



格子QCDの今後に向けて

筑波大学計算科学研究センター
藏増 嘉伸



内容

- §1. 格子QCDとは
- §2. 数値計算上の特徴
- §3. 格子QCD研究の歴史
- §4. クエンチ近似と第一原理計算としてのフルQCD
- §5. PACS-CSプロジェクト
- §6. 今後の課題と展望



格子QCDとは

強い相互作用の非摂動的研究(基礎科学)

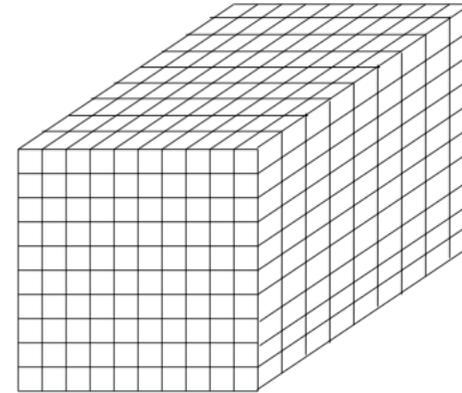
強い相互作用	自然界を支配する4つの 基本的な力 の1つ 重力、電磁力、強い力、弱い力 クォーク・グルーオンが基本的自由度 原子核 ⊃ 核子 ⊃ クォーク・グルーオン ⊃ 未知の粒子？
非摂動的研究	空間3次元＋時間次元を離散化(4次元格子) クォーク・グルーオンをのせてモンテカルロシミュレーション
目的	クォーク・グルーオンを自由度とした第一原理計算 によって より大きなスケール(原子核、宇宙) より小さなスケール(超対称性、大統一理論) の物理を探る



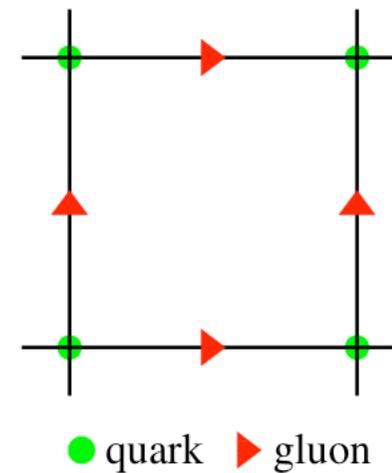
格子QCD計算の特徴(その1)

数個のパラメータ

- ・4次元体積: $V = N_X \cdot N_Y \cdot N_Z \cdot N_T$
- ・格子間距離: a
- ・フレーバー数: 0 (クエンチ近似)
3 (フルQCD)
- ・クォーク質量: m_q



基本自由度はクォーク・グルーオン



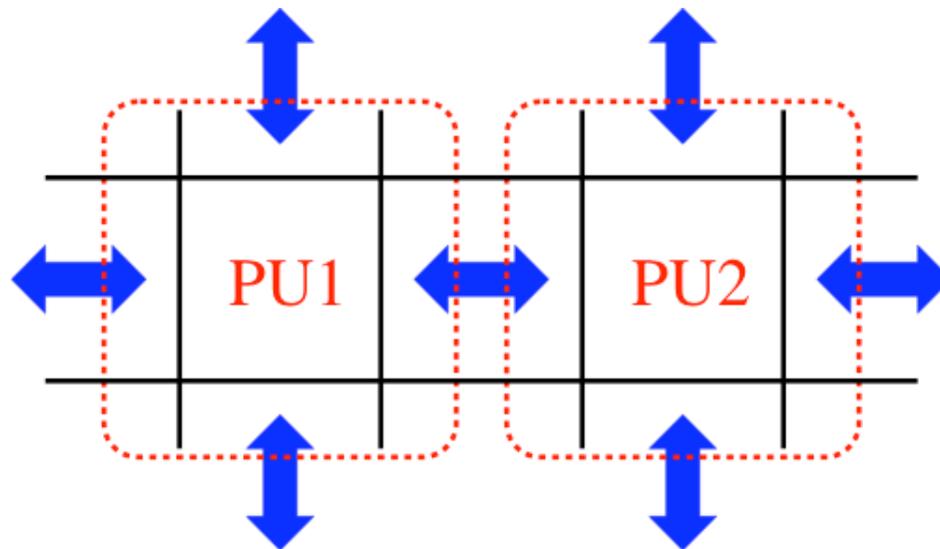


格子QCD計算の特徴(その2)

