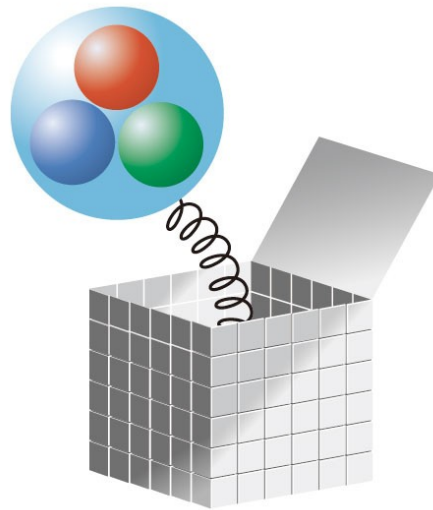


# 格子量子色力学の大規模シミュレーション



松古 栄夫 (Hideo Matsufuru)



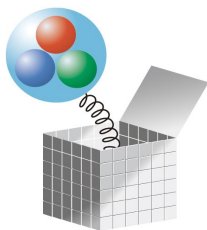
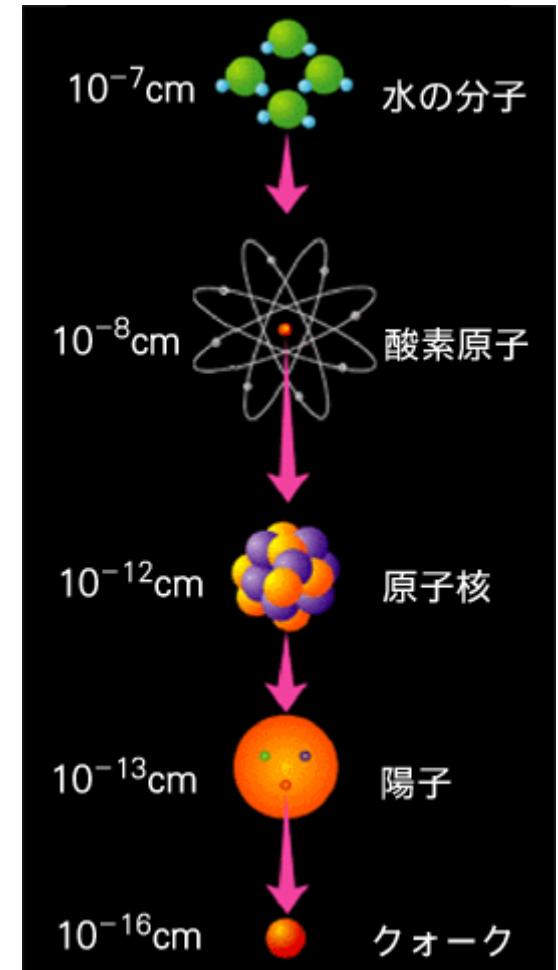
高エネルギー加速器研究機構 (KEK)



# 目次

- 格子QCDとは
- 格子QCDシミュレーション
- 大規模計算環境
  - スーパーコンピュータ@KEK
  - 格子QCDデータの共有化
- JLQCDプロジェクト
- まとめ

格子QCDの扱うスケール





# 格子QCDとは

## 素粒子の標準理論

- 量子色力学 (QCD): 強い力を記述
- ワインバーグ-サラム理論: 電磁気と弱い力

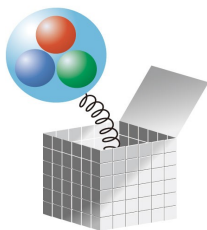
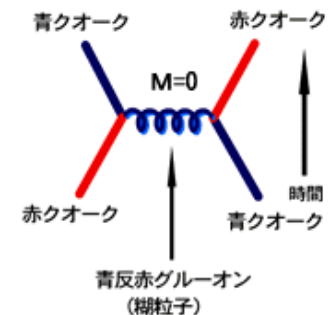
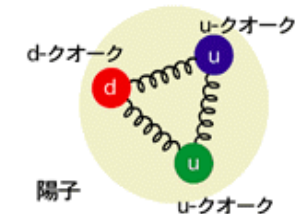
## QCD: 強い相互作用の基礎理論

- 陽子や中性子(ハドロン)はクォークでできている
- クォークは「色」の自由度を持つ
- 「色」の変化=相互作用 (グルーオンが媒介)
- 長距離で「結合定数」が増大
- 解析的に解けない (摂動論が使えない)
- 実験の不定性 (新しい物理の探索で困る)

