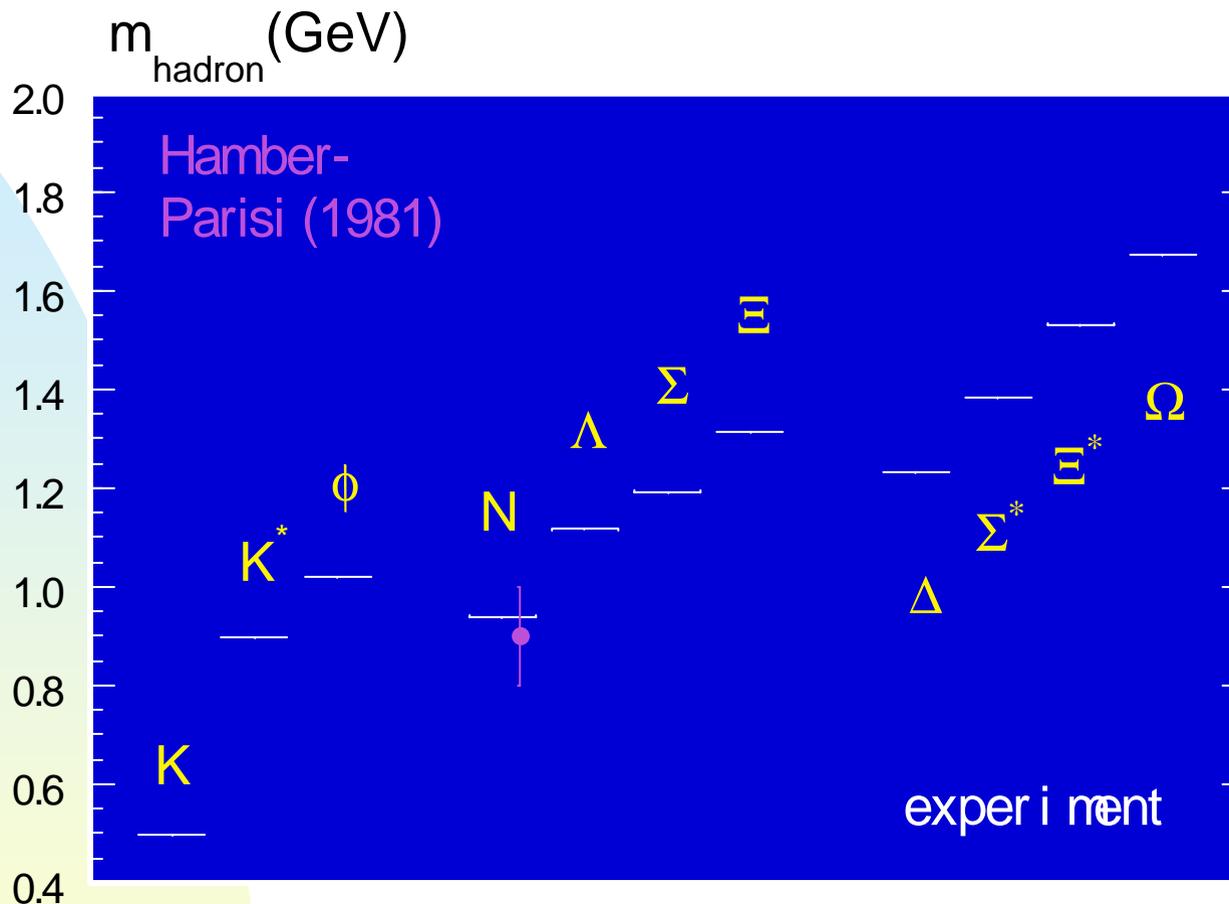
CP-PACSによる正面攻撃



