

1D2 格子量子色力学の大規模シミュレーション

○ 松古栄夫 (高エネルギー加速器研究機構)

Hideo Matsufuru (High Energy Accelerator Research Organization (KEK))

Key Words: Numerical Analysis

Abstract

Lattice Quantum Chromodynamics (QCD) is one of the scientific fields which require most large-scale numerical simulations. In this talk, I explain fundamental aspects and algorithms of lattice QCD, and how its large-scale simulation is performed on massively parallel computers with an example at KEK.

1. はじめに

格子量子色力学 (Quantum Chromodynamics, QCD) は、大規模計算を可能にする計算機の発展と歩調を合わせて進展してきた。この講演では、格子 QCD シミュレーションの原理とアルゴリズムを概説し、KEK で行っている JLQCD Collaboration のプロジェクトを例として、大規模シミュレーションがどのように行われているかを紹介する。

2. 格子 QCD の原理

原子核を構成する陽子や中性子は、クォークと呼ばれる素粒子が、強い相互作用によって束縛されて出来ている。量子色力学 (QCD) はこの強い相互作用を記述する理論であるが、解析的に扱うことは難しい。陽子や中性子など (ハドロンと呼ぶ) が示す多彩な性質を QCD に基づいて理解するには、数値的に計算を行う方法が必要である。格子 QCD はこれを可能にする一般的な枠組を与え、広範に研究が行われている [1]。

格子 QCD は、4次元 Euclid 空間上に定義された場の理論であり、経路積分法を用いて量子化される。これによって統計力学系と同じ形となるため、Monte Carlo 法によって数値的な計算が可能となる。まず時空間を4次元の有限格子で近似し、各格子点(サイト)にクォーク場を、サイトとサイトを結ぶリンク上にゲージ場(グルーオン場)を表すリンク変数を配する。クォークはカラー自由度 (R,G,B) を持つと考え、この3次元空間内での回転によって相互作用を記述する。リンク変数は 3×3 複素行列で、ユニタリー群 $SU(3)$ に属し、サイトと方向 (x, y, z, t) によってラベルされる。クォーク場は、カラー自由度に加えてスピノール (スピン \uparrow, \downarrow と粒子・反粒子を表す) 4成分を持つので、 $3 \times 4 = 12$ の自由度を各サイトで持つ。

経路積分法ではクォーク場は反交換するグラスマン数として扱われるが、このような数を計算機上で扱うのは難しい。従って、クォーク場を手で積分してしま

い、伝播関数の形で扱う。これはクォークの相関を表すグリーン関数であり、クォーク場を含む物理量はこの伝播関数を用いて表すことができる。例えば、クォークの伝播関数を組み合わせてハドロンの相関関数を構成し、その時間方向への伝播の振る舞いを調べることによって、ハドロンの質量などを求めることができる。

クォークの作用は、格子間隔 $a \rightarrow 0$ の連続極限で QCD と一致するものであればよい。ここではもっとも単純な構造を持つ、Wilson 作用を考える。クォークの伝播関数は、つぎのような線形方程式を解いて得られる。

$$\sum_y K[U]_{x,y} v_y = b_x, \quad (1)$$

$$K[U]_{x,y} = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu} (1 - \gamma_{\mu}) U_{\mu}(x) \delta_{x+\hat{\mu},y} + (1 + \gamma_{\mu}) U_{\mu}^{\dagger}(x - \hat{\mu}) \delta_{x-\hat{\mu},y} \quad (2)$$

ここで $U_{\mu}(x) \in SU(3)$ はリンク (x, μ) 上のリンク変数、 x, y はサイト、 $\mu = x, y, z, t$ は方向を表わし、 $\hat{\mu}$ は μ -方向の単位ベクトルである。格子間隔 $a = 1$ とおいた。 γ_{μ} は 4×4 の行列で γ -行列と呼ばれ、クォークのスピノール構造を規定する。 κ はクォークの質量に関連したパラメーターである。Eq. (1) において、 b はある与えられたベクトル (サイト \times カラー \times スピノールの自由度を持つ)、 v が解である。この方程式は巨大連立線形方程式であり、 $K[U]_{x,y}$ は疎行列であるため、共役勾配法などによって解を求める。

3. 格子 QCD シミュレーション

格子 QCD シミュレーションは、通常次のような手順に沿って行われる。

(1) リンク変数の配位の生成

リンク変数 $U_{\mu}(x)$ の生成は、通常 Hybrid Monte Carlo 法というアルゴリズムを用いて行う。あるリンク変数の配位 (全てのリンク変数がある数値を持ったような状態) から出発し、分子力学的にリンク変数を発展させてゆくことによって、統計的に独立な配位を作っていく。この手法では、クォークが真空において対生成・対

消滅をくり返す、真空偏極の効果を取り入れることができる。真空偏極の効果を計算するには、クォークの伝播関数を求めるのと同じ計算を、発展の各ステップで行うことが必要となる。