数値的な手法が必要 →

格子QCD

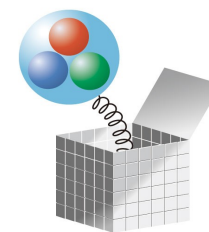
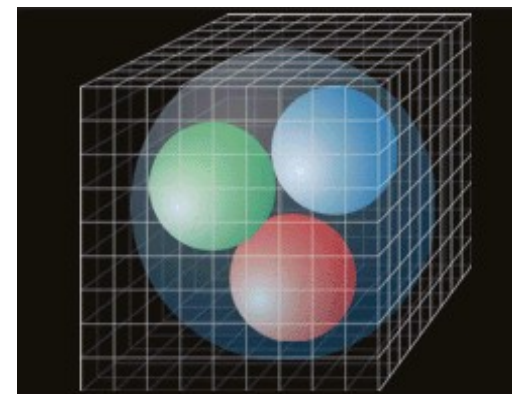
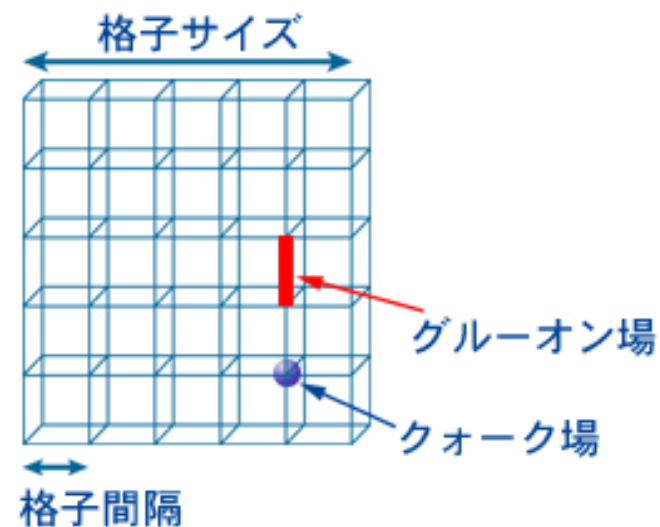
|                 | 物質粒子                |                           |                             | 力を伝える粒子                      |                |
|-----------------|---------------------|---------------------------|-----------------------------|------------------------------|----------------|
|                 | 第1世代                | 第2世代                      | 第3世代                        | 強い相互作用                       | 電磁相互作用         |
| クォーク            | $u$<br>アップ          | $c$<br>チャーム               | $t$<br>トップ                  | $g$<br>グルーオン                 | $\gamma$<br>光子 |
|                 | $d$<br>ダウン          | $s$<br>ストレンジ              | $b$<br>ボトム                  |                              |                |
| レプトン            | $\nu_e$<br>電子ニュートリノ | $\nu_\mu$<br>$\mu$ ニュートリノ | $\nu_\tau$<br>$\tau$ ニュートリノ | 弱い相互作用                       |                |
|                 | $e$<br>電子           | $\mu$<br>ミューオン            | $\tau$<br>タウ                | $W^+$ $W^-$ $Z$<br>Wボソン Zボソン |                |
| ヒッグ場に伴う粒子 (未発見) |                     |                           |                             | ヒッグス粒子                       |                |





# 格子QCDとは

- 格子QCD: 格子の上の場の理論
  - 4次元正方格子時空
  - 連続極限でQCD
  - グルーオン場: リンク上の $3 \times 3$ 複素行列
  - クォーク場: サイト上のグラスマン数  
(計算機上で扱えないので手で積分)
  - 経路積分で量子化  $\rightarrow$  統計力学系とおなじ形
  - **モンテカルロ法によるシミュレーション**
- 格子QCDシミュレーション
  - 低エネルギーでQCDを一般的に扱う唯一の方法
  - ハドロンの性質をQCD(第一原理)から理解
  - 素粒子理論の不定性を減らすのに大きな貢献





# 格子QCDとは

- 物理量の期待値:

$$\langle O \rangle = \int \frac{DU D\bar{\phi} D\phi}{\int DU D\bar{\phi} D\phi \exp(-S_G - \phi^\dagger D^{-1}[U] \phi)} O[U] \exp(-S_G - \phi^\dagger D^{-1}[U] \phi)$$