ハドロンの質量の実験値

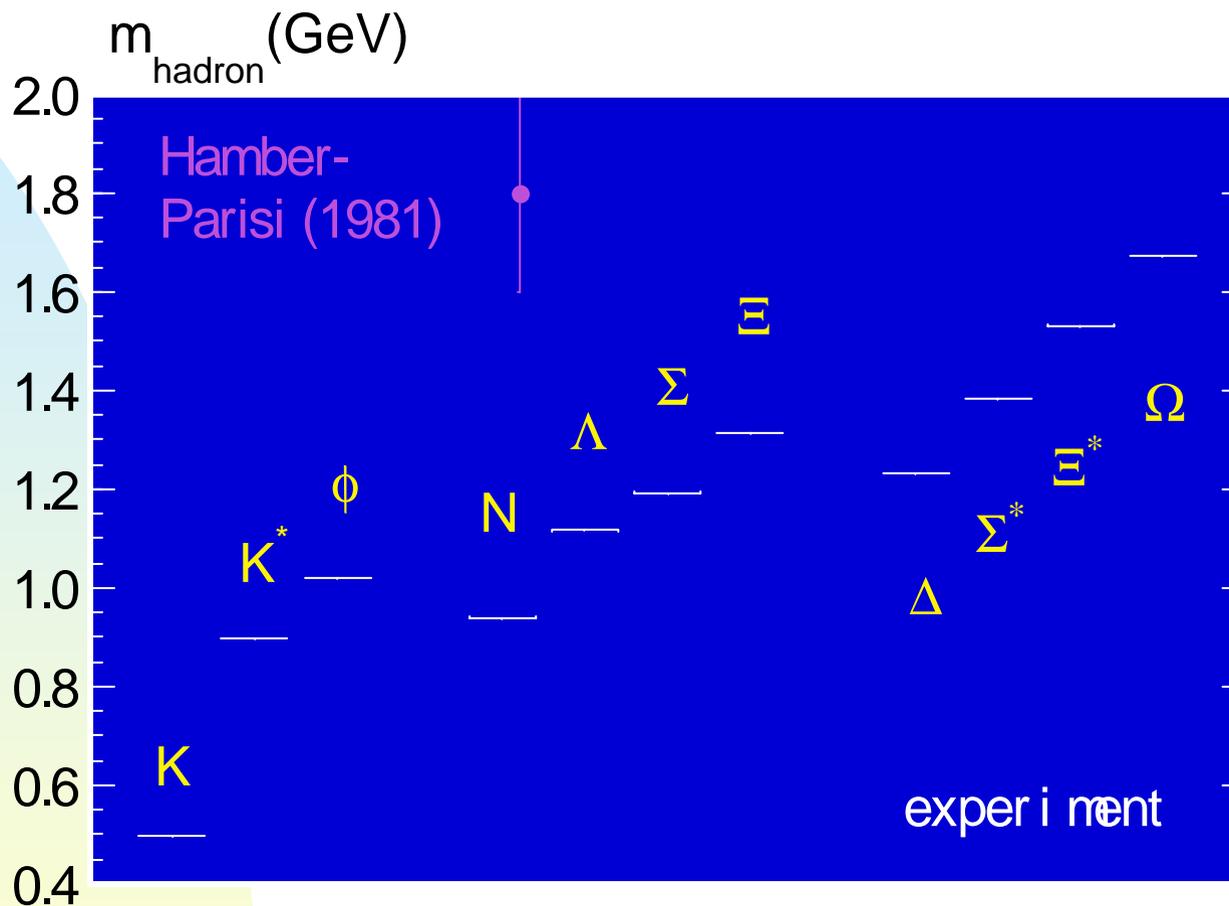


最初の計算 (1981)