(2) クォーク伝播関数の計算

前節で述べたように、クォークの伝播関数を求めることは巨大な線型方程式を解くことに対応する。リンク変数の配位を生成する際にも各ステップで同じことが必要であり、結局この解法が、計算時間の大部分を占める場合が多い。従って、共役勾配法などの逐次解法のアルゴリズムを改良することは、シミュレーション時間の短縮に直結する。

(3) 物理量の計算

クォークの伝播関数が求まれば、それらを組み合わせる種々の物理量が計算できる。例えばハドロンの質量、ハドロン崩壊過程の崩壊定数や形状因子などを計算し、その統計誤差、系統誤差の見積りを行う。素粒子物理学では、KEKで行われている B ファクトリー実験などの高エネルギー衝突実験に関係するハドロンの遷移確率の計算が重要である。これらは標準理論を検証し新しい物理を探るために、高精度の値が必要とされている。

格子 QCD を並列計算機で扱う場合には、格子を分割し、各部分格子を各ノードに配する。現在行われている格子は 16^4 - 24^4 程度のサイズのものが多いため、 $O(1000)$ 以上の並列ノードで計算する場合には、各ノード上の部分格子は各方向に数個程度となる。Eq. (2) が示すように、となり合うサイトでの相互作用があるため、演算性能に加えて通信性能が重要な要素となる。

3. KEK のプロジェクト

実際の大規模シミュレーションの例として、高エネルギー加速器研究機構 (KEK) のスーパーコンピュータシステムを用いて我々がやっている、JLQCD Collaboration のプロジェクト [2] を紹介する。国内では他に、筑波大学で大規模な研究プロジェクトが行われている。

最近の格子 QCD の大きな発展として、格子上でのカイラル対称性の理解が進んだことがある。カイラル対称性とは、クォークの質量が非常に軽い場合に成り立つ対称性であり、現実世界ではこの対称性が自発的に破れることによって、陽子や中性子の持つ大部分の質量が生じると説明される。しかしながら格子上でのこの対称性を持つ理論を構成することは長い間困難であった。最近理論的な理解が進み、そのような理論が提唱されたが、この理論に従ってシミュレーションを行うには従来の 100 倍以上の計算力が必要となる。KEK などの最新鋭スーパーコンピュータの導入に加え、アルゴリズムなどの改良を経て、我々はこの理論 (オーバーラップ・フェルミオンと呼ばれる) を用いたプロジェクトを実行中である [2]。この場合にも、基本的な演算は Eq. (2) と同じ演算子から構成される。

KEK では、スーパーコンピュータシステムとして、日立 SR11000 (理論演算性能 2.15TFlops, 総メモリ容量 512GB)、IBM System Blue Gene (理論演算性能 57.3TFlops, 総メモリ容量 5.12TB) からなる複合システムを 2006 年より運用している [3]。このシステムは、素粒子・原子核物理、物性物理、加速器などのシミュレーションに利用されているが [4]、計算時間の大きな部分を格子 QCD が占めている。

以下では、Blue Gene で行っている計算について紹介する。Blue Gene システムは 10 ラックからなり、1 ラックは 1024 ノード (2048 プロセッサコア) から構成される。各ノードは 4MB の L3 キャッシュを持ち、これを 2 つのプロセッサが共有している。ネットワークの単位は 1/2 ラックで、 $8 \times 8 \times 8$ のトーラス型であり、1 ノード内の 2 プロセッサも二つのノードのように扱うことができるため、 $8 \times 8 \times 8 \times 2$ の 4 次元的トポロジーとなる。格子サイズは $16^3 \times 16$ を用いた。いくつものパラメータで並列に計算を進めるのが効率的であり、必要となる演算量、格子サイズ、結果を得るまでの時間などを考慮して 1/2 ラックまたは 1 ラック毎に、一つの格子でのシミュレーションを行っている。

Blue Gene での高速化は、各プロセッサの倍精度複素数演算をダブル FPU によって高速化することと、ノード間の通信を最適化することによって行う。これらを最適化することによって、最も単純な Eq. (2) のタイプの線型問題に対して、オンキャッシュの場合にはピーク性能の 30% 近くの性能を得ることができた [6]。実際のプロジェクトでは 15% 程度の性能で計算を行っており、今後も改良を続けてゆく。物理的な結果についても成果が出始めている [2]。

リンク変数の配位を一度作ってしまうと、それを用いて種々の計算が可能である。このため、配位データの共有化を進めるための国際的組織、ILDG (International Lattice DataGrid) が活動を行っている。国内でも JLDG という組織を立ち上げ、配位データを ILDG に提供すると同時に、高速ネットワーク SINET3 を通じた遠隔サイト間での高速なデータ転送や、その効率的運用のためのシステムの開発などを行っている [5]。

References

- [1] 青木慎也「格子上の場の理論」(シュプリンガー・フェアラーク東京, 2005)
- [2] <http://jlqcd.kek.jp/>
- [3] <http://scwww.kek.jp/>
- [4] <http://ohgata-s.kek.jp/>
- [5] <http://www.jldg.org/>
- [6] 土井淳, 寒川光, 松古栄夫, 橋本省二, 情報処理学会論文誌 (トランザクション) コンピューティングシステム 47 No.SIG7 (2006) 114.