グルーオン作用: 評価は容易

グルーオン場  $U$ , 擬クォーク場  $\phi$  についての積分

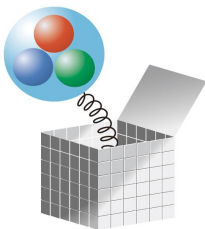
→ モンテカルロ法で生成

擬クォーク場(グラスマン数の積分をガウス積分で表したもの)

実際には、この  $D$  の逆を求めるのに時間かかる

モンテカルロ法: グルーオン場の配位  $\{U\}$  (と擬クォーク場  $\phi$ ) を

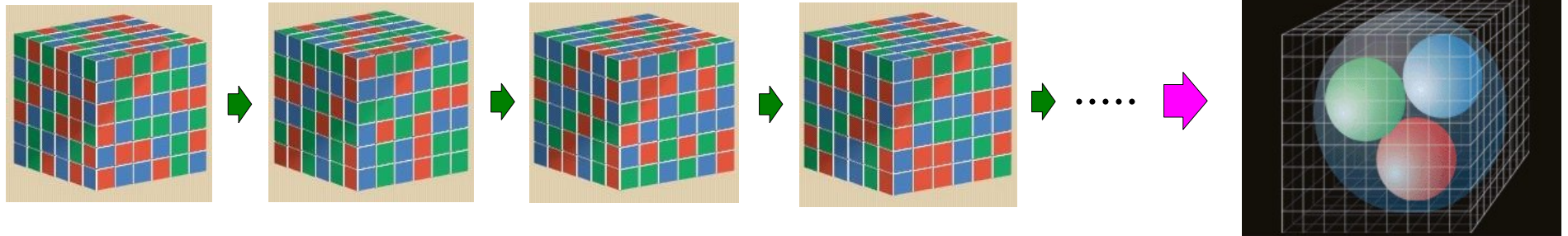
$\exp(-S_G - \phi^\dagger D^{-1}[U] \phi)$  の確率で生成





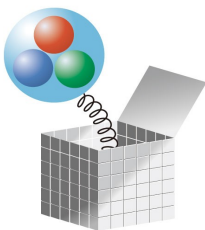
# 格子QCDシミュレーション

- 配位の生成 (あまり厳密でないイメージ図)



## グルーオン場 {U} の生成

- ハイブリッド・モンテカルロ法
  - ミクロカノニカル集団としてあつかう → 発展方程式
  - 時々ランダムに擬フェルミオン場  $\varphi$  を生成 (取っておかなくてもよい)
- 生成したグルーオン場の配位を使って、物理量を計算
  - Ex. クォークの伝播関数からハドロンの相関関数を構成
  - 統計平均 → 物理量の期待値





# 格子QCDシミュレーション

- 計算時間のほとんどは、線型方程式を解いている

$$D(x, y)\phi(y) = \xi(x)$$

- $\phi$  は 3 (カラー) x 4 (スピン、粒子/反粒子) x サイト数 =  $O(10^6)$  の自由度を持つ複素ベクトル

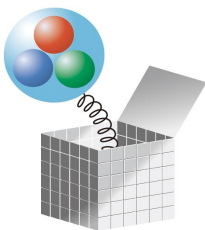
$$D(x, y) = \delta_{x, y} - \kappa \sum_{\mu} [(1 - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta_{x + \hat{\mu}, y} + (1 + \gamma_{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu}) \delta_{x - \hat{\mu}, y}]$$

対角成分

+  $\mu$  方向の隣接サイトとの結合

-  $\mu$  方向の隣接サイトとの結合

- $D(x, y)$  は巨大疎行列  
→ Krylov 部分空間法で解く (CG, BiCGStab, etc. + 前処理)
- $D$  の演算のスピードを上げることによってもスピード向上