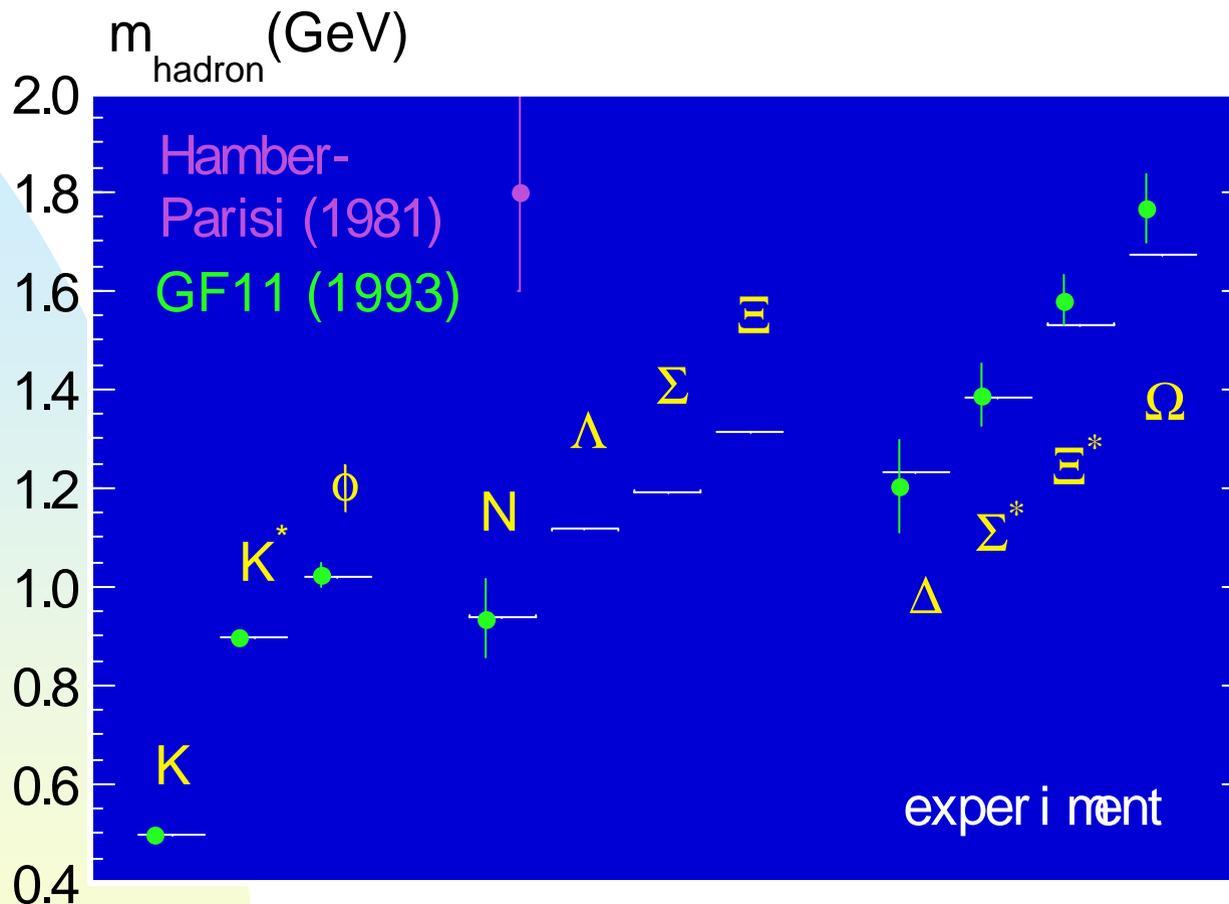
良く合っているように見えたが...

最初の計算