並列化

近接相互作用 \Rightarrow 4次元論理格子空間を物理プロセッサにマップ

高い並列性と容易な拡張性





格子QCD計算の特徴(その3)

カーネル部分(主要ループ)

通称“MULT”と呼ばれる計算が実行時間全体の50%強を占める

12・V次元の複素数の行列・ベクトル積

但し、非零要素は40・12・Vの疎行列

$$y(n)_{\alpha}^a = \sum_{m, \beta, b} M(n, m)_{\alpha, \beta}^{a, b} \cdot x(m)_{\beta}^b$$

$$n, m = 1, \dots, V$$

$$\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$$

$$a, b = 1, 2, 3$$



格子QCD計算の特徴(その4)

ボトルネック

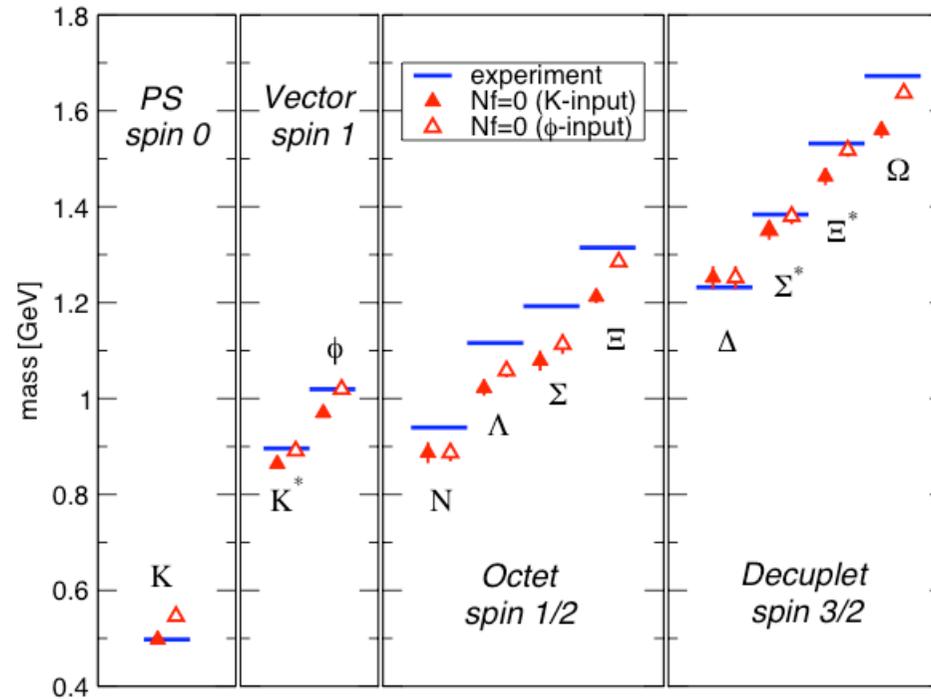
メモリバンド幅律速

MULTのByte/Flop値は約2.7

	PACS-CS	T2K	次世代機
ピークスピード/ノード	5.6 GF/s	147.2 GF/s	
メモリバンド幅/ノード	6.4 GB/s	42.4 GB/s	
B/F	1.14	0.29	?



クエンチ近似におけるハドロン質量(CP-PACS)