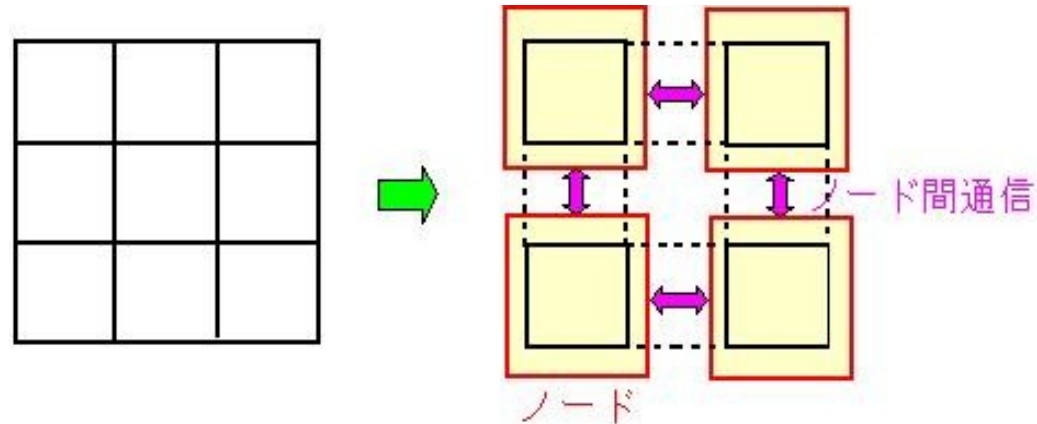




# 格子QCDシミュレーション

- 並列計算

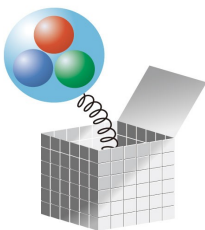
格子を分割



→ ノード内演算+ノード間通信

実際の例: 24x24x24x48 格子 / 2x8x8x8 ノード (Blue Gene@KEK)

- D の演算1回あたり
  - ノード内演算: 934K Flop
  - ノード間通信: 138KB



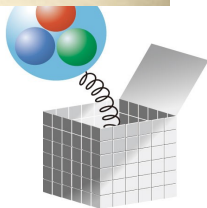
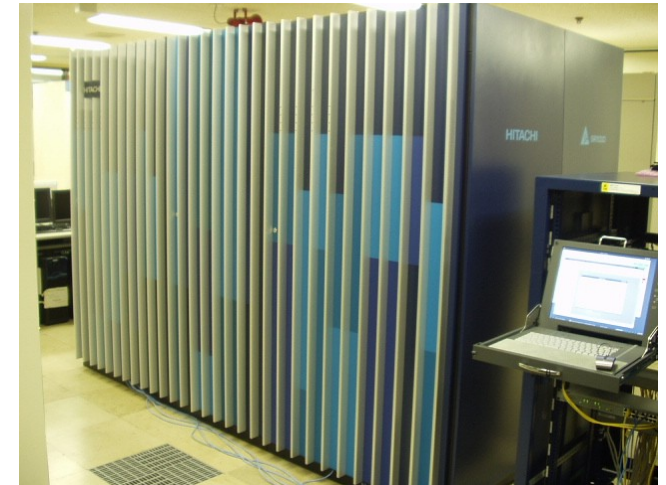




# 大規模計算環境／KEK

## KEK スーパーコンピュータシステム

- システムA: Hitachi SR11000
  - 理論性能 2.15 TFlops, 主記憶 500 GB
  - (16 SMP Power5+) × 16 ノード
  - 自動並列化(ノード内)+MPI並列
- システムB: IBM Blue Gene
  - 56.7 TFlops, 5 TB memory
  - [1ラック = 1024ノード(2048コア)] × 10
  - 大規模並列計算用 (主に格子QCD)
- ディスク 80TB (+100TB NAS file server)
- バックアップ用テープドライブ