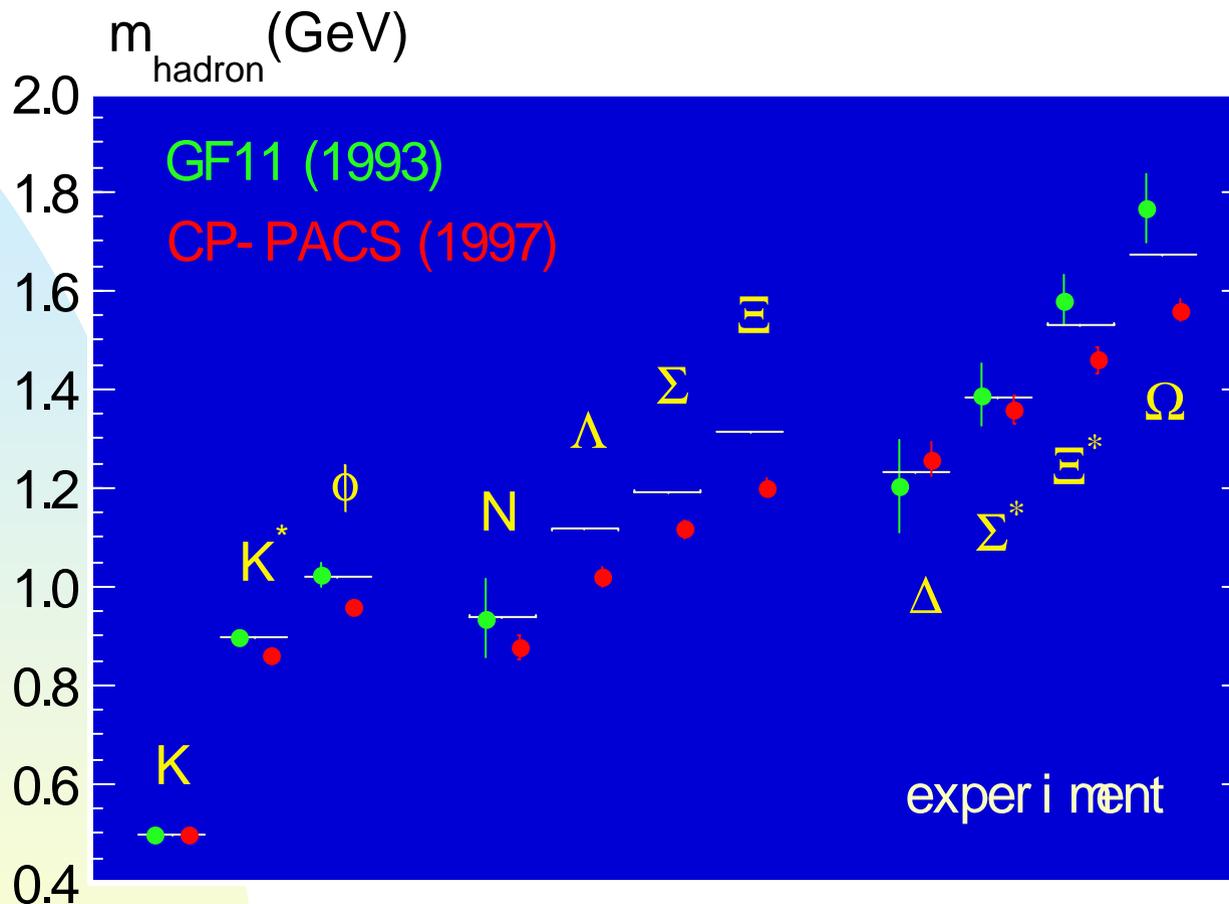
質量の単位の見積もりを2倍誤っていた...