実験値とのズレは最大で10%程度⇒非常に良い近似と言える



なぜクエンチ近似を超える計算が必要か？

クエンチ近似は第一原理計算ではない

系統誤差の定量的評価は不可能

クエンチ近似の”誤差”は実験と比較しなければわからない

⇒ 予言能力はない

第一原理計算とは

近似を排し、系統誤差の定量的評価が可能

⇒ 実験と同じ、但しフルQCDの計算量はクエンチ近似の $O(100)$ 倍

第一原理計算とモデル/近似計算はサイエンスとして全く別次元

両者の差異は定量的問題ではない



PACS-CSプロジェクト

格子QCD研究の積年の夢である物理点での2+1フレーバーシミュレーションの実現を目標とする

これまでの成果

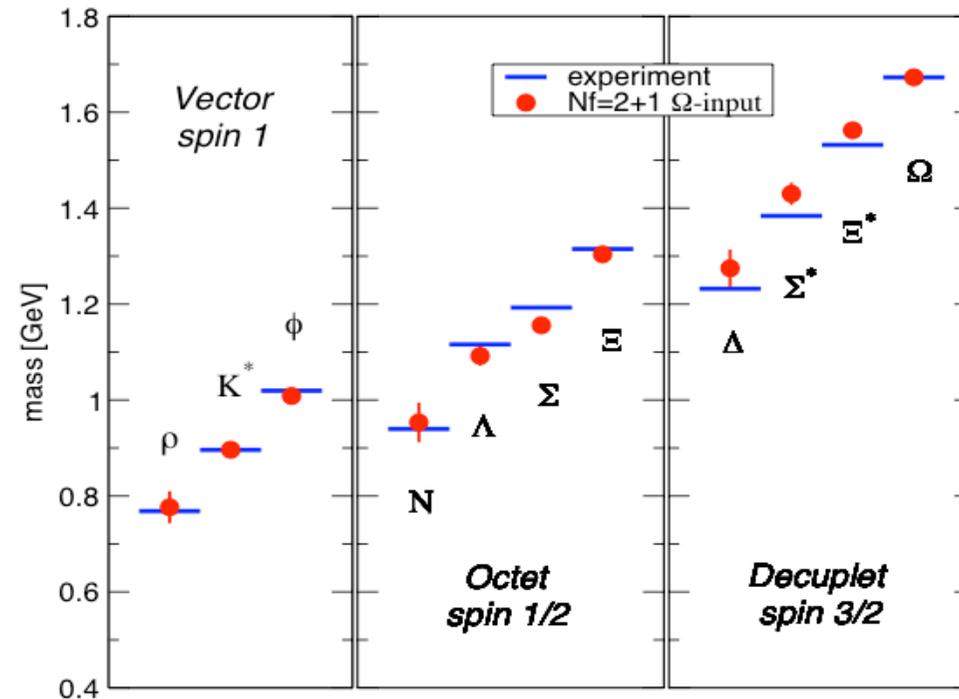
- ・領域分割HMC(DDHMC)アルゴリズムを用いてu,dクォーク質量を徐々に小さくし、物理点を目指す
- ・物理点近傍における物理量の対数的クォーク質量依存性の確認
- ・ハドロン質量と実験値との比較(次頁)
- ・物理点でのシミュレーションの実現可能性を実証

2008-

物理点での2+1フレーバーシミュレーションを開始



ハドロン質量の実験値との比較(PACS-CS)



期待以上の一致(ズレは最大で3%程度)
ただし、有限体積・格子間隔効果のコントロールは未完



今後の課題と展望

ピーク性能	マシン	物理的ターゲット
<1TF	CP-PACS	クエンチ近似の限界 2+1フレーバーシミュレーションの創始
14TF	PACS-CS	物理点でのシミュレーション実現
95TF	T2K	ハドロン一体問題の解決 軽い原子核の生成
O(10)PF	次世代機	高温・高密度下のシミュレーション 核子の多体問題

今後の主要テーマは多体・高温・高密度へと展開



今後のスパコン計画への要望(その1)

スパコンは "Formula 1" であるべし

- ・エキサイティングであること
- ・最先端テクノロジーとスーパーライセンスドライバーの共同作業
最速を目指すことが必然的に分業と協力と信頼関係を生む



今後のスパコン計画への要望(その2)

アプリを前提としたスパコン作り(格子QCDの立場から)

バランスの良い計算機

- ・演算性能
- ・メモリバンド幅
- ・ノード間・プロセッサ間通信

演算性能が向上してもB/F値が下がれば意味がない



今後のスパコン計画への要望(その3)

(部分)稼働前のテスト機導入

スパコンは旬のもの⇒スタートダッシュが鍵

コード最適化は2、3週間では不可能⇒少なくとも数ヶ月前

優れたプロファイラー

QCDではMULT以外の計算も50%弱存在

⇒MULT以外の最適化も必要

最低でもループ単位で実行時間と実行性能が表示されるもの



基礎科学における格子QCDの位置づけ

いま歴史を振り返って見れば、、、

素粒子物理学の基礎理論である場の理論は電磁相互作用の研究を通して確立・発展し、その後他分野に応用

50年後に歴史を振り返ってみれば、、、

大規模数値計算による素粒子の非摂動効果の研究は強い相互作用を対象として確立・発展し、その後研究手法も含めて他分野に応用

そのためには、

- 近似を排した第一原理計算の完遂
- 大規模計算科学における研究手法・体制の確立