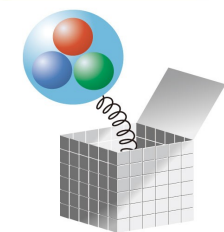
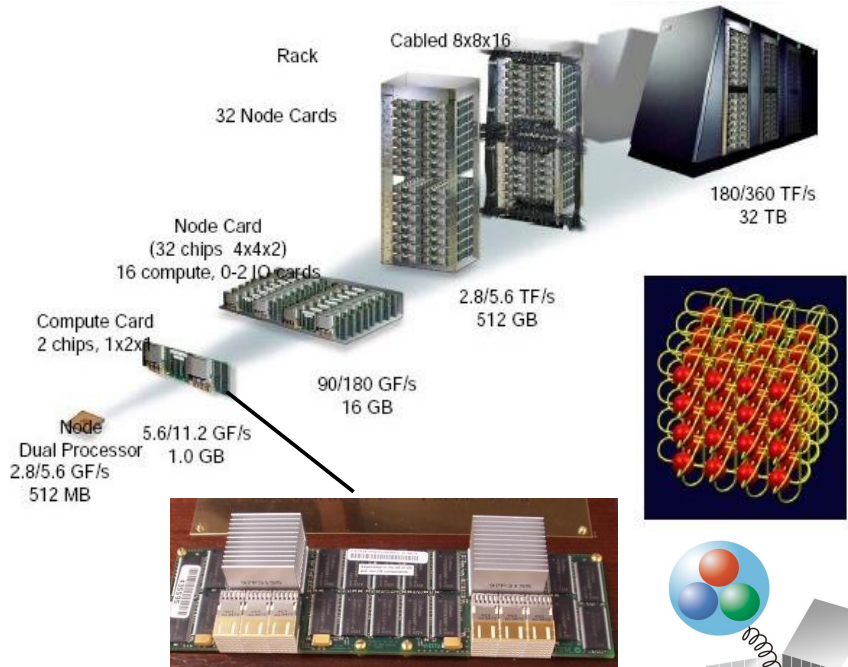
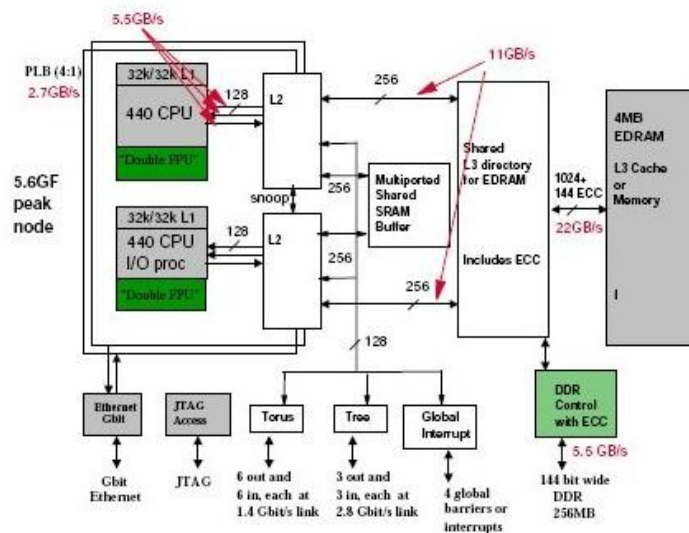




# 大規模計算環境 / KEK

## IBM Blue Gene/L

- CPU: PPC440 (700MHz), 2.8GFlops
  - DoubleFPU: 複素数演算を高速に処理
  - 1ノード内に2CPUコア → 並列化可能
  - 4MB L3キャッシュを共有
- 1024ノード / ラック
  - 1/2 ラック: 8x8x8 トーラスネットワーク
  - 1.4Gbps/双方向 x 6
- 格子サイズ 16x16x16x48 での線型問題
  - ~29% の実効性能 (1/2 ラック)
  - 日本IBM によるライブラリ
  - 通信は演算にほぼ隠せる

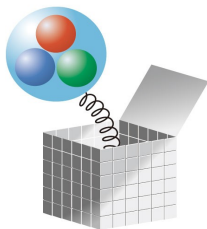




# 大規模計算環境／その他

## その他の主な格子QCD計算のリソース

- 筑波大学
  - PACS-CS: 14.3TFlops
  - CP-PACS, QCD-PAX の後継機
  - クラスタに適したアルゴリズムを採用
- 大阪大学核物理研究センター (RCNP)
  - NEC SX-8R: 5.3TFlops
  - 格子QCDはベクトル機との相性は良い
- 京都大学基礎物理学研究所 (YITP)
  - NEC SX8: 1TFlops

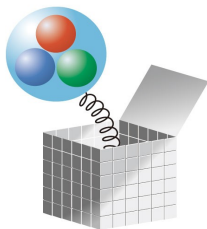
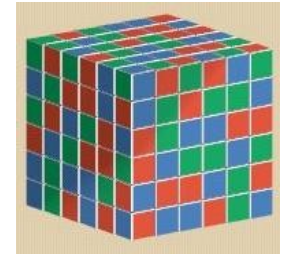




# 大規模計算環境／配位データの共有化

## 格子QCDシミュレーション

- クォークの真空偏極効果を取り入れた、ダイナミカル・シミュレーションが一般的になってきた
  - とは言え、コストは高い
  - 初心者には敷居が高い
- 一度「場の配位」を作ってしまうことができることは多い
- 配位データの公開、共有化によって研究の効率化
  - 既に Gauge Connection (USA)、LQA(筑波大学)などで公開
  - ILDG (International Lattice DataGrid): 2006年6月より運
  - JLDG: ILDG に参加する国内組織