GF11の計算 (1993)



10%の精度で実験値を再現

CP-PACSの計算 (1997)



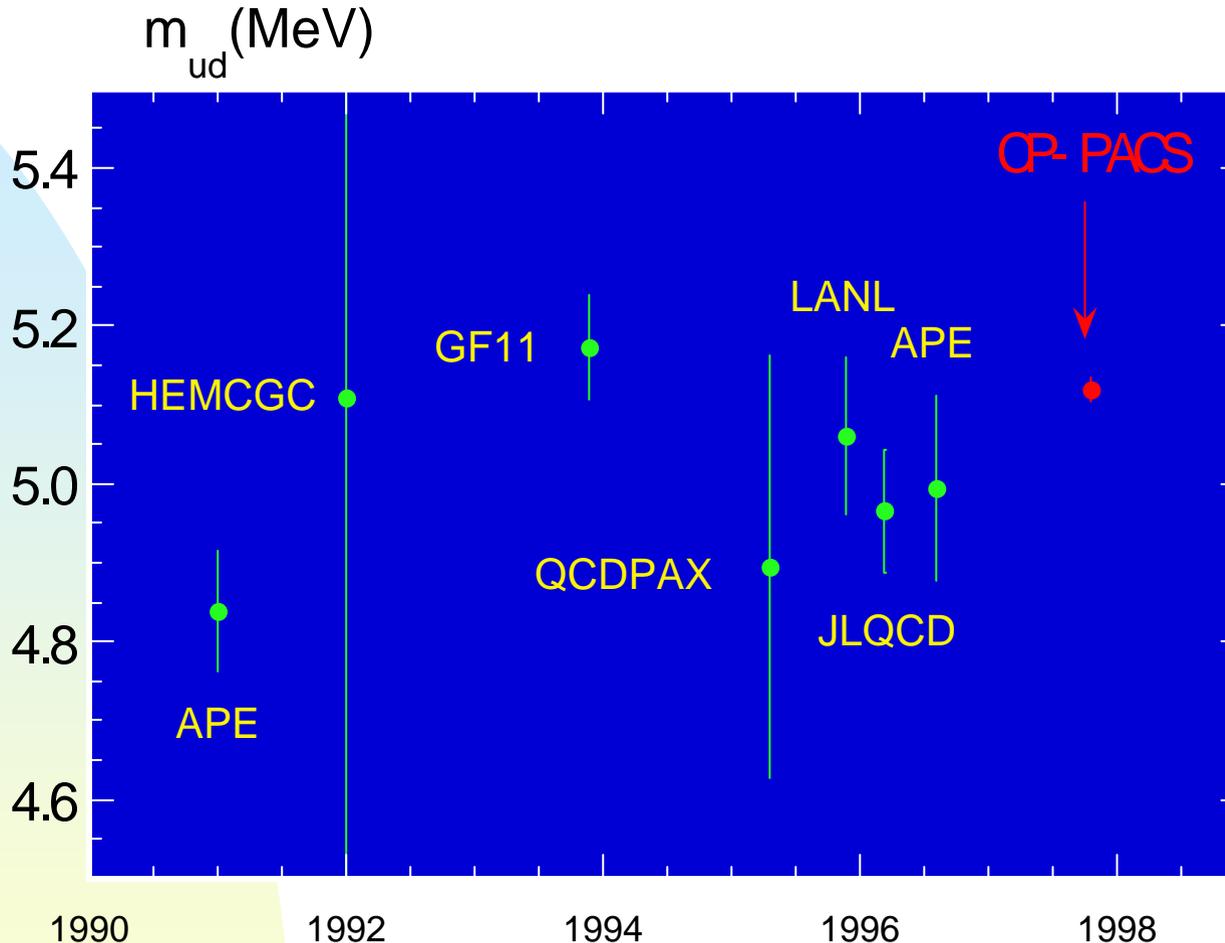
- クエンチ効果の存在を確認
- 1981年以来の懸案の解決

CP-PACS 計算の規模

β	5.9	6.1	6.25	6.47
<i>size</i>	$32^3 \times 56$	$40^3 \times 70$	$48^3 \times 84$	$64^3 \times 112$
<i>a(fm)</i>	0.101	0.076	0.064	0.047
<i>La</i>	3.23	3.06	3.05	3.01
<i>#conf.</i>	800	600	400	150
<i>#PU</i>	256	512	1024	2048
<i>hour / conf</i>	3.0	4.8	6.8	15
<i>I / O loss</i>	17%	16%	19%	18%

•全CPU時間 4630時間 (2048PU換算)

クォークの質量



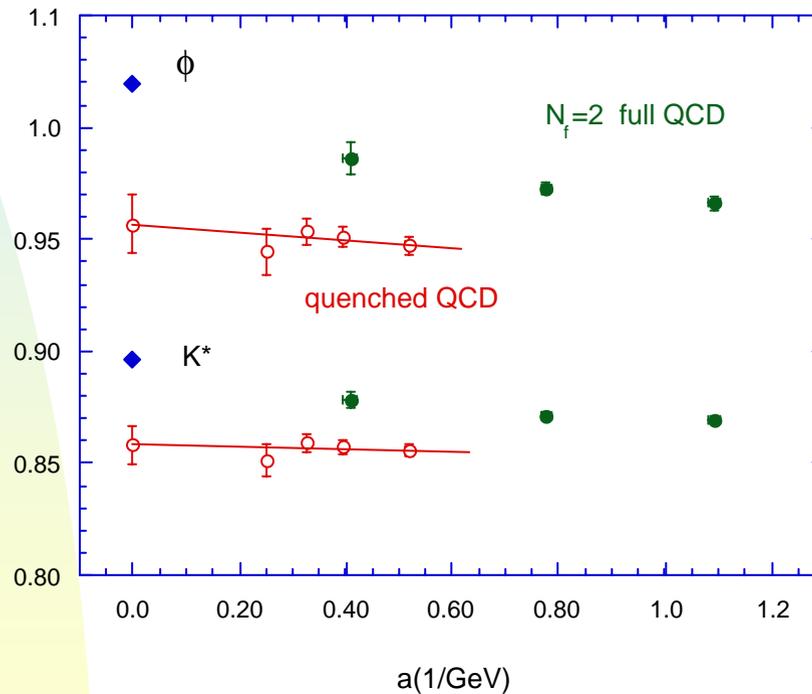
- 素粒子標準理論全体に取り重要な基本パラメータ
- 実験的に測定不可能（クォークの閉じ込め）

Full QCD 計算

- 最も軽いクォーク (up, down) の効果を取り入れた計算
- 真に現実的なQCDシミュレーションへの第一歩

Full QCD計算の中間子質量差への影響

- より実験結果に近い値を示唆



・ 将来への展望

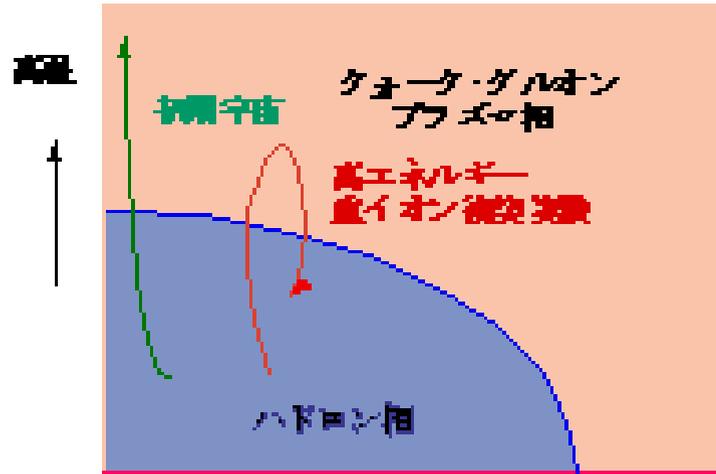
- 格子QCD研究の展開
- ペタフロップスコンピューティング

格子QCD研究の展開

- 高温・高密度下でのクォーク・グルオン
プラズマ相転移
- 弱い相互作用の未解決の問題への応用

クォーク・グルオンプラズマ

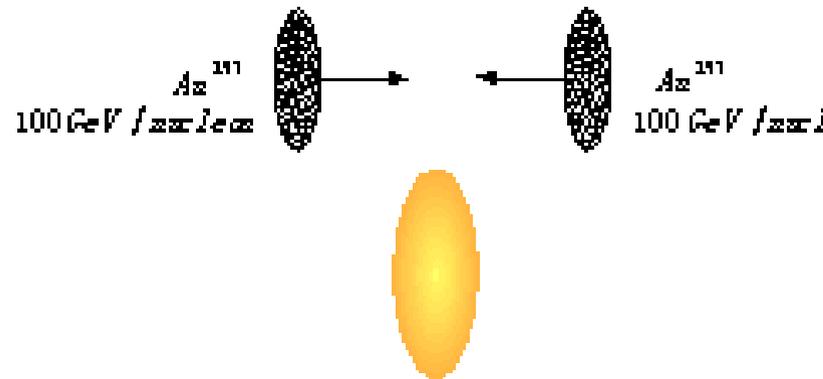
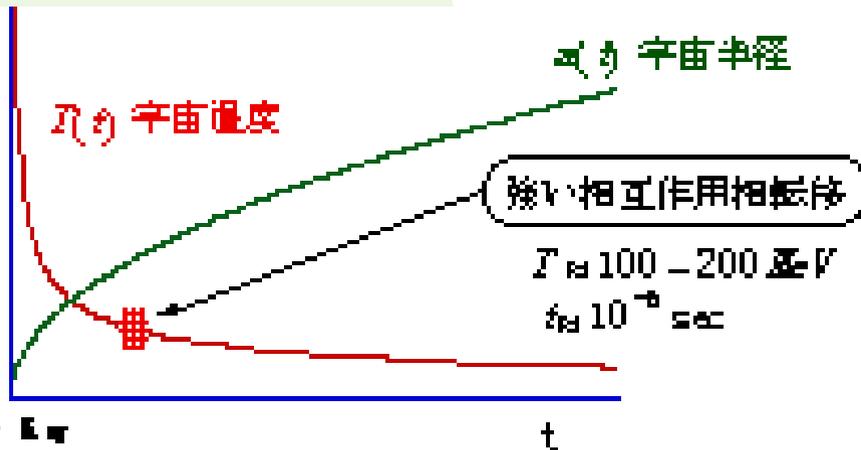
QCDの相図



宇宙初期

高密度

重イオン衝突



ペタフロップスコンピューティング

- 物理問題の数値解法には『臨界計算量』がある
- クエンチ近似QCDの値 $1TFLOPS \cdot year / 1TB$
現時点でほぼ達成
- Full QCD : (単純には) クエンチQCDの1000倍以上
計算速度がネック

⇒ $\geq 1 PFLOPS \cdot year / 1TB$

ペタフロップスが実現すれば

- 理論的理解・計算アルゴリズムの進歩と相俟って、
飛躍的な進歩を予想
 - ⇒ 素粒子標準理論（クォーク・レプトン＋
強・電・弱相互作用）が完成の域
- 現在では、手が付かない問題への挑戦
 - ⇒ 原子核への応用
- 標準理論を越える世界への挑戦

- 重要且つ興味ある問題は次々と現れる
- 新しい物理は常により強力な計算力を必要とする