# 大規模計算環境 --配位データの共有化

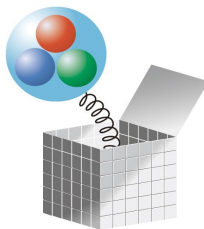
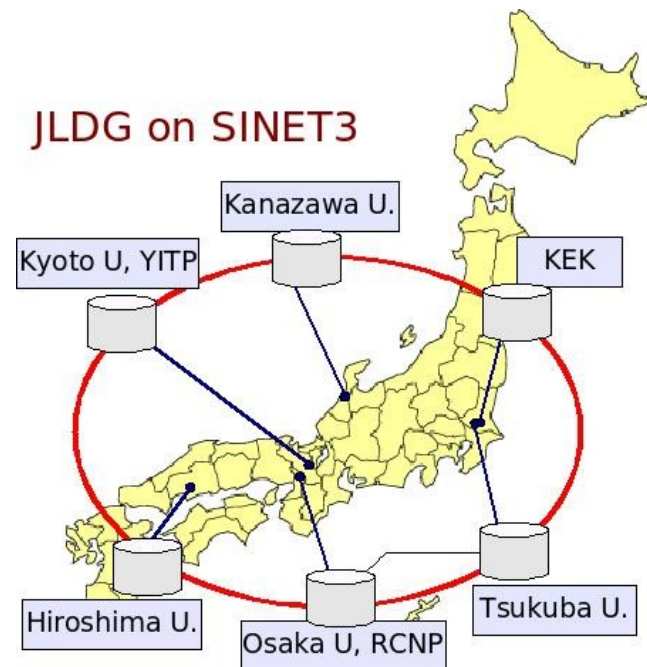
- **ILDG: International Lattice DataGrid** (<http://www.lqcd.org/ildg>)

- メタデータ記述言語の整備 (QCDml)
- ミドルウェア整備 (各域内グリッド間の転送)
- アメリカ、ヨーロッパ、オーストラリア、日本
- 2006年6月より運用



- **JLDG** (<http://www.jldg.org/>)

- ミドルウェアの開発 (ILDGへのゲートウェイ)
- 高速ネットワーク Sinet3 を利用したデータ公開
- 国内グループでの高速データ転送 (HEPnet-J/sc)
- 分散ファイルシステムの開発 (based on Gfarm)



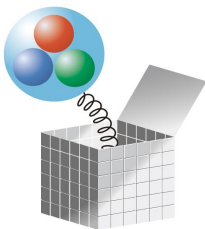




# JLQCD プロジェクト

JLQCD Collaboration (<http://jlqcd.kek.jp/>)

- 橋本、金児、山田、野秋、新谷、松古 (KEK)、宇川、金谷、青木、吉江 (筑波大)、深谷 (理研)、大野木 (京都大)、大川、石川 (広島大)
- 他の Collaboration との共同研究 (台湾、韓国)
- クォークの真空偏極の効果を含む大規模シミュレーション
  - フレイバー物理のためのハドロン反応過程
- KEK のスーパーコンピュータを主に利用 (約80%)
- カイラル対称性を格子上で厳密に保つ理論を採用
  - カイラル対称性: 右巻と左巻のクォークに関する対称性
  - 理論的な構造はベスト
  - これまでの理論に比べると1000倍のコスト
  - アルゴリズムの改良が不可欠





# JLQCD プロジェクト

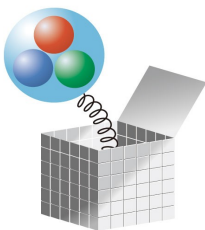
最近の結果:

カイラル対称性の自発的破れを検証 (2007.4.24 プレスリリース)

- 陽子や中性子の質量はどこから来ているのか？
  - クォークはもともと質量ゼロ
  - ヒッグス機構により、2% の質量を獲得
  - 98% は、「カイラル対称性の自発的破れ」の機構で説明
- 真空中にクォーク・反クォーク対が凝縮することによって起こる
- QCDからの直接の検証は初めて

現在大規模なシミュレーションを実行中

- QCDの真空の性質
- 素粒子物理に必要なハドロン反応過程の計算







# まとめ

---

格子QCD シミュレーションで行っていることを紹介した

- 強い相互作用の理解が目的
- ほとんどの時間、巨大疎行列に関する線型方程式を解いている
- 大規模並列計算が有効
- データ共有のための枠組
- 理論・アルゴリズムともに発